

DENSIDAD DE ESTADOS Y TRANSPORTE ELÉCTRICO EN SUPERCONDUCTORES Y SISTEMAS PERIÓDICOS NANOESTRUCTURADOS

DENSITY OF STATES AND ELECTRIC TRANSPORT IN SUPERCONDUCTORS AND SYSTEMS WITH PERIODIC NANOESTRUCTURE

Camilo Andrés Martínez Montero

Universidad Nacional de Colombia Facultad de Ciencias, Departamento de Física Bogotá D.C., Colombia 2021

DENSIDAD DE ESTADOS Y TRANSPORTE ELÉCTRICO EN SUPERCONDUCTORES Y SISTEMAS PERIÓDICOS NANOESTRUCTURADOS

DENSITY OF STATES AND ELECTRIC TRANSPORT IN SUPERCONDUCTORS AND SYSTEMS WITH PERIODIC NANOESTRUCTURE

Camilo Andrés Martínez Montero

Tesis presentada como requisito parcial para optar al título de: Doctor en Ciencias - Física

> Directora: Doctora Shirley Gómez Páez Co-Director: Doctor William Javier Herrera

Línea de investigación: Estado sólido Grupo de investigación: Superconductividad y nanotecnología

Universidad Nacional de Colombia Facultad de Ciencias, Departamento de Física Bogotá D.C., Colombia 2021

Para mi familia, que con su apoyo pude cumplir mis metas.

Agradecimientos

Esta tesis está dedicada a mis padres, quienes me han apoyado para continuar mis estudios de doctorado. Al profesor William Javier Herrera, que ha estado conmigo en toda mi formación profesional y me apoyó tanto para inscribirme al doctorado, como para llevar a cabo la culminación de esta tesis. Al profesor Pablo Burset, quien me acogió en la Universidad de Aalto en Helsinki y con quien tuve el placer de hacer mi pasantía. A mi directora de tesis, la profesora Shirley Gómez Páez, así como al grupo de superconductividad y nanotecnología de la Universidad Nacional de Colombia. Finalmente, agradezco al programa de becas de doctorados de Colciencias, gracias al cual obtuve los recursos para desarrollar mis estudios.

Resumen

En este trabajo analizamos el efecto de un potencial de pares periódico sobre la densidad de estados y las propiedades de transporte en superconductores no convencionales, así como el efecto de superredes periódicas semi-infinitas o finitas que se presentan en heteroestructuras conformadas por grafeno y superconductores. Se analiza un material superconductor con un potencial de pares periódico en una red cuadrada, encontrado las bandas de energía y la densidad de estados. Se encuentran y analizan la aparición de nuevas brechas de energía, que no aparecen en sistemas homogéneos, las cuales pueden ser relevantes cerca de la temperatura crítica. Para sistemas basados en grafeno se estudian superredes de bloques pn acopladas a un superconductor, encontrando que el número de nuevos puntos de Dirac no es afectado por la región superconductora, pero debido a las reflexiones de Andreev locales, se puede determinar su aparición e incrementar su intensidad, lo cual podría utilizarse para su detección. Adicionalmente se analizan los casos de bloques pn asimétricos en voltajes "gate", donde se demuestra que se puede recobrar el caso simétrico haciendo un cambio en el dopaje efectivo en la lámina de grafeno, mientras que cuando los anchos son asimétricos los nuevos puntos de Dirac pueden no crearse. Se analizan los mapas de probabilidad de transmisión electrón-electrón y electrón-hueco en sistemas de lentes de Veselago GSG y G - SL - S - SL - G, con G grafeno dopado tipo n, SL una superred y S un superconductor dopado tipo p. En estos sistemas los puntos focales pueden ser mejorados cambiando los parámetros del sistema, adicionalmente. con la introducción de las superredes se puede colimar la corriente de electrones y que la señal de enfoque de huecos sea mayoritaria. Con bicapas de grafeno se estudian las lentes de Veselago encontrando cómo los fenómenos de interferencia entre las dos monocapas afectan los mapas de probabilidad de transmisión electrón-electrón, creando diferencias respecto a los resultados con monocapas de grafeno.

Palabras clave: funciones de Green, superconductividad, grafeno, bicapas de grafeno, reflexiones de Andreev, Lentes de Veselago

Abstract

In this work we analyze the effect of a periodic pair potential on the density of states and transport properties in unconventional superconductors. The effect of semi-infinite or finite periodic superlattices in heterostructures formed by graphene and superconductors is also studied. A two-dimensional superconductor with a periodic pair potential in a square lattice is analyzed, finding the energy bands and the density of states. The appearance of new energy gaps, which do not appear for homogeneous systems, and which may be relevant near the critical temperature, are found and analyzed. Block pn superlattices are studied for graphene-based systems coupled to a superconductor. Thus, the number of new Dirac points is not affected by the superconducting region; however, due to local Andreev reflections, its emergence can be determined, and its intensity increased, which could be used for its detection. In addition, the cases of asymmetric pn blocks at gate voltages are analyzed, where the symmetric case can be recovered by making a change in the effective doping in the graphene sheet, while no new Dirac points can be created when the widths are asymmetric. The electron-electron and electron-hole transmission probability maps are analyzed in Veselago GSG and G - SL - S - SL - G lens systems, with G doped graphene type n, SL a superlattice and S a p-type doped superconductor. In these systems, the focal points can be improved by changing the system parameters. Additionally, with the introduction of the superlattice, the electron current can be collimated and the hole focusing signal can be increased. Veselago lenses with graphene bilayers are studied, showing that the interference between the two monolayers affects the electron-electron transmission probability maps, creating differences concerning the results with graphene monolayers.

Keywords: Green functions, superconductivity, graphene, bilayers graphene, Andreev reflection, Veselago lens

Lista de Figuras

1-1.	a) Reflexión de Andreev local en un sistema $N-S$, donde un electrón incidente se refleja sobre la interfase como hueco y un par de Cooper es transmitido al superconductor. b) Reflexión de Andreev no local en un sistema $N-S-N$, donde un electrón que incide desde el material normal de la izquierda se transmite como un hueco al material normal de la derecha, induciendo un par de Cooper en el superconductor	3
1-2.	a) Lente de Veselago formada por una juntura de grafeno <i>np</i> cuando el punto de enfoque está a la misma distancia de inyección y se encuentra usando las trayectorias semi-clásicas del electrón. Tomada de [38]. b) Proceso de enfoque en una lente de Veselago GSG: las líneas rojas corresponden a las trayectorias semi-clásicas de las cuasi-partículas tipo electrón y las azules son de cuasi-partículas tipo hueco, tomada de [41].	5
1-3 .	a) Vista superior (arriba) y lateral (abajo) de una bicapa de grafeno Bernal, el dímero está conformado por los átomos $A y B'$. b) Bandas de energías alrededor de los puntos de Dirac de la bicapa de grafeno donde se aprecian cuatro bandas, dos de ellas se tocan y son usadas para la aproximación de baja energía, tomada de [52]	6
2-1.	El espectro de energía de un metal está dado por varias bandas, obtenidas al considerar los distintos cruces de las parábolas de los electrones, cuya periodicidad genera una repetición de estas. En la figura se observan dos bandas y el valor de la brecha de energía. Imagen tomada de [14]	10
2-2.	Superficie de Fermi del material superconductor Bi(Pb)-2212. Tomada con Arpes [60].	11
2-3.	Simetrías del potencial de pares en el espacio reciproco: a) simetría s , b) simetría p_x , c) simetría d_{xy} y d) simetría $d_{x^2-y^2}$.	13
2-4 .	Descripción de una reflexión de Andreev, donde el potencial de pares varía en función de x siendo 0 en el metal normal y máximo en el superconductor	14

2-5.	Red de grafeno, los átomos $A ext{ y } B$ son de carbono. El rombo del centro de la figura es la celda primitiva con vectores $\mathbf{a}_1 ext{ y } \mathbf{a}_2$. Los primeros vecinos de un átomo A son los del átomo $B ext{ y }$ viceversa.	14
2-6.	a) Espectro de energía del grafeno donde $K_D = 2\pi/(\sqrt{3}a_0)$. b) Probabilidad de transmisión de un electrón que incide en una juntura pn de grafeno en función del ángulo de incidencia. Tomado de [66]	16
2-7.	Bordes posibles de una nanocinta de grafeno donde se agregan el tipo de átomo en el borde. a) Borde zigzag donde solo se tiene un tipo de átomo que sera tipo A para el resto del texto. b) Borde «armchair» donde la frontera presenta ambos tipos de átomos A y B	17
2-8.	Diagrama de una juntura grafeno-superconductor, donde la superconductividad se obtiene por efecto de proximidad al estar la lámina de grafeno en contacto con un superconductor.	17
2-9.	Diferentes formas de reflexiones de Andreev en grafeno. a) Reflexión especular cuando el hueco se crea en la otra banda del electrón incidente y b) retro-reflexión donde el hueco se crea en la misma banda del electrón incidente.	18
2-10	a) Vista lateral de la bicapa de grafeno en ambas configuraciones. b) Vista superior de la bicapa de grafeno en configuración Bernal.	19
2-11	 .a) Espectro de energía de la bicapa de grafeno cerca de los puntos de Dirac, donde se aprecia una forma parabólica a bajas energías y presenta una segunda banda. b) Probabilidad de tunelamiento de un electrón en una juntura <i>pn</i> de bicapa de grafeno en función del ángulo de incidencia. Tomado de [66]. 	20
2-12	Soluciones asintóticas para las condiciones de frontera para a) grafeno infinito y b) grafeno finito.	23
2-13	3.Diagrama de reflexiones de Andreev electrón-hueco en las fronteras de un grafeno superconductor.	26
2-14	Diagrama metodológico de la obtención de la función de Green de una juntura, un sistema izquierda con función de Green g_{LL} , y un sistema a la derecha con función de Green g_{RR} desacoplado. Se juntan para encontrar la función de Green de todo el sistema G usando la ecuación de Dyson con un parámetro de acople $\hat{\Sigma}_{LR/RL}$	28
2-15	Esquema del contorno temporal de Keldysh. Se distinguen las dos ramas del contorno en el eje temporal t_k , una por encima para la rama negativa y por debajo para la rama positiva. Las flechas azules se meustra la dirección de propagación entre estas	90
	ramas. Tomada de $[76]$	30

3-1.	El espectro de energía correspondiente a los electrones se representa por una parábola con concavidad negativa (línea punteada negra), mientras que el espectro de energía del hueco corresponde a una parábola con concavidad positiva (línea punteada azul). La línea continua roja es la solución con potencial de pares homogéneo.	36
3-2.	El par de Cooper se desplaza sobre una red de iones que genera un potencial de pares periódico, el sistema queda descrito en términos de los vectores \mathbf{r} y \mathbf{r}' . También se puede usar el sistema de coordenadas centrado en el par de Cooper \mathbf{R} y coordenada relativa \mathbf{s}	37
3-3 .	En las líneas punteadas se tienen las soluciones parabólicas para los huecos cuando el potencial de la red es cero y las mismas desplazadas un vector de la red recíproca \mathbf{K}_{-1} . Cuando se incluye el potencial de la red se abre una brecha de energía, línea continua roja, válida en la primera zona de Brillouin	40
3-4.	Soluciones en la aproximación de electrones cuasi-libres. Las líneas punteadas son para electrones y huecos sin potencial de red, la línea que corresponde al espectro de hueco está desplazada un vector de red $\mathbf{K}_{1,0}$. La línea azul demarca el cruce de las soluciones punteadas y la línea continua roja representa la solución cuando se tiene el potencial de la red.	41
3-5.	Se ilustran la superficie de Fermi (línea negra), las esferas de Andreev (línea roja) y los planos de Bragg (línea azul) para diferentes valores de energía de Fermi y potencial de red. a) Cuando la esfera de Fermi no sale de la primera zona de Brillouin, para este caso no hay esferas de Andreev. b) Cuando la superficie de Fermi se extiende fuera de la primera zona de Brillouin se obtienen esferas de Andreev	42
3-6.	Se ilustran la superficie de Fermi (línea negra), las esferas de Andreev (línea roja) y los planos de Bragg (línea azul) para diferentes valores de energía de Fermi y potencial de red. a) Esquema de zona repetida para la primera zona de Brillouin, también se indica el recorrido en el que se analizará el espectro de energía. b) Esquema de zona repetida para la segunda zona de Brillouin.	43
3-7.	Brecha de energía sobre la superficie de Fermi cuando existen las esferas de Andreev, se tomaron como isotrópicos los términos de la expansión de Fourier del potencial de pares, la línea continua azul es cuando $\Delta_{1,0} = \Delta_{0,0}$. Cuando $\Delta_{1,0} = 0$ obtenemos la línea roja punteada. El inserto ilustra la superficie de Fermi, cuya brecha de energía superconductora se ha calculado sobre la energía roja	45
	10ju	10

3-8.	Espectro de energía sobre el camino ΓXM de la fig. 3-6 , para a) un supercon- ductor homogéneo, es decir $\Delta_{1,0} = 0$ y b) $ \Delta_{1,0}(\mathbf{k}) = \Delta_{0,0}(\mathbf{k}) $. El potencial de pares considerado tiene asimetría $d_{x^2-y^2}$ y se indican los puntos donde aparecen las brechas de las esferas de Andreev con A_1 y A_2 . Cada banda se ilustra con un color diferente, siendo la roja la banda de menor energía y la magenta la de mayor energía considerada	46
3-9 .	Ilustración de las superficies dadas en (3-64) y (3-65) (superficies amarillas) para un valor de $T = 0$. La solución corresponde al punto donde se cruzan con el plano azul que corresponde al plano cero.	51
3-10	D.Densidad de estados para una red cuadrada para distintos valores de $\Delta_{1,0}(\mathbf{k})$ y U_1 . Para todas las líneas $\Delta_{0,0}(\mathbf{k})$ es distinta de cero y con simetría $d_{x^2-y^2}$.	53
4-1 .	Diagrama que distingue las funciones de Green $\hat{\boldsymbol{G}}_{LR}(x, x'')$ y $\hat{\boldsymbol{G}}_{RR}(x, x')$. Las líneas verdes son procesos que el potencial de corte no permite, dejando solamente las líneas rojas.	57
4-2 .	Diferentes formas de acercarse a la frontera en una juntura de grafenos con frontera zigzag. Adaptada de [74]	58
4-3 .	Bordes para obtener junturas "armchair" y zigzag, tomada de [74]	59
4-4 .	Ilustración de los procesos para encontrar la función de una nanocinta de grafeno entre x_0 y x_1 , el cual se obtiene al volver a cortar la función de Green semi-infinita derecha en el punto x_1 . Se definen las nuevas regiones LL y RR para la solución de las ecuaciones de Dyson	60
4-5 .	Ilustración de un bloque np y de la energía de Fermi de cada bloque. En la figura se muestran los puntos x_b y x_c que definen el bloque n con energía de Fermi E_n . Esta nanocinta de grafeno se acopla con el bloque p que está entre x_c y x_a con energía de Fermi E_p . El primer bloque verde, con energía de Fermi E_n , está entre x_b y $x_b + W_n$, y para el segundo en rojo, con energía de Fermi E_p , está entre $x_b + W_n$ y $x_b + W_n + W_p$	61
4-6 .	Diagrama de unión de un bloque np de ancho L a una superred semi-infinita que va desde menos infinito hasta x_b . Un bloque adicional no altera el número de bloques np de un grafeno semi-infinito, por lo que una juntura de una superred con un bloque adicional vuelve a ser una superred semi-infinita que se extiende ahora hasta $x_a = x_b + L$.	65
4-7 .	Diagrama de la superred semi-infinita acoplada con un superconductor. La superred tiene energía de Fermi central E_F .	67

- 4-8. Superred de grafeno simétrica sin dopar. a) Conductancia diferencial espectral para diferentes valores del potencial de la superred (A) u/(2π) = 1.03, (B) 1.11, (C) 1.19, (D) 2.15 y (E) 2.23. b) Mapa de la conductancia diferencial espectral a energía cero como función de u y q
 q = q/q_{max}, con ħv_Fq_{max} ≈ 29Δ. c) Conductancia diferencial como función de la energía para diferentes valores de u usados en (a). El parámetro ε indica la separación del nuevo par de puntos de Dirac del punto de Dirac central. d) a diferencial como función de u para diferentes energías. e) Estimación del valor de ε de la segunda derivada de la corriente con respecto al voltaje. Para todos los casos, E_F = 0 y L = ξ/2, con ξ la longitud de coherencia del superconductor.
- **4-9**. Superred de grafeno simétrica dopada. a) Conductancia diferencial espectral con $E_F = 0.5\Delta$ para diferentes valores de $u/(2\pi)$ (A)= 1.03, (B) 1.11 y (C) 1.19. En todos los mapas $\bar{q} = q/q_{max}$, con $\hbar v_F q_{max} \cong 16\Delta$. b) Conductancia diferencial en función de la energía para diferentes valores de u en a). Las flechas indican el parámetro ϵ . c) Conductancia diferencial en función de u para diferentes energías. En todos los casos $L = \xi/2$.
- **4-11**.Mapas espectrales de la conductancia diferencial en función del vector de onda q para diferentes valores de asimetrías en sus anchos, parámetro α , con $E_F^* = 0.5$ y $\beta = 1...$
- 4-12.Superred de grafeno finita. a) Conductancia diferencial espectral para N = 50, con $E_F = 0$ (izquierda) y $E_F = \Delta/2$ (derecha). En ambos casos $\bar{q} = q/q_{max}$ con $\hbar v_F q_{max} \approx 14\Delta$. b-c) Conductancia diferencial para diferentes números de bloques np de la superred donde para b) se ha usado que la $E_F = 0$ y para c) $E = \Delta/2$. La línea gris tanto en b) como c) es la superred semi-infinita encontrada en las fig. 4-8 y fig. 4-9. En todos los casos $L = \xi/2$.
- **4-13**.Proceso de enfoque de una lente de grafeno *np*, el punto de enfoque está a la misma distancia de inyección y se encuentra usando las trayectorias semi-clásicas del electrón. Tomada de [38].

69

71

74

75

77

- 4-14.Diagrama de procesos no locales en junturas grafeno-superconductor grafeno. a) Un electrón puede tunelar el superconductor para transmitirse como un electrón en el grafeno de la derecha, lo que se llama cotunelamiento. b) El electrón puede formar un par de Cooper dentro del superconductor, el cual se logra tomando un electrón del grafeno a la derecha, creando un hueco que se propaga a la derecha de este.

- 4-17.Diagrama de las trayectorias semi-clásicas de los electrones (líneas sólidas y punteadas rojas) o cuasi-electrones (líneas discontinuas rojas), y huecos (líneas discontinuas negras) o cuasi-huecos (líneas punteadas negras). Las letras representan el punto de inyección A, el hueco enfocado (D y I), el electrón enfocado G o puntos donde ocurren reflexiones.

78

4-19 .a–c) Probabilidades de transmisión \hat{T}_{ee} (línea negra) y \hat{T}_{eh} (línea discontinua roja) normalizadas al máximo de la transmisión de una lente de Veselago de interfaces perfectas sin un superconductor, en el eje óptico para diferentes valores del parámetro de acople en cada una de las interfases. d) Cálculo de σ_{nl} en el eje óptico para diferentes valores del parámetro de acople $-E_{FS} = -500\Delta$, el punto de inyección está en $d = -3/2W_s$ y $W_s = \xi$.	84
4-20 .Mapas de probabilidad de transmisión electrón-hueco (izquierda) y transmisión electrón-electrón (derecha) para la región G ₂ , normalizadas al máximo de la transmisión, T_v , de una lente de Veselago de interfaces perfectas sin un superconductor, cuando $E_{FG1} = E_{FG2} = -E_{FS}$ para valores diferentes de E_{FS} , el punto de inyección se encuentra a 0.5ξ y con un ancho del superconductor de ξ .	86
4-21 .Diagrama de las trayectorias ópticas de cuasi-partículas tipo electrón (línea rojas) y cuasi-partículas tipo hueco (líneas verdes y negras), cuando E_{FS} decrece y la aproximación de Andreev no es válida. Las letras representan el punto de inyección A; el punto focal de huecos D para diferentes reflexiones de Andreev internas, siendo el punto central el que se obtiene en la aproximación de Andreev.	87
4-22 .Sistema bajo estudio, es construido con un grafeno dopado n , superred, super- conductor, superred y grafeno dopado n . Ambas superredes son simétricas y la energía de Fermi central de la superred será igual a la del grafeno adjunto. El inyector y el detector se ubican sobre G_1 y G_2 , respectivamente	88
4-23 .Transmisión electrón-hueco (panel izquierdo) y electrón-electrón (panel derecho) del sistema $n - S - n$, cuando $U = 0$ y $E_{FS} = E_{FG1} = E_{FG1} = 500\Delta$, el comportamiento concuerda con lo mostrado en [41]	88
 4-24.Probabilidad de transmisión electrón-electrón y electrón-hueco cuando el punto de inyección está a 1.5ξ, el tamaño de las superredes es de 0.8ξ formada por 40 capas np simétricas con energía de Fermi promedio de 500Δ y U = 50Δ. Las energías de los grafenos son de 500Δ y la del superconductor de -500Δ. a) Cuando tenemos la SL a la izquierda del superconductor y b) Cuando la SL está a la derecha del superconductor, como en la fig. 4-22 	89
4-25 .Conductancia diferencial no local en función de la distancia sobre el eje óptico para la lente de Veselago con una superred (sistema $n - SL - S - n$), con dos superredes $(n - SL - S - SL - n)$ y sin superred (sistema $n - S - n$). Las condiciones son las establecidas en 4-22 con $U_n = 50\Delta$.	90

4-26	B .Probabilidad de transmisión electrón-electrón y electrón-hueco para las mismas condiciones de la fig. 4-24 cuando ambas superredes están presentes	91
4-27	Y.Probabilidades de transmisión electrón-electrón y electrón-hueco cuando solo tenemos la superred de grafeno a la derecha, con $U=100\Delta$ y, por lo tanto, tenemos dos puntos de Dirac. Las condiciones son las establecidas en la fig. 4-22 .	91
5-1.	Vista superior de la bicapa de grafeno en apilamiento Bernal, un átomo de carbono se encuentra en el centro del hexágono de la otra monocapa. La monocapa superior es de color negro y la inferior de color rojo, la celda primitiva es igual a la del grafeno, pero contiene cuatro átomos.	93
5-2.	Diagrama de las dispersiones para una bicapa de grafeno. a) Si la bicapa es infinita no existe un cambio en el vector de onda de propagación. b) En el caso de la barrera de fortaleza infinita se tiene que un electrón que incide con un vector de onda (línea punteada) se refleja como una combinación de los modos de propagación en la dirección contraria (líneas continuas)	96
5-3.	a) Densidad espectral de una bicapa en función del vector de onda q , se aprecian las bandas de energía donde la separación de energía de las dos bandas por encima de la energía de Fermi es del parámetro t_1 . b) Densidad de estados en función de la energía para la bicapa de grafeno en apilamiento Bernal, en esta se presenta un salto cuando la energía coincide con el parámetro de acople entre capas con $q_{max} = 7t_1/(\hbar v_F)$.	98
5-4.	Diagrama de corte de la bicapa de grafeno infinita, el potencial de corte está en $x = 0$. La región que está a la izquierda del potencial de corte es denotada como bGB_L y a la derecha como bGB_R . Cuando el parámetro U tiende a infinito, el potencial de corte desconecta la bicapa infinita al no contener propagaciones que pasen la barrera (líneas verdes punteadas).	99
5-5.	Diagrama de los dos tipos de bordes zigzag en la bGB. a) Borde α donde las capas superior e inferior forman un borde zigzag. b) Borde β se tiene en la capa superior un borde zigzag con átomos B' , mientras la capa de abajo no tiene bordes zigzag	99
5-6.	a) Densidad local de estados para una bicapa de grafeno semi-infinita en el borde, a diferentes energías de Fermi para frontera α y β , en este caso coinciden las densidades. b) Densidad local de estados para la bicapa semi-infinita en función de la distancia para ambos bordes, la distancia donde se calcula la densidad de estados se normaliza a $\zeta = \hbar v_T / t_1 \approx 3a_0 / 5$	101

5-7.	a) Densidad local de estados para una bicapa de grafeno semi-infinita cuando estamos a una posición del borde de $x = -20\zeta$ para cada tipo de frontera. b) y c) Densidad espectral para cada tipo de borde cuando $x = -20\zeta$, siendo b) para el borde α y c) para el borde β con $q_{max} = 7t_1/(\hbar v_F)$	101
5-8.	Lente de Veselago con dos bicapas de grafeno semi-infinitas, las cuales se juntan en $x = 0$, la bicapa izquierda (bGB_L) tiene una energía de Fermi E_F y la derecha (bGB_R) una energía $-E_F$. La lente de Veselago se estudia para los dos tipos de frontera α y β , con $\zeta = t_1/(\hbar v_F)$.	102
5-9 .	Mapa de probabilidad de transmisión electrón-electrón cuando la inyección se realiza a $x=-78\zeta$ para una lente de Veselago con monocapas de grafeno	103
5-10	Diagrama de las lentes de Veselago vistas de lado para los dos tipos de bordes zigzag, a) borde α donde se aprecia una simetría alrededor de la interfase, b) borde β donde es asimétrica en el punto de unión y c) diagrama del cambio de la energía de Fermi para la juntura.	104
5-11	.a) Imagen lateral de la lente de Veselago con bicapa de grafeno para frontera α donde se indica el punto de inyección y los diferentes puntos de detección de b) a e). Imágenes b-e) son mapas de probabilidad de transmisión electrón- electrón, donde se inyecta en un átomo del dímero B' de la capa superior, que se encuentra a -78ζ , y recolectando en: b) la capa superior en un átomo A' que no pertenece al dímero, c) la capa superior en el átomo B' que pertenece al dímero, d) la capa inferior en el átomo A que pertenece al dímero A y e) la capa inferior en el átomo B que no pertenece al dímero.	105
5-12	La) Imagen lateral de la lente de Veselago con bicapa de grafeno para frontera β donde se indica el punto de inyección y los diferentes puntos de detección de b) a e). Imágenes b-e) son mapas de probabilidad de transmisión electrón- electrón, donde se inyecta en un átomo del dímero B' de la capa superior, que se encuentra a -78 ζ , y recolectando en: b) la capa superior en un átomo A' que no pertenece al dímero, c) la capa superior en el átomo B' que pertenece al dímero, d) la capa inferior en el átomo A que pertenece al dímero A y e) la capa inferior en el átomo B que no pertenece al dímero.	106
D-1 .	Mapas de probabilidad de transmisión electrón-electrón para una lente de Veselago con borde α donde se inyecta a -78 ζ , los átomos que conforman el dímero son B' y A .	123
D-2.	Mapas de probabilidad de transmisión electrón-electrón para una lente de Veselago con borde β donde se inyecta a -78 ζ , los átomos que conforman el dímero son B' y A .	124

Contenido

	Agr	adecin	nientos	iv
	Res	umen		v
Li	sta d	e figu	ras	vii
1.	Intr	oducci	ión	2
2.	Gen	eralida	ades de los superconductores, el grafeno y las bicapas de grafeno	8
	2.1.	Teorer	na de Bloch y aproximación de electrones cuasi-libres	8
	2.2.	Supero	conductores	11
	2.3.	Grafer	10	13
	2.4.	Bicapa	as de grafeno	18
	2.5.	Funcio	ones de Green	19
		2.5.1.	Método de soluciones asintóticas para encontrar la función de Green .	21
		2.5.2.	Función de Green para la lámina de grafeno con superconductividad inducida	24
		2.5.3.	Ecuación de Dyson	27
		2.5.4.	Cálculo de la corriente eléctrica	29
3.	Sist	ema sı	uperconductor con potencial de pares periódico	34
	3.1.	Ecuac	iones Bogoliubov-de Gennes para potenciales de pares periódicos	35
	3.2.	Anális	sis para una red cuadrada	41
	3.3.	Relaci	ones de auto-consistencia	47
	3.4.	Densie	lad de estados	52

4.	Sup	erredes de Grafeno acopladas a superconductores	54			
	4.1.	. Obtención de las funciones de Green semi-infinita y finita, a partir de la función				
	4.0		00			
	4.2.	Unión de nanocintas de grateno y la superred de grateno	61			
		4.2.1. Construcción de la función de Green para una superred de grafeno finita	63			
		4.2.2. Superred de grafeno semi-infinita	65			
	4.3.	Superred de grafeno acoplada a un superconductor $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	67			
		4.3.1. Superred finita acoplada con el grafeno	74			
	4.4.	Lente de Veselago con grafeno y superredes	76			
		4.4.1. Lentes de Veselago	79			
		4.4.2. Lentes de Veselago con superredes	87			
5.	5. Bicapas de grafeno					
	5.1.	Funciones de Green para la bicapa de grafeno $\ \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ .$	93			
	5.2.	Bicapa de grafeno semi-infinita	98			
		5.2.1. Aplicación al estudio de lentes de Veselago	102			
6.	Con	clusiones y perspectivas 1	.08			
	6.1.	Conclusiones	108			
	6.2.	Perspectivas	111			
7.	Pub	licaciones 1	12			
А.	Ecu	ación general para el corte de una región usando la ecuación de Dyson1	14			
в.	Cál Dys	culo de la función de un grafeno semi-infinito usando la ecuación de con	16			
C.	Fun	ción de Green del bloque np y la superred de grafeno 1	18			
D.	Map de g	pas de probabilidad de transmisión para lentes de Veselago con bicapas grafeno	.22			
	Bibliografía 12					

1

Capítulo 1

Introducción

Los materiales superconductores presentan un cambio de fase del estado normal a uno donde los electrones se comportan de manera coherente y la resistividad se hace cero. La primera teoría microscópica para explicar la superconductividad fue desarrollada en 1957 por Bardeen, Cooper y Schrieffer (BCS) [1,2]. Esta teoría se basa en que los electrones pueden sentir un potencial atractivo neto, obtenido por el intercambio virtual de fonones entre electrones [3]. En los superconductores, el estado base es formado por parejas de electrones llamados pares de Cooper los cuales poseen un momento y un espín opuesto para sistemas que respeten la simetría de inversión temporal [2]. En el modelo BCS aparece un potencial de pares cuya magnitud está relacionada con el número promedio de pares de Cooper y cuya fase expresa la correlación de largo alcance del sistema [2]. Por otro lado, las excitaciones en los superconductores se obtienen al romperse un par de Cooper y son descritas por las ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes, que provienen de una teoría de campo medio cuyo potencial de pares se debe encontrar de forma auto-consistente. Cuando el potencial de pares es inhomogéneo, como sucede en la interfase de un material normal y un superconductor (sistema N-S), se originan reflexiones de Andreev cuando un electrón que incide desde el material normal con una energía menor que el módulo del potencial de pares no puede transmitirse al superconductor como un estado excitado, este electrón puede aparearse con otro, formando un par de Cooper, lo que ocasiona que se refleje un hueco en el material normal (fig. **1-1**a) [4].

En un sistema N - S - N también se pueden presentar reflexiones de Andreev no locales o cruzadas CAR ("Cross Andreev Reflection"), donde un electrón que incide desde la región normal izquierda se transmite como un hueco en la región normal derecha e induce un par de Cooper en el superconductor (fig. 1-1b) [4–6]. El proceso inverso de CAR es equivalente a desdoblar un par de Cooper que proviene del superconductor en cada una de las regiones normales [7,8]. Estos procesos se han estudiado en grafeno [6,9], nanotubos de carbono [8,10]



Figura 1-1: a) Reflexión de Andreev local en un sistema N - S, donde un electrón incidente se refleja sobre la interfase como hueco y un par de Cooper es transmitido al superconductor. b) Reflexión de Andreev no local en un sistema N - S - N, donde un electrón que incide desde el material normal de la izquierda se transmite como un hueco al material normal de la derecha, induciendo un par de Cooper en el superconductor.

y nanoalambres [11, 12] con el objetivo de encontrar las condiciones para que los procesos CAR sean dominantes respecto a otros como el proceso de tunelamiento de electrones, a través del superconductor (cotunelamiento de electrones).

En el estudio de la superconductividad del modelo BCS, no es usual considerar el potencial periódico de la red de iones. Sin embargo, es posible para el potencial de pares que tiene la periodicidad de la red a partir de las relaciones de auto-consistencia y del teorema de Bloch, que el potencial de pares presente la periodicidad de la red [13–15]. El análisis de la superconductividad para un potencial de pares con la periodicidad de la red se ha realizado a lo largo de una dimensión o de una dirección del espacio recíproco, donde aparecen nuevas brechas de energía relacionadas con las dispersiones de Andreev [13–15]. Estas brechas se dan en esferas centradas en los planos de Bragg, denominadas esferas de Andreev. El presente trabajo extenderá los estudios [13–15] al incluir sistemas bidimensionales en la aproximación de electrones cuasi-libres obtienendo la densidad de estados y solucionando las relaciones de auto-consistencia, lo cual será un primer acercamiento al estudio de la superconductividad de alta temperatura crítica, considerando que los superconductores como los cupratos o los de base de hierro pueden ser entendidos en términos de planos [16-18]. En estos materiales se puede observar una nueva fase denominada "pseudogap", caracterizada por la presencia de un potencial adicional que se comporta como una brecha de energía [19, 20] la cual ha sido observada en experimentos de ARPES [21, 22] y en conductancia diferencial [23, 24]. La fase "pseudogap" sigue siendo motivo de estudio y podría ser una pieza clave para entender la superconductividad en estos sistemas.

Para el estudio de superconductores con potencial de pares periódico utilizamos el modelo de electrones cuasi-libres, el cual puede considerarse en los superconductores de base de hierro, que presentan electrones débilmente o medianamente localizados [25,26]. Además, mostramos los efectos de distintos términos de la expansión de Fourier del potencial de pares en las bandas

4

de energía y la densidad de estados para una red cuadrada; también exploramos el comportamiento con la temperatura de la primera y segunda componente de la expansión de Fourier del potencial de pares, lo cual permitirá observar su relevancia cerca de la temperatura crítica y por lo cual la segunda componente podría ser candidata para explicar la fase "pseudogap".

La superconductividad en nanotubos de carbono o en grafeno se puede lograr por efecto de proximidad [27], lo que permite la construcción de sistemas G - S. Allí, las reflexiones de Andreev pueden ser especulares o de retro-reflexión dependiendo de la energía de invección y el dopaje del grafeno [28,29]. El grafeno ha sido estudiado desde 1947 [30], logrando su obtención en 2004 [31], se caracteriza por ser un sistema bidimensional formado por átomos de carbono en una red hexagonal con dos átomos por celda primitiva. En el espacio recíproco la red es hexagonal, en los vértices del hexágono están puntos de Dirac donde se unen la banda de conducción y de valencia del material, al rededor de estos puntos el espectro es lineal por lo que es posible modelar la dinámica por la ecuación de Dirac para fermiones no masivos [32–34]. El grafeno como estructura finita posee bordes tipo "armchair" o zigzag, que afectan el espectro de energía, por ejemplo, una nanocinta de grafeno con bordes zigzag contiene estados superficiales o de borde, mientras estos estados no se presentan en una con bordes "armchair" [35]. Para obtener semiconductores tipo n o tipo p, el grafeno se puede dopar usando potenciales "gate". Se observa que en interfases np se pueden obtener índices de refracción negativos (lentes de Veselago), pues el momento de los electrones y huecos es dependiente de la banda donde se encuentren, lo que permite enfocar una corriente de electrones. En el caso en que las magnitudes de las energías de Fermi de cada región sean opuestas, el índice de refracción es -1, lo cual se puede analizar usando la óptica geométrica [36,37] como se muestra en la fig. 1-2a. Este tipo de lentes de Veselago han sido estudiados experimentalmente [38,39] examinando las condiciones en las cuales se puede obtener los puntos de enfoque.

En las lentes de Veselago realizadas en [37, 40] se observa que la diferencia de dopaje entre las interfaces presenta un gradiente, donde se evidencia que si el cambio de dopaje se realiza de manera abrupta, el proceso de enfoque es mejor. En un sistema G - S - G podemos tener lentes de Veselago que permiten que un electrón que incide desde el grafeno de la izquierda se enfoque como un hueco en el grafeno de la derecha, lo que corresponde a una reflexión CAR donde su punto enfoque de los huecos está en un lugar diferente al de cotunelamiento de electrones [41], como se muestra en la fig. **1-2**b. Estos estudios se han realizado para interfases perfectas, utilizando la aproximación de Andreev, con lo cual en el presente trabajo ampliamos su estudio introduciendo junturas no ideales y diferentes dopajes donde la aproximación de Andreev no es válida. Para ello usamos el formalismo de la función de Green para hallar las probabilidades de transmisión electrón-electrón y electrón-hueco, así como la conductancia diferencial no local, encontrando que cuando las interfases no son perfectas se puede incrementar la intensidad de las reflexiones CAR respecto al cotunelamiento. De igual manera, mostraremos que cuando la aproximación de Andreev no es válida obtenemos aberraciones ópticas en las trayectorias de huecos que provienen de reflexiones CAR.



Figura 1-2: a) Lente de Veselago formada por una juntura de grafeno *np* cuando el punto de enfoque está a la misma distancia de inyección y se encuentra usando las trayectorias semi-clásicas del electrón. Tomada de [38]. b) Proceso de enfoque en una lente de Veselago GSG: las líneas rojas corresponden a las trayectorias semi-clásicas de las cuasi-partículas tipo electrón y las azules son de cuasi-partículas tipo hueco, tomada de [41].

Adicional al sistema de grafeno tenemos las bicapas, formadas por dos monocapas de grafeno apiladas. En particular se estudiará la bicapa de grafeno Bernal (bGB) donde un átomo de carbono se encuentra en el centro de la red de la otra monocapa de grafeno (fig. 1-3a). El estudio de las bicapas de grafeno ha despertado gran interés ya que se ha encontrado que la rotación de las dos monocapas, una respecto a la otra, genera un nuevo tipo de superconductor [42]. La bGB presenta de manera similar al grafeno los puntos de Dirac, pero el espectro de energía alrededor de estos es parabólico y no lineal [43–46], lo que modela a los portadores de carga como masivos [43] y crea diferencias en el comportamiento del tunelamiento Klein en estos sistemas [46,47]. En las bGB se presentan cuatro bandas cerca de los puntos de Dirac, donde dos de ellas se tocan mientras las otras están separadas a una distancia relacionada con el parámetro de acople entre capas (fig. 1-3b). Un modelo usado para estudiar las bGB es el de baja energía, donde solo se tienen en cuenta las bandas que se tocan [48]. Este modelo introduce el dímero, el cual corresponde a los átomos que están directamente uno encima del otro; por su parte, el transporte se estudia en los átomos que no forman el dímero. Estos modelos no permiten estudiar fronteras definidas en las bGB, las cuales presentan diferentes densidades de estados en el borde [49]. Las nanocintas de las bGB pueden poseer cuatro tipos de fronteras, de las cuales dos de ellas son en zigzag, conocidas como α y β , dependiendo de la cercanía del dímero a la frontera. Las bGB se pueden dopar usando potenciales "gate" pero, a diferencia de la monocapa, es posible que se abran brechas de energía en los puntos de Dirac cuando se presenta un potencial eléctrico

alto [50] o si se tienen potenciales "gate" diferentes entre las capas superior e inferior [51]. Es posible diseñar lentes de Veselago usando potenciales "gate", de manera equivalente a como se realiza en las monocapas de grafeno [46], estas se estudiarán para interfases con bordes bien definidos. Para esto encontramos la función de Green de la bGB infinita, con el método de funciones asintóticas, y por medio de las ecuaciones de Dyson se encontraron las funciones de Green de la bGB semi-infinita con borde. Con el aporte de las funciones de Green de grafeno semi-infinitas se procede a ampliar los trabajos de la lente de Veselago con bGB [46]. Aquí encontramos efectos sobre las propiedades de transporte que, debido al tipo de frontera, no ha sido considerado en otros trabajos.



Figura 1-3: a) Vista superior (arriba) y lateral (abajo) de una bicapa de grafeno Bernal, el dímero está conformado por los átomos $A ext{ y } B'$. b) Bandas de energías alrededor de los puntos de Dirac de la bicapa de grafeno donde se aprecian cuatro bandas, dos de ellas se tocan y son usadas para la aproximación de baja energía, tomada de [52].

Se analizan sistemas superconductores con periodicidad intrínseca, así como sistemas con periodicidad extrínseca en superredes de grafeno formada por bloques np que se repiten. Estas superredes de grafeno (SL) muestran nuevos puntos de Dirac, según el ancho de las regiones que conforman el bloque y el potencial "gate" [53,54]. Las superredes de grafeno se pueden usar para colimar una corriente de electrones al suprimir la velocidad de propagación tangente a las interfases [55,56]. La fabricación de superredes de grafeno de alta calidad se ha logrado con grafeno encapsulado en nitruro de boro [57,58]. En este trabajo extendemos los estudios de las propiedades de transporte en sistemas con monocapas de grafeno acopladas a superconductores, en interfases SL - S usando la ecuación de Dyson para encontrar la función de Green de la SL semi-infinita, y la juntura SL - S donde mostramos que la superconductividad no interfiere en el número de nuevos puntos de Dirac, y que debido a las reflexiones locales de Andreev, se pueden intensificar la señal en la conductancia diferencial.

Mostramos cómo la energía de Fermi promedio efectiva del bloque np permite caracterizar el punto de Dirac de la lámina SL y cómo la aparición de los nuevos puntos de Dirac depende de las asimetrías en anchos del bloque np. Se usarán SL finitas en las lentes de Veselago N - S - N colocando superredes finitas a la derecha o izquierda del superconductor para incluir los efectos de colimación en el análisis del comportamiento de las reflexiones CAR y cotunelamiento, donde mostramos que, tener una SL a ambos lados del superconductor incrementa la intensidad el punto focal de la señal CAR respecto a la de cotunelamiento.

Este trabajo se desarrolla de la siguiente manera: en el segundo capítulo realizamos una introducción a los aspectos teóricos más relevantes de los sistemas mencionados y presentamos las ecuaciones para su desarrollo. En el tercer capítulo, se presenta un estudio sobre la superconductividad con un potencial de pares periódico, explorando resultados que no fueron alcanzados en [14] como la solución de las ecuaciones de auto-consistencia y la densidad de estados de una red cuadrada. El cuarto capítulo está dedicado a sistemas con base de grafeno, y se presenta la función de Green de superredes infinitas y semi-infinitas. En este mismo capítulo se encuentra la conductancia diferencial de una superred acoplada a un superconductor y el análisis de sistemas de Veselago con superconductores. El quinto capítulo se ha dedicado a las bicapas de grafeno en acople Bernal con diferentes fronteras zigzag donde encontramos la función de Green de un sistema infinito y semi-infinito, a partir de la cual encontramos las probabilidades de transmisión electrón-electrón y electrón-hueco en lentes de Veselago con bicapas. Por último, se presentan las conclusiones del trabajo y sus perspectivas.

Capítulo 2

Generalidades de los superconductores, el grafeno y las bicapas de grafeno

2.1. Teorema de Bloch y aproximación de electrones cuasi-libres

Consideremos un sistema de electrones que se mueven en un potencial periódico con un Hamiltoniano en segunda cuantización dado por

$$\widehat{H} = \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \widehat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left(\frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}) - E_F \right) \widehat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r}), \qquad (2-1)$$

con $U(\mathbf{r})$ como el potencial periódico, E_F la energía de Fermi y $\widehat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r})$ el operador de campo que destruye un electrón en la posición \mathbf{r} con espín σ , lo que podemos escribir en términos de funciones de Bloch como

$$\widehat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \widehat{c}_{\mathbf{k},\sigma} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \qquad (2-2)$$

donde las funciones $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ corresponden a las funciones de Bloch del sistema y $\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}$ el operador de Bloch que destruye un electrón en vector de onda \mathbf{k} y espín σ , con lo cual tenemos el Hamiltoniano

$$\widehat{H} = \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k},\sigma'} \widehat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} \widehat{c}_{\mathbf{k}',\sigma} \int d\mathbf{r} \varphi^{*}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \left(\frac{p^{2}}{2m} + U(\mathbf{r}) - E_{F}\right) \varphi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\sigma} E_{\mathbf{k}} \widehat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} \widehat{c}_{\mathbf{k}',\sigma},$$
(2-3)

 con

$$\left(\frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}) - E_F\right)\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{\mathbf{k}}\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \qquad (2-4)$$

las soluciones de (2-4) satisfacen el teorema de Bloch, que permite escribirlas como

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\phi(\mathbf{r}),\tag{2-5}$$

donde $\phi(\mathbf{r})$ tiene la periodicidad de la red, $\phi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n)$. Se observa que si a $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ se le suma un vector que coincida con la periodicidad de $\phi(\mathbf{r})$, se obtiene

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n}\psi(\mathbf{r}).$$
(2-6)

Dado que las funciones $U(\mathbf{r}) \ge \psi(\mathbf{r})$ son periódicas, se pueden realizar las siguientes expansiones de Fourier

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{m} U(\mathbf{K}_{m}) e^{i\mathbf{K}_{m}\cdot\mathbf{r}},$$
(2-7)

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{V_b}} \sum_m u_{\mathbf{K}_m} e^{i\mathbf{K}_m\cdot\mathbf{r}},\tag{2-8}$$

donde se ha usado como factor de normalización el volumen del sistema V_b y los coeficientes $u_{\mathbf{K}_m}$ dependen del vector de onda k. Usando el Hamiltoniano (2-4) y las ecuaciones (2-7) y (2-8), obtenemos la siguiente ecuación para el coeficiente $u(\mathbf{K}_m)$

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\left(\mathbf{k} + \mathbf{K}_n\right)^2 - E_F\right)u(\mathbf{K}_n) + \sum_m U\left(\mathbf{K}_n - \mathbf{K}_m\right)u(\mathbf{K}_m) = Eu(\mathbf{K}_n),\tag{2-9}$$

el sistema de ecuaciones para los coeficientes $u(\mathbf{K}_n)$ permite obtener el espectro de energía $E_{\mathbf{k}}$.

Asumimos que el potencial de la red es de orden perturbativo respecto a la energía cinética de los electrones para introducir la aproximación de electrones cuasi-libres, donde a primer orden para un valor fijo de $U(\mathbf{K}_n)$ obtenemos

$$u(\mathbf{K}_n) = -\frac{2mU(\mathbf{K}_n)}{\hbar^2 \left((\mathbf{k} + \mathbf{K}_n)^2 - \mathbf{k}^2 \right)} u(0), \qquad (2-10)$$

el cual muestra una divergencia cuando $(\mathbf{k} + \mathbf{K}_n)^2 - \mathbf{k}^2 = 0$, también expresada como

$$\mathbf{K}_n \cdot \left(\mathbf{k} + \mathbf{K}_n / 2 \right) = 0, \tag{2-11}$$

ecuación que corresponde a los planos de Bragg. La aproximación de primer orden no es suficiente alrededor de estos planos, por lo que al usar (2-9) obtenemos las siguientes ecuaciones para encontrar las soluciones alrededor de los planos

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\mathbf{k}^2 - E - E_F\right)u_0 + V\left(-\mathbf{K}_p\right)u_{\mathbf{K}_p} = 0, \qquad (2-12)$$

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\left(\mathbf{k} + \mathbf{K}_p\right)^2 - E - E_F\right) u_{\mathbf{K}_p} + V\left(\mathbf{K}_p\right) u_0 = 0.$$
(2-13)



Figura 2-1: El espectro de energía de un metal está dado por varias bandas, obtenidas al considerar los distintos cruces de las parábolas de los electrones, cuya periodicidad genera una repetición de estas. En la figura se observan dos bandas y el valor de la brecha de energía. Imagen tomada de [14].

Para tener soluciones distintas de cero necesitamos que el determinante de la matriz del sistema de ecuaciones sea cero, por lo que al utilizar las definiciones dadas por

$$\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_p} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\mathbf{k} + \mathbf{K}_p\right)^2 - E_F, \qquad (2-14)$$

$$\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}) = \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_p} \pm \varepsilon_{\mathbf{k}}}{2},$$
(2-15)

obtenemos el espectro de energía

$$E(\mathbf{k}) = \varepsilon_{+} \left(\mathbf{k} \right) \pm \left(V_{\mathbf{K}_{p}}^{2} + \varepsilon_{-}^{2}(\mathbf{k}) \right)^{1/2}.$$
(2-16)

Así, la brecha de energía en un plano de Bragg está dada por

$$\Delta E(\mathbf{K}_p) = 2 \left| V_{\mathbf{K}_p} \right|. \tag{2-17}$$

El espectro de energía se obtiene a partir de la periodicidad y de la aproximación de electrones cuasi-libres en las cercanías de los planos de Bragg. En este espectro (fig. 2-1) observamos una brecha de energía cuando el vector de onda pertenece a un plano de Bragg.

Para obtener la superficie de Fermi se resuelve la siguiente ecuación

$$E_n(\mathbf{k}) - E_F = 0, \tag{2-18}$$

siendo $E_n(\mathbf{k})$ la energía de la *n*-ésima banda. La descripción de esta superficie de Fermi dará información de las propiedades de los materiales. De esta manera diversos materiales tendrán

distintas superficies de Fermi, las cuales se pueden observar con experimentos de ARPES [59], donde se puede determinar la forma de su superficie en el espacio recíproco para diversos materiales, por ejemplo, para superconductores (fig. 2.1).



Figura 2-2: Superficie de Fermi del material superconductor Bi(Pb)-2212. Tomada con Arpes [60].

2.2. Superconductores

Los materiales superconductores presentan un cambio de fase del estado normal a uno donde los electrones se comportan de manera coherente y la resistividad se hace cero, este cambio de fase está caracterizado por un parámetro de orden complejo el cual es cero en la fase normal y máximo en la fase superconductora a temperatura cero. El modelo BCS explica el comportamiento de los electrones en la fase superconductora e introduce un potencial de pares Δ [1] proporcional al parámetro de orden [61], donde la magnitud del potencial de pares está relacionada con el número promedio de pares de Cooper y cuya fase expresa la correlación de largo alcance del sistema [2]. El Hamiltoniano del modelo BCS en segunda cuantización, usando la aproximación de campo medio, está dado por

$$\widehat{H} \approx \sum_{\alpha} \int d\mathbf{r} \widehat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left(\frac{\widehat{p}^{2}}{2m} + U(\mathbf{r}) - E_{F} \right) \widehat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r})
+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \left\{ \Delta(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \widehat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) \widehat{\Psi}_{-\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}') + \Delta^{*}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \widehat{\Psi}_{-\alpha}(\mathbf{r}') \widehat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}) \right\},$$
(2-19)

donde los operadores de campo $\widehat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r})$ y $\widehat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r})$ destruyen o crean un electrón en la posición \mathbf{r} con espín α . Por su parte, el potencial de pares Δ cumple la relación

$$\Delta(\mathbf{r}',\mathbf{r}) = -\beta V(\mathbf{r}',\mathbf{r}) \left\langle \widehat{\Psi}_{-\beta}(\mathbf{r}) \widehat{\Psi}_{\beta}(\mathbf{r}') \right\rangle, \qquad (2-20)$$

con $V(\mathbf{r}', \mathbf{r})$ el potencial neto de interacción entre los electrones, y $\langle \widehat{\Psi}_{-\beta}(\mathbf{r}) \widehat{\Psi}_{\beta}(\mathbf{r}') \rangle$ el valor esperado de destruir dos partículas con espín opuesto. El valor esperado es cero cuando el material se encuentra en el estado normal, pero en el estado superconductor es proporcional al número de electrones apareados.

Para diagonalizar el Hamiltoniano (2-19) realizamos la siguiente transformación canónica de Bogoliubov-Valantin

$$\widehat{\Psi}_{\beta}(\mathbf{r},t) = \sum_{n} \left[u_{n}(\mathbf{r},t)\widehat{\gamma}_{n,\beta} + \beta v_{n}^{*}(\mathbf{r},t)\widehat{\gamma}_{n,-\beta}^{\dagger} \right], \qquad (2-21)$$

$$\widehat{\Psi}_{-\beta}^{\dagger}(\mathbf{r},t) = \sum_{n} \left[u_{n}^{*}(\mathbf{r},t)\widehat{\gamma}_{n,-\beta}^{\dagger} - \beta v_{n}(\mathbf{r},t)\widehat{\gamma}_{n,\beta} \right], \qquad (2-22)$$

con lo cual se puede obtener el siguiente Hamiltoniano

$$\widehat{H} = E_0 + \sum_n E_n \widehat{\gamma}_{n,\alpha}^{\dagger} \widehat{\gamma}_{n,\alpha}, \qquad (2-23)$$

donde E_0 es la energía del estado base y E_n es la energía de excitación del estado n. Para que la transformación (2-21) y (2-22) diagonalice el Hamiltoniano, las funciones $u_n(\mathbf{r})$ y $v_n(\mathbf{r})$ satisfacen

$$Eu_n(\mathbf{r}) = \left(\frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}) - E_F\right) u_n(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' \Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') v_n(\mathbf{r}'), \qquad (2-24)$$

$$Ev_n(\mathbf{r}) = -\left(\frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}) - E_F\right)v_n(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' \Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}')u_n(\mathbf{r}').$$
(2-25)

Observamos en las anteriores ecuaciones que cuando $\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 0$ el sistema queda desacoplado y se obtiene que la ecuación (2-24) describe a un electrón con función de onda $u_n(\mathbf{r})$ por encima de la energía de Fermi, mientras la ecuación (2-25) describe la función de onda $v_n(\mathbf{r})$ de un hueco por debajo de la energía de Fermi. Las ecuaciones (2-24) y (2-25) son las ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes que describen los estados excitados descritos por un espinor electrón-hueco formado por $u_n(\mathbf{r})$ y $v_n(\mathbf{r})$.

El potencial de pares genera una brecha de energía del mismo valor cerca de la superficie de Fermi, la cual puede tener diferentes tipos de simetrías (fig. **2-3**.) [62–64]. Para los superconductores convencionales, la brecha de energía es independiente de **k**, conocida como

simetría s. En contraste, para los superconductores no convencionales podemos tener simetrías tipo d o tipo p [64,65].

Cuando el potencial de pares es inhomogéneo, por ejemplo, en una juntura entre un material



Figura 2-3: Simetrías del potencial de pares en el espacio reciproco: a) simetría s, b) simetría p_x , c) simetría d_{xy} y d) simetría $d_{x^2-y^2}$.

normal y un superconductor, tenemos nuevos procesos de dispersión conocidos como reflexiones de Andreev, donde un electrón que no tiene energía suficiente para transmitirse como una cuasi-partícula puede formar un par de Cooper. Debido a la conservación de carga, en este proceso se crea un hueco dentro del material normal cuando este cede un electrón para formar el par, como se muestra esquemáticamente en la fig. **2-4**. Las reflexiones de Andreev son fundamentales para las propiedades de transporte para superconductores convencionales y no convencionales.

2.3. Grafeno

Como se mencionó anteriormente, el grafeno fue estudiado desde 1947 por Wallace [30] y sintetizado en el 2004 por Andre Geim y Konstantin Novoselov [31]. El grafeno es un material bidimensional formado por átomos de carbono en dos redes triangulares entrelazadas



Figura 2-4: Descripción de una reflexión de Andreev, donde el potencial de pares varía en función de x siendo 0 en el metal normal y máximo en el superconductor.

denominadas $A \neq B$ (fig. 2-5), donde los vectores de la celda primitiva están dados por

$$\mathbf{a}_{1} = \frac{1}{2} \left(1, \sqrt{3} \right) a_{0}, \tag{2-26}$$
$$\mathbf{a}_{2} = \frac{1}{2} \left(1, -\sqrt{3} \right) a_{0}, \tag{2-27}$$

donde $a_0 = \sqrt{3}a$ es la distancia entre átomos de carbono A - A, con a = 1.41Å. Para el



Figura 2-5: Red de grafeno, los átomos A y B son de carbono. El rombo del centro de la figura es la celda primitiva con vectores \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 . Los primeros vecinos de un átomo A son los del átomo B y viceversa.

grafeno en el modelo "tight binding" se tiene el siguiente Hamiltoniano

$$H = \sum_{i,\delta_m} t(a_i^{\dagger} b_{i+\delta_m} + b_{i+\delta_m}^{\dagger} a_i), \qquad (2-28)$$

donde, realizando la transformación

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot R_i} a_{\mathbf{k}}, \tag{2-29}$$

$$b_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot R_i} b_{\mathbf{k}}, \tag{2-30}$$

y sumando sobre los vectores a los primeros vecinos de un átomo A que son

$$\delta_0 = 0, \tag{2-31}$$

$$\delta_1 = -\frac{1}{2} \left(1, -\sqrt{3} \right) a, \tag{2-32}$$

$$\delta_2 = \frac{1}{2} \left(1, \sqrt{3} \right) a, \tag{2-33}$$

obtenemos que el espectro de energía está dado por

$$E(\mathbf{k}) = \pm |t| \sqrt{1 + 4\cos\left(k_x \sqrt{3}a_0/2\right) \left(\cos\left(k_x \sqrt{3}a_0/2\right) + \cos\left(3k_y a_0/2\right)\right)},$$
(2-34)

como se observa en la fig. **2-6**a. En este espectro se aprecia que las bandas de valencia y de conducción se tocan en los vértices del hexágono correspondientes a los límites de la primera zona de Brillouin, convirtiendo al grafeno en un semiconductor de brecha de energía cero. De los seis puntos de Dirac sobre la red hexagonal solo dos son no equivalentes, dados por

$$\mathbf{K} = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a_0} (1,0) , \qquad (2-35)$$

$$\mathbf{K}' = \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a_0} \left(1, \sqrt{3}\right). \tag{2-36}$$

Alrededor de estos puntos el espectro de energía se puede aproximar como

$$E\left(\mathbf{k}\right) = \pm \left|\gamma\right| \sqrt{\delta k_x^2 + \delta k_y^2},\tag{2-37}$$

con $\gamma = t \frac{3a_0}{2}$, siendo δk_x y δk_y las variaciones del vector de onda alrededor del punto **K** o **K'**. Aplicando la aproximación $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ obtenemos que el Hamiltoniano se puede escribir alrededor del punto **K** o **K'** como

$$H_g^{\hat{\mathbf{K}}/\mathbf{K}'} = \begin{pmatrix} -E_F & \hbar v_F \left(-i\partial_x \pm iq\right) \\ \hbar v_F \left(-i\partial_x \mp iq\right) & -E_F \end{pmatrix},$$
(2-38)

donde $v_F = \gamma/\hbar$ es la velocidad de Fermi y q es idéntico a δk_y . La dinámica de los electrones es gobernada por la ecuación de Dirac para fermiones con masa en reposo cero. Así, es posible



Figura 2-6: a) Espectro de energía del grafeno donde $K_D = 2\pi/(\sqrt{3}a_0)$. b) Probabilidad de transmisión de un electrón que incide en una juntura pn de grafeno en función del ángulo de incidencia. Tomado de [66].

hacer un paralelo entre resultados relativistas y el comportamiento de los electrones del grafeno, aunque la velocidad de estos sea de 1/300 veces la velocidad de la luz, lo que permite observar la paradoja de Klein en el grafeno, la cual es la predicción de que un electrón que incida sobre una barrera de potencial puede atravesarla con probabilidad uno [47], independiente del valor de la altura de la barrera. Este efecto se ha observado experimentalmente en junturas pnp y es dependiente del ángulo de incidencia, siendo uno a incidencia normal y variando con el ángulo, como se ilustra en la fig. **2-6**b [67].

Experimentalmente se construyen nanocintas de grafeno caracterizadas por bordes "armchair" y zigzag (fig. **2-7**) [68,69]. En el caso de nanocintas con borde zigzag, el material es metálico y presenta estados de borde, mientras en el caso de nanocintas con borde "armchair" no se presenta este estado y pasa de ser semiconductor a metálico, dependiendo de su ancho [45].

Los sistemas de grafeno también se han estudiado en contacto con materiales superconductores donde se induce superconductividad en el grafeno usando el efecto de proximidad [70, 71] como se aprecia en la fig. **2-8**. Los electrones con superconductividad inducida son descritos por las ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes Dirac (BdG-D). Su construcción parte de agregar un acople de electrones y huecos al Hamiltoniano del grafeno alrededor de los puntos de Dirac, con lo cual se obtiene el siguiente Hamiltoniano

$$\tilde{H}_{BGD} = \begin{pmatrix} \tilde{H}_g & \tilde{\Delta} \\ \tilde{\Delta}^* & -\tilde{H}_g \end{pmatrix}, \qquad (2-39)$$



Figura 2-7: Bordes posibles de una nanocinta de grafeno donde se agregan el tipo de átomo en el borde. a) Borde zigzag donde solo se tiene un tipo de átomo que sera tipo A para el resto del texto. b) Borde «armchair» donde la frontera presenta ambos tipos de átomos A y B.

donde \tilde{H}_g es el Hamiltoniano (2-38) y $\tilde{\Delta}$ es el potencial de pares en la base de pseudo-spín,



Figura 2-8: Diagrama de una juntura grafeno-superconductor, donde la superconductividad se obtiene por efecto de proximidad al estar la lámina de grafeno en contacto con un superconductor.

en la base de átomos $A ext{ y } B$.

Las reflexiones de Andreev pueden ser retro-reflexiones o especulares cuando consideramos una juntura grafeno-superconductor. El vector de onda del hueco está relacionado con el vector de onda del electrón usado para formar el par de Cooper, este electrón puede ser tomado de la banda de valencia o conducción [28]. Debido a la cercanía de las dos bandas, cuando es tomado de la otra banda de la que incidió el electrón tenemos una reflexión de Andreev especular fig. **2-9** donde se aprecia que solo la componente k_x del vector de onda del hueco cambia de signo. Cuando el hueco es generado en la misma banda, se tiene que el vector de onda del hueco es opuesto al del electrón incidente, con lo cual hablamos de una retro-reflexión (fig. **2-9**b).



Figura 2-9: Diferentes formas de reflexiones de Andreev en grafeno. a) Reflexión especular cuando el hueco se crea en la otra banda del electrón incidente y b) retro-reflexión donde el hueco se crea en la misma banda del electrón incidente.

2.4. Bicapas de grafeno

Las bicapas de grafeno (BG) están formadas por el apilamiento de dos mono-capas de grafeno, que puede ser Bernal o apilamiento AA, donde el Bernal es más usado experimentalmente [43]. Ambos apilamientos se ven con vista lateral en la fig. **2-10**a , mientras que el apilamiento Bernal se representa desde una vista superior en la fig. **2-10**b. A diferencia de la monocapa de grafeno, la bicapa presenta un espectro parabólico a baja energía, lo que implica que la dinámica sea modelada por portadores de Dirac masivos. En las bicapas también tenemos bandas que se tocan en los puntos de Dirac, en los que se puede presentar una brecha de energía controlable usando campos externos [72]; adicionalmente tenemos dos bandas de energía separadas que dependen del acople entre las monocapas de grafeno.

Para modelar las bicapas usaremos la aproximación $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ alrededor de los puntos de Dirac,



Figura 2-10: a) Vista lateral de la bicapa de grafeno en ambas configuraciones. b) Vista superior de la bicapa de grafeno en configuración Bernal.

para lo cual usamos el siguiente Hamiltoniano

$$H = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\pi} & 0 & 0 \\ \hat{\pi}^{\dagger} & 0 & t_1 & 0 \\ 0 & t_1 & 0 & \hat{\pi}^{\dagger} \\ 0 & 0 & \hat{\pi} & 0 \end{pmatrix},$$
(2-40)

con t_1 , como parámetro que acopla el átomo A de la monocapa superior con el átomo B de la monocapa inferior, donde $\hat{\pi}$ y $\hat{\pi}^{\dagger}$ se obtienen de la misma manera que en la monocapa de grafeno y están dados por

$$\widehat{\pi} = v_F \left(p_x + i p_y \right), \widehat{\pi}^{\dagger} = v_F \left(p_x - i p_y \right).$$
(2-41)

Cuando tenemos que $t_1 = 0$ en (2-40), el sistema queda descrito como dos redes de grafeno desacopladas. En las bicapas de grafeno se encuentra que el valor obtenido de t_1 es de aproximadamente 1/10 del valor de t. El espectro de energía para la bicapa en esta aproximación se observa en la fig. **2-11**a, donde, si bien el espectro es parabólico, las dos bandas se siguen tocando en un punto. Como en el grafeno, tenemos una brecha de energía cero entre las bandas de valencia y conducción, obteniendo resultados similares al grafeno. En este tipo de sistemas también se presenta la paradoja de Klein, donde la transmisión es uno cuando el electrón incide con un ángulo de $\pi/4$ [66], como se muestra en la fig. **2-11**b.

2.5. Funciones de Green

En este trabajo usamos el formalismo de las funciones de Green para estudiar el espectro de energía y las propiedades de transporte. Las funciones de Green se pueden definir usando los



Figura 2-11: a) Espectro de energía de la bicapa de grafeno cerca de los puntos de Dirac, donde se aprecia una forma parabólica a bajas energías y presenta una segunda banda. b) Probabilidad de tunelamiento de un electrón en una juntura pn de bicapa de grafeno en función del ángulo de incidencia. Tomado de [66].

operadores de campo para fermiones como

$$\hat{g}_{\sigma}^{r}(\mathbf{r},\mathbf{r}',t,t') = -i\Theta(t-t')\left\langle \left[\hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r},t),\hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}',t')\right]_{+}\right\rangle, \qquad (2-42)$$

$$\hat{g}^{a}_{\sigma}(\mathbf{r},\mathbf{r}',t,t') = i\Theta(t'-t)\left\langle \left[\hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r},t),\hat{\Psi}^{\dagger}_{\sigma}(\mathbf{r}',t')\right]_{+}\right\rangle, \qquad (2-43)$$

donde $\Theta(t'-t)$ es la función paso de Heavyside y $\hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r},t)$ y $\hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r},t)$ son los operadores de campo que destruyen o crean electrones, respectivamente en la posición \mathbf{r} , en el tiempo t, con espín σ . En el texto se considera degeneración en espín, por que se omitirá en las expresiones, a no ser que sea necesario incluirlo. El término $\left\langle \left[\hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r},t), \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}',t') \right]_{+} \right\rangle$ se refiere a un promedio estadístico en un ensamble gran canónico. El superíndice de la función de Green, r y a, se refiere a las funciones de Green retardada y avanzada respectivamente, dado que la más usada en el este trabajo es la retardada se eliminara el superíndice r, a menos que se considere necesario.

Cuando tenemos un sistema de partículas independientes, a partir de las ecuaciones de movimiento de los operadores de campo en la imagen de Heisenberg, podemos encontrar que la función de Green cumple la siguiente ecuación diferencial

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \hat{h}\left(\mathbf{r}\right)\right)\hat{g}\left(\mathbf{r},\mathbf{r}',t,t'\right) = \hbar\delta\left(t-t'\right)\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}'\right),\tag{2-44}$$
donde $\hat{h}(\mathbf{r})$ es el Hamiltoniano que actúa sobre una partícula. También es usual describir la función de Green usando las transformadas de Fourier en energía, donde la ecuación a resolver es

$$\left(E - \hat{h}\left(\mathbf{r}\right)\right)\hat{g}\left(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E\right) = \delta\left(\mathbf{r} - \mathbf{r}'\right),\tag{2-45}$$

adicionalmente, cuando el sistema es homogéneo en el espacio, se puede hacer una transformada de Fourier al espacio vectores de onda obteniendo la siguiente ecuación para $\hat{g}(\mathbf{k}, E)$

$$\left(E - \hat{h}\left(\mathbf{r}\right)\right)\hat{g}\left(\mathbf{k}, E\right) = \hat{1}.$$
(2-46)

Para el caso de un sistema de grafeno tenemos que la función de Green es matricial de orden dos, y se extenderá a orden cuatro cuando se considere un grafeno con superconductividad inducida, trabajado en el espacio de Nambu. Adicionalmente, como estamos interesados en sistemas que varían a lo largo del eje x, la función de Green que vamos a utilizar es de la forma $\hat{g}(x, x', q, E)$ donde se ha realizado una transformada de Fourier mixta en tiempo y vector de onda en k_y que llamaremos q, dada por

$$\hat{g}(x, x', q, E) = \int \hat{g}(x, y, x', y', t) e^{-iq(y-y') + iE(t-t')/\hbar} d(y-y') d(t-t')$$
(2-47)

También introducimos los símbolos > y < ¹, para tener en cuenta cuál es mayor o menor entre x y x', de tal manera que

$$\hat{g}^{>}(x, x', q, E) \text{ si } x > x',$$
(2-48)

$$\hat{g}^{<}(x, x', q, E) \text{ si } x < x'.$$
 (2-49)

Usaremos la anterior notación para los cálculos que se realicen con las funciones de Green, considerando que en general $\hat{g}^{>}(x, x, q, E) \neq \hat{g}^{<}(x, x, q, E)$.

2.5.1. Método de soluciones asintóticas para encontrar la función de Green

Encontrar las funciones de Green asociadas a un Hamiltoniano inhomogéneo o matricial por medio de la ecuación diferencial (2-44) puede ser tedioso para un grafeno finito para lo cual se pueden usar otros métodos, por ejemplo, el método de las soluciones asintóticas utiliza funciones de onda que solucionan el Hamiltoniano con condiciones de frontera específicas [73].

¹Las funciones de Green con los símbolos > y < suelen usarse para las definiciones de las funciones de Green «mayor» y «menor», las cuales son empleadas en el formalismo de Keldysh. En esta investigación el presente texto estos símbolos solo se usan para indicar cuándo x es mayor o menor que x',

Para construir la función de Green del grafeno usando el Hamiltoniano en un solo valle, como se realiza en [73], debemos tener en cuenta las condiciones de frontera, las cuales dependerán de si el sistema es infinito, semi-infinito o finito. Para el grafeno partimos de solucionar la siguiente ecuación

$$\begin{pmatrix} -E_F & \hbar v_F (-i\partial_x + iq) \\ \hbar v_F (-i\partial_x - iq) & -E_F \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_A(x) \\ \Psi_B(x) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi_A(x) \\ \Psi_B(x) \end{pmatrix}.$$
 (2-50)

Supondremos que las soluciones son de la forma

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \Psi_A(x) \\ \Psi_B(x) \end{pmatrix} = e^{ikx}\phi, \qquad (2-51)$$

con ϕ un espinor que se obtiene a partir de una ecuación de valores y vectores propios. Reemplazando esta solución en 2-50 se obtiene que k es dado por

$$k = \pm \sqrt{\frac{\left(E_F + E\right)^2}{\left(\hbar v_F\right)^2} - q^2},$$
(2-52)

cuyos vectores propios están dados por

$$\phi_1 = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} \\ e^{i\alpha/2} \end{pmatrix}, \tag{2-53}$$

$$\phi_2 = \begin{pmatrix} -e^{i\alpha/2} \\ e^{-i\alpha/2} \end{pmatrix}, \tag{2-54}$$

 con

$$e^{\pm i\alpha} = \frac{k \pm iq}{E + E_F}.$$
(2-55)

Con esto, las soluciones del Hamiltoniano (2-50) son

$$\psi^{\pm}(x) = e^{\pm ikx}\phi_{1/2},\tag{2-56}$$

de ellas construimos las soluciones asintóticas de acuerdo a las fronteras. Consideramos dos posibilidades, dependiendo si el grafeno es finito o infinito. Para un grafeno infinito (fig. 2-12a), solo tenemos que considerar cuáles soluciones van hacia la derecha o hacia la izquierda, ya que no hay procesos de dispersión. Para grafenos finitos, se encuentra que los electrones se reflejan en la frontera con un coeficiente r_l (fig. 2-12b). Con esto obtenemos que las soluciones asintóticas son de la forma

$$\varphi^{>/<}(x) = e^{\pm ikx}\phi_{1/2} + r_l e^{\mp ikx}\phi_{2/1}.$$
(2-57)

Para un grafeno infinito tenemos $r_l = 0$, al no tener procesos de reflexión; para grafenos con frontera zigzag, consideremos que en el borde hay un átomo con lo cual una componente de la función de onda toma el valor de cero. Si construimos la frontera con un átomo tipo A, en la la frontera la componente de la función de onda $\psi^{>/<}(x)$ debe anularse, es decir $\psi_A^>(x_L) = 0$. Por otra parte, el átomo tipo B debe anularse para realizar los acoples en la frontera izquierda, con lo cual tenemos $\psi_B^<(x_R) = 0$. Al aplicar la ecuación (2-57) podemos obtener que los coeficientes de reflexión r_L y r_R , son

$$r_R = -e^{-i\alpha}e^{2ikx_R},$$

$$r_L = e^{-i\alpha}e^{-2ikx_L}.$$
(2-58)
(2-59)

Finalmente, para obtener la función de Green con estas dos soluciones asintóticas se encuentra



Figura 2-12: Soluciones asintóticas para las condiciones de frontera para a) grafeno infinito y b) grafeno finito.

la combinación lineal de las soluciones para satisfacer las condiciones de Frontera, con la siguiente construcción de la función de Green

$$\hat{\boldsymbol{g}}^{<}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}', \boldsymbol{q}, \boldsymbol{E}) = A\varphi^{<}(\boldsymbol{x})\varphi^{>,T}(\boldsymbol{x}')\hat{\sigma}_{\boldsymbol{z}},\tag{2-60}$$

$$\hat{\boldsymbol{g}}^{>}(x, x', q, E) = A'\varphi^{>}(x)\varphi^{<,T}(x')\hat{\sigma}_{z}, \qquad (2-61)$$

donde $\psi^{>,T}(x')$ es la transpuesta de la solución y $\hat{\sigma}_z$ es la matriz de Pauli [73].

Para determinar el valor de A y A' se utiliza la relación entre $\hat{g}^{<}(x, x', q, E)$ y $\hat{g}^{>}(x, x', q, E)$ que se encuentra a partir de la ecuación (2-44) integrada en x, obteniendo

$$\hat{\boldsymbol{g}}^{>}(x,x) - \hat{\boldsymbol{g}}^{<}(x,x) = \frac{-i}{\hbar v_F} \begin{pmatrix} 0 & 1\\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$
(2-62)

Al reemplazar (2-57) en (2-60) y (2-61) y solucionar (2-62), obtenemos la función de Green de un grafeno infinito $(r_l = 0)$

$$\hat{\boldsymbol{g}}^{<}(x,x',q,E) = \frac{-i}{\hbar v_F \cos \alpha} e^{-ik(x-x')} \begin{pmatrix} 1 & -e^{i\alpha} \\ -e^{-i\alpha} & 1 \end{pmatrix}, \qquad (2-63)$$

$$\hat{\boldsymbol{g}}^{>}(x,x',q,E) = \frac{-i}{\hbar v_F \cos \alpha} e^{ik(x-x')} \begin{pmatrix} 1 & e^{-i\alpha} \\ e^{i\alpha} & 1 \end{pmatrix}.$$
(2-64)

Al usar las condiciones de frontera (2-58) y (2-59), obtenemos la función de Green de la nanocinta de grafeno con bordes zigzag, comprendida entre x_0 y x_1 , como

$$\hat{\boldsymbol{g}}^{<}(x,x') = \frac{A}{D} \left(e^{ik(x'-x)} \begin{pmatrix} 1 & -e^{i\alpha} \\ -e^{-i\alpha} & 1 \end{pmatrix} + e^{ik(x+x'-2x_0)} e^{-i\alpha} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} & -1 \\ 1 & -e^{i\alpha} \end{pmatrix} \right) \\ -\frac{A}{D} \left(e^{-ik(x+x'+2x_1)} e^{-i\alpha} \begin{pmatrix} e^{i\alpha} & 1 \\ -1 & -e^{-i\alpha} \end{pmatrix} + e^{i2kW} e^{-i\alpha} e^{ik(x-x')} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} & e^{-2i\alpha} \\ 1 & e^{-i\alpha} \end{pmatrix} \right),$$
(2-65)

$$\hat{\boldsymbol{g}}^{>}(\boldsymbol{x}.\boldsymbol{x}') = \frac{A}{D} \left(e^{ik(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')} \begin{pmatrix} 1 & e^{-i\alpha} \\ e^{i\alpha} & 1 \end{pmatrix} + e^{ik(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{x}'-2x_0)} e^{-i\alpha} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} & -1 \\ 1 & -e^{i\alpha} \end{pmatrix} \right) -\frac{A}{D} \left(e^{-ik(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{x}'+2x_1)} e^{-i\alpha} \begin{pmatrix} e^{i\alpha} & 1 \\ -1 & -e^{-i\alpha} \end{pmatrix} + e^{ik(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x})} e^{2ikW} e^{-i\alpha} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} & -1 \\ -e^{-2i\alpha} & e^{-i\alpha} \end{pmatrix} \right),$$
(2-66)

 con

$$W = x_1 - x_0$$
 (2-67)

$$A = \frac{-i}{2\hbar v_F \cos \alpha},\tag{2-68}$$

$$D = \left(e^{-2i\alpha}e^{2ikW} + 1\right).$$
(2-69)

Las funciones de Green obtenidas son la base para encontrar la función de la superred de grafeno en la sección 4.2. En la sección 4.1 se mostrará otro método que implementamos en este trabajo para encontrar la función de Green finita, usando la de un grafeno infinito.

2.5.2. Función de Green para la lámina de grafeno con superconductividad inducida

Para encontrar la función de Green de un grafeno con superconductividad inducida, que está descrito por el Hamiltoniano (2-39), se debe solucionar la siguiente ecuación

$$(E - \hat{H}_{BGD})\hat{g}_s(x, x', q, E) = \delta(x - x').$$
(2-70)

Como mencionamos anteriormente, este proceso es tedioso, por lo que usaremos el método de soluciones asintóticas, para lo cual vamos a obtener los valores y vectores propios del Hamiltoniano \hat{H}_{BGD} dado por (2-39), donde se realiza el mismo proceso anterior

$$\psi_{e/h}^{>}(x) = e^{\pm ik_{e/h}^{s}x} \phi_{1e/2h} \otimes \begin{pmatrix} u_0/v_0 \\ v_0/u_0 \end{pmatrix}, \qquad (2-71)$$

$$\psi_{e/h}^{<}(x) = e^{\mp i k_{e/h}^{s} x} \phi_{2e/1h} \otimes \begin{pmatrix} u_0/v_0 \\ v_0/u_0 \end{pmatrix}, \qquad (2-72)$$

obteniendo el producto tensorial de la base espinorial del grafeno con la base de electrones y huecos de superconductividad, y cuyos valores propios están dados por

$$k_{e/h}^{s} = \sqrt{\frac{(E_F \pm \Omega)^2}{\hbar^2 v_F^2} - q^2},$$
(2-73)

 $con \Omega = \sqrt{E^2 - |\Delta|^2} y \phi_{1/2}$ los descritos con las ecuaciones (2-53) y (2-54), con $e^{\pm i\alpha_{e/h}} = \frac{k_{e/h}^s \pm q}{E + E_F}$. Los valores de u_0 y v_0 son

$$u_0 = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 + \frac{\Omega}{E}\right)},\tag{2-74}$$

$$v_0 = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\Omega}{E}\right)}.$$
(2-75)

Para las condiciones de frontera se tienen nuevos procesos de dispersión por las reflexiones de Andreev, con lo cual además de las vistas en la fig. **2-12** tenemos las mostradas en la fig. **2-13**, donde un electrón puede ser reflejado como hueco. En este caso, las soluciones asintóticas están dadas por

$$\phi_e^{<}(x) = \psi_e^{<}(x) + r_L^e \psi_e^{>}(x) + r_L^h \psi_h^{>}(x), \qquad (2-76)$$

$$\phi_e^{>}(x) = \psi_e^{>}(x) + r_R^e \psi_e^{<}(x) + r_R^h \psi_h^{<}(x), \qquad (2-77)$$

$$\phi_h^<(x) = \psi_h^<(x) + r_L'^e \psi_h^>(x) + r_{h,L}'^h \psi_e^>(x), \qquad (2-78)$$

$$\phi_h^>(x) = \psi_h^>(x) + r_R'^e \psi_h^<(x) + r_{h,R}'^h \psi_e^<(x).$$
(2-79)

Por ejemplo, en la ecuación (2-76) tenemos un electrón que viaja a la derecha ($\psi_e^{<}(x)$) y que puede reflejar un electrón que se desplaza a la izquierda ($\psi_e^{>}(x)$) con una amplitud de reflexión r_L^e , o como un hueco que se desplaza a la izquierda ($\psi_h^{<}(x)$) con una amplitud de reflexión r_L^h . El coeficiente de reflexión r_L^e corresponde a procesos de dispersiones de electrones en electrones; mientras el coeficiente de reflexión r_L^h corresponde a dispersiones de electrones en huecos, es decir, reflexiones de Andreev. Cada una de estas soluciones tiene en cuenta estos procesos para cada frontera y tipo de cuasi-partícula.

Como se hizo en el grafeno, tendremos un átomo tipo A a la derecha y B a la izquierda. Para las fronteras finitas debemos aplicar las condiciones de frontera tanto para la componente tipo electrón como tipo hueco, con lo cual obtenemos las siguientes ecuaciones:

$$\phi_{e,A}^{<}(x_L) = \phi_{h,A}^{<}(x_L) = 0, \qquad (2-80)$$

$$\phi_{e,a}^{>}(x_R) = \phi_{h,a}^{>}(x_R) = 0, \qquad (2-81)$$

donde x_R y x_L son los puntos donde se encuentran las fronteras del superconductor a derecha e izquierda, respectivamente. Al solucionar (2-80) y (2-81) obtenemos que los coeficientes de



Figura 2-13: Diagrama de reflexiones de Andreev electrón-hueco en las fronteras de un grafeno superconductor.

reflexión están dados por

$$r_R^{\prime e/h} = r_R^{e/h} = e^{\pm i\alpha_{e/h}} e^{\pm 2ik_{e/h}^s x_R},$$
(2-82)

$$r_L^{\prime e/h} = r_L^{e/h} = e^{\pm i\alpha_{e/h}} e^{\pm 2ik_{e/h}^s x_L}.$$
(2-83)

Finalmente, aplicando la construcción (2-60) y (2-61) tal como se hizo para la lámina de grafeno, de donde es posible obtener la función de Green con superconductividad inducida como

$$\hat{\boldsymbol{g}}_{s}^{>/<}(x,x') = \left(g_{e}^{>/<}(x,x') + g_{h}^{>/<}(x,x')\right) \otimes \frac{1}{\Omega} \left(E\hat{\sigma}_{0} + \Delta\hat{\sigma}_{x}\right) + \left(g_{e}^{>/<}(x,x') - g_{h}^{>/<}(x,x')\right) \otimes \hat{\sigma}_{z},$$
(2-84)

 con

$$g_{(e/h)}^{>}(x,x') = A_{e/h} \left(e^{\pm ik_{e/h}^{s}(x-x')} + r_{L,e/h} e^{\pm ik_{e/h}^{s}(x+x')} \right) + A_{e/h} \left(r_{R,e/h} e^{\pm ik_{e/h}^{s}(x+x')} + r_{L,e/h} r_{R,e/h} e^{\pm ik_{e/h}^{s}(x'-x)} \right), \quad (2-85)$$

$$g_{(e/h)}^{<}(x,x') = A_{e/h} \left(e^{\mp i k_{e/h}^{s}(x-x')} + r_{L,e/h} e^{\pm i k_{e/h}^{s}(x+x')} \right) + A_{e/h} \left(r_{R,e/h} e^{\pm i k_{e/h}^{s}(x+x')} + r_{L,e/h} r_{R,e/h} e^{\mp i k_{e/h}^{s}(x'-x)} \right),$$
(2-86)

у

$$A_{e/h} = \frac{-i}{4\hbar v_F \cos\left(\alpha_{e/h}\right) \left(1 - r_{L,e/h} r_{R,e/h}\right)},\tag{2-87}$$

siendo x_R y x_L la posición de los bordes del grafeno superconductor y $\hat{\sigma}_z$ la matriz de Pauli.

2.5.3. Ecuación de Dyson

Consideremos un sistema descrito por un Hamiltoniano dado por

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(\mathbf{r}) \tag{2-88}$$

donde la función de Green asociada al Hamiltoniano \hat{H}_0 es conocida, entonces encontraremos la función de Green del sistema descrito por \hat{H} en donde está presente un potencial inhomogéneo $\hat{V}(\mathbf{r})$. Ahora, para encontrar la función de Green asociada al Hamiltoniano \hat{H} , $\hat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E)$, resolvemos la ecuación diferencial

$$\left(E - \hat{H}(\mathbf{r})\right)\hat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$
(2-89)

De igual manera, podemos obtener la función de Green del sistema conocido $(\hat{g}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E))$ como

$$\left(E - \hat{H}(\mathbf{r}) + \hat{V}(\mathbf{r})\right)\hat{g}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$
(2-90)

Usando las ecuaciones (2-89) y (2-90), podemos obtener una relación entre la función de Green del sistema \hat{H}_0 como

$$\hat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) = \left(1 + \left(E - \hat{H}(\mathbf{r})\right)^{-1} V(\mathbf{r})\right) \hat{g}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E)$$
(2-91)

Finalmente, usando

$$\left(E - \hat{H}\left(\mathbf{r}\right)\right)^{-1} \dots = \int \hat{G}\left(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{1}, E\right) \dots d\mathbf{r}_{1}$$
(2-92)

obtenemos

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) = g(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) + \int d\mathbf{r}_1 g(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, E) V(\mathbf{r}_1) G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}', E).$$
(2-93)

Esto es útil para conocer la forma en que un potencial externo afecta la propagación de una partícula a partir del sistema sin perturbar, al tiempo que puede modelar impurezas, junturas etc. Para este trabajo se usará un potencial tipo delta de Dirac para realizar cortes y obtener las funciones de Green de sistemas finitos y semi-infinitos.

La ecuación de Dyson se puede utilizar para encontrar la función de Green de una juntura que se forma a partir de dos sistemas que se acoplan, para los cuales tenemos las funciones de Green g_{LL} y g_{RR} (2-14), y una auto-energía que los acopla Σ_{LR} . La función de Green del sistema acoplado se indicará con G.

La inclusión de los índices establece en el sistema perturbado los puntos iníciales y finales de la propagación, por ejemplo, la función de Green G_{LL} es la función perturbada que propaga del



Figura 2-14: Diagrama metodológico de la obtención de la función de Green de una juntura, un sistema izquierda con función de Green g_{LL} , y un sistema a la derecha con función de Green g_{RR} desacoplado. Se juntan para encontrar la función de Green de todo el sistema G usando la ecuación de Dyson con un parámetro de acople $\hat{\Sigma}_{LR/RL}$.

material izquierdo al mismo material izquierdo, mientras que G_{LR} propaga desde el material izquierdo al derecho.

Para obtener la función de Green de la juntura se establece la ecuación de Dyson para distintos sitios de propagación, obteniendo un sistema de ecuaciones. Por ejemplo, para obtener la función de Green $G_{LL}(x, x', q, E)$ de dos sistemas semi-finitos que se acoplan en 0 es necesario solucionar las siguientes tres ecuaciones

$$G_{LL}(x, x', q, E) = g_{LL}(x, x', q, E) + g_{LL}(x, 0, q, E) \hat{\Sigma}_{LR} G_{RL}(0, x', q, E), \qquad (2-94)$$

$$G_{RL}(0, x', q, E) = g_{RR}(0, 0, q, E) \hat{\Sigma}_{RL} G_{LL}(0, x', q, E), \qquad (2-95)$$

$$G_{LL}(0, x', q, E) = g_{LL}(0, x', q, E) + g_{LL}(0, 0, q, E) \hat{\Sigma}_{LR} G_{RL}(0, x', q, E).$$
(2-96)

Usando el sistema de ecuaciones (2-94), (2-95) y (2-96) se obtiene la función de Green perturbada del sistema al lado izquierdo como

$$G_{LL}(x, x', q, E) = g_{LL}(x, x', q, E) + g_{LL}(x, 0, q, E)$$
$$\hat{\Sigma}_{LR} \left(1 - g_{LL}(0, 0, q, E) \hat{\Sigma}_{LR} g_{RR}(0, 0, q, E) \hat{\Sigma}_{RL} \right)^{-1} g_{LL}(0, x', q, E) .$$
(2-97)

Esta función de Green correspondería en nuestro caso a un Hamiltoniano dado por

$$\hat{H} = \hat{H}_L + \hat{H}_R + \hat{H}_{LR} - \mu_L \hat{N}_L - \mu_R \hat{N}_R, \qquad (2-98)$$

donde $\hat{H}_{L/R}$ es el Hamiltoniano del sistema izquierdo y derecho, respectivamente, $\mu_{L/R}N_{L/R}$ es el potencial químico multiplicado por el operador número y \hat{H}_{LR} es el Hamiltoniano que acopla los sistemas. En general conocemos la función de Green de los sistemas desacoplados,

es decir, conocemos las funciones de Green asociadas a los Hamiltonianos $\hat{H}_{L/R} - \mu_{L/R}N_{L/R}$ las cuales estamos denotando como $g_{LL/RR}(x, x', q, E)$. De esta manera, el papel del potencial inhomogéneo que acopla los dos sistemas está dado por \hat{H}_{LR} , que en la aproximación Hamiltoniana para dos sistemas de grafeno con un borde zigzag con un borde A de la izquierda (ver la sección 2.3) y un borde B de la derecha, es

$$\hat{H}_{LR} = \sum_{\sigma} \Sigma_{LR} \hat{c}^{\dagger}_{L,A,\sigma} \hat{c}_{R,B\sigma} + \Sigma_{RL} \hat{c}^{\dagger}_{R,B,\sigma} \hat{c}_{L,A,\sigma}, \qquad (2-99)$$

 Σ_{LR} como parámetro de acople entre las interfaces y $\hat{c}^{\dagger}_{i,n,\sigma}$ un operador que crea un electrón en el lado *i* en el átomo *n*.

2.5.4. Cálculo de la corriente eléctrica

En esta sección se encuentra la ecuación para encontrar la corriente eléctrica y la conductancia diferencial cuando se aplica una diferencia de potencial entre dos sistemas $(L \ y \ R)$ que conforman una juntura, cuando consideramos que los electrones inciden desde el sistema de la derecha. Para ello, calculamos la derivada respecto al tiempo del operador $-eN_L$ en la imagen de Heisenberg. Para el sistema se considera la aproximación Hamiltoniana (2-98), donde la corriente está dada por

$$I = \frac{ie}{\hbar} \sum_{\sigma} \left(\Sigma_{LR} \left\langle \hat{c}^{\dagger}_{L,A,\sigma}(q,t) \hat{c}_{R,B\sigma}(q,t) \right\rangle + \Sigma_{RL} \left\langle \hat{c}^{\dagger}_{R,B\sigma}(q,t) \hat{c}_{L,A\sigma}(q,t) \right\rangle \right),$$
(2-100)

donde los estados dependen del tiempo al ser este un sistema en no equilibrio. Para este sistema podemos realizar una transformación de calibración, $\hat{c}_{i\sigma} \longrightarrow e^{-i\mu_i t/(2\hbar)} \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger}$, para que la dependencia temporal no esté en los operadores de campo. La diferencia de voltaje genera un ajuste de los potenciales químicos, donde el lado izquierdo está a tierra y el lado derecho tiene un voltaje (V), obteniendo $\mu_R \longrightarrow \mu_R + V$. En la corriente se aprecia una forma similar a como se definen las funciones de Green en (2-42) sin los conmutadores, con lo cual, para estudiar estos sistemas usamos las funciones de Green de Keldysh [74–76]. Los trabajos anteriores han mostrado que al estar estos procesos fuera del equilibrio en donde las interacciones pueden depender explícitamente del tiempo, el estado inicial no perturbado en $-\infty$ difiere esencialmente del estado final perturbado en ∞ [74,75]. Luego, para hacer uso de la estructura formal de la teoría de perturbaciones en el equilibrio, en donde la interacción de acople es atenuada adiabáticamente a cero en los extremos $t = \pm\infty$, es necesario que los estados inicial y final difieran en un factor de fase constante. Esto se puede conseguir, en el caso de no equilibrio, al comparar el estado inicial en $-\infty$ en la rama superior, con el estado en $-\infty$ en la rama inferior luego de recorrer el contorno mostrado en la **2-15**.

Estas ramas se conectan en $+\infty$ y definen la rama positiva y negativa, en este contorno se definen diversas funciones de Green: G^{++} es la función temporal, G^{--} es la función



Figura 2-15: Esquema del contorno temporal de Keldysh. Se distinguen las dos ramas del contorno en el eje temporal t_k , una por encima para la rama negativa y por debajo para la rama positiva. Las flechas azules se meustra la dirección de propagación entre estas ramas. Tomada de [76]

anti-temporal, G^{-+} la función menor y G^{+-} la función mayor. Esta última es necesaria para calcular la corriente, definida como

$$G_{i,j}^{+-}(q,t_c,t_d') = -i\left\langle \hat{T}_t(\hat{C}_i(q,t_c),\hat{C}_j^{\dagger}(q,t_d'))\right\rangle$$
(2-101)

donde para el grafeno es

$$\hat{C}_i(q,t_c) = \left(\hat{c}_{i,A} \uparrow (q,t_c), \hat{c}_{i,B} \uparrow (q,t_c), \hat{c}_{i,A}^{\dagger} \uparrow (q,t_c), \hat{c}_{i,B}^{\dagger} \uparrow (q,t_c)\right)^T,$$
(2-102)

y \hat{T}_t es el operador de ordenamiento temporal de Keldysh para fermiones, dado por

$$\hat{T}_t(\hat{C}_i(q,t_1),\hat{C}_i(q,t_2)...\hat{C}_i(q,t_n)) = \hat{C}_i(q,t_{c_1})\hat{C}_i(q,t_{c_2})...\hat{C}_i(q,t_{c_n}),$$
(2-103)

donde $c_1 < c_2 < ... < c_n$, con lo cual podemos encontrar la corriente usando las funciones de Keldysh definidas anteriormente [74–76]

$$I = \frac{2e}{h} \int dq dt \operatorname{Tr} \left[\hat{\sigma}_z \left(\hat{\Sigma}_{RL} \hat{G}_{RL}^{+-}(q,t) - \hat{\Sigma}_{LR} \hat{G}_{LR}^{+-}(q,t) \right) \right],$$
(2-104)

donde \hat{G}_{RL}^{+-} y \hat{G}_{LR}^{+-} son las funciones de Green sobre el contorno de Keldysh, definidas por

$$\hat{G}_{ij}^{+-}(t,t') = i \begin{pmatrix} \left\langle \hat{c}_{j,A}^{\dagger}(t')\hat{c}_{i,A},(t) \right\rangle & \left\langle \hat{c}_{j,A}^{\dagger}(t')\hat{c}_{i,B}(t) \right\rangle & \left\langle \hat{c}_{j,A}(t')\hat{c}_{i,A}(t) \right\rangle & \left\langle \hat{c}_{j,A}(t')\hat{c}_{i,B}(t) \right\rangle \\ \left\langle \hat{c}_{j,B}^{\dagger}(t')\hat{c}_{i,A}(t) \right\rangle & \left\langle \hat{c}_{j,B}^{\dagger}(t')\hat{c}_{i,B}(t) \right\rangle & \left\langle \hat{c}_{j,B}(t')\hat{c}_{i,A}(t) \right\rangle & \left\langle \hat{c}_{j,B}(t')\hat{c}_{i,B}(t) \right\rangle \\ \left\langle \hat{c}_{j,A}^{\dagger}(t')\hat{c}_{i,A}^{\dagger}(t) \right\rangle & \left\langle \hat{c}_{j,A}^{\dagger}(t')\hat{c}_{i,B}^{\dagger}(t) \right\rangle & \left\langle \hat{c}_{j,A}^{\dagger}(t')\hat{c}_{i,B}^{\dagger}(t) \right\rangle & \left\langle \hat{c}_{j,A}(t')\hat{c}_{i,B}^{\dagger}(t) \right\rangle \\ \left\langle \hat{c}_{j,B}^{\dagger}(t')\hat{c}_{i,A}^{\dagger}(t) \right\rangle & \left\langle \hat{c}_{j,B}^{\dagger}(t')\hat{c}_{i,B}^{\dagger}(t) \right\rangle & \left\langle \hat{c}_{j,B}(t')\hat{c}_{i,B}^{\dagger}(t) \right\rangle & \left\langle \hat{c}_{j,B}(t')\hat{c}_{i,B}^{\dagger}(t) \right\rangle & \left\langle \hat{c}_{j,B}(t')\hat{c}_{i,B}^{\dagger}(t) \right\rangle \\ \end{pmatrix},$$

$$(2-105)$$

donde i, j se refiere a $L \ge R$, respectivamente con

$$\hat{\Sigma}_{LR} = t_h \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix},$$
(2-106)

con t_h un parámetro de acople en las interfaces, que no debe confundirse con el tiempo. Para el cálculo de la corriente se realiza la transformada de Fourier de tiempo a energía y se obtienen las funciones de Green de Keldysh en términos de funciones de Green sin perturbar y las funciones de Green avanzadas y retardadas, usando las siguientes ecuaciones

$$\hat{G}_{RL}^{+-}(q,E) = \hat{G}_{RR}^{+-}(q,E)\hat{\Sigma}_{RL}^{a}\hat{g}_{LL}^{a}(q,E) + \hat{G}_{RR}^{r}(q,E)\hat{\Sigma}_{RL}^{r}\hat{g}_{LL}^{+-}(q,E), \qquad (2-107)$$

$$\hat{G}_{LR}^{+-}(q,E) = \hat{g}_{LL}^{+-}(q,E)\hat{\Sigma}_{LR}^{a}\hat{G}_{RR}^{a}(q,E) + \hat{g}_{LR}^{r}(E)\hat{\Sigma}_{LR}^{r}\hat{G}_{RR}^{+-}(q,E), \qquad (2-108)$$

donde $\hat{g}_{RR/LL}^{a}(q, E)$ y $\hat{g}_{RR/LL}^{r}(q, E)$ se refieren a funciones de Green avanzadas y retardadas, respectivamente; $\hat{\Sigma}_{LR}^{a} = \hat{\Sigma}_{LR}^{r}$ es el parámetro de acople en las interfaces y $\hat{g}_{ij}^{+-}(E)$ funciones de Keldysh sin perturbar (sistemas desacoplados), las cuales se pueden obtener de la siguiente relación

$$\hat{g}_{LL/RR}^{+-}(q,E) = 2\pi i \hat{\rho}_{LL/RR}(q,E) f_{LL/RR}(E),$$
(2-109)

$$\hat{g}_{LL/RR}^{-+}(q,E) = -2\pi i \hat{\rho}_{LL/RR}(q,E) \left(1 - f_{LL/RR}(E)\right), \qquad (2-110)$$

siendo $\hat{\rho}_{LL/RR}(q, E)$ la densidad de estados obtenida a partir de la parte imaginaria de la función de Green retardada y f(E) la distribución de Fermi Dirac. Estas ecuaciones se pueden reescribir con la siguiente propiedad de las funciones de Keldysh

$$\hat{G}^r - \hat{G}^a = \hat{G}^{-+} - \hat{G}^{+-}.$$
(2-111)

Por su parte, el efecto de establecer una diferencia de potencial entre el lado izquierdo y derecho de la interfase es ajustar las funciones de distribución de Fermi como

$$f_{LL}^{e/h}(E) = f(E \pm eV),$$
 (2-112)

$$f_{RR}^{e/h}(E) = f(E),$$
 (2-113)

de igual manera como ha sido realizado en [74–76], se obtiene la corriente como

$$I = 8\pi^2 \frac{e}{h} \left(I_1 + I_2 + I_3 + I_A \right), \tag{2-114}$$

 con

$$\begin{split} I_{1} &= t^{2} \int dE dq \operatorname{Tr} \left[\hat{\Sigma}_{LR}^{T} \operatorname{Re} \left(\left(\hat{I} + t \hat{G}_{RL,ee}^{r}(E,q) \hat{\Sigma}_{LR}^{T} \right) \hat{\rho}_{RR,ee}(E,q) \hat{\Sigma}_{LR} \left(\hat{I} + t \hat{\Sigma}_{LR} \hat{G}_{RL,ee}^{r*}(E,q) \right) \\ \hat{\rho}_{LL,ee}(E,q) \left(f(E+eV) - f(E) \right) \right], \end{split}$$
(2-115)
$$I_{2} &= -t^{3} \int dE dq \operatorname{Tr} \left[\operatorname{Re} \left(\left(\hat{I} + t \hat{\Sigma}_{LR} \hat{G}_{RL,ee}^{r*}(E,q) \right) \hat{\Sigma}_{LR} \hat{\rho}_{LL,ee}(E,q) \hat{\sigma}_{1}^{T} \hat{G}_{RL,eh}^{r}(E,q) \hat{\Sigma}_{LR}^{T} \right) \\ \hat{\rho}_{RR,he}(E,q) + \left(\hat{I} + t \hat{G}_{RL,ee}^{r}(E,q) \hat{\sigma}_{1}^{T} \right) \hat{\rho}_{RR,eh}(E,q) \hat{\Sigma}_{LR} \hat{G}_{RL,eh}^{r*}(E,q) \hat{\Sigma}_{LR} \hat{\rho}_{LL,ee}(E,q) \hat{\Sigma}_{LR}^{T} \right) \\ (f(E+eV) - f(E)) \right], \qquad (2-116) \\ I_{3} &= t^{4} \int dE dq \operatorname{Tr} \left[\operatorname{Re} \left(\hat{G}_{RL,eh}^{r*}(E,q) \hat{\Sigma}_{LR} \hat{\rho}_{LL,ee}(E,q) \hat{\Sigma}_{LR}^{T} \hat{G}_{RL,eh}^{r}(E,q) \hat{\Sigma}_{LR} \hat{\rho}_{RR,hh}(E,q) \hat{\Sigma}_{LR} \right) \\ (f(E+eV) - f(E)) \right], \qquad (2-117) \\ I_{A} &= t^{4} \int dE dq \operatorname{Tr} \left[\operatorname{Re} \left(\hat{G}_{RR,eh}^{r*}(E,q) \hat{\Sigma}_{LR} \hat{\rho}_{LL,ee} \hat{\Sigma}_{LR}^{T}(E,q) \hat{G}_{RR,eh}^{r*}(E,q) \hat{\Sigma}_{LR} \hat{\rho}_{LL,hh}(E,q) \hat{\Sigma}_{LR} \right) \\ + \hat{G}_{RR,he}^{r,>*}(E,q) \hat{\Sigma}_{LR} \hat{\rho}_{LL,hh}(E,q) \hat{\Sigma}_{LR}^{T} \hat{G}_{RR,he}^{r*}(E,q) \hat{\Sigma}_{LR} \hat{\rho}_{LL,ee}(E,q) \hat{\Sigma}_{LR}^{T} \right) f(E+eV) \right] (2-118) \end{aligned}$$

Esta corriente ha sido analizada en anteriores trabajos [74–76] donde cada término representa diferentes procesos de dispersión de un electrón que incide desde la región L, a la región R que, recordamos, es un superconductor. El término I_1 contiene los términos $\hat{\rho}_{ee,LL}$ y $\hat{\rho}_{ee,RR}$, lo que indica que corresponde a dispersiones de electrones que se transmiten como cuasipartículas tipo electrón al superconductor. El segundo I_2 corresponde a la transferencia de electrones por el desdoblamiento de pares de Cooper $\rho_{ee,LL}$, que se visualiza en los términos $\hat{\rho}_{eh,RR}$ y $\hat{\rho}_{he,LL}$. Por su parte, I_3 representa procesos de dispersión de electrones representados por $\hat{\rho}_{ee,LL}$ y transmitidos como cuasi-partículas tipo hueco dentro del superconductor $\hat{\rho}_{hh,R}$. Todos los procesos mencionados corresponden a transferencias de electrones del grafeno como cuasi-partículas al superconductor. El último I_A ² corresponde a reflexiones de Andreev locales, donde los electrones incidentes representados por $\hat{\rho}_{ee,LL}$ son reflejados como huecos dentro del mismo sistema L, representado por $\hat{\rho}_{hh,L}$, sin depender de la densidad de estados a la derecha, ya que se transmiten como pares de Cooper.

Para obtener la conductancia diferencial se deriva la corriente en función del voltaje, con lo que se obtiene

$$\sigma = 8\pi^2 \frac{e^2}{h} \left(\sigma_{e1} + \sigma_{e2} + \sigma_{e3} + \sigma_A\right), \qquad (2-119)$$

²La función de Green es discontinua, por lo cual en este término se especifica que el cálculo requiere la función de Green notada con $G^>$ a diferencia de las otras donde ya está indicado con LR y RL.

 con

$$\sigma_{e1} = t^{2} \int dq \operatorname{Tr} \left[\operatorname{Re} \left(\left(\hat{I} + t \hat{G}_{RL,ee}^{r}(E,q) \hat{\Sigma}_{LR}^{T} \right) \hat{\rho}_{RR,ee}(E,q) \left(\hat{I} + t \hat{\Sigma}_{LR} \hat{G}_{RL,ee}^{r*}(E,q) \right) \right) \right], \quad (2-120)$$

$$\sigma_{e2} = -t^{3} \int dq \operatorname{Tr} \left[\operatorname{Re} \left(\left(\hat{I} + t \hat{\Sigma}_{LR} \hat{G}_{RL,ee}^{r*}(E,q) \right) \hat{\Sigma}_{LR} \hat{\rho}_{LL,ee}(E,q) \hat{\sigma}_{1}^{T} \hat{G}_{RL,eh}^{r}(E,q) \hat{\Sigma}_{LR}^{T} \hat{\rho}_{RR,he}(E,q) \right) \right. \\
\left. + \left(\hat{I} + t \hat{G}_{RL,ee}^{r}(E,q) \hat{\sigma}_{1}^{T} \right) \hat{\rho}_{RR,eh}(E,q) \hat{\Sigma}_{LR} \hat{G}_{RL,eh}^{r*}(E,q) \hat{\Sigma}_{LR} \hat{\rho}_{LL,ee}(E,q) \hat{\Sigma}_{LR}^{T} \hat{\rho}_{RR,hh}(E,q) \right], \quad (2-121)$$

$$\sigma_{e3} = t^{4} \int dq \operatorname{Tr} \left[\operatorname{Re} \left(\hat{G}_{RL,eh}^{r*}(E,q) \hat{\Sigma}_{LR} \hat{\rho}_{LL,ee}(E,q) \hat{\Sigma}_{LR}^{T} \hat{G}_{RL,eh}^{r}(E,q) \hat{\Sigma}_{LR} \hat{\rho}_{RR,hh}(E,q) \hat{\Sigma}_{LR} \right) \right] \left[2-122 \right] \\
\sigma_{A} = t^{4} \int dq \operatorname{Tr} \left[\operatorname{Re} \left(\hat{G}_{RR,eh}^{r,*}(E,q) \hat{\Sigma}_{LR} \hat{\rho}_{LL,ee} \hat{\Sigma}_{LR}^{T}(E,q) \hat{G}_{RR,eh,>}^{r}(E,q) \hat{\Sigma}_{LR} \hat{\rho}_{LL,hh}(E,q) \hat{\Sigma}_{LR}^{T} \right) \right], \quad (2-123)$$

conductancia, la cual se deja dependiente de la energía en cambio del voltaje y equivale a hacer E = eV. Estos resultados se usarán en capítulos posteriores para el estudio de superconductores con potenciales de pares periódicos, superredes de grafeno, bicapas de grafeno e interfases de superredes de grafeno con superconductores.

Capítulo 3

Sistema superconductor con potencial de pares periódico

La primera teoría microscópica de la superconductividad fue desarrollada por Bardeen, Cooper y Schrieffer en el año 1957 [1,2]. La teoría se basa en que los electrones pueden sentir un potencial atractivo neto, obtenido en el modelo BCS por el intercambio virtual de fonones entre electrones [3]. En los superconductores convencionales el estado base es formado por parejas de electrones llamados pares de Cooper, con momento y espín opuesto [2]. Los pares de Cooper están caracterizados por una longitud de coherencia que relaciona la distancia promedio entre los electrones del par. En el modelo BCS aparece un potencial de pares cuya magnitud está relacionada con el número promedio de pares de Cooper, mientras la fase del potencial expresa la correlación a largo alcance entre los electrones [2]. Las excitaciones del sistema superconductor se obtienen al romper un par de Cooper y son descritas por las ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes, las cuales provienen de una teoría de campo medio cuyo potencial de pares se debe encontrar de forma auto-consistente. Para un superconductor en "bulk", las soluciones de estas ecuaciones usualmente consideran que el potencial es homogéneo y no tienen en cuenta el potencial de la red de iones [77], pero debido a que las funciones de onda de las cuasi-partículas deben satisfacer el teorema de Bloch, se encuentra que, por la relación de auto-consistencia, el potencial de pares debe presentar la periodicidad de la red, lo cual ha sido estudiado en detalle para sistemas unidimensionales [13–15]. Los estudios de superconductores con potenciales de pares periódicos se han construido de manera artificial al usar una superred formada por dos superconductores de potencial de pares diferentes, donde se pueden obtener cambios en la temperatura crítica [78]. Sin embargo, no se han estudiado los efectos de un potencial de pares periódico para sistemas bidimensionales debido a la red de iones en la densidad de estados, lo que podría ser relevante en superconductores de alta temperatura crítica como los cupratos o superconductores con base en hierro.

En los superconductores de alta temperatura crítica se observa que los modelos con potenciales de pares homogéneos no son suficientes para explicar sus propiedades [77]. Estos materiales pueden mostrar la fase "pseudogap" cercana a la temperatura de transición al estado superconductor [26, 79, 80], donde aparece un nuevo potencial cerca de los planos de Bragg, como se puede observar en los experimentos de ARPES, creando arcos de Fermi [21]. Tanto en los cupratos como los superconductores con base en Hierro tenemos que los fenómenos de superconductividad se pueden modelar en primera instancia sobre planos, por lo que es posible usar modelos bidimensionales [16-18]. Para entender la superconductividad de alta temperatura crítica algunos estudios se han centrado en la fase "pseudogap" [19,20], por ejemplo, cambiando la forma de interacción entre los pares de Cooper con un modelo denominado "amperean pairing" [20]. Como en los superconductores de base de hierro tenemos que los electrones están medianamente localizados, podemos usar un modelo de electrones cuasi-libres para entender algunas de sus propiedades [25,26]. Con esta idea deseamos estudiar el efecto del potencial de la red cristalina sobre la densidad de estados, el espectro de energía y el potencial de pares en sistemas bidimensionales y así observar posibles relaciones con resultados que se han encontrado para estos superconductores.

En este capítulo mostraremos que el primer término de la expansión de Fourier del potencial de pares corresponde al que es usado en la teoría BCS para un superconductor homogéneo; mientras el segundo término de la expansión, que no se considera normalmente, está relacionado con la periodicidad de la red y con las esferas de Andreev. Mostramos que el segundo término es relevante cuando nos acercamos a la temperatura crítica y por lo tanto podría ser usado para entender la fase "pseudogap" en los superconductores [80]. En particular se puede observar cómo este nuevo potencial presenta un comportamiento similar al responsable de la aparición de los arcos de Fermi en la fase "pseudogap" [21], cerca de los planos de Bragg.

3.1. Ecuaciones Bogoliubov-de Gennes para potenciales de pares periódicos

Al incluir el potencial de la red, las ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes (BdG) [13, 14] pueden ser descritas como

$$E_l u_l(\mathbf{r}) = \left(\frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}) - \mu\right) u_l(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' \Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') v_l(\mathbf{r}'), \qquad (3-1)$$

$$E_l v_l(\mathbf{r}) = -\left(\frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}) - \mu\right) v_l(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' \Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') u_l(\mathbf{r}'), \qquad (3-2)$$

donde l denota un conjunto completo de números cuánticos, $U(\mathbf{r})$ es un potencial escalar que describe la interacción de los electrones con la red de iones y podría incluir el potencial de la

aproximación de Hartree-Fock, y μ es el potencial químico.

Cuando $\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 0$ y $U(\mathbf{r}) = 0$, tenemos que las soluciones de las ecuaciones (3-1) y (3-2) corresponden a las de partícula libre, cuyo espectro de energía es parabólico en el espacio de vectores de onda, como puede verse en fig. **3-1**. El espectro de energía para los electrones se representa por parábolas con concavidad hacia arriba (línea negra punteada), mientras para los huecos las parábolas presentan concavidad hacia abajo (línea azul punteada). La energía de Fermi desplaza la parábola de electrones hacia abajo y la de huecos hacia arriba, de tal manera que estas se cruzan cuando el vector \mathbf{k} está sobre la superficie de Fermi. Cuando $\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \neq 0$ en un superconductor homogéneo $\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \Delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, se abre una brecha de energía en el punto de cruce de las dos parábolas, como muestra la línea roja de la fig. **3-1**.

36



Figura 3-1: El espectro de energía correspondiente a los electrones se representa por una parábola con concavidad negativa (línea punteada negra), mientras que el espectro de energía del hueco corresponde a una parábola con concavidad positiva (línea punteada azul). La línea continua roja es la solución con potencial de pares homogéneo.

Cuando el potencial de pares es homogéneo obtenemos que las soluciones de 3-1 y 3-2 son de la forma

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} + \tilde{\Delta}(\mathbf{k}) v_{\mathbf{k}} = E u_{\mathbf{k}}, \tag{3-3}$$

$$-\varepsilon_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} + \tilde{\Delta}^*(\mathbf{k})u_{\mathbf{k}} = Ev_{\mathbf{k}}, \qquad (3-4)$$

con $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m - \mu$ como la energía cinética. El superconductor presenta un espectro de energía dado por

$$E = \sqrt{\left|\tilde{\Delta}(\mathbf{k})\right|^2 + \varepsilon_{\mathbf{k}}^2},\tag{3-5}$$

donde se observa una brecha de energía $\tilde{\Delta}(\mathbf{k})$, la cual corresponde a la transformada de Fourier de $\Delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ dada por

$$\tilde{\Delta}(\mathbf{k}) = \int e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \Delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \qquad (3-6)$$

en el caso de un superconductor isotrópico $\hat{\Delta}(\mathbf{k}) = \Delta(\mathbf{k})$, que es la brecha de energía para un superconductor con simetría s.

Las ecuaciones de Bogoliubov de-Gennes provienen de una teoría de campo medio y el potencial de pares cumple la siguiente ecuación de auto-consistencia

$$\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \sum_{l} \left(u_l(\mathbf{r}') v_l^*(\mathbf{r}) (1 - f_l) - u_l(\mathbf{r}) v_l^*(\mathbf{r}') f_l \right),$$
(3-7)

con f_l la función de distribución de Fermi para el estado $l \ge V(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ como el potencial de interacción neto de los electrones.

Para abordar el problema general de un superconductor inhomogéneo y anisotrópico, vamos a considerar el sistema de una red de iones donde los electrones que forman un par de Cooper están en las coordenadas \mathbf{r} y $\mathbf{r'}$ (fig. **3-2**). Las ecuaciones de Bogoliubov de-Gennes se describen usando un sistema de coordenadas centrado en el par de Cooper, dado por

$$\mathbf{s} = \mathbf{r} - \mathbf{r}', \tag{3-8}$$
$$\mathbf{R} = \frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2}. \tag{3-9}$$



Figura 3-2: El par de Cooper se desplaza sobre una red de iones que genera un potencial de pares periódico, el sistema queda descrito en términos de los vectores \mathbf{r} y $\mathbf{r'}$. También se puede usar el sistema de coordenadas centrado en el par de Cooper \mathbf{R} y coordenada relativa \mathbf{s} .

Cuando se introduce el potencial de la red se obtienen cambios en las soluciones de las ecuaciones BdG, uno de las cuales es que el potencial de pares puede ser periódico [13]. Un

potencial de pares periódico cumple

$$\Delta(\mathbf{s}, \mathbf{R} + \mathbf{R}_m) = \Delta(\mathbf{s}, \mathbf{R}), \tag{3-10}$$

donde \mathbf{R}_m es un vector de la red.

Similar al caso homogéneo, definimos la transformada de Fourier del potencial de pares como

$$\tilde{\Delta}(\mathbf{k}, \mathbf{R}) = \int d\mathbf{s} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{s}} \Delta(\mathbf{s}, \mathbf{R}).$$
(3-11)

Debido a que el potencial de la red es periódico en la coordenada \mathbf{r} , y el potencial de pares es periódico en la coordenada \mathbf{R} se pueden expandir ambos en una serie de Fourier dada por

$$\tilde{\Delta}(\mathbf{k}, \mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{K}_m} e^{i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{R}} \Delta_{\mathbf{K}_m}(\mathbf{k}), \qquad (3-12)$$

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}_m} e^{i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r}} U_{\mathbf{K}_m}, \qquad (3-13)$$

con los coeficientes dados por

$$\Delta_{\mathbf{K}_m}(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{R} e^{-i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{R}} \tilde{\Delta}(\mathbf{k}, \mathbf{R}), \qquad (3-14)$$

$$U_{\mathbf{K}_m} = \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r}} U(\mathbf{r}). \tag{3-15}$$

Usando la aproximación cuasi-clásica [81] podemos hacer la siguiente aproximación a la integral

$$\int d\mathbf{r}' \Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r} - \mathbf{s}) v^l(\mathbf{r} - \mathbf{s}) e^{i\mathbf{s} \cdot \mathbf{q}} \approx \tilde{\Delta}(\mathbf{q}, \mathbf{r}) v_l(\mathbf{r}).$$
(3-16)

Esta aproximación es válida cuando $(\xi_0 k_F)^{-1} << 1^1$. Además, nos permite usar el potencial de pares en la coordenada **r**, usual para el estudio de superconductores anisotrópicos y que será el rango de aplicación del análisis para el presente capítulo. A partir de las ecuaciones (3-12) y (3-13) para los potenciales del Hamiltoniano (3-10), Para este problema los números cuánticos importantes serán la banda de energía que notaremos con l y el vector de onda **k**, con lo cual se propone la siguiente solución que satisface el teorema de Bloch para las funciones $u_l(\mathbf{r})$ y $v_l(\mathbf{r})$ dadas por

$$\begin{pmatrix} u_{l,\mathbf{K}_{m}}(\mathbf{r}) \\ v_{l,\mathbf{K}_{m}}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{V_{b}}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{K}_{m}} e^{i\mathbf{K}_{m}\cdot\mathbf{r}} \begin{pmatrix} u_{l,\mathbf{k},\mathbf{K}_{m}} \\ v_{l,\mathbf{k},\mathbf{K}_{m}} \end{pmatrix},$$
(3-17)

¹Donde ξ_0 es la longitud de coherencia del superconductor, lo cual es equivalente a la aproximación de Andreev en la cual la temperatura de Fermi del material es mucho mayor que la temperatura crítica. siendo V_b el volumen de integración. Ahora, reemplazando (3-17) en las ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes (3-1) y (3-2), junto con el uso de 3-12 y 3-13 y las expansiones de Fourier de los potenciales, se obtiene el siguiente conjunto de ecuaciones para $u_{l,\mathbf{k},\mathbf{K}_m}$ y $v_{l,\mathbf{k},\mathbf{K}_m}$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n} u_{l,\mathbf{k},\mathbf{K}_n} + \sum_{\mathbf{K}_m} U_{\mathbf{K}_n-\mathbf{K}_m} u_{l,\mathbf{k},\mathbf{K}_m} + \sum_{\mathbf{K}_m} \Delta_{\mathbf{K}_n-\mathbf{K}_m}(\mathbf{k}) v_{l,\mathbf{k},\mathbf{K}_m} = E_l(\mathbf{k}) u_{l,\mathbf{k},\mathbf{K}_n}, \quad (3-18)$$

$$-\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n} v_{l,\mathbf{k},\mathbf{K}_n} - \sum_{\mathbf{K}_m} U_{\mathbf{K}_n-\mathbf{K}_m} v_{l,\mathbf{k},\mathbf{K}_m} + \sum_{\mathbf{K}_m} \Delta^*_{\mathbf{K}_m-\mathbf{K}_n}(\mathbf{k}) u_{l,\mathbf{k},\mathbf{K}_m} = E_l(\mathbf{k}) v_{l,\mathbf{k},\mathbf{K}_n}, \quad (3-19)$$

donde $\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n} = \hbar^2 (\mathbf{k} + \mathbf{K}_n)^2 / 2m - E_F$, $U_{\mathbf{K}_n}$ son los términos de la expansión de Fourier del potencial de la red (3-12) y $\Delta_{\mathbf{K}_n}(\mathbf{k})$ son los términos de la expansión de Fourier (3-13) [14], y se ha aproximado el potencial químico a la energía de Fermi. En este sistema de ecuaciones las incógnitas son los coeficientes u_{l,\mathbf{K}_m} y v_{l,\mathbf{K}_m} , los cuales se buscan como las soluciones no triviales de este sistema de ecuaciones. Para solucionarlas se pueden usar distintas aproximaciones, en este capítulo nos centraremos en una aproximación equivalente a la de electrones cuasi-libres, con las cuales, al buscar soluciones no triviales, encontramos el espectro de energía que dependerá de los coeficientes $U_{\mathbf{K}_n}$ y $\Delta_{\mathbf{K}_n}(\mathbf{k})$.

El potencial de pares presenta una ecuación de auto-consistencia, que se solucionará en una sección posterior para un sistema periódico y se observará su comportamiento tanto a temperatura cero, como cerca a la temperatura crítica. En general, de esta ecuación de auto-consistencia se obtiene la temperatura crítica del superconductor.

A continuación estudiamos cómo aparecen las nuevas brechas de energías debido a la periodicidad del potencial de pares y las zonas donde se forman. Vamos a usar la teoría de perturbación para encontrar las funciones de onda de las cuasi-partículas con las ecuaciones (3-18) y (3-19) cuando $U_{\mathbf{K}_m} \neq 0$ y $\Delta_{\mathbf{K}_m} \neq 0$, a primer orden obtenemos que los coeficientes son proporcionales a

$$u_{l,\mathbf{k},\mathbf{K}_n}, v_{l,\mathbf{k},\mathbf{K}_n} \propto \frac{1}{\left(\varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n}\right)\left(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n}\right)}.$$
(3-20)

Se observa una divergencia cuando, $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \pm \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n}$, para los cuales la aproximación de primer orden no es válida. En los puntos donde divergen se aplica la teoría de perturbaciones a segundo orden, donde obtenemos que la condición $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n}$ conduce a la formación de planos de Bragg, debido a que los puntos satisfacen la ecuación de un plano con vector normal \mathbf{K}_n , dado por

$$-\mathbf{k} \cdot \mathbf{K}_n = \frac{K_n^2}{2}.$$
(3-21)

La condición $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n}$ es equivalente al cruce de las soluciones parabólicas de dos huecos o dos electrones, como se observa en las líneas discontinuas de la fig. **3-3**. En esta figura



Figura 3-3: En las líneas punteadas se tienen las soluciones parabólicas para los huecos cuando el potencial de la red es cero y las mismas desplazadas un vector de la red recíproca \mathbf{K}_{-1} . Cuando se incluye el potencial de la red se abre una brecha de energía, línea continua roja, válida en la primera zona de Brillouin.

se ilustra el espectro de energía en función del vector de onda para huecos cuando no hay potencial de pares. Al tener en cuenta el potencial de la red se observa que se abre una brecha, como es usual en la aproximación de electrones cuasi-libres.

La condición $\varepsilon_{\mathbf{k}} = -\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n}$ corresponde al cruce de una parábola de electrones con una de huecos, desplazada un vector de la red reciproca \mathbf{K}_n que son las líneas punteadas de la fig. **3-4**. Esto se puede interpretar como una dispersión de una cuasi-partícula tipo electrón en una tipo hueco o viceversa, y por lo tanto podemos verlo como una dispersión de Andreev entre cuasi-partículas. La condición $\varepsilon_{\mathbf{k}} = -\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n}$ conlleva a

$$\left(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{K}_n}{2}\right)^2 = k_F^2 - K_n^2/4,\tag{3-22}$$

la cual es la ecuación de una esfera que está centrada en un plano de Bragg y con radio $\sqrt{k_F^2 - K_n^2/4}$, a esta esfera se le ha denominado esfera de Andreev [13, 14]. Es de notar que el radio debe ser positivo para observar el cruce, con lo cual

$$k_F^2 - K_n^2/4 > 0. (3-23)$$

Por lo tanto, para un valor de energía de Fermi y vector de la red reciproca \mathbf{K}_n podemos no tener esferas de Andreev. Esto es diferente a la aparición de planos de Bragg, los cuales existen para cualquier valor de energía de Fermi y vector de la red reciproca \mathbf{K}_n .



Figura 3-4: Soluciones en la aproximación de electrones cuasi-libres. Las líneas punteadas son para electrones y huecos sin potencial de red, la línea que corresponde al espectro de hueco está desplazada un vector de red $\mathbf{K}_{1,0}$. La línea azul demarca el cruce de las soluciones punteadas y la línea continua roja representa la solución cuando se tiene el potencial de la red.

3.2. Análisis para una red cuadrada

Ahora vamos a aplicar estos resultados para una red cuadrada donde los vectores \mathbf{K}_m son descritos como $\mathbf{K}_{n_1,n_2} = n_1 \mathbf{b}_1 + n_2 \mathbf{b}_2$, donde \mathbf{b}_i como los vectores de la red recíproca. Usando los subíndices n_1 y n_2 para identificar los términos U y Δ de la expansión de Fourier del potencial escalar y el potencial de pares, obtenemos por la simetría del sistema que

$$K_{0,n} = K_{n,0} = K_n, (3-24)$$

$$U_{\mathbf{K}_{n_1,n_2}} = U_{\mathbf{K}_{n_2,n_1}} = U_{n_1,n_2}, \tag{3-25}$$

$$\Delta_{\mathbf{K}_{n_1,n_2}}(\mathbf{k}) = \Delta_{\mathbf{K}_{n_2,n_1}}(\mathbf{k}) = \Delta_{n_2,n_1}(\mathbf{k}).$$
(3-26)

Para la notación se usará $\Delta_{\mathbf{K}_p}(\mathbf{k})$ para vectores arbitrarios. Cuando $k_F < K_1/2$ no tenemos esferas de Andreev y la superficie de Fermi quedaría dentro de la primera zona de Brillouin (fig. **3-5**a). Para obtener esferas de Andreev se necesita que la superficie de Fermi salga de la primera zona de Brillouin (fig. **3-5**b) para $K_1\sqrt{2}/2 > k_F > K_1/2$, donde las esferas de Andreev se ilustran con líneas rojas.

Cuando se toma el potencial de la red diferente de cero obtenemos que las superficies de Fermi ya no se cruzan con las esferas de Andreev. Para analizar este caso pasamos a observar la superficie de Fermi y la esfera de Andreev en el esquema de zona repetida para la primera zona de Brillouin fig. **3-6**a y la segunda **3-6**b. Para ninguna de las dos zonas se encuentran cruces de las superficies de Fermi con las esferas de Andreev.



Figura 3-5: Se ilustran la superficie de Fermi (línea negra), las esferas de Andreev (línea roja) y los planos de Bragg (línea azul) para diferentes valores de energía de Fermi y potencial de red. a) Cuando la esfera de Fermi no sale de la primera zona de Brillouin, para este caso no hay esferas de Andreev. b) Cuando la superficie de Fermi se extiende fuera de la primera zona de Brillouin se obtienen esferas de Andreev

A continuación, se encuentra el espectro de energía y se determina el valor de la brecha de energía sobre los planos de Bragg, la superficie de Fermi y la debida a las esferas de Andreev a lo largo de una dirección en el espacio recíproco y se observan diferencias cuando el sistema es bidimensional. Para ello, consideremos un sistema en el cual solo existen las esferas de Andreev con el primer vector de la red recíproca, por lo tanto $K_1\sqrt{2}/2 > k_F > K_1/2$. Para analizar este sistema debemos resolver el sistema de ecuaciones (3-1) y (3-2), para un vector de la red reciproca arbitrario \mathbf{K}_p , obteniendo

$$E_{\pm}^{2} = \varepsilon_{\pm}^{2}(\mathbf{k}) + \varepsilon_{-}^{2}(\mathbf{k}) + U_{\mathbf{K}_{p}}^{2} + |\Delta_{0,0}(\mathbf{k})|^{2} + |\Delta_{\mathbf{K}_{p}}(\mathbf{k})|^{2} \pm \left\{ 4\varepsilon_{\pm}^{2}(\mathbf{k}) \left(U_{\mathbf{K}_{p}}^{2} + \varepsilon_{-}^{2}(\mathbf{k}) \right) + 2 \left| \Delta_{\mathbf{K}_{p}}(\mathbf{k}) \right|^{2} \left(2\varepsilon_{-}^{2}(\mathbf{k}) + |\Delta_{0,0}(\mathbf{k})|^{2} \right) + 8\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}) U_{\mathbf{K}_{p}} \operatorname{Re} \left(\Delta_{0,0}(\mathbf{k}) \Delta_{\mathbf{K}_{p}}^{*}(\mathbf{k}) \right) + 2 \operatorname{Re} \left(\Delta_{0,0}^{2}(\mathbf{k}) \Delta_{\mathbf{K}_{p}}^{*2}(\mathbf{k}) \right) \right\}^{1/2}, \qquad (3-27)$$

 \cos

$$\varepsilon_{\pm}\left(\mathbf{k}\right) = \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_{p}} \pm \varepsilon_{\mathbf{k}}}{2},\tag{3-28}$$

donde $U_{-\mathbf{K}_P} = U_{\mathbf{K}_P} = U_{\mathbf{K}_P}^*$, y $|\Delta_{-\mathbf{K}_p}(\mathbf{k})|^2 = |\Delta_{\mathbf{K}_p}(\mathbf{k})|^2$. Condición que en particular se consigue para los superconductores con simetría de inversión.



Figura 3-6: Se ilustran la superficie de Fermi (línea negra), las esferas de Andreev (línea roja) y los planos de Bragg (línea azul) para diferentes valores de energía de Fermi y potencial de red. a) Esquema de zona repetida para la primera zona de Brillouin, también se indica el recorrido en el que se analizará el espectro de energía. b) Esquema de zona repetida para la segunda zona de Brillouin.

La ecuación (3-27) es válida cerca de los planos y esferas de Andreev, con lo cual podemos obtener el valor de la brecha en los planos y las esferas como

$$\Delta E = E_+ - E_-. \tag{3-29}$$

Dado que los puntos sobre los planos de Bragg satisfacen que $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n}$, entonces se puede obtener el valor de E_{\pm} como

$$E_{\pm}^{2} = \varepsilon_{\pm}^{2} \left(\mathbf{k}\right) + U_{\mathbf{K}_{p}}^{2} + \left|\Delta_{0,0}\left(\mathbf{k}\right)\right|^{2} + \left|\Delta_{\mathbf{K}_{p}}\left(\mathbf{k}\right)\right|^{2} \pm 2\left|\varepsilon_{\pm}\left(\mathbf{k}\right)U_{\mathbf{K}_{p}} + \Delta_{0,0}\left(\mathbf{k}\right)\Delta_{\mathbf{K}_{p}}^{*}\left(\mathbf{k}\right)\right|.$$
(3-30)

Cuando estamos lejos de la superficie de Fermi tenemos que $\varepsilon_+(\mathbf{k}) >> U_{\mathbf{k}_p}, \Delta_{0,0}(\mathbf{k}), \Delta_{\mathbf{K}_p}(\mathbf{k}),$ de donde se obtiene que la brecha es aproximadamente igual a

$$\Delta E \approx \left| 2U_{\mathbf{K}_p} \right|,\tag{3-31}$$

de lo cual confirmamos que la brecha presente en los planos es igual a la que se tiene sin superconductividad, siempre y cuando el potencial de pares sea despreciable respecto a ε (**k**). En general, para cualquier plano de Bragg se obtendrá que, mientras no estemos cerca de la superficie de Fermi, la brecha de energía será igual a la de su fase sin superconductividad.

Ahora, cuando lo analizamos sobre las esferas de Andreev, donde se cumple $\varepsilon_{\mathbf{k}} = -\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n}$, el mismo procedimiento anterior permite obtener que la brecha de energía es aproximadamente

o que el valor de la brecha en las esferas de Andreev viene dado por los términos de la expansión del potencial de pares siempre y cuando no estemos cerca de la superficie de Fermi, y dependerá de la temperatura y la relación de auto-consistencia.

Para obtener la brecha de energía superconductora equivalente a la teoría BCS se calcula la primera banda de energía sobre la superficie de Fermi E_{-} , donde obtenemos

$$E_{-} = \left| \Delta_{0,0} \left(\mathbf{k} \right) \pm \tilde{U} \left(\mathbf{k} \right) \Delta_{\mathbf{K}_{p}} \left(\mathbf{k} \right) \right|, \qquad (3-33)$$

 con

$$\tilde{U}(\mathbf{k}) = U_{\mathbf{k}_p} / \left(\frac{\varepsilon(\mathbf{k}) + \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{K}_p)}{2}\right),\tag{3-34}$$

allí es importante recalcar que \mathbf{k} debe encontrarse sobre la superficie de Fermi. Esta ecuación muestra que sin la red o sin la periodicidad del potencial de pares obtenemos los resultados de la literatura para un superconductor homogéneo [82], resultado original de este trabajo y que muestra el efecto neto de tener un potencial de pares periódico sobre el espectro de energía y sobre la brecha superconductora. Los casos de interés se presentan cuando $\tilde{U}(\mathbf{k})$ no es despreciable, lo cual sucede cerca a los planos de Bragg, donde el valor máximo o mínimo de la brecha es

$$E = \Delta_{0,0} \left(\mathbf{k} \right) \pm \Delta_{\mathbf{K}_{p}} \left(\mathbf{k} \right). \tag{3-35}$$

Este resultado se muestra en la fig. **3-7**, donde se ha escogido que las componentes de Fourier del potencial de pares $\Delta_{0,0}$ y $\Delta_{1,0}$ sean isotrópicas. En la figura se aprecia que a pesar de que los términos de la expansión son isotrópicos, la forma de la brecha sobre la superficie de Fermi no lo es, allí se incrementa y disminuye sobre esta superficie de Fermi dependiendo de si su superficie es de electrones o de huecos. Además, conforme nos alejamos de los planos de Bragg, la brecha superconductora vuelve a ser $\Delta_{0,0}$.

Para finalizar la presente sección obtendremos las bandas de energía de una red cuadrada con un potencial de pares anisotrópico con simetría $d_{x^2-y^2}$. Para ello, debemos tener en cuenta los vectores para cuatro planos de Bragg dados por (0,0), (0,1), (1,0) y (1,1). Esta inclusión implica tener una matriz ocho por ocho para resolver las ecuaciones (3-18) y (3-19), lo cual se hizo numéricamente. Ya que cuando $k_F < K_1/2$ no se obtienen esferas de Andreev, vamos a analizar el sistema cuando $K_1/2 < k_F < K_1\sqrt{2}/2$



Figura 3-7: Brecha de energía sobre la superficie de Fermi cuando existen las esferas de Andreev, se tomaron como isotrópicos los términos de la expansión de Fourier del potencial de pares, la línea continua azul es cuando $\Delta_{1,0} = \Delta_{0,0}$. Cuando $\Delta_{1,0} = 0$ obtenemos la línea roja punteada. El inserto ilustra la superficie de Fermi, cuya brecha de energía superconductora se ha calculado sobre la energía roja.



Figura 3-8: Espectro de energía sobre el camino ΓXM de la fig. **3-6**, para a) un superconductor homogéneo, es decir $\Delta_{1,0} = 0$ y b) $|\Delta_{1,0}(\mathbf{k})| = |\Delta_{0,0}(\mathbf{k})|$. El potencial de pares considerado tiene asimetría $d_{x^2-y^2}$ y se indican los puntos donde aparecen las brechas de las esferas de Andreev con A_1 y A_2 . Cada banda se ilustra con un color diferente, siendo la roja la banda de menor energía y la magenta la de mayor energía considerada.

Para encontrar el espectro de energía usamos el camino mostrado en la fig. **3-6** donde se muestran los puntos de alta simetría y comienza en el punto Γ . Adicionalmente, en la misma figura del camino se muestran los puntos A_1 y A_2 que corresponden a los cruces de las esferas de Andreev, todos los puntos son indicados en la gráfica de las bandas de energía. En la fig. 3-8a tenemos $\Delta_{1,0}(\mathbf{k}) = 0$, es decir, solo hay efectos de la componente homogénea, y se compara con el caso cuando ambas potenciales son iguales $\Delta_{1,0}(\mathbf{k}) = \Delta_{0,0}(\mathbf{k})$, ver fig. **3-8**b. Observando las dos figuras se aprecia que el efecto de la esfera de Andreev en A_1 es abrir una brecha de energía entre la banda roja y la banda azul, cuyo valor es $\Delta_{1,0}(\mathbf{k})$. También se aprecia que cerca de A_2 la brecha del plano de Bragg debería mantenerse constante (3-30), pero la presencia del potencial $\Delta_{1,0}(\mathbf{k})$ cambia el valor de la brecha, conforme nos acercamos a la esfera de Andreev. Es importante notar que el punto A_1 se encuentra entre dos superficies de Fermi, una de electrones y otra de huecos, y que el lado afectado por la presencia del potencial $\Delta_{1,0}(\mathbf{k})$ es el cercano a la superficie de Fermi de huecos. Así, en la gráfica se confirma que lejos de la superficie de Fermi las brechas se comportan como lo esperado de un material homogéneo; sin embargo, cerca de esta y las esferas de Andreev, los efectos del potencial de pares periódico se hacen notorios y se modifican las brechas de energía, debido a que en la zona donde aparecen puede existir una correlación entre las esferas de Andreev y los arcos de Fermi, ya que, como se mencionó, son nuevas brechas de energía que aparecen cerca a los planos de Bragg similares al potencial de la fase "pseudogap" [21].

3.3. Relaciones de auto-consistencia

En esta sección se solucionarán las ecuaciones de auto-consistencia para las dos primeras componentes de Fourier del potencial de pares y en consecuencia obtener su comportamiento con la temperatura. Para comenzar, retomamos las soluciones de Bloch de (3-17) y las relaciones de auto-consistencia (3-7), para obtener la siguiente ecuación para el potencial de pares

$$\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \sum_{l, \mathbf{k}, \mathbf{K}_n, \mathbf{K}_m} u_{l, \mathbf{k} + \mathbf{K}_n} v_{l, \mathbf{k} + \mathbf{K}_m}^* \left(e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r})} e^{i(\mathbf{K}_n \cdot \mathbf{r}' - \mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r})} \left(1 - f_{l, \mathbf{k}}\right) - e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} e^{i(\mathbf{K}_n \cdot \mathbf{r} - \mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r}')} f_{l, \mathbf{k}} \right).$$

$$(3-36)$$

Donde l se refiere a la banda de energía y **k** es el vector de onda. Escribiendo el potencial de pares en las coordenadas **s** y **R**, y usando las definiciones de (3-8) y (3-9), encontramos que

la relación de auto-consistencia es

$$\Delta'(\mathbf{s}, \mathbf{R}) = V(\mathbf{s}) \sum_{l, \mathbf{k}, \mathbf{K}_n, \mathbf{K}_m} \qquad u_{l, \mathbf{k} + \mathbf{K}_n} v_{l, \mathbf{k} - \mathbf{K}_m + \mathbf{K}_n}^* e^{i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{R}} \left(e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{K}_n + \mathbf{K}_m/2) \cdot \mathbf{s}} \left(1 - f_{l, \mathbf{k}} \right) - e^{-i(\mathbf{k} - \mathbf{K}_n + \mathbf{K}_m/2) \cdot \mathbf{s}} f_{l, \mathbf{k}} \right), \qquad (3-37)$$

donde se ha realizado el cambio de variable $\mathbf{K}_m \mapsto \mathbf{K}_n - \mathbf{K}_m$ y donde el potencial de interacción depende de las posiciones relativas. Se aprecia que el potencial de pares es periódico en la coordenada \mathbf{R} , con lo cual directamente se obtiene la expansión de Fourier del potencial de pares, recordando que

$$\Delta_{\mathbf{K}_{m}}^{\prime}(\mathbf{s}) = \int dR e^{i\mathbf{K}_{m}\mathbf{R}} \Delta(\mathbf{s}, \mathbf{R}), \qquad (3-38)$$

como

$$\Delta_{\mathbf{K}_m}(\mathbf{s}) = \sum_{l,\mathbf{k},\mathbf{K}_n} u_{l,\mathbf{k}+\mathbf{K}_l} v_{l,\mathbf{k}-\mathbf{K}_m+\mathbf{K}_n}^* V(\mathbf{s}) \left(e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{K}_n+\mathbf{K}_m/2)\cdot\mathbf{s}} \left(1-f_{l,\mathbf{k}}\right) - e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{K}_n+\mathbf{K}_m/2)\cdot\mathbf{s}} f_{l,\mathbf{k}} \right).$$
(3-39)

Haciendo la transformada de Fourier (3-11) de este potencial obtenemos

$$\Delta_{\mathbf{K}_m}(\mathbf{q}) = \sum_{l,\mathbf{k},\mathbf{K}_n} u_{l,\mathbf{k}+\mathbf{K}_n} v_{l,\mathbf{k}-\mathbf{K}_m+\mathbf{K}_n}^* \left(V(\mathbf{q},\tilde{\mathbf{K}}_{n,m}) \left(1 - f_{l,\mathbf{k}}\right) - \left(V(\mathbf{q},-\tilde{\mathbf{K}}_{n,m})f_{l,\mathbf{k}}\right) \right).$$
(3-40)

con $\tilde{\mathbf{K}}_{n,m} = \mathbf{k} + \mathbf{K}_n - \mathbf{K}_m/2$. De la ecuación (3-40) obtenemos las relaciones de auto-consistencia para los dos primeros términos de la expansión de Fourier como

$$\Delta_{0,0}(\mathbf{q}) = \sum_{l,\mathbf{k},\mathbf{K}_n} u_{l,\mathbf{k}+\mathbf{K}_n} v_{l,\mathbf{k}+\mathbf{K}_n}^* \left(V(\mathbf{q},\tilde{\mathbf{K}}_{n,0}) \left(1 - f_{l,\mathbf{k}}\right) - V(\mathbf{q},-\tilde{\mathbf{K}}_{n,0}) f_{l,\mathbf{k}} \right),$$
(3-41)

$$\Delta_{1,0}(\mathbf{q}) = \sum_{l,\mathbf{k},\mathbf{K}_n} \left(u_{l,\mathbf{k}+\mathbf{K}_n} v_{l,\mathbf{k}-\mathbf{K}_1+\mathbf{K}_n}^* + u_{l,\mathbf{k}+\mathbf{K}_1} v_{l,\mathbf{k}}^* \right) \left(V(\mathbf{q},\tilde{\mathbf{K}}_{n,1}) \left(1 - f_{l,\mathbf{k}}\right) - V(\mathbf{q},-\tilde{\mathbf{K}}_{n,1}) f_{l,\mathbf{k}} \right).$$

$$(3-42)$$

Las ecuaciones (3-41) y (3-42) son auto-consistentes y requieren conocer los coeficientes $u_{l,\mathbf{k}+\mathbf{K}_n}$ y $v_{l,\mathbf{k}+\mathbf{K}_n}$, con lo cual se debe solucionar el sistema de ecuaciones (3-18) y (3-19) simultáneamente. Para ilustrar el procedimiento de encontrar la solución de estas ecuaciones, se resolverán a lo largo del camino ΓX , cuando los términos de la expansión de Fourier son isotrópicos y podemos hacer las siguientes definiciones por simetría

$$U_{1,0} = U_{-1,0} = U_1, (3-43)$$

$$\Delta_{0,0}(\mathbf{q}) = \Delta_0, \tag{3-44}$$

$$\Delta_{\pm 1,0}(\mathbf{q}) = \Delta_{\pm 1}. \tag{3-45}$$

Así, es necesario encontrar $u_{l,\mathbf{k},\mathbf{K}_m}$ y $v_{l,\mathbf{k},\mathbf{K}_m}$ para el primer vector de la red recíproca y despreciar los términos de orden superior como

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} & U_{1} & \Delta_{0} & \Delta_{-1} \\ U_{1} & \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_{1,0}} & \Delta_{1} & \Delta_{0} \\ \Delta_{0}^{*} & \Delta_{1}^{*} & -\varepsilon_{\mathbf{k}} & -U_{1} \\ \Delta_{-1}^{*} & \Delta_{0}^{*} & -U_{1} & -\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{K}_{1,0}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{l,\mathbf{k}} \\ u_{l,\mathbf{k}+\mathbf{K}_{1,0}} \\ v_{l,\mathbf{k}} \\ v_{l,\mathbf{k}+\mathbf{K}_{1,0}} \end{pmatrix} = E^{l} \begin{pmatrix} u_{l,\mathbf{k}} \\ u_{l,\mathbf{k}+\mathbf{K}_{1}} \\ v_{l,\mathbf{k}} \\ v_{l,\mathbf{k}+\mathbf{K}_{1}} \end{pmatrix},$$
(3-46)

Para solucionar este sistema y encontrar el valor de los coeficientes, haremos el siguiente "ansatz"

$$\begin{pmatrix} u_{l,\mathbf{k}} \\ u_{l,\mathbf{k}+\mathbf{K}_{1,0}} \end{pmatrix} = u_{l,s}\vec{u}_N, \qquad (3-47)$$

$$\begin{pmatrix} v_{l,\mathbf{k}} \\ v_{l,\mathbf{k}+\mathbf{K}_1} \end{pmatrix} = v_{l,s}\vec{v}_N, \qquad (3-48)$$

tal que los $\vec{u}_{l,N}$ son la solución del estado normal que cumple

$$H_N \vec{u}_{l,N} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} & U_1 \\ U_1 & \varepsilon_{\mathbf{k} + \mathbf{K}_{1,0}} \end{pmatrix} \vec{u}_{l,N} = E_{l,N} \vec{u}_{l,N}, \qquad (3-49)$$

con lo cual podemos escribir la ecuación (3-46) como

$$\begin{pmatrix} H_N & \Delta \\ \Delta^* & -H_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{l,s} \vec{u}_{l,N} \\ v_{l,s} \vec{v}_{l,N} \end{pmatrix} = E_l \begin{pmatrix} u_{l,s} \vec{u}_{l,N} \\ v_{l,s} \vec{v}_{l,N} \end{pmatrix},$$
(3-50)

siendo

$$\Delta = \begin{pmatrix} \Delta_0 & \Delta_{-1} \\ \Delta_1 & \Delta_0 \end{pmatrix},\tag{3-51}$$

donde se verifica que $\Delta_{-1} = \Delta_1^*$, resultado que se obtiene directamente de las relaciones de auto-consistencia.

Al solucionar la ecuación (3-50) obtenemos la siguiente relación entre las soluciones normales y las soluciones superconductoras

$$u_{l,s} = -\frac{(\Delta \vec{v}_{l,N}) \cdot \vec{u}_{l,N}^T}{(E_{l,N} - E_{l,\mathbf{q},\mathbf{k}})} v_s.$$

$$(3-52)$$

Para encontrar los vectores de la solución normal partimos de la ecuación a primer orden del Hamiltoniano dado por

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} & U_1 \\ U_1 & \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{l,\mathbf{k}} \\ u_{l,\mathbf{k}+\mathbf{K}_1} \end{pmatrix} = E_{l,N} \begin{pmatrix} u_{l,\mathbf{k}} \\ u_{l,\mathbf{k}+\mathbf{K}_1} \end{pmatrix},$$
(3-53)

y de manera similar se encuentra $\vec{v}_{l,N}$, donde tenemos que las dos primeras bandas está dada por

$$E_{l,N} = e_{+} \pm \sqrt{\varepsilon_{-}^{2} + U_{1}^{2}}, \qquad (3-54)$$

siendo

$$\varepsilon_{\pm} = \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} \pm \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_1}}{2},\tag{3-55}$$

con lo cual el vector propio es

$$u_{l,\mathbf{k}} = -\frac{U_1}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - E_{l,N}} u_{l,\mathbf{k}+\mathbf{K}_1}.$$
(3-56)

Con las ecuaciones (3-54) y (3-56) podemos obtener las soluciones de auto-consistencia para los potenciales Δ_0 y Δ_1 de manera explícita, ya que con la suma parcial sobre las bandas de energía usando un potencial de interacción cerca a la superficie de Fermi, tenemos

$$\Delta_0(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta_0(\mathbf{q}) + d_c \Delta_1(\mathbf{q})}{2E_{\mathbf{q},\mathbf{k}}} \left(V(\mathbf{q} - \mathbf{k}) \left(1 - f_{\mathbf{k}}\right) - V(\mathbf{q} + \mathbf{k}) f_{\mathbf{k}} \right), \tag{3-57}$$

$$\Delta_{1}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta_{0}(\mathbf{q}) + d_{c}\Delta_{1}(\mathbf{q})}{4E_{\mathbf{q},\mathbf{k}}} d_{c} \left(V(\mathbf{q} - \mathbf{k}) \left(1 - f_{\mathbf{k}}\right) - V(\mathbf{q} + \mathbf{k}) f_{\mathbf{k}} \right), \tag{3-58}$$

 con

$$\varepsilon_c = \frac{U_1}{\varepsilon_- + \sqrt{\varepsilon_-^2 + U_1^2}},\tag{3-59}$$

$$d_c = \frac{-2(\mathbf{q})_c}{1+(\mathbf{q})_c^2}$$
(3-60)

у

$$E_{l,\mathbf{q},\mathbf{k}}^{2} = E_{l,N}^{2} + \left| \Delta_{0}(\mathbf{q}) - 2 \frac{\varepsilon_{c} \Delta_{1}(\mathbf{q})}{1 + (\varepsilon_{c})^{2}} \right|^{2}.$$
(3-61)

Si en estas ecuaciones de auto-consistencia se hace el potencial de la red $U_1 = 0$ obtenemos que las ecuaciones se convierten en

$$\Delta_0(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta_0(\mathbf{q})}{2E_{\mathbf{q},\mathbf{k}}} \left(V(\mathbf{q} - \mathbf{k}) \left(1 - f_{\mathbf{k}}\right) - V(\mathbf{q} + \mathbf{k}) f_{\mathbf{k}} \right), \tag{3-62}$$

$$\Delta_1(\mathbf{q}) = 0, \tag{3-63}$$

lo que coincide con la relación de auto-consistencia para el caso homogéneo del potencial de pares en la teoría BCS [82].

Para resolver las ecuaciones de auto-consistencia se necesita solucionar de manera conjunta el sistema dado por (3-57) y (3-58). Para ello, suponemos un potencial constante, pasando de la suma en **k** a una integral cercana a la superficie de Fermi para definir las siguientes funciones

$$F(\Delta_0(\mathbf{q}), \Delta_1(\mathbf{q})) = \int d\mathbf{k} \left(\frac{1}{V_b} \frac{\Delta_0(\mathbf{q}) + d_c \Delta_1(\mathbf{q})}{2E_{\mathbf{q},\mathbf{k}}} V(1 - 2f_{\mathbf{k}}) \right) - \Delta_0(\mathbf{q}), \tag{3-64}$$

$$G(\Delta_0(\mathbf{q}), \Delta_1(\mathbf{q})) = \int d\mathbf{k} \left(\frac{1}{V_b} \frac{\Delta_0(\mathbf{q}) + d_c \Delta_1(\mathbf{q})}{4E_{\mathbf{q},\mathbf{k}}} d_c V \left(1 - 2f_{\mathbf{k}}\right) \right) - \Delta_1(\mathbf{q}), \tag{3-65}$$

Vamos a resolver este sistema para un potencial de pares isotrópico y un potencial V constante cerca de la superficie de Fermi. Para encontrar el valor de Δ_0 y Δ_1 a una temperatura T, se obtienen las superficies dadas por (3-64) y (3-65), como se muestra en la fig. **3-9**. La solución corresponde a cuando las superficies se encuentren en cero, es decir,

$$F(\Delta_0, \Delta_1) = G(\Delta_0, \Delta_1) = 0. \tag{3-66}$$



Figura 3-9: Ilustración de las superficies dadas en (3-64) y (3-65) (superficies amarillas) para un valor de T = 0. La solución corresponde al punto donde se cruzan con el plano azul que corresponde al plano cero.

El procedimiento anterior muestra que $\Delta_0 = 1000\Delta_1$ cuando T = 0, como se muestra en la fig. **3-9**, para varios valores de potenciales de red cuando la temperatura es cercana a 0. Este resultado establece que el sistema a baja temperatura queda descrito por la teoría BCS usual. Cuando se solucionan las ecuaciones de auto-consistencia cerca de la temperatura crítica se encuentra que el valor de Δ_1 es del orden del valor de Δ_0 , de tal manera que en las proximidades de la temperatura crítica ambos potenciales se deben tener en cuenta y los efectos de la periodicidad de la red pueden ser más relevantes. Este es un aporte nuevo que no se ha encontrado en la literatura, que muestra como Δ_1 podría ser un candidato para explicar la fase "pseudogap" debido a su dependencia con la temperatura, convirtiéndose en un punto de partida para casos más específicos, por ejemplo, para superconductores con base en hierro o cupratos.

3.4. Densidad de estados

Finalmente, para ilustrar el efecto de $\Delta_{0,0}$ y $\Delta_{1,0}$ sobre las propiedades del superconductor se calculará la densidad de estados por unidad de volumen, lo cual es posible cuando se conoce el espectro de energía como

$$\rho(E) = \frac{1}{4\pi^3} \int d\mathbf{k} \delta(E - E_{\mathbf{k}}). \tag{3-67}$$

Para realizar la anterior integral numéricamente, se utiliza la siguiente secuencia de la delta de Dirac

$$\rho(E) = \lim_{n \to 0} \frac{n}{\pi^2 \left((E - E_{l,\mathbf{k}}) + n^2 \right)^2}.$$
(3-68)

Para calcular la densidad de estados para una red cuadrada vamos a utilizar la ecuación (3-27) y así obtener el espectro de energía $E_{\mathbf{k}}$, considerando una simetría $d_{x^2-y^2}$ en los potenciales $\Delta_{0,0}$ y $\Delta_{1,0}$. Para analizar la densidad de estados se realiza la fig.**3-10** con una magnitud fija de $|\Delta_{0,0}|$ y diferentes valores de la amplitud de $\Delta_{1,0}$ y U_1 .

De acuerdo con lo obtenido en las secciones anteriores, cuando la amplitud de $|\Delta_{1,0}(\mathbf{k})| = 0$ y $U_1 = 0$ tenemos un sistema descrito por el modelo BCS con una simetría $d_{x^2-y^2}$, que muestra un máximo cuando la energía es igual a $\Delta_{0,0}(\mathbf{k})$, como se observa con la línea azul continua de la fig. **3-10**. Ahora analizamos el caso cuando la amplitud de $\Delta_{1,0}(\mathbf{k}) = 0$ y $U_1 \neq 0$ representada en la línea roja a trazos, en donde se aprecia que el punto donde se obtiene el máximo de la densidad de estados no cambia, además, se observa un nuevo máximo más pequeño en $E = \Delta_{0,0}(\mathbf{k})/2$. Este nuevo máximo es debido a que se presentan reflexiones de Bragg, aunque este efecto no es muy notorio y es dependiente del valor de la brecha de energía de las bandas en el estado normal y por tanto de U_1 , este resultado contrasta al obtenido para un superconductor con base de hierro [83].



Figura 3-10: Densidad de estados para una red cuadrada para distintos valores de $\Delta_{1,0}(\mathbf{k})$ y U_1 . Para todas las líneas $\Delta_{0,0}(\mathbf{k})$ es distinta de cero y con simetría $d_{x^2-y^2}$.

Por último, analizamos cuando $\Delta_{1,0}(\mathbf{k}) = \Delta_{0,0}(\mathbf{k})$ y $U_1 \neq 0$, en este caso el máximo se ha desplazado hacia la derecha en energía y ya no hay una correspondencia entre el máximo y la magnitud del potencial de pares $|\Delta_{0,0}(\mathbf{k})|$ de un superconductor homogéneo. En la densidad de estados se observan dos picos bien definidos, el primero se encuentra a la izquierda del pico de un superconductor homogéneo (sin potencial de red), y el otro es similar al del superconductor homogéneo y se encuentra desplazado a la derecha. Estos cambios en la densidad de estados son debidos a la presencia simultánea del potencial de la red de iones y el potencial de pares periódico, debido a las reflexiones de Andreev de las cuasi-partículas. Estos resultados son similares a los presentados por los superconductores de alta temperatura en la fase "pseudogap", donde se tienen dos potenciales, el segundo representado por $\Delta_{1,0}(\mathbf{k})$ [20].

Con esto hemos observado que la segunda componente de Fourier del potencial de pares puede afectar la densidad de estados y el espectro superconductor. Las condiciones para obtener estos son primero, estar cerca de la temperatura crítica donde el potencial $\Delta_{1,0}$ es comparable al homogéneo, la segunda es que la esfera de Fermi salga de la primera zona de Brillouin y la tercera es que estemos cerca a los planos de Bragg. Estas tres condiciones permitirían decir que el potencial de la red de iones y sus efectos deben considerarse en el potencial de pares, pues podrían permitir entender la fase "pseudogap" por medio de la similitud entre su potencial y la segunda componente de Fourier del potencial de pares.

Capítulo 4

Superredes de Grafeno acopladas a superconductores

En el capítulo anterior se estudiaron superconductores con una periodicidad microscópica del potencial de pares, como producto de la red de iones, así, continuando con la idea de periodicidad, en este capítulo estudiaremos los sistemas periódicos de superredes basados en grafeno. El grafeno es un material versátil que puede ser modificado para ser metálico o semiconductor, gracias a que presenta un espectro lineal sin brecha de energía [32–34]. Esta dualidad puede ser usada en superredes de grafeno, que son formadas por un potencial periódico electrostático unidimensional sobre una lámina, haciendo de este material un candidato importante para el desarrollo de circuitos eléctricos [84]. Se ha mostrado teóricamente que los portadores de carga del grafeno se comportan como fermiones de Dirac con quiralidad. Al utilizar un potencial de superred unidimensional con amplitud U y periodo L, se crean nuevos puntos de Dirac debido a que la quiralidad prohíbe la apertura de una brecha de energía, los nuevos puntos se crean cuando el producto de UL alcanza un valor crítico [54, 85, 86].

La propagación de electrones y huecos en las superredes de grafeno es altamente anisotrópica y puede ser controlada al variar el potencial de la superred y la energía de Fermi. Los electrones que se transmitan perpendicularmente a la interfase no tienen cambios significativos en su velocidad, sin embargo, conforme sean cada vez más paralelos a la intefase, su intensidad disminuye [56]. Se ha logrado obtener superredes de grafeno de alta calidad por medio de la encapsulación de nitruro de boro [57,58]. La formación de puntos de Dirac ha sido medida experimentalmente como picos en la resistividad [87–89], cimentando el camino para una novedosa y exótica física en superredes basadas en grafeno [90,91].

El reciente descubrimiento de la superconductividad no convencional en bicapas de grafeno ha mostrado una conexión entre las correlaciones superconductoras y las redes de Moiré [91]. Sin embargo, no existen estudios sobre el efecto de la superconductividad en la formación de nuevos puntos de Dirac en superredes de grafeno. Las junturas de grafeno con superconductores pueden ser fabricadas en el régimen balístico [92–95]. En estas junturas híbridas, electrones y huecos de la banda de conducción de la terminal de grafeno se combinan para formar pares de Cooper en el superconductor, a través de procesos microscópicos conocidos como reflexiones de Andreev [96]. Cuando el dopaje es menor que el voltaje aplicado y el potencial de pares, el espectro sin brecha de energía del grafeno permite tener reflexiones de Andreev inusuales, donde electrones en la banda de conducción se convierten en huecos de la banda de valencia [28]. En este trabajo se muestra que estos procesos inter-banda presentan respuestas características en la formación de puntos de Dirac, los cuales podrían facilitar su detección experimental.

El control experimental de dispositivos de grafeno ha permitido una serie de trabajos que reportan reflexiones de Andreev inter-banda, [29], espectroscopia de estados ligados de Andreev en junturas Josephson [97], desdoblamiento de pares de Cooper [98] y superconductividad no convencional por efecto de proximidad [99–102]. Trabajos teóricos han extendido estos efectos a junturas de grafeno con materiales ferromagnéticos [103] y lentes de Veselago con superconductores [104]. Se han observado los efectos de junturas np con base en grafeno con un índice de refracción negativo que los hace funcionar como lente de Veselago y permiten enfocar una corriente de electrones [38, 105, 106]. Otro sistema que se puede estudiar en grafeno es el formado en la lente de Veselago pnp que enfoca una corriente de electrones de manera similar a una lente de Veselago np. Cambiar el grafeno central por un superconductor permite tener una corriente por tunelamiento y una corriente por reflexiones de Andreev cruzadas (CAR) [41]. Se encuentra que no se han mostrado los efectos de acoplar superredes de grafeno con materiales superconductores, lo que es el objeto de estudio de esta sección.

En este capítulo analizamos los efectos conjuntos del potencial de la superred y la superconductividad inducida en el grafeno, enfocándonos en la aparición de nuevos puntos de Dirac y en las propiedades de transporte de la juntura superred-superconductor (SL - S). Demostramos que el transporte para energías por debajo del potencial de pares es extremadamente sensitivo a la creación de nuevos puntos de Dirac, cuando los procesos de Andreev inter-banda son dominantes. También observamos que la conductancia diferencial presenta cambios abruptos para voltajes proporcionales a la energía de separación entre el punto de Dirac original y los nuevos puntos generados. Este efecto es robusto aún cuando existan asimetrías del potencial de la superred, la presencia de un dopaje adicional en la lámina de grafeno y efectos de tamaño finito. Es debido a esto que junturas SL - S son convenientes para tratar preguntas fundamentales acerca de la formación de nuevos puntos de Dirac por un potencial periódico y pueden ser una componente para futuras aplicaciones de circuitos basados en grafeno con propiedades específicas. En la parte final del capítulo estudiamos las lentes de Veselago en sistemas n - S - n, donde n se refiere a un grafeno con dopaje tipo n y S representa un superconductor, donde analizamos cómo mejorar la corriente CAR y con esto ayudar a la detección del desdoblamiento de pares de Cooper. En particular nos enfocamos en métodos que permitirán mejorar la señal CAR, mostrando que, al no tener interfases perfectas, obtendremos que la señal CAR sea dominante sobre la de cotunelamiento. También analizamos cómo el tener energías de Fermi comparables con el potencial de pares superconductor afecta los puntos focales de huecos. Finalmente, se introducen las superredes de grafeno en las lentes de Veselago y se muestran sus efectos de colimación para la señal de cotunelamiento de electrones y de CAR.

4.1. Obtención de las funciones de Green semi-infinita y finita, a partir de la función de Green infinita para el grafeno

Para encontrar la función de Green finita se puede usar el método de soluciones asintóticas, mostrado en la sección 2.5.1, sin embargo este método puede volverse más complejo cuando se incrementan el número de procesos de dispersión en las fronteras, por lo que una alternativa es usar la función de Green del sistema infinito y cortarla para encontrar la función de Green de un sistema semi-infinito o una nanocinta. El método que se presenta a continuación utiliza la ecuación de Dyson y la función de Green del sistema infinito, para el cual se deben tener en cuenta las condiciones de frontera especificadas por el potencial de corte introducido. En esta sección mostraremos este proceso en el grafeno, considerando que se pueden comparar los resultados con las funciones de Green de una nanocinta de grafeno en [73], encontradas con el método de soluciones asintóticas. Este proceso se usará posteriormente para la bicapa de grafeno, que al tener más procesos de dispersión en las fronteras, hace más complejo el método de soluciones asintóticas respecto al de corte que se puede implementar numéricamente.

Consideremos un sistema infinito perturbable en x_1 con un potencial de corte $V(x_1) = U\delta(x_1 - x_0)\hat{S}$ como se muestra en la fig. **4-1**, y donde se muestra cómo el potencial de corte divide al sistema en dos regiones, una que notamos LL para $x < x_0$ y otra RR, cuando $x > x_0$. La función de Green del sistema perturbado la encontramos usando la ecuación de Dyson (2-93), escrita como

$$\hat{\boldsymbol{G}}(x,x') = \hat{\boldsymbol{g}}(x,x') + \int dx_1 \hat{\boldsymbol{g}}(x,x_1) V(x_1) \hat{\boldsymbol{G}}(x_1,x'), \qquad (4-1)$$

donde $\hat{g}(x, x')$ es la función del sistema infinito sin perturbación, con q como vector de onda
paralelo a la juntura. Para la notación de las demás funciones de Green no se colocará explícitamente la dependencia de q y E.

El potencial de corte es $V(x) = U\delta(x - x_0)\hat{S}$, donde U es un parámetro que al tender a infinito permite desconectar la región derecha de la región izquierda y \hat{S} es una matriz de acople característica del sistema. La función de Green sin perturbar contiene diferentes formas de propagar de x a x' o de x a x'', como se observa en la fig. **4-1**. Las funciones de Green perturbadas las denotamos como $\hat{G}_{RR}(x, x', E)$, que va de un punto x a un punto x' a la derecha de la barrera, y como $\hat{G}_{RL}(x, x'', E)$ que va desde un punto x a la derecha de la barrera a un punto x'' a la izquierda. Cuando U tiende a infinito la función de Green \hat{G}_{RL} es cero pues el potencial anula todas las trayectorias que crucen la barrera (líneas verdes), mientras que la función $\hat{G}_{RR}(x, x', E)$ es la función de Green de un sistema semi-infinito para $x > x_0$.

La función de Green perturbada en el borde $\hat{G}_{RR}(x_0, x_0, E)$ dependerá de la forma que tenga la matriz \hat{S} , determinada por la condición de frontera de los estados en el borde.



Figura 4-1: Diagrama que distingue las funciones de Green $\hat{G}_{LR}(x, x'')$ y $\hat{G}_{RR}(x, x')$. Las líneas verdes son procesos que el potencial de corte no permite, dejando solamente las líneas rojas.

Usamos la notación introducida en la sección 2.5 con los símbolos $\langle y \rangle$ para las funciones de Green, indicando cuando x < x' ó x > x', respectivamente.

Cuando se hacen junturas en el grafeno se debe tener en cuenta la forma en que se aproxima a la frontera de la juntura, donde la función de Green, en los bordes, puede estar dada por $\hat{G}_{RR}^{>}(x_0, x_0) = \hat{G}_{RR}^{>}(x_0 + 0^+, x_0 + 0^-)$ o $\hat{G}_{RR}^{<}(x_0, x_0) = \hat{G}_{RR}^{<}(x_0 + 0^-, x_0 + 0^+)$, donde 0⁺ y 0⁻ observado en la fig. **4-2**, adaptada de [74].



Figura 4-2: Diferentes formas de acercarse a la frontera en una juntura de grafenos con frontera zigzag. Adaptada de [74].

Usando el símbolo > y < para indicar cómo se toma x_0 , procedemos a resolver la ecuación de Dyson (4-1), obteniendo que la función de Green al lado derecho es

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{D}^{}(x,x',q,E) = \hat{\boldsymbol{g}}^{}(x,x',q,E) + U\hat{\boldsymbol{g}}^{>}(x,x_{0},q,E)\hat{S}\hat{M}_{R}\hat{\boldsymbol{g}}^{<}(x_{0},x',q,E),$$
(4-2)

donde $\hat{g}^{>/<}(x, x')$ es la función de Green del sistema que vamos a cortar, cuando x > x' ó x < x', con

$$\hat{M}_R = \left(1 - U\hat{g}^>(x_0, x_0, q, E)\hat{S}\right)^{-1}.$$
(4-3)

El cálculo más detallado se encuentra en el anexo A.

Para aplicar estas ecuaciones al grafeno se debe tener en cuenta la estructura espinorial de los sitios $A ext{ y } B$, lo cual determinará las condiciones de frontera y por lo tanto las funciones de Green semi-infinitas obtenidas. En el grafeno se pueden tener dos fronteras, una que mezcla valles "armchair" y una zigzag caracterizada porque en el borde tenemos solo un tipo de átomo [73], como se observa en la fig. **4-3**, tomada de [74].

4.1 Obtención de las funciones de Green semi-infinita y finita, a partir de la función de Green infinita para el grafeno59



Figura 4-3: Bordes para obtener junturas "armchair" y zigzag, tomada de [74].

La matriz \hat{S} para la frontera zigzag es construida de tal manera que quite las propagaciones del átomo A en la región RR a un átomo B en la región LL en la función de Green (fig. **4-3**), con lo cual la matriz es

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{4-4}$$

Cuando se resuelve (4-2) para el sistema infinito, se obtiene la siguiente función de Green para un grafeno semi-infinito derecho

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{RR}^{<}(x,x') = A \left(e^{ik(x'-x)} \begin{pmatrix} 1 & -e^{i\alpha} \\ -e^{-i\alpha} & 1 \end{pmatrix} + e^{ik(x+x')} e^{-2ikx_0} e^{-i\alpha} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} & -1 \\ 1 & -e^{i\alpha} \end{pmatrix} \right),$$

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{RR}^{>}(x,x') = A \left(e^{ik(x-x')} \begin{pmatrix} 1 & e^{-i\alpha} \\ e^{i\alpha} & 1 \end{pmatrix} + e^{ik(x+x')} e^{-2ikx_0} e^{-i\alpha} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} & -1 \\ 1 & -e^{i\alpha} \end{pmatrix} \right),$$
(4-5)
$$(4-6)$$

 con

$$A = \frac{-i}{2\hbar v_F \cos\alpha},\tag{4-7}$$

у

$$e^{\pm i\alpha} = \frac{k \pm iq}{E + EF}.$$
(4-8)

El cálculo detallado se encuentra en el anexo B, y coincide con lo reportado en la referencia [73].



Figura 4-4: Ilustración de los procesos para encontrar la función de una nanocinta de grafeno entre x_0 y x_1 , el cual se obtiene al volver a cortar la función de Green semi-infinita derecha en el punto x_1 . Se definen las nuevas regiones LL y RR para la solución de las ecuaciones de Dyson.

Ahora vamos a implementar el mismo método de corte para encontrar la función de Green para una nanocinta de grafeno entre x_0 y x_1 . Para ello se utiliza un potencial de corte $V(x) = U\delta (x - x_1) \hat{S}$ y la función de Green semi-infinita obtenida anteriormente, como se observa en el diagrama de la fig. 4-4. El ancho de la película es definido por $W = x_1 - x_0$ con lo cual, al usar la función de Green semi-infinita derecha (4-5) y (4-6), junto con la ecuación (A-7) se obtiene la función de Green de una nanocinta de grafeno con bordes zigzag así

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{LL}^{<}(x,x') = \frac{A}{D} \left(e^{ik(x'-x)} \begin{pmatrix} 1 & -e^{i\alpha} \\ -e^{-i\alpha} & 1 \end{pmatrix} + e^{ik(x+x')} e^{-2ikx_0} e^{-i\alpha} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} & -1 \\ 1 & -e^{i\alpha} \end{pmatrix} \right) \\ -\frac{A}{D} \left(e^{2ikx_1} e^{-ik(x+x')} e^{-i\alpha} \begin{pmatrix} e^{i\alpha} & 1 \\ -1 & -e^{-i\alpha} \end{pmatrix} + e^{i2kW} e^{-i\alpha} e^{ik(x-x')} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} & e^{-2i\alpha} \\ 1 & e^{-i\alpha} \end{pmatrix} \right),$$
(4-9)

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{LL}^{>}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') = \frac{A}{D} \left(e^{ik(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')} \begin{pmatrix} 1 & e^{-i\alpha} \\ e^{i\alpha} & 1 \end{pmatrix} + e^{ik(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{x}')} e^{-2ikx_0} e^{-i\alpha} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} & -1 \\ 1 & -e^{i\alpha} \end{pmatrix} \right) -\frac{A}{D} \left(e^{2ikx_1} e^{-ik(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{x}')} e^{-i\alpha} \begin{pmatrix} e^{i\alpha} & 1 \\ -1 & -e^{-i\alpha} \end{pmatrix} + e^{ik(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x})} e^{2ikW} e^{-i\alpha} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} & -1 \\ -e^{-2i\alpha} & e^{-i\alpha} \end{pmatrix} \right),$$
(4-10)

con

$$D = \left(e^{-2i\alpha}e^{2ikW} + 1\right).$$
(4-11)

Estas dos últimas ecuaciones son las funciones de Green de una lámina de grafeno como se obtienen en [73] por el método de soluciones asintóticas, ilustrado en la sección 2.5.1.

4.2. Unión de nanocintas de grafeno y la superred de grafeno

Con la función de Green de la nanocinta de grafeno procedemos a encontrar la función de Green de un bloque np (fig. 4-5), el cual servirá para formar la superred de grafeno, al juntar varios de estos bloques.



Figura 4-5: Ilustración de un bloque np y de la energía de Fermi de cada bloque. En la figura se muestran los puntos x_b y x_c que definen el bloque n con energía de Fermi E_n . Esta nanocinta de grafeno se acopla con el bloque p que está entre x_c y x_a con energía de Fermi E_p . El primer bloque verde, con energía de Fermi E_n , está entre x_b y $x_b + W_n$, y para el segundo en rojo, con energía de Fermi E_p , está entre $x_b + W_n$ y $x_b + W_n + W_p$.

Primero utilizaremos la ecuación de Dyson para unir una película o nanocinta de grafeno n con una nanocinta de grafeno p y formar la juntura np. Cada película será denominada ya sea derecha R o izquierda L, de acuerdo con la fig. 4-5. También es útil definir que el ancho de la primera película es $W_n = x_c - x_b$ y el ancho de la segunda película es $W_p = x_a - x_c$. Con estas definiciones, se obtiene la función de Green de un bloque np usando las siguientes ecuaciones de Dyson

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{LR/RL}^{}(x_{i}, x_{j}) = \hat{\boldsymbol{g}}_{L/R}^{}(x_{i}, x_{c})\hat{\boldsymbol{T}}_{LR/RL} \\
(1 - \hat{\boldsymbol{g}}_{R/L}^{>/<}(x_{c}, x_{c})\hat{\boldsymbol{T}}_{RL/LR}\hat{\boldsymbol{g}}_{L/R}^{}(x_{c}, x_{c})\hat{\boldsymbol{T}}_{LR/RL})^{-1} \\
\hat{\boldsymbol{g}}_{R/L}^{}(x_{c}, x_{j}), \qquad (4-12)$$

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{LL/RR}^{>/<}(x_{i}, x_{i}) = \hat{\boldsymbol{g}}_{L/R}^{>/<}(x_{i}, x_{i}) + \hat{\boldsymbol{g}}_{L/R}^{}(x_{i}, x_{c})\hat{\boldsymbol{T}}_{LR/RL} \\
(1 - \hat{\boldsymbol{g}}_{R/L}^{>/<}(x_{c}, x_{c})\hat{\boldsymbol{T}}_{RL/LR}\hat{\boldsymbol{g}}_{L/R}^{}(x_{c}, x_{c})\hat{\boldsymbol{T}}_{LR/RL})^{-1} \\
\hat{\boldsymbol{g}}_{R/L}^{>/<}(x_{c}, x_{c})\hat{\boldsymbol{T}}_{RL/LR}\hat{\boldsymbol{g}}_{L/R}^{>/<}(x_{c}, x_{i}). \qquad (4-13)$$

Donde las matrices de acople sufren un cambio respecto a las utilizadas para cortar. Para la

unión se toma el átomo B de la derecha y se acopla con el átomo A de la región izquierda, con lo cual tenemos que la matriz \hat{T}_{RL} de acople es

$$\hat{T}_{RL} = \begin{pmatrix} 0 & t_0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{4-14}$$

siendo t_0 un parámetro, en general complejo, recordando que \hat{T}_{LR} es la transpuesta conjugada de \hat{T}_{RL} .

La función de Green del bloque np que se utiliza para encontrar la función de Green de la superred, se denotará en minúsculas. Para construir la función de la superred de grafeno es suficiente tener las funciones de Green del bloque np que van entre los extremos del bloque, para las cuales tenemos

$$\hat{\boldsymbol{g}}_{LR}^{<}(x_b, x_a) = \frac{-i}{\hbar v_F} \frac{t e^{ik(W_a + W_b)}}{D_L D_R + t^2 K_R K_L} \begin{pmatrix} 0 & 0\\ (1 + e^{-2i\alpha_R})(1 + e^{-2i\alpha_L}) & 0 \end{pmatrix},$$
(4-15)

$$\hat{\boldsymbol{g}}_{RL}^{<}(x_a, x_b) = \frac{-i}{\hbar v_F} \frac{-t e^{ik(W_a + W_b)}}{D_L D_R + t^2 K_R K_L} \begin{pmatrix} 0 & (1 + e^{-2i\alpha_R}) (1 + e^{-2i\alpha_L}) \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$
(4-16)

 \cos

$$D_{L/R} = \left(e^{-2i\alpha_{L/R}} e^{2ik(W_{n/p})} + 1 \right),$$
(4-17)

$$K_{L/R} = e^{i\alpha_{L/R}} \left(1 - e^{2ikW_{n/p}} \right),$$
(4-18)

$$t = \frac{|t_0|}{\hbar v_F}.$$
(4-19)

Para las funciones de Green que van de un borde al mismo borde se obtiene

$$\hat{\boldsymbol{g}}_{LL}^{>/<}(x_b, x_b) = \hat{\boldsymbol{g}}_{L}^{>/<}(x_b, x_b) - \frac{i}{\hbar v D_L} \frac{e^{-i\alpha_R} e^{i2kW_n} t^2}{D_L D_R + t^2 K_R K_L} \begin{pmatrix} (1 + e^{-2i\alpha_L})^2 (1 - e^{2ikW_p}) & 0\\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$
(4-20)

$$\hat{\boldsymbol{g}}_{RR}^{>/<}(x_a, x_a) = \hat{\boldsymbol{g}}_{R}^{>/<}(x_a, x_a) - \frac{i}{\hbar v_F D_R} \frac{e^{-i\alpha_L} e^{i2kW_P} t^2}{D_L D_R + t^2 K_R K_L} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & (1 + e^{-2i\alpha_R})^2 (1 - e^{i2kW_n}) \end{pmatrix},$$
(4-21)

donde $\hat{\boldsymbol{g}}_{L}^{>/<}(x_{b}, x_{b})$ y $\hat{\boldsymbol{g}}_{R}^{>/<}(x_{a}, x_{a})$ son las funciones de Green de la nanocinta de grafeno (4-9) y (4-10) para la película de grafeno dopada n y p, respectivamente.

Estas funciones de Green poseen como estructura

$$\hat{\boldsymbol{g}}_{LR}^{<}(x_b, x_a) = \frac{-i}{\hbar v_F} \begin{pmatrix} 0 & -E_L \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad (4-22)$$

$$\hat{\boldsymbol{g}}_{RL}^{>}(x_a, x_b) = \frac{-i}{\hbar v_F} \begin{pmatrix} 0 & 0\\ E_L & 0 \end{pmatrix}, \qquad (4-23)$$

$$\hat{\boldsymbol{g}}_{LL}^{<}(x_b, x_b) = \frac{-i}{\hbar v_F} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 0 & -C_L \end{pmatrix}, \qquad (4-24)$$

$$\hat{\boldsymbol{g}}_{RR}^{>}(x_a, x_a) = \frac{-i}{\hbar v_F} \begin{pmatrix} -C_R & 0\\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad (4-25)$$

 con

$$E_L = \frac{t e^{ik(W_a + W_b)}}{D_L D_R + t^2 K_R K_L},$$
(4-26)

$$C_{L/R} = \frac{e^{i\alpha_{L/R}} \left(1 - e^{i2kW_{a/b}}\right)}{D_{L/R}} + \frac{ie^{-i\alpha_{L/R}} e^{i2kW_{a/b}} \left(1 + e^{-2i\alpha_{L/R}}\right) \left(1 - e^{i2kW_{b/a}}\right)}{e^{ik(W_a + W_b)} D_{L/R} \left(1 + e^{-2i\alpha_{R/L}}\right)} E_{L/R}.$$
 (4-27)

Las funciones de Green encontradas para el bloque np serán usadas para construir superredes finitas y semi-infinitas, las cuales serán acopladas a superconductores o en lentes de Veselago.

4.2.1. Construcción de la función de Green para una superred de grafeno finita

Para la construcción de la superred finita partimos de un bloque fundamental np el cual se repite N veces. Para comenzar el proceso se realiza la juntura de dos bloques, para ello se usa el mismo proceso que se utilizó para unir el bloque np pero cambiando las nanocintas de grafeno por los bloques. Para la unión de dos bloques se obtienen las siguientes funciones de Green

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{LR}^{<}(x_b, x_a) = \frac{-i}{\hbar v_F} \begin{pmatrix} 0 & -F \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad (4-28)$$

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{RL}^{>}(x_a, x_b) = \frac{-i}{\hbar v_F} \begin{pmatrix} 0 & 0\\ F & 0 \end{pmatrix}, \qquad (4-29)$$

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{RR}^{<}(x_b, x_b) = \frac{-i}{\hbar v_F} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 0 & -J_R \end{pmatrix}, \qquad (4-30)$$

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{LL}^{>}(x_a, x_a) = \frac{-i}{\hbar v_F} \begin{pmatrix} -J_L & 0\\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad (4-31)$$

 con

$$F = \frac{ie^{ik(W_n + W_p)} \left(1 + e^{-2i\alpha_R}\right) \left(1 + e^{-2i\alpha_L}\right)}{D_L D_R + t^2 K_R K_L},$$
(4-32)

$$J_{L/R} = \frac{e^{i\alpha_{L/R}} \left(1 - e^{i2kW_{n/p}}\right)}{D_{L/R}} + \frac{e^{-i\alpha_{L/R}} e^{i2kW_{n/p}t^2} \left(1 + e^{-2i\alpha_{L/R}}\right)^2 \left(1 - e^{i2kW_{p/n}}\right)}{D_{L/R} \left(D_L D_R + t^2 K_R K_L\right)}, \quad (4-33)$$

$$(4-34)$$

Al unir dos bloques se aprecia que la estructura de la función de Green es igual a la de un bloque np, pero con diferentes componentes en las matrices. Esto permite usar un método iterativo para encontrar la función de Green de una superred de N bloques, utilizando la función de Green de N-1 bloques y por último acoplándola con un bloque np, obteniendo

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{sl}^{<}(a',b') = \frac{-i}{\hbar v_F} \begin{pmatrix} 0 & -F_{sl,N} \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$
(4-35)

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{sl}^{>}(b',a') = \frac{-i}{\hbar v_F} \begin{pmatrix} 0 & 0\\ F_{sl,N} & 0 \end{pmatrix}, \qquad (4-36)$$

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{R,sl}^{<}(a',a') = \frac{-i}{\hbar v_F} \begin{pmatrix} 0 & -1\\ 0 & -P_{R,sl,N} \end{pmatrix}, \qquad (4-37)$$

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{L}^{>}(b',b') = \frac{-i}{\hbar v_{F}} \begin{pmatrix} -P_{L,sl,N} & 0\\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$
(4-38)

 con

$$F_{sl,N} = \frac{itF_{sL,N-1}F_R}{1+t^2 \left(J_{sl,N-1}G_R\right)},\tag{4-39}$$

$$P_{L,sl,N} = G_{sL,N-1} + \frac{t^2 (F_{sl,N-1})^2 J_{sl,N-1}}{1 + t^2 (P_{sl,N-1} J_R)},$$
(4-40)

$$P_{R,sl,N} = G_R + \frac{t^2 (F_R)^2 J_R}{1 + t^2 (P_{sL,N-1}J_R)}.$$
(4-41)

El ancho de la superred de grafeno está dado por

$$W_{SL} = N(W_n + W_p), \tag{4-42}$$

donde N es el número de bloques np. El cálculo detallado de la función de Green de la superred finita se encuentra en el Anexo C.

4.2.2. Superred de grafeno semi-infinita

En esta sección vamos a obtener la función de Green de una superred de grafeno semi-infinita. Para ello partimos de una superred semi-infinita a la cual se agrega un bloque np adicional, con lo que se convierte en la misma superred semi-infinita corrida (fig. **4-6**), donde agregando un bloque nuevo np se vuelve a obtener un sistema semi-infinito.



Figura 4-6: Diagrama de unión de un bloque np de ancho L a una superred semi-infinita que va desde menos infinito hasta x_b . Un bloque adicional no altera el número de bloques npde un grafeno semi-infinito, por lo que una juntura de una superred con un bloque adicional vuelve a ser una superred semi-infinita que se extiende ahora hasta $x_a = x_b + L$.

Con esta idea resolvemos la ecuación de Dyson cuando la estructura grafeno semi-infinita en el punto x_b se agrega en el borde un bloque np

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{SL}^{<}(x_{b}, x_{b}) = \hat{\boldsymbol{G}}_{RR}^{<}(x_{b}, x_{b}) + \hat{\boldsymbol{G}}_{RL}^{>}(x_{b}, x_{a})\hat{\boldsymbol{T}}_{RL}(1 - \hat{\boldsymbol{g}}_{SL}^{<}(x_{a}, x_{a})\hat{\boldsymbol{T}}_{LR}\hat{\boldsymbol{G}}_{LL}^{>}(x_{a}, x_{a})\hat{\boldsymbol{T}}_{RL})^{-1} \\ \hat{\boldsymbol{g}}_{SL}^{<}(x_{a}, x_{a})\hat{\boldsymbol{T}}_{LR}\hat{\boldsymbol{G}}_{LR}^{<}(x_{a}, x_{b}),$$

$$(4-43)$$

donde $\hat{\boldsymbol{G}}_{ij}^{<}(x_m, x_n,)$ es dada por la función de Green del bloque np según las ecuaciones (4-22), (4-23), (4-24) y (4-25). Por su parte, $\hat{\boldsymbol{G}}_{SL}^{<}(x_b, x_b)$ es la función de Green de la superred semi-infinita perturbada con el bloque np en el extremo y $\hat{\boldsymbol{g}}_{SL}^{<}(x_a, x_a)$ la función de Green de una superred semi-infinita sin el bloque np, con $x_a = x_b + L$. Al agregar el bloque np no se afecta la función de Green en el extremo, por lo que obtenemos que la función de Green sin perturbar en el borde debe ser igual a la función de Green sin perturbar en el mismo borde, es decir,

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{SL}^{>}(x_b, x_b) = \hat{\boldsymbol{g}}_{SL}^{>}(x_a, x_a) = \frac{-i}{\hbar v_F} \begin{pmatrix} G_{AA} & G_{AB} \\ G_{BA} & G_{BB} \end{pmatrix},$$
(4-44)

donde G_{AA} , G_{AB} , G_{BA} y G_{BB} son los elementos de matriz a determinar de la superred semi-infinita. Así, al reemplazar la función de Green del bloque np (4-23), (4-22), (4-25) y (4-24) y la relación para la función de Green de la superred semi-infinita (4-44) en la ecuación de Dyson (4-43), se obtiene la siguiente ecuación

$$\begin{pmatrix} G_{AA} & G_{AB} \\ G_{BA} & G_{BB} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 0 & C_R + \frac{t_1^2 E_L^2 G_{BB}}{1 + t_1^2 C_L G_{BB}} \end{pmatrix}.$$
(4-45)

con E_L , $C_{L/R}$ dados por las ecuaciones (4-26) y (4-27), respectivamente. Al solucionar la ecuación (4-45) obtenemos

$$G_{AA} = G_{BA} = 0,$$
 (4-46)

$$G_{AB} = -1, (4-47)$$

$$G_{BB} = -\frac{\left(1 - t_1^2 C_R C_L - t_1^2 E^2\right) \pm \sqrt{\left(1 - t_1^2 C_R C_L - t_1^2 E_L^2\right)^2 + 4t_1^2 C_R C_L}}{2t_1^2 C_L}.$$
(4-48)

De las dos raíces, solo una es consistente con la función de Green de la superred, de la cual obtenemos la función de Green de la superred infinita como

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{SL}^{>}(x_b, x_b) = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 0 & -\frac{\left(1 + t_1^2 C_R C_L + t_1^2 E_L^2\right) + \sqrt{\left(1 + t_1^2 C_R C_L + t^2 E_L^2\right)^2 + 4t^2 C_R C_L}}{2t^2 C_L} \end{pmatrix}.$$
(4-49)

La grilla de potencial "gate" usada para obtener la superred es descrita como

$$V(x) = \left\{ \begin{array}{l} E_F + U_n, \quad x \in [mL, mL - W_n] \\ E_F - U_p, \quad x \in [mL - W_n, (m-1)L] \end{array} \right\},$$
(4-50)

donde U_n y U_p son el valor necesario para obtener la energía de Fermi del grafeno dopado. Para la superred de grafeno se define la energía de Fermi promedio de un bloque np, en la forma

$$E_F^*(x) = \frac{1}{L} \int_{mL-W_n}^{mL} \left(E_F + U_n \right) dx + \frac{1}{L} \int_{(m-1)L}^{mL-W_n} \left(E_F - U_p \right) dx, \tag{4-51}$$

de la cual obtenemos que

$$E_F^*(x) = \frac{W_n}{L} \left(E_F + U_n \right) + \frac{W_p}{L} \left(E_F - U_p \right).$$
(4-52)

También es útil definir la relación entre anchos de un bloque np como

$$\alpha = \frac{W_n}{W_p},\tag{4-53}$$

Ahora, para las energías de Fermi notamos que los aportes importantes son las variaciones respecto a la energía de Fermi E_F , con lo cual la relación de voltajes está dada por

$$\beta = \frac{U_n}{U_p}.\tag{4-54}$$

Con estas definiciones se puede observar que para la superred se obtiene un potencial de la forma

$$V(x) = \begin{cases} E_F^* + \omega \frac{1+\beta}{\alpha\beta-1}, & x \in [mL, mL - W_n] \\ E_F^* - \omega \frac{\alpha+\alpha\beta}{\alpha\beta-1}, & x \in [mL - W_n, (m-1)L] \end{cases}$$
(4-55)



Figura 4-7: Diagrama de la superred semi-infinita acoplada con un superconductor. La superred tiene energía de Fermi central E_F .

En la cual *m* es un número entero mayor que cero y $\omega = U_p(\alpha\beta - 1)/(1 + \alpha)$. Cuando $W_p = 0$ no existe superred de grafeno, y cuando $U_p = 0$ el potencial se reduce a

$$V(x) = \begin{cases} E_F^* + U_n \frac{1}{\alpha + 1}, & x \in [mL, mL - W_n] \\ E_F^* - U_n \frac{\alpha}{\alpha + 1}, & x \in [mL - W_n, (m - 1)L] \end{cases}$$
(4-56)

Los parámetros α y β determinan asimetrías en anchos y en el potencial periódico del sistema, respectivamente. Para una red sin asimetrías estos parámetros valen uno, por el contrario, tenemos asimetrías cuando estos toman valores mayores o menores que uno. Para el caso simétrico se aprecia que la energía promedio de Fermi es

$$E_F^*(x) = E_F,\tag{4-57}$$

y el potencial queda dado por

$$V(x) = \begin{cases} E_F + U_n, & x \in [mL, mL - W_n] \\ E_F - U_n, & x \in [mL - W_n, (m-1)L] \end{cases}.$$
(4-58)

En estos sistemas se ha considerado que $U_n, U_p > 0$, pero los resultados no dependen de tener una superred np o una pn.

4.3. Superred de grafeno acoplada a un superconductor

Con los resultados anteriores analizamos una juntura de una superred de grafeno semi-infinita acoplada con un superconductor, sistema mostrado en la fig. **4-7**.

Para conformar la juntura se utiliza la función de Green 2-84 para el superconductor, las funciones de Green de la sección 4.2 y la ecuación de Dyson 4-12. Vamos a encontrar numéricamente la función de Green de la juntura y encontraremos la conductancia diferencial usando la ecuación (2-119).

El primer sistema para analizar es el conformado por una superred ideal simétrica, donde $W_n = W_p = L/2$ y $U_n = U_p = U$, cuando $E_F = 0$. Para este sistema se puede renormalizar el potencial U como $u = UL/\hbar v_F$. De allí se obtiene que los puntos de Dirac se abren cuando $u = 2n\pi$, con un entero positivo n [54, 55]. El número de nuevos puntos de Dirac no es afectado por la juntura con el superconductor, pues, como lo muestra la fig.4-8b, el primer par de nuevos puntos de Dirac se abren cuando $u \approx 2\pi$, y los segundos cuando $u \approx 4\pi$. La densidad espectral $\sigma(q, E)$ obtenida en la región de la superred cerca del superconductor es característica de la superred con su forma de menorá. Aún con la ausencia del potencial de superred, se observa el punto de Dirac original (fig.4-8b), centrado en q = 0, se mantiene para energías por debajo del potencial superconductor [27,73]. El potencial de la superred cambia la velocidad de Fermi, de forma que ensancha el espectro cónico del grafeno, incluso antes de crear un nuevo punto de Dirac. Cuando es acoplado el superconductor es importante que la densidad espectral de estados por debajo de la energía de la brecha superconductora sea más alta, comparada con el caso no superconductor cuando $\Delta = 0$, en los cuales pueden observarse cambios bruscos de intensidad (representados por un cambio de color) para energías por debajo y encima de la brecha en la fig.4-8a. Finalmente, conforme u se incrementa más allá de los valores críticos de la creación de nuevos puntos [paneles A-C en la fig.4-8a], un nuevo punto de Dirac aparece. El punto original de Dirac y el nuevo punto creado están desconectados cuando la energía es cero, pero están mezclados para valores finitos de energía sobre un valor característico ϵ , indicado por las flechas blancas en la fig.**4-8**a. El parámetro ϵ es finito para valores de $u > 2\pi$ y se incrementa con u hasta que se aproxima a Δ y aparece un nuevo punto de Dirac en $u \approx 4\pi$. En este valor crítico, ϵ vuelve a ser cero y vuelve a ser finito nuevamente para $u > 4\pi$. Por lo tanto el parámetro de energía ϵ es una medida cualitativa de la separación entre el punto de Dirac central y cada nuevo punto de Dirac.



Figura 4-8: Superred de grafeno simétrica sin dopar. a) Conductancia diferencial espectral para diferentes valores del potencial de la superred (A) $u/(2\pi) = 1.03$, (B) 1.11, (C) 1.19, (D) 2.15 y (E) 2.23. b) Mapa de la conductancia diferencial espectral a energía cero como función de $u \neq \bar{q} = q/q_{max}$, con $\hbar v_F q_{max} \cong 29\Delta$. c) Conductancia diferencial como función de la energía para diferentes valores de u usados en (a). El parámetro ϵ indica la separación del nuevo par de puntos de Dirac del punto de Dirac central. d) a diferencial como función de u para diferentes energías. e) Estimación del valor de ϵ de la segunda derivada de la corriente con respecto al voltaje. Para todos los casos, $E_F = 0 \neq L = \xi/2$, con ξ la longitud de coherencia del superconductor.

Los tres efectos mencionados, (1) la formación de nuevos puntos de Dirac cuando $u \approx 2n\pi$, (2) el incremento en la densidad espectral para valores por debajo de la brecha superconductora, y (3) la separación entre los nuevos puntos de Dirac caracterizada por el parámetro ϵ , pueden ser observados en la conductancia diferencial normalizada σ . Las fig. **4-8**c y fig. **4-8**d muestran respectivamente la conductancia diferencial de la juntura SL-S como una función de la energía de excitación y la fortaleza de la superred. En la ausencia del potencial de superred y cuando $E_{FS} = 0$, se recuperan los resultados dados por [28], donde la reflexión de Andreev inter-banda es dominante (línea gris con u = 0). Para $u \neq 0$, la conductancia diferencial para un valor de energía de cero se mantiene fija a $2\sigma_0$ con σ_0 la normalización usada en [28], excepto en los valores críticos donde se forman los nuevos puntos de Dirac. Como la conductancia del estado sin superred σ_0 tiene en cuenta la contribución de los tres canales, el aumento de la conductancia se debe a reflexiones de Andreev que toman lugar en el punto de Dirac original y los nuevos puntos de Dirac.

En contraste, para energías finitas se observan dos efectos relacionados a la presencia de la

superred. Primero, la conductancia muestra un pico o una depresión para energías iguales al parámetro ϵ [ver flechas en la fig. **4-8**c]. Segundo, la superred incrementa la conductancia para energías por debajo de la brecha ($E \leq \Delta$), lo cual es una consecuencia directa del incremento de la densidad espectral para energías por debajo de la brecha superconductora. Lo primero está asociado con las diferentes contribuciones de reflexiones de Andreev. Para pequeños valores de ϵ , la conductancia normalizada muestra un pico, indicando que los procesos inter-banda se vuelven dominantes cuando los nuevos puntos de Dirac son creados. Cuando ϵ se acerca a Δ , el pico en la conductancia se vuelve una depresión ya que los puntos de Dirac están claramente separados, esto produce más retro-dispersiones para valores de q que estén entre el punto de Dirac central y los nuevos puntos de Dirac. En ambos casos, el parámetro ϵ , que indica la separación entre los nuevos puntos de Dirac y el central, es accesible a través de la conductancia diferencial. Tomando la segunda derivada de la conductancia diferencial respecto al voltaje, es decir, $\partial^2 I/\partial V^2$, los pequeños cambios mostrados en la fig. **4-8**c.

Los resultados expuestos anteriormente muestran que cuando la energía es cero la superred puede crear nuevos puntos de Dirac aún cuando se encuentra acoplada a un superconductor. Siempre que el potencial U de la superred sea comparable con el potencial de pares del superconductor, la conductancia diferencial es completamente dominada por las reflexiones de Andreev inter-banda y se fija para valores de $2\sigma_0$. Para energías finitas, la conductancia normalizada muestra cambios bruscos cuando $E = \epsilon$, lo cual determina la energía de separación entre los puntos de Dirac observados en la figura que muestra la relación de dispersión. La conductancia diferencial de una juntura SL-S y su derivada entonces son una herramienta para estudiar la creación de nuevos puntos de Dirac.

El siguiente paso es considerar cuando $E_F^* \neq 0$ y se mantiene la simetría de la superred. Al dopar la superred uniformemente se cambia el lugar donde aparecen los puntos de Dirac como se observa en la fig. **4-9**a, pero no cambia la condición de su aparición, $u = 2n\pi$. El corrimiento en la posición de los nuevos puntos de Dirac a energía finita resulta en una supresión de la conductancia como se observa en fig. **4-9**b y fig. **4-9**c, lo cual se debe a la desaparición de la densidad de estados para las excitaciones tipo hueco [27,28].

Este resultado se debe a que el grafeno es un semiconductor de brecha de energía cero, la cual no afecta la aparición de nuevos puntos de Dirac, en contraste con el caso sin dopar cuando $E_F = 0$ (comparar figuras 4-9c y 4-8d). Dado que los nuevos puntos de Dirac se abren ahora en la región completamente positiva (si E > 0), el rango de energías donde el superconductor muestra sus efectos respecto al parámetro ϵ se duplica respecto a la región en energías para $E_F = 0$. Un análisis de la derivada de la conductancia permite estimar el valor de ϵ correspondiente al cambio en la pendiente de la conductancia. El dopaje positivo de la capa de grafeno, en el régimen donde las reflexiones de Andreev inter-banda son incrementadas, ayu-



da a visualizar la formación de los nuevos puntos de Dirac usando la conductancia normalizada.

Figura 4-9: Superred de grafeno simétrica dopada. a) Conductancia diferencial espectral con $E_F = 0.5\Delta$ para diferentes valores de $u/(2\pi)$ (A)= 1.03, (B) 1.11 y (C) 1.19. En todos los mapas $\bar{q} = q/q_{max}$, con $\hbar v_F q_{max} \approx 16\Delta$. b) Conductancia diferencial en función de la energía para diferentes valores de u en a). Las flechas indican el parámetro ϵ . c) Conductancia diferencial en función de u para diferentes energías. En todos los casos $L = \xi/2$.

Para las redes asimétricas se usa la red dopada donde $E_F^* = 0.5\Delta$ energía que coincide con el valor para el cual aparece el punto de Dirac central. El primer caso asimétrico es cuando $\alpha = 1$ y $\beta \neq 1$ el cual corresponde a anchos simétricos y alturas de barrera asimétricas de la fig. **4-7**. Para este caso el sistema queda descrito como un sistema simétrico donde el potencial periódico está dado por $U = E_F^* \pm \langle V \rangle \operatorname{con} \langle V \rangle = U(1 + \beta)/2$, observado en la ecuación 4-56. El efecto neto de la asimetría es mover la energía de Fermi a E_F^* , donde el punto original de Dirac y los nuevos puntos de Dirac aparecen (fig. **4-10**a), para la cual también se presenta el caso simétrico de la fig. **4-9**b (línea azul). Cambiando el valor de β , la conductancia muestra el mínimo a diferentes energías de inyección, mientras estas se encuentren por debajo de la brecha superconductora, siempre y cuando $E_F^* < \Delta$ (línea verde). El dopaje E_F^* del grafeno provee un parámetro experimental controlable que puede rectificar la asimetría en las alturas de barreras junto con su valor.



Figura 4-10: Superred asimétrica caracterizada por los parámetros α y β , definidos en el texto. a) Conductancia diferencial cuando se tiene asimetrías en el potencial "gate", parámetro β , cuando $\alpha = 1$ y $u/(2\pi) = 1.11$, para diferentes valores de E_F y β . Para las líneas punteadas se tiene que $E_F = \Delta/2$, y para las líneas solidas $E_F = 3\Delta/2$. b-c) para los casos asimétricos en anchos, parámetro α de las láminas de grafeno p y n, siendo b) la conductancia diferencial espectral y c) la conductancia diferencial para valores de $\beta = 1$, $u/(2\pi) = 1.11$, y diferentes valores de α ; tanto en b) como en c) se ha ajustado la energía de Fermi uniforme E_F para que se tenga que $E_F^* = 0.5\Delta$. Para todas las figuras $L = \xi/2$ y $\bar{q} = q/q_{max}$ con $\hbar v_F q_{max} \approx 15\Delta$ para los mapas.

El último caso corresponde a una red asimétrica en anchos, $\alpha \neq 1$, en donde la posición del punto de Dirac original sigue estando en E_F^* , pero los nuevos puntos de Dirac aparecen en diferentes energías. Por ejemplo, el dopaje real de los tres paneles de la fig. **4-10**a ha sido ajustado de tal manera que todos los casos tienen $E_F^* = \Delta/2$. Sin embargo, el ancho de la película de grafeno dopada tipo n es mayor que el de la película de grafeno dopada tipo p ($\alpha > 1$), mientras que para otro panel es la nanocinta de grafeno dopada tipo p la que es más pequeña ($\alpha < 1$). Como resultado, los nuevos puntos de Dirac aparecen para energías mayores o menores del punto de Dirac original ubicado en la energía de Fermi E_F^* . En el panel derecho de la fig. **4-10**b, la superred de grafeno es tan asimétrica que los nuevos puntos de Dirac se han unido nuevamente al punto de Dirac original, recobrando el resultado para el grafeno con alto dopaje.

Para el caso asimétrico en anchos (α diferente de uno), se obtienen cambios drásticos en la conductancia, como se observa en la fig. **4-10**c, donde la línea azul que corresponde al caso simétrico con $E_F^* = \Delta/2$ (línea azul) se ha usado como referencia. Para el caso asimétrico en anchos se comparan los casos mostrados en **4-10**b, donde se escogió que tengan la misma energía de Fermi promedio $E_F^* = \Delta/2$. Cuando $\alpha < 1$ (línea verde), los nuevos puntos de Dirac aparecen para energías mayores a la energía de Fermi promedio y la conductancia diferencial muestra una región mínima extendida por encima de la energía donde aparece el punto de Dirac original. Para el caso contrario, si $\alpha > 1$ (línea roja), los nuevos puntos de Dirac aparecen para energías menores a la energía de Fermi promedio, lo que se puede ver claramente como una distorsión en la conductancia para energías por debajo del punto de Dirac original. El caso de alta asimetría (línea gris) aproxima la conductancia de una lámina de grafeno con alta presencia de reflexiones de Andreev intra-banda [28].

Una red asimétrica en el parámetro β solo tiene un efecto de normalización de E_F (fig. 4-10a), esto se explica recordando que el sistema está definido por las energías de Fermi de la superred y los anchos de estas y no por las alturas relativas a E_F , con lo cual es mejor considerar los valores definidos anteriormente. Caso distinto cuando los anchos son los asimétricos. Como se había mencionado, el punto de Dirac central se ubica en la energía de Fermi promedio. Los nuevos puntos de Dirac necesitan que aparezca la condición $u = 2n\pi$ para cada elemento de la superred por separado, no en el bloque np. Cuando estas no lo cumplen, los nuevos puntos de Dirac se desplazan en energía hacia arriba o abajo dependiendo de cuál es menos ancho, si el bloque p (arriba) o el bloque n (abajo), como se observa en la fig. 4-10b y c. Como se mencionó inicialmente, cuando uno de los anchos es cero obtenemos una lámina de grafeno. Con todo lo anterior se hace el mapa de todos los casos con asimetrías de α (fig. 4-11), donde se observa cómo, al disminuir el ancho del bloque p, los nuevos puntos de Dirac se van creando cada vez por encima de la energía de Fermi promedio, adicionalmente se va acercando al punto de Dirac central. Para cierto valor del ancho del bloque p alcanza el máximo desplazamiento en energía donde aparece para disminuir y luego unirse al punto de



Dirac central. Finalmente, conforme se incrementa el valor de *alpha* se obtiene que el sistema tiende al de una lámina de grafeno con un superconductor.

Figura 4-11: Mapas espectrales de la conductancia diferencial en función del vector de onda q para diferentes valores de asimetrías en sus anchos, parámetro α , con $E_F^* = 0.5$ y $\beta = 1$.

Los resultados muestran la necesidad de superredes con anchos regulares, mientras las asimetrías en los potenciales "gate" pueden ser compensadas por un cambio uniforme en el nivel de dopaje de la lámina de grafeno.

4.3.1. Superred finita acoplada con el grafeno

La aparición de los nuevos puntos de Dirac y su separación del punto de Dirac original en una superred semi-infinita puede ser caracterizada por el parámetro ϵ . Ahora se analiza el impacto de una superred de grafeno de longitud finita sobre la conductancia diferencial. El tamaño finito en la dirección vertical, paralela a las interfases, puede introducir una estructura adicional debido a la cuantización del momento paralelo. Por simplicidad, se considera solamente el límite de ancho-infinito, donde el tamaño vertical es mucho mayor que la longitud horizontal. La superred finita es conectada en (x = 0) a un superconductor y en el otro lado, (x = -NL), a un reservorio no superconductor, el cual es modelado como una lámina de grafeno altamente dopada [27,73,107]. Nuevamente L es el tamaño del bloque np, y N es el número total de bloques np de la superred. Por simplicidad se consideran solamente junturas transparentes entre la superred finita y el superconductor y entre el electrodo y la superred, solamente se consideran los casos de superredes simétricas.



Figura 4-12: Superred de grafeno finita. a) Conductancia diferencial espectral para N = 50, con $E_F = 0$ (izquierda) y $E_F = \Delta/2$ (derecha). En ambos casos $\bar{q} = q/q_{max}$ con $\hbar v_F q_{max} \approx$ 14 Δ . b-c) Conductancia diferencial para diferentes números de bloques np de la superred donde para b) se ha usado que la $E_F = 0$ y para c) $E = \Delta/2$. La línea gris tanto en b) como c) es la superred semi-infinita encontrada en las fig. 4-8 y fig. 4-9. En todos los casos $L = \xi/2$.

El hecho de que la superred del medio sea finita resulta en la división del punto de Dirac

continuo en bandas de energía (fig. 4-12a). En la superred, la condición para la aparición de nuevos puntos de Dirac, $u = 2n\pi$, es mantenida para pocos bloques np. El patrón menorá obtenido para la superred finita es similar al mostrado en la fig. 4-9b, aunque estas no tengan muchos bloques np y pese a que las resonancias en las posiciones de los puntos de Dirac son ensanchadas y no queden bien definidas. El ensanchamiento de la relación de dispersión para las energías por debajo de la brecha superconductora es mostrada en la fig. 4-12a para la superred sin dopar (panel izquierdo) y el caso dopado (panel derecho). La forma borrosa de los nuevos puntos de Dirac es el resultado de un incremento de la probabilidad de que se presenten retro-dispersiones. Se muestra el efecto del tamaño de la superred finita sobre la conductancia diferencial en las figuras fig. 4-12b y 4-12c para $E_F = 0$ y $E_F = \Delta/2$, respectivamente. Las líneas grises muestran el caso semi-infinito ya analizado con los mismos parámetros. En esta se puede confirmar la fortaleza del efecto de la superred sobre la conductancia diferencial para valores diferentes de energía de Fermi E_F . Cuando $E_F = 0$, el caso semi-infinito es cualitativamente reproducido para valores de $N \ge 50$, con $L = \xi$, sin embargo, para estimar el valor de 2ϵ para la superred dopada, $E_F = \Delta/2$, solo es necesario pocos bloques $N \ge 20$ son suficientes.

4.4. Lente de Veselago con grafeno y superredes

En el año 2007 fueron propuestas junturas de grafeno np como lentes de Veselago, mostrando un índice de refracción ideal de -1 [38] y logrando su confirmación experimental posteriormente [108, 109]. Los puntos de enfoque y otras propiedades de estas lentes se han estudiado usando trayectorias semi-clásicas de la teoría de rayos de la óptica, explicando fenómenos como el efecto Hall [36,37]. El estudio de cómo mejorar el proceso de enfoque y su uso ha motivado la realización de modificaciones a las lentes de Veselago, como el uso de superconductores para observar reflexiones de Andreev no locales en lentes de Veselago pnp [110], o usando materiales ferromagnéticos con grafeno [111] en los cuales los procesos de focalización son dependientes del espín. También se ha estudiado el efecto de las interfases sobre el enfoque, encontrándose que, entre más abrupta sea la interfase np, es más fácil enfocar la corriente electrónica o cómo la presencia de impurezas afectan el punto de enfoque [37,40]. En esta sección se estudian las lentes de Veselago con un superconductor con el propósito de observar cómo se afectan los procesos de tunelamiento de electrones y reflexiones de Andreev cruzadas. Vamos a analizar los efectos sobre los puntos focales cuando las interfases no son perfectas o nos alejamos de la aproximación de Andreev. Finalmente, se introduce superredes como un colimador con el propósito de separar la señal de tunelamiento electrónico de las reflexiones de Andreev no locales.

Al aplicar las condiciones de frontera en la interfase de la lente de Veselago con grafeno

np, se puede obtener la ley de Snell, $n_r = -k_n/k_p$, este índice corresponde a la región donde se encuentra el electrón. Los vectores de onda para cada región se pueden escribir como $\mathbf{k}_n = (k_n \cos \phi_n, k_n \sin \phi)$ y $\mathbf{k}_p = (k_n \cos \phi_p, k_n \sin \phi_p)$. El parámetro $\phi_{n/p}$ es el ángulo de la velocidad de grupo con respecto a la normal en la banda de conducción p y la de valencia n, respectivamente. El índice de refracción n_r es igual a -1 si cada región tiene una energía de Fermi opuesta, $E_{Fp} = -E_{Fn}$, dado que en esas condiciones las magnitudes de los vectores de onda son iguales, $k_n = k_p$. El cambio de momento permite enfocar los electrones como se muestra en [38] y en la fig. **4-13**, donde con las trayectorias semi-clásicas se puede encontrar el punto de enfoque, el cual coincide con el que se encuentra con la óptica geométrica.



Figura 4-13: Proceso de enfoque de una lente de grafeno np, el punto de enfoque está a la misma distancia de inyección y se encuentra usando las trayectorias semi-clásicas del electrón. Tomada de [38].

Cuando la relación entre las energías de Fermi es diferente de $E_{Fp} = -E_{Fn}$, el índice de refracción tiene un valor distinto de -1 y las trayectorias son modificadas, lo cual resulta en la aparición de trayectorias cáusticas. En este caso, una aberración en el punto focal es observada; un efecto de esto también puede verse como un máximo en el mapa de la corriente eléctrica. En el trabajo de Cheianov [38] se consideran algunos efectos que pueden causar aberraciones en los puntos focales, como la inclusión de una pequeña isla de bicapa de grafeno o la presencia de un potencial debido a la carga ubicada en una distancia larga después de la interfase, con la intención de visualizar la fuerza de la focalización de los electrones en un punto específico del espacio. En los casos considerados, el punto focal persiste con una disminución significativa en la intensidad del máximo de la corriente. Dado que el efecto de la focalización es robusto, se ha propuesto la construcción de lentes de Veselago basadas en junturas pnp y npn para focalizar electrones. Recientemente, se ha mostrado que en las lentes de Veselago pn el punto focal en la corriente eléctrica se puede apreciar hasta en temperaturas cercanas a 60K [108].

Modelos de lentes de Veselago han sido estudiados en sistemas grafeno-superconductor-grafeno con dopaje *pnp* e interfases perfectas [104, 110], encontrando regiones específicas donde los electrones y los huecos son enfocados, las cuales pueden ser establecidas por trayectorias semi-clásicas de las cuasi-partículas. En estos sistemas las reflexiones de Andreev no locales (CAR) son dominantes respecto al proceso de cotunelamiento de los electrones como se muestra en la fig. **4-14**, haciendo posible que el rompimiento de pares de Cooper sea analizado para regiones específicas sobre el eje óptico de la lente. En este trabajo estudiamos estas lentes de Veselago cuando las interfases no son perfectas, buscando observar cómo cambian las intensidades de los coeficientes de transmisión y la conductancia diferencial. Se estudiaran adicionalmente los cambios de la conductancia diferencial cuando las energías de Fermi no son tan grandes respecto al potencial de pares del superconductor, debido a que en este régimen existen cambios en las trayectorias semi-clásicas. Finalmente, se implementarán las superredes de la sección anterior como colimadores para obtener cambios en los puntos focales de la corriente de electrones y huecos, buscando la posibilidad de separar aún más la señal de tunelamiento de electrones de la de los procesos CAR.



Figura 4-14: Diagrama de procesos no locales en junturas grafeno-superconductor grafeno. a) Un electrón puede tunelar el superconductor para transmitirse como un electrón en el grafeno de la derecha, lo que se llama cotunelamiento. b) El electrón puede formar un par de Cooper dentro del superconductor, el cual se logra tomando un electrón del grafeno a la derecha, creando un hueco que se propaga a la derecha de este.



Figura 4-15: Lente de Veselago compuesta por un material superconductor depositado sobre una lámina de grafeno. Hay tres regiones bien definidas, la primera es un grafeno (G₁) semi-infinito, donde los electrones son inyectados, los cuales pasan a la segunda región superconductora (S) donde son dispersados y finalmente son enfocados en la tercera región de grafeno (G₂). La energía de Fermi del superconductor está por encima de los puntos de Dirac y por debajo en los grafenos, siendo un sistema *pnp*. También se consideran dos parámetros de acople, t_1 entre G₁ y S, y t_2 entre S y G₂. El superconductor está entre x = 0 y $x = W_S$, y los electrones son inyectados en x = -d y y = 0.

4.4.1. Lentes de Veselago

La lente de Veselago usando una región superconductora se muestra en la fig. **4-15**, siendo G₁ es el grafeno donde los electrones son inyectados y G₂ es la región donde los electrones y huecos son enfocados. Entre las regiones de grafeno hay una región S donde la superconductividad es inducida por efecto de proximidad, depositando un superconductor sobre una lámina de grafeno entre 0 y W_S . Para ambos, el grafeno y el superconductor, las energías de Fermi han sido ajustadas usando un voltaje "gate", la energía de Fermi para el superconductor es E_{FS} , y para los grafenos \hat{G}_1 y \hat{G}_2 , son E_{FG1} y E_{FG2} , respectivamente. El sistema construido cumple que $E_{FS} = -E_{FG1} = -E_{FG2}$, convirtiendo este sistema en un *pnp*. El parámetro de acople entre la interfase $\hat{G}_1 S$ es t_1 y entre la interfase $S\hat{G}_2$ es t_2 . La transparencia entre las interfases es $\hat{T}_{1(2)} = 4t_{1(2)}^2 / (1 + t_{1(2)}^2)^2 \operatorname{con} t_{1(2)}$ normalizado a $\hbar v_F$, de donde se obtiene transparencia perfecta cuando $t_{1(2)} = 1$.

Ahora vamos a analizar cómo los cambios en el dopaje y el parámetro de acople entre las interfases de la juntura afectan la conductancia diferencial y las probabilidades de transmisión electrón-electrón y electrón-hueco. Para esto, consideremos las diferentes dispersiones en las interfases de la juntura. Un electrón incidente desde la región G₁ hacia al superconductor, desde la banda de valencia, tiene una probabilidad de refractarse en la región superconductora como una cuasi-partícula tipo electrón (q_e) . En este proceso el índice de refracción al cambiar a la región superconductora es de -1, ya que tenemos un cambio de bandas al pasar a la banda de conducción. Ahora, cuando este cuasi-electrón se transmite a la región G_2 tenemos nuevamente un cambio de banda, con lo cual el índice de refracción es nuevamente -1. El electrón que incide desde la región G_1 , también puede ser transmitido al superconductor como una cuasi-partícula tipo hueco (q_h) , en este caso no hay un cambio de la velocidad de grupo, debido al cambio de cuasi-partícula y de banda, y la trayectoria no cambia significativamente; sin embargo, sobre la segunda interfase, un cambio de banda ocurre al transmitirse como un hueco obteniendo un índice de refracción de -1. Ambos procesos conllevan a que electrones y huecos puedan enfocarse en diferentes posiciones espaciales, como es mostrado en la fig. **4-16**, para interfases perfectas.

Para probar que las partículas en este sistema son enfocadas sobre los puntos predichos por las trayectorias semi-clásicas [104] se encuentra la probabilidad de transmisión $\hat{T}_{ee(eh)}$, la cual representa la probabilidad de que un electrón incidente desde la región G₁ sea transmitido como otro electrón (hueco) en la región G₂. El coeficiente \hat{T}_{eh} es conocido como coeficiente de reflexión de Andreev no local [5] y es equivalente a la probabilidad que un par de Cooper que proviene del superconductor presente un desdoblamiento en dos electrones con espín y momento opuesto, uno en la región derecha y otro en la región izquierda [8, 11, 112]. Las probabilidades de transmisión locales son encontradas usando las funciones de Green, como

$$\hat{T}_{ee} \propto \left| \hat{\boldsymbol{G}}_{RL,ee}^{AB}(x,0,x',y') \right|^2, \tag{4-59}$$

$$\hat{T}_{eh} \propto \left| \hat{\boldsymbol{G}}_{RL,eh}^{AB}(x,0,x',y') \right|^2,$$
(4-60)

siendo $\hat{\boldsymbol{G}}_{RL,ee}^{AB}(x,0,x',y')$ la componente de la función de Green que propaga un electrón del átomo A en la región G₁ en el punto (x,0) al átomo B en la región G₂ en el punto (x',y'). De manera similar $\hat{\boldsymbol{G}}_{RL,eh}^{AB}(x,0,x',y')$ es la función de Green que propaga un electrón en G₁ a un hueco en G₂, para los mismos puntos. Estas funciones de Green son obtenidas resolviendo la ecuación de Dyson (4-12), para la geometría de la fig. **4-15**.



Figura 4-16: Diagrama de las trayectorias semi-clásicas de electrones y huecos, donde la dirección para el vector de onda y la velocidad de grupo son mostradas en cada región para cada tipo de partícula. El punto de inyección está en (-d, 0), el ancho del superconductor es W_s y los puntos de detección están en G₂. En la figura, $\mathbf{v}_e^{i,r}$ y $\mathbf{v}_h^{i,r}$ representan las velocidades de grupo para electrones y huecos en la banda de conducción (valencia), respectivamente, y $\mathbf{k}_{e(h)}$ el vector de onda para los electrones (huecos). Imagen adaptada de [104].

Las probabilidades \hat{T}_{ee} y \hat{T}_{eh} son graficadas como función de x' y normalizadas a T_v siendo este la probabilidad de transmisión máxima de la misma lente de Veselago de interfaces perfectas sin un superconductor, que permite encontrar los puntos de máxima probabilidad, los cuales corresponden al enfoque de las cuasi-partículas y coinciden con el punto donde las trayectorias semi-clásicas se interceptan. Esto pasa incluso cuando son consideradas múltiples reflexiones dentro del superconductor, como se muestra en la fig. **4-16**.

Con base en el trabajo [104], se encuentra que la conductancia diferencial no local $\sigma \propto \hat{T}_{eh} - \hat{T}_{ee}$ es positiva con máximos donde el punto focal de huecos está presente, mientras es negativa y presenta mínimos en los puntos focales de electrones. La separación espacial de los puntos focales de electrones y huecos podrían permitir usar electrodos puntuales para maximizar el desdoblamiento de los pares de Cooper y analizar el entrelazamiento de los estados electrónicos en estos sistemas.

Ahora se analiza el efecto de las interfases imperfectas (parámetro de acople menor que uno) sobre los puntos focales de electrones o huecos. Para una juntura np ya se ha realizado una comparación entre la aproximación semi-clásica y el modelo "Tight Binding", donde se encuentran picos en la probabilidad de transmisión para electrones alrededor de los puntos



Figura 4-17: Diagrama de las trayectorias semi-clásicas de los electrones (líneas sólidas y punteadas rojas) o cuasi-electrones (líneas discontinuas rojas), y huecos (líneas discontinuas negras) o cuasi-huecos (líneas punteadas negras). Las letras representan el punto de inyección A, el hueco enfocado (D y I), el electrón enfocado G o puntos donde ocurren reflexiones.

focales que describen las trayectorias semi-clásicas [37]. Ahora vamos a analizar el efecto del parámetro de acople, y, por lo tanto, interfases no perfectas, sobre la conductancia diferencial no local σ_{nl} , analizando las trayectorias semi-clásicas de electrones y huecos en la lente de Veselago (fig. 4-17), las cuales no cambian por tener interfases imperfectas pero tendrán otro efecto que se verá más adelante. En la fig. 4-17, comenzamos con la inyección en el punto A en G_1 de tal manera que la distancia al punto de invección -d sea más grande que el ancho de la región superconductora W_s , y trayectorias simétricas de electrones respecto al eje óptico. Consideremos el camino ABCD, que genera el primer punto focal de huecos y requiere que en la segunda interfase se presente una dispersión de Andreev y un segundo camino ABHI que origina el segundo punto focal de hueco y necesita una dispersión de Andreev en la primera interfase. Para el camino ABCEFG tenemos el punto focal de electrones que requieren dos reflexiones internas de electrones dentro del superconductor. Un electrón que tunela usando el camino ABCJ no se focaliza en G_2 , haciendo una zona de dispersión. Estos procesos pueden tener múltiples reflexiones internas dentro del superconductor, que generan puntos focales de electrones con una relación de $x' = (2m - 1/2) W_s$ y para huecos en $x' = (2m + 1/2) W_s$ con $m = 1, 2, 3, \dots$ Vale aclarar que cuando la aproximación de Andreev no es válida tenemos cambios en las trayectorias de huecos que se verán más adelante.

Teniendo en cuenta que \hat{T}_{ee} y \hat{T}_{eh} están relacionados con σ_{nl} , podemos analizar la conductancia diferencial para valores de los parámetros de acople. Para parámetros de acople simétricos, $t = t_1 = t_2$, se grafican los coeficientes de transmisión en la fig. **4-18**a-c, donde se observa que cuando el parámetro de acople decrece, la intensidad del coeficiente \hat{T}_{ee} disminuye con respecto a \hat{T}_{eh} . También se nota que el punto focal de electrones desaparece, mientras el punto focal de huecos se incrementa. Ahora, si graficamos σ_{nl} sobre el eje óptico como una función de x para diferentes valores de t obtenemos la fig. **4-18**d. En esta figura, podemos observar que la conductancia diferencial presenta picos en los puntos donde los electrones y huecos son enfocados en la fig. **4-17**. También se aprecia que cuando t decrece, σ_{nl} se incrementa hasta tener únicamente valores positivos, mostrando un dominio de las reflexiones de Andreev no locales. También podemos observar que el pico máximo inicialmente incrementa su valor y posteriormente decrece a cero. El incremento del pico en la conductancia diferencial es el resultado de un aumento en \hat{T}_{eh} con respecto a \hat{T}_{ee} , siendo \hat{T}_{ee} el que decrece rápidamente cuando t disminuye, debido a que las junturas se desacoplan.



Figura 4-18: a–c) Probabilidad de transmisión \hat{T}_{ee} (línea negra) y \hat{T}_{eh} (línea discontinua roja) normalizadas al máximo de la transmisión, T_v , de una lente de Veselago de interfaces perfectas sin un superconductor, en el eje óptico para diferentes valores del parámetro de acople. d) Cálculo de la conductancia diferencial σ_{nl} en el eje óptico para los mismos parámetros de a-c. Para todas las figuras $t_1 = t_2 = t$, $E_{FG1} = E_{FG2} = -E_{FS} = -500\Delta$, el punto de inyección está en $d = 3/2W_s$ y $W_s = \xi$.

Ahora se encuentran la probabilidad de transmisión y la conductancia diferencial para valores asimétricos de los parámetros de acople encontrando que la probabilidad de transmisión \hat{T}_{ee} decrece (fig. 4-19). Las asimetrías en los parámetros de acople modifican la probabilidad de transmisión \hat{T}_{eh} dependiendo de los caminos de la fig. **4-17**, de tal forma que, cuando $t_1 < 1 \text{ y } t_2 = 1$, el segundo punto focal en \hat{T}_{eh} se incrementa y el primero decrece como se observa en la fig. **4-19**, esto es porque la reducción de t_1 incrementa la probabilidad de que un electrón en G₁ pase a ser una cuasi-partícula tipo hueco en S; en consecuencia la conductancia diferencial se incrementa en el segundo punto focal de huecos debido al camino ABHI. Para $t_1 = 1 \text{ y } t_2 < 1$, la probabilidad de que una cuasi-partícula tipo hueco se convierta en una tipo electrón en G₂ se incrementa y favorece el punto focal de huecos por el camino ABCD, donde \hat{T}_{eh} presenta un máximo para el primer punto focal. El comportamiento de la transmisión también puede observarse en la conductancia diferencial (fig. **4-19**), donde los máximos se intercambian del primer al segundo punto focal, dependiendo del parámetro de acople de cada una de las interfases.



Figura 4-19: a–c) Probabilidades de transmisión \hat{T}_{ee} (línea negra) y \hat{T}_{eh} (línea discontinua roja) normalizadas al máximo de la transmisión de una lente de Veselago de interfaces perfectas sin un superconductor, en el eje óptico para diferentes valores del parámetro de acople en cada una de las interfases. d) Cálculo de σ_{nl} en el eje óptico para diferentes valores del parámetro de acople. Para todas las figuras $E_{FG1} = E_{FG2} = -E_{FS} = -500\Delta$, el punto de inyección está en $d = -3/2W_s$ y $W_s = \xi$.

Para finalizar estudiamos los efectos de tener una energía de Fermi donde la aproximación de

Andreev no es válida, para lo cual se tomarán E_{FS} entre 50 Δ y 100 Δ , lo que ocasiona cambios en las dispersiones de Andreev. Para esto, en la fig. **4-20** se muestran los mapas para \hat{T}_{eh} y \hat{T}_{ee} en x' y y', para diferentes valores de las energías de Fermi. Con base en los mapas es posible observar una región extendida donde los huecos son enfocados. Esta región se incrementa en tamaño cuando la energía de Fermi decrece y cuando se ha asumido $E_{FG1} = E_{FG2} = -E_{FS}$. En la fig. **4-17** se muestra la trayectoria cuasi-clásica de los electrones por el camino ABCJ el cual no presenta focalización, como se aprecia en la fig. **4-20** derecha que corresponde al coeficiente \hat{T}_{ee} . En los mapas de \hat{T}_{eh} , parte izquierda de la fig. **4-20**, se observa un incremento en el tamaño del punto focal y también las correspondientes cáustica, cuando la energía de Fermi disminuye. En este punto, el cambio de las cáusticas se debe a que hay aberraciones de las trayectorias semi-clásicas. El índice de refracción para las cuasi-partículas en cualquiera de las dos interfases dependen si son del mismo tipo, cuasi-electrón a cuasi-electrón, o tipo diferente, cuasi-electrón a cuasi-hueco. En el caso de que la aproximación de Andreev no sea válida el índice de refracción es diferente de 1.

En la fig. 4-20, se muestran las trayectorias de las cuasi-partículas cuando la energía de Fermi decrece y la aproximación de Andreev no es válida. En este caso se puede observar una región extendida donde el hueco es enfocado. El punto focal de las cuasi-partículas que no hacen reflexiones de Andreev internas está espacialmente localizado en una posición diferente con respecto a los que realizan reflexiones de Andreev internas (fig. 4-21). Así, diferentes ángulos de incidencia de las cuasi-partículas sobre las interfases hacen que la probabilidad de transmisión \hat{T}_{eh} tenga valores máximos sobre una región del espacio que está centrada, respecto al punto focal, cuando la energía de Fermi del sistema es alta (ver fig. 4-17). Considerando que los procesos de tunelamiento en las interfases son independientes de las reflexiones de Andreev internas, la probabilidad \hat{T}_{ee} no es afectada por la disminución de la energía de Fermi.

Podemos concluir que los cambios en los parámetros de acople no afectan los puntos de enfoque, pero afectan los diferentes máximos observados en los mapas de probabilidad de transmisión electrón-electrón y electrón-hueco. El parámetro de acople en cada interfase altera el primer y segundo máximo de los puntos focales de huecos por separado, pero siempre decrece la probabilidad de transmisión electrón-electrón. Estos efectos aparecen en la conductancia diferencial no local, donde los picos más intensos dependen de cuál interfase tiene un parámetro de acople menor que uno. También se puede observar qué energías de Fermi cercanas al potencial de pares incrementan el tamaño de los puntos focales de las cuasi-partículas tipo hueco, debido a que la aproximación de Andreev no es válida.



Figura 4-20: Mapas de probabilidad de transmisión electrón-hueco (izquierda) y transmisión electrón-electrón (derecha) para la región G₂, normalizadas al máximo de la transmisión, T_v , de una lente de Veselago de interfaces perfectas sin un superconductor, cuando $E_{FG1} = E_{FG2} = -E_{FS}$ para valores diferentes de E_{FS} , el punto de inyección se encuentra a 0.5 ξ y con un ancho del superconductor de ξ .



Figura 4-21: Diagrama de las trayectorias ópticas de cuasi-partículas tipo electrón (línea rojas) y cuasi-partículas tipo hueco (líneas verdes y negras), cuando E_{FS} decrece y la aproximación de Andreev no es válida. Las letras representan el punto de inyección A; el punto focal de huecos D para diferentes reflexiones de Andreev internas, siendo el punto central el que se obtiene en la aproximación de Andreev.

4.4.2. Lentes de Veselago con superredes

Como mencionamos, las superredes pueden colimar una corriente de electrones, con lo cual al incluirlas en una lente de Veselago se pueden observar cambios en los puntos focales de los electrones o huecos. Para esto se considera el sistema descrito en la fig. **4-22**, donde las superredes se "apagan" cuando los potenciales "gate" que forman la superred se hacen cero. Las energías de Fermi del grafeno sin superred serán las energías de Fermi promedio de las superredes adyacentes. Las superredes serán simétricas y con 40 bloques np para observar los efectos de colimación (fig. **4-12**b). El punto de inyección se coloca en 1.5 ξ , siendo ξ la longitud de coherencia del superconductor. Debido a que la superred finita de 40 bloques tiene un ancho total de $W_{SL} = 40L$, y se necesita que sea menor que 1.5 ξ , se escoge que la longitud L sea de 0.02 ξ , esto conlleva a incrementar el potencial "gate" de la superred a $U = 50\Delta$ para tener nuevos puntos de Dirac de acuerdo con los resultados anteriores.

Los resultados se compararán con los de la sección anterior y los encontrados en [74]. Para el sistema mostrado en la fig. **4-23**, tenemos un punto de enfoque de los electrones a 2.5ξ , también tenemos un punto de enfoque de los huecos a 1.5ξ y otro a 3.5ξ , debido a que la segunda superred va desde 1ξ a 1.8ξ . El primer punto de enfoque que ocurriría en 1.5ξ no es observado. A continuación, estudiamos el sistema para el cual tenemos solo una superred a la izquierda que se denota como n - SL - S - n, para la cual obtenemos la fig. **4-24**a, en esta se observa cómo al salir del superconductor la corriente de electrones está más dispersa en la región central, lo cual es consecuencia de que la corriente de electrones es colimada, también el punto focal ha perdido su intensidad siendo comparable a la señal de fondo. Para la corriente de huecos se encuentra que, a diferencia de la de electrones, esta presenta puntos menos dispersos, aunque la intensidad disminuye.



Figura 4-22: Sistema bajo estudio, es construido con un grafeno dopado n, superred, superconductor, superred y grafeno dopado n. Ambas superredes son simétricas y la energía de Fermi central de la superred será igual a la del grafeno adjunto. El inyector y el detector se ubican sobre G₁ y G₂, respectivamente.



Figura 4-23: Transmisión electrón-hueco (panel izquierdo) y electrón-electrón (panel derecho) del sistema n - S - n, cuando U = 0 y $E_{FS} = E_{FG1} = E_{FG1} = 500\Delta$, el comportamiento concuerda con lo mostrado en [41].



Figura 4-24: Probabilidad de transmisión electrón-electrón y electrón-hueco cuando el punto de inyección está a 1.5 ξ , el tamaño de las superredes es de 0.8 ξ formada por 40 capas np simétricas con energía de Fermi promedio de 500 Δ y $U = 50\Delta$. Las energías de los grafenos son de 500 Δ y la del superconductor de -500Δ . a) Cuando tenemos la SL a la izquierda del superconductor y b) Cuando la SL está a la derecha del superconductor, como en la fig. 4-22.

Para cuando se considera una superred solo a la derecha, sistema n - S - SL - n, fig. **4-24**b, se tiene una situación similar al caso anterior. En este sistema la corriente de electrones es colimada pero aún se alcanza a notar el punto focal de los electrones, aunque no es tan detallado como en el caso n - SL - S - n. La corriente de huecos nuevamente no se colima.

La explicación de los efectos vistos, cuando el sistema presenta una sola superred, puede darse al considerar la superred como un filtro angular de la señal. La superred filtra ciertos valores del momento transversal q, dependiendo del producto $u = UL/\hbar v_F$, el cual caracteriza el número de nuevos puntos de Dirac [113]. El momento transversal q de las cuasi-partículas, después de atravesar el superconductor, depende de los procesos que presentan, las que cotunelan presentan valores en q = 0, mientras que para los que provienen de reflexiones de Andreev presentan el máximo para $q \neq 0$ [4]. Las lentes de Veselago con una superred filtran las reflexiones de Andreev cruzadas al ser cero cuando el ángulo de incidencia es cero y ser máxima en vectores de onda que son filtrados por la superred. Mientras que el filtro hace que la señal de los electrones sea mayormente la que tenga q = 0, con lo cual el pico de enfoque de la transmisión electrón-electrón se mezclará con la señal de fondo que procede de electrones que tunelan normalmente a la interfase. Con esta señal se puede observar que la conductancia diferencial no local σ_{nl} en el eje óptico (fig. **4-25**) presenta valores distinguibles para cuando se tiene desdoblamiento de pares, con un solo punto positivo proveniente del hueco enfocado, mientras la señal de electrones se comporta como un ruido de fondo.



Figura 4-25: Conductancia diferencial no local en función de la distancia sobre el eje óptico para la lente de Veselago con una superred (sistema n - SL - S - n), con dos superredes (n - SL - S - SL - n) y sin superred (sistema n - S - n). Las condiciones son las establecidas en **4-22** con $U_n = 50\Delta$.

Para observar el efecto de los nuevos puntos de Dirac se considera el sistema n-SL-S-SL-n, pues este sistema tiene los mismos puntos de Dirac a ambos lados del superconductor. La fig. **4-26** muestra que la señal de electrones mantiene el efecto de la colimación, pero la de huecos tiene mayor intensidad respecto a los casos anteriores. Esto indica que colocar la superred tanto a la derecha como a la izquierda mejora la separación de la corriente de electrones colimada de la de huecos enfocada.



Figura 4-26: Probabilidad de transmisión electrón-electrón y electrón-hueco para las mismas condiciones de la fig. **4-24** cuando ambas superredes están presentes.

Finalmente, el comportamiento de este sistema es afectado por el valor del potencial "gate" de la superred de grafeno, y no por el tamaño. Cuando se incrementa el valor del potencial "gate" al doble, $U = 100\Delta$ se obtiene la fig. **4-27** donde se observa que este cambio no altera la corriente de electrones, pero deforma la corriente de huecos moviendo el punto focal, y disminuyendo considerablemente su señal. Esto hace que el sistema no sea eficiente para enfocar electrones en huecos.



Figura 4-27: Probabilidades de transmisión electrón-electrón y electrón-hueco cuando solo tenemos la superred de grafeno a la derecha, con U=100 Δ y, por lo tanto, tenemos dos puntos de Dirac. Las condiciones son las establecidas en la fig. 4-22.

Al colocar superredes de grafeno en una lente de Veselago se permite colimar una corriente de electrones, perturbando poco el punto focal de la corriente producida por reflexiones de Andreev no locales. Este proceso podría ser usado para separar mejor la corriente de electrones y detectar el desdoblamiento de pares de Cooper en este sistema.

Capítulo 5

Bicapas de grafeno

Las bicapas de grafeno se construyen a partir del apilamiento de dos monocapas de grafeno, donde el más común es llamado Bernal [43–46], como se muestra fig. **5-1** y será considerado en este capítulo. De manera similar al grafeno la bicapa presenta puntos de Dirac [43], aunque, a diferencia de la monocapa que posee dos bandas de energía que se tocan en estos puntos de manera lineal, la bicapa tiene cuatro bandas cerca de los puntos de Dirac, de las cuales dos se tocan de forma parabólica [43], lo cual hace que los portadores de carga sean modelados como masivos a diferencia de lo que ocurre en el grafeno, mostrando en la bicapa un comportamiento diferente en el efecto Klein [46,47]. La bicapa de grafeno en apilamiento Bernal (bGB) se puede dopar con potenciales "gate", pero a diferencia de la monocapa es posible que se abran brechas de energía en los puntos de Dirac cuando tenemos potenciales eléctricos altos [50] o potenciales "gate" diferentes entre cada una de sus capas [51].

La bicapa de grafeno puede ser utilizada para construir lentes de Veselago [46] y colimadores [55], cuyos estudios se han realizado considerando principalmente la aproximación a baja energía, y sin tener en cuenta la frontera [43]. La aproximación de baja energía corresponde a estudiar las dos bandas que se tocan en los puntos de Dirac sin considerar que las nuevas están separadas de las primeras en energía por un valor correspondiente al término de acople entre las capas [114], lo cual lleva a que el sistema pueda ser descrito de una manera reducida en esas dos bandas, usando un término conocido como el dímero que corresponde a los átomos acoplados, esta reducción no permite tener en cuenta las fronteras en sistemas finitos, aunque permite obtener la densidad de estados [48].

Es de nuestro interés encontrar la función de Green de una bGB sin la aproximación de baja energía, para que sea posible considerar los efectos de la frontera en interfases con grafeno y permitir el estudio de superredes, así como de lentes de Veselago. Como se realizó en la sección 4.1, primero hallamos la función de Green de la bicapa de grafeno infinita y con


Figura 5-1: Vista superior de la bicapa de grafeno en apilamiento Bernal, un átomo de carbono se encuentra en el centro del hexágono de la otra monocapa. La monocapa superior es de color negro y la inferior de color rojo, la celda primitiva es igual a la del grafeno, pero contiene cuatro átomos.

ayuda de la ecuación de Dyson encontramos las funciones de Green semi-infinitas con bordes definidos. Con estas funciones de Green semi-infinitas se analizará una lente de Veselago np, donde mostraremos los efectos de los bordes zigzag α y β en los procesos de enfoque [49], lo cual genera diferencia con las lentes de Veselago con monocapas de grafeno.

5.1. Funciones de Green para la bicapa de grafeno

Para encontrar la función de Green usamos el modelo "tight binding" a primeros vecinos, para el cual recordamos que la celda primitiva es similar a la de la monocapa de grafeno, como se muestra en la fig. 5-1 [43]. La función de Green de la bicapa se obtiene utilizando el método de funciones asintóticas, para lo cual solucionamos el Hamiltoniano en la dirección x, como se hizo para el grafeno en la sección 2.5, este método, hasta donde sabemos no se ha usado para encontrar la función de Green de la bicapa de grafeno y es un aporte de este trabajo que permite encontrar la función de Green sin la aproximación a baja energía. Para ello se utiliza el Hamiltoniano con bordes zigzag para cada monocapa de grafeno (fig. 5-1) alrededor de los puntos de Dirac y se soluciona la siguiente ecuación

$$\begin{pmatrix} \hat{H}_{g} & \hat{t}_{g} \\ \hat{t}_{g}^{\hat{T}} & \hat{H}_{g} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{g}(x) \\ \Psi_{g}'(x) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi_{g}(x) \\ \Psi_{g}'(x) \end{pmatrix},$$
(5-1)

con

$$\hat{H}_g = \begin{pmatrix} -E_F - E & \hbar v_F \left(-i\partial_x - iq \right) \\ \hbar v_F \left(-i\partial_x + iq \right) & -E_F - E \end{pmatrix},$$
(5-2)

la cual corresponde al Hamiltoniano de cada monocapa de grafeno, como se encontró en la sección 2.5, y

$$\hat{t}_g = \begin{pmatrix} 0 & 0\\ t_1 & 0 \end{pmatrix},\tag{5-3}$$

representa el acople a primeros vecinos entre las monocapas, donde el átomo B' de la capa superior se acopla con el átomo A de la capa inferior. Al ser de cuarto orden la ecuación (5-1) tiene cuatro soluciones, lo cual le da ventaja al método de soluciones asintóticas respecto a otros que pueden ser dispendiosos debido a la geometría. Los estados de la bicapa son bi-espinores, compuestos por los espinores de cada monocapa

$$\Psi_{g} = \begin{pmatrix} \Psi_{A}(x) \\ \Psi_{B}(x) \end{pmatrix}, \tag{5-4}$$

$$\Psi_{g}^{\prime} = \begin{pmatrix} \Psi_{A^{\prime}}(x) \\ \Psi_{B^{\prime}}(x) \end{pmatrix}.$$
(5-5)

Suponemos que las soluciones son de la forma

$$\begin{pmatrix} \Psi_g(x) \\ \Psi'_g(x) \end{pmatrix} = e^{ikx} \varphi_k, \tag{5-6}$$

con φ_k un biespinor que se encontrará más adelante. Esto nos conduce a una ecuación de valores y vectores propios con lo cual obtenemos la siguiente relación

$$(\hbar v_F)^2 \left(k^2 + q^2\right) = \left(E_F + E\right)^2 \pm \left|t_1 \left(E_F + E\right)\right|,$$
(5-7)

donde tenemos cuatro valores propios que están dados por

$$k_{\pm} = \sqrt{\frac{(E_F + E)^2 \pm |t_1 (E_F + E)|}{(\hbar v_F)^2} - q^2},$$
(5-8)

$$k'_{\pm} = -\sqrt{\frac{(E_F + E)^2 \pm |t_1 (E_F + E)|}{(\hbar v_F)^2} - q^2},$$
(5-9)

como es de esperarse, esto nos duplica el número de soluciones que tenemos respecto al grafeno. Los vectores propios correspondientes son

$$\boldsymbol{\varphi}_{k\pm} = \begin{pmatrix} \mp \frac{\hbar v_F(k\pm -iq)}{(E_F + E)} \\ \mp 1 \\ 1 \\ \frac{\hbar v_F(k\pm +iq)}{E_F + E} \end{pmatrix}, \tag{5-10}$$

$$\boldsymbol{\varphi}_{-k_{\pm}} = \begin{pmatrix} \mp \frac{\hbar v_F(-k_{\pm} - iq)}{(E_F + E)} \\ \mp 1 \\ 1 \\ \frac{\hbar v_F(-k_{\pm} + iq)}{E_F + E} \end{pmatrix}.$$
(5-11)

La construcción de la función de Green con el método de soluciones asintóticas, se realiza de forma similar a como se hizo para el grafeno usando

$$\gamma = \left(\begin{array}{cc} \sigma_z & 0\\ 0 & -\sigma_z \end{array}\right). \tag{5-12}$$

Examinando las dispersiones en las fronteras, las cuales se muestran en la fig. **5-2**. Por lo tanto, usamos las siguientes funciones

$$\phi_{}^{+}(x) = e^{\mp i k_{+} x} \begin{pmatrix} \pm \vartheta_{\pm} \\ -1 \\ 1 \\ -\vartheta_{\mp} \end{pmatrix},$$

$$\phi_{}^{-}(x) = e^{\mp i k_{-} x} \begin{pmatrix} \mp \kappa_{\pm} \\ 1 \\ 1 \\ -\kappa_{\mp} \end{pmatrix},$$

$$(5-13)$$

donde los símbolos $> {\rm y} <$ se refieren a la dirección de propagación negativa o positiva en el ejex,respectivamente, y

$$\vartheta_{\pm} = \frac{\hbar v_F \left(k_+ \pm iq\right)}{\left(E_F + E\right)},\tag{5-15}$$

$$\kappa_{\pm} = \frac{\hbar v_F \left(k_- \pm iq\right)}{\left(E_F + E\right)}.$$
(5-16)

Vamos a calcular las funciones de Green de x a x' para una bicapa de grafeno infinito. Para ello tenemos que hacer el producto de las soluciones asintóticas pero como no tenemos procesos de dispersión, estos se pueden obtener de

$$\hat{\boldsymbol{g}}^{>}(x, x', E) = A_{+}\boldsymbol{\phi}^{+}_{>}(x)\boldsymbol{\phi}^{+,T}_{<}(x')\gamma + A_{-}\boldsymbol{\phi}^{-}_{>}(x)\boldsymbol{\phi}^{-,T}_{<}(x')\gamma$$
(5-17)

$$\hat{\boldsymbol{g}}^{<}(x,x',E) = A'_{+}\boldsymbol{\phi}^{+}_{<}(x)\boldsymbol{\phi}^{+,T}_{>}(x')\gamma + A'_{-}\boldsymbol{\phi}^{-}_{<}(x)\boldsymbol{\phi}^{-,T}_{>}(x')\gamma, \qquad (5-18)$$

Para encontrar los coeficientes de estas ecuaciones utilizamos la siguiente ecuación, similar a la de grafeno, pero con un producto tensorial, dada por



Figura 5-2: Diagrama de las dispersiones para una bicapa de grafeno. a) Si la bicapa es infinita no existe un cambio en el vector de onda de propagación. b) En el caso de la barrera de fortaleza infinita se tiene que un electrón que incide con un vector de onda (línea punteada) se refleja como una combinación de los modos de propagación en la dirección contraria (líneas continuas).

$$\hat{\boldsymbol{g}}^{>}(x,x,E) - \hat{\boldsymbol{g}}^{<}(x,x,E) = \frac{-i}{\hbar v_F} \begin{pmatrix} 0 & 1\\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$
(5-19)

Reemplazando las funciones asintóticas (5-17) y (5-18), en (5-19) se encuentra

$$A_{\pm} = A'_{\pm} = \frac{-i(E_F + E)}{\hbar^2 v_F^2 k_{\pm}},\tag{5-20}$$

con lo cual obtenemos la función de Green de la bicapa de grafeno infinita como

$$\hat{g}^{<}(x, x', q, E) = A_{+}e^{ik_{+}(x'-x)} \begin{pmatrix} \vartheta_{+}\vartheta_{-} & -\vartheta_{+} & +\vartheta_{+} & -\vartheta_{+}^{2} \\ -\vartheta_{-} & 1 & -1 & \vartheta_{+} \\ \vartheta_{-} & -1 & 1 & -\vartheta_{+} \\ -\vartheta_{-}^{2} & \vartheta_{-} & -\vartheta_{-} & \vartheta_{+}\vartheta_{-} \end{pmatrix} \\
+A_{-}e^{ik_{-}(x'-x)} \begin{pmatrix} \kappa_{+}\kappa_{-} & -\kappa_{+} & -\kappa_{+} & \kappa_{+}^{2} \\ -\kappa_{-} & 1 & 1 & -\kappa_{+} \\ -\kappa_{-} & 1 & 1 & -\kappa_{+} \\ \kappa_{-}^{2} & -\kappa_{-} & -\kappa_{-} & \kappa_{-}\kappa_{+} \end{pmatrix},$$
(5-21)
$$\hat{g}^{>}(x, x', q, E) = A_{+}e^{ik_{+}(x-x')} \begin{pmatrix} \vartheta_{-}\vartheta_{+} & \vartheta_{-} & -\vartheta_{-} & -\vartheta_{-}^{2} \\ \vartheta_{+} & 1 & -1 & -\vartheta_{-} \\ -\vartheta_{+} & -1 & 1 & \vartheta_{-} \\ -\vartheta_{+}^{2} & -\vartheta_{+} & \vartheta_{+} & \vartheta_{+}\vartheta_{-} \end{pmatrix} \\
+A_{-}e^{ik_{-}(x'-x)} \begin{pmatrix} \kappa_{+}\kappa_{-} & \kappa_{-} & \kappa_{-}^{2} \\ \kappa_{+} & 1 & 1 & \kappa_{-} \\ \kappa_{+} & 1 & 1 & \kappa_{-} \\ \kappa_{+}^{2} & \kappa_{+} & \kappa_{+} & \kappa_{+}\kappa_{-} \end{pmatrix}.$$
(5-21)

Cuando el parámetro de acople entre las monocapas de grafeno es cero $(t_1 = 0)$ esta función de Green se reduce a una función de Green formada por dos bloques de función de Green de monocapas de grafeno desacopladas, dadas por

$$\hat{\boldsymbol{g}}^{>/<}(x,x',E) = \begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{g}}_m^{>/<}(x,x',E) & 0\\ 0 & \hat{\boldsymbol{g}}_m^{>/<}(x,x',E) \end{pmatrix},$$
(5-23)

siendo $\hat{\boldsymbol{g}}_m^{>/<}$ la obtenida en la sección 2.5.1, ecuaciones (2-63) y (2-64), que se pueden escribir como

$$\hat{\boldsymbol{g}}_{m}^{>}(x,x',E) = \frac{-i\left(E_{F}+E\right)}{\hbar^{2}v_{F}^{2}k}e^{ik(x'-x)} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\hbar v_{F}(k+iq)}{E_{F}+E} \\ -\frac{\hbar v_{F}(k-iq)}{E_{F}+E} & 1 \end{pmatrix},$$
(5-24)

$$\hat{\boldsymbol{g}}_{m}^{>}(x,x',E) = \frac{-i\left(E_{F}+E\right)}{\hbar^{2}v_{F}^{2}k}e^{ik(x'-x)} \begin{pmatrix} 1 & \frac{\hbar v_{F}(k-iq)}{E_{F}+E} \\ \frac{\hbar v_{F}(k+iq)}{E_{F}+E} & 1 \end{pmatrix},$$
(5-25)

con $k_{+} = k_{-} = k = \sqrt{\frac{(E_F + E)^2}{(\hbar v_F)^2} - q^2}.$

Con la función de Green podemos obtener la densidad de estados como

$$\rho(x,E) = \frac{-1}{\pi} \int dq \operatorname{Tr}\left(\operatorname{Im}\left(\hat{\boldsymbol{g}}^{R}(x,x,q,E)\right)\right),\tag{5-26}$$



Figura 5-3: a) Densidad espectral de una bicapa en función del vector de onda q, se aprecian las bandas de energía donde la separación de energía de las dos bandas por encima de la energía de Fermi es del parámetro t_1 . b) Densidad de estados en función de la energía para la bicapa de grafeno en apilamiento Bernal, en esta se presenta un salto cuando la energía coincide con el parámetro de acople entre capas con $q_{max} = 7t_1/(\hbar v_F)$.

la cual se ilustra en la fig. **5-3**a y corresponde a la mostrada en [43] para el caso de una bicapa infinita. A diferencia del grafeno la bicapa presenta 4 bandas de energía (fig. **5-3**b), dos de ellas se tocan en cero, mientras las otras dos están separadas de las anteriores un valor t_1 , esto hace que cuando la energía sea $E = E_F + t_1$ se presente un salto en la densidad de estados al incluir los estados de estas nuevas bandas.

5.2. Bicapa de grafeno semi-infinita

La función de Green de la bGB semi-infinita, se encuentra usando el método empleado en el grafeno en la sección 4.1. Para este caso vamos a considerar la bicapa de grafeno infinita y cortarla en x = 0, como se muestra en la fig. **5-4**. El potencial de corte es $\hat{V} = U\delta(x)\hat{S}_c^e$, donde \hat{S}_c^e es una matriz que determina la frontera y U se hace tender a infinito con el propósito de que los procesos donde las partículas cruzan el punto de corte (líneas verdes punteadas) no sean consideradas en la función de Green perturbada, de tal manera que esta solo contenga propagaciones que no pasen la barrera (línea continua). Con este proceso se obtiene una función de Green semi-infinita izquierda (bGB_L) y una función de Green semi-infinita derecha (bGB_R) .

Para determinar \hat{S}_{C}^{e} de la bicapa se tiene que, a diferencia de la monocapa de grafeno, esta tiene dos tipos de borde zigzag [115]. En la fig. **5-5** se aprecian los dos tipos de bordes, los cuales son dependientes de donde se realiza el corte de la bicapa de grafeno. Cuando el corte se realiza de tal manera que ambas láminas de grafeno tienen el mismo tipo de átomo se llama α (fig. **5-5**a) mientras que cuando el tipo de átomo es distinto se llama β (fig. **5-5**b [115]). La matriz de corte para generar un borde tipo zigzag α se define como



Figura 5-4: Diagrama de corte de la bicapa de grafeno infinita, el potencial de corte está en x = 0. La región que está a la izquierda del potencial de corte es denotada como bGB_L y a la derecha como bGB_R . Cuando el parámetro U tiende a infinito, el potencial de corte desconecta la bicapa infinita al no contener propagaciones que pasen la barrera (líneas verdes punteadas).



Figura 5-5: Diagrama de los dos tipos de bordes zigzag en la bGB. a) Borde α donde las capas superior e inferior forman un borde zigzag. b) Borde β se tiene en la capa superior un borde zigzag con átomos B', mientras la capa de abajo no tiene bordes zigzag.

$$\hat{S}_{c}^{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$
(5-27)

mientras para un borde zigzag β es de la forma

$$\hat{S}_{c}^{\beta} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$
(5-28)

Para ambos tipos de bordes descritos se obtiene que los procesos donde se consideran dispersiones de izquierda a derecha son descontados. En este caso se debe resolver la siguiente ecuación de corte y encontrar la función de Green a la región derecha del potencial de corte como

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{D}^{}(x,x',q,E) = \hat{\boldsymbol{g}}^{}(x,x',q,E) + U\hat{\boldsymbol{g}}^{>}(x,x_{0},q,E)\hat{S}_{c}\hat{M}_{R}\hat{\boldsymbol{g}}^{<}(x_{0},x',q,E),$$
(5-29)

con

$$\hat{M}_R = \left(1 - U\hat{\boldsymbol{g}}^{>}(x_0, x_0, q, E)\hat{S}_c\right)^{-1}.$$
(5-30)

De manera similar se puede obtener la función de Green en la región izquierda del potencial de corte para la bicapa como

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{I}^{}(x,x',q,E) = \hat{\boldsymbol{g}}^{}(x,x',q,E) + U\hat{\boldsymbol{g}}^{<}(x,x_{0},q,E)\hat{S}_{c}^{T}\hat{M}_{L}\hat{\boldsymbol{g}}^{>}(x_{0},x',q,E),$$
(5-31)

con

$$\hat{M}_L = \left(1 - U\hat{\boldsymbol{g}}^<(x_0, x_0, q, E)\hat{S}_c^T\right)^{-1}.$$
(5-32)

Ahora, se procede a tomar el límite cuando U tiende a infinito para desconectar las regiones y obtener la función de Green de un sistema semi-infinito con borde definido. Con las funciones de Green semi-infinitas se puede obtener la densidad de estados usando la ecuación (5-26), la cual se muestra en la fig. **5-6**. Se presenta la densidad de estados en el borde, donde se aprecia un estado en la energía de Fermi independientemente del tipo de frontera fig. **5-6**. Para observar cómo decae este estado se gráfica la densidad local de estados en función de la distancia al borde normalizada a $\zeta = \hbar v_F/t_1 = 3a_0/5$ siendo a_0 la distancia entre átomos A de la misma monocapa (fig. **5-5**). La forma en la que decae la gráfica es independiente del tipo de frontera, mientras que la densidad de estados es diferente conforme nos adentramos en la bicapa semi-infinita, de tal manera que cuando $x/\zeta = -20$, tenemos que un tipo de frontera presenta una densidad de estados diferente a la otra. En la fig. **5-7**a se aprecia que en



Figura 5-6: a) Densidad local de estados para una bicapa de grafeno semi-infinita en el borde, a diferentes energías de Fermi para frontera $\alpha \neq \beta$, en este caso coinciden las densidades. b) Densidad local de estados para la bicapa semi-infinita en función de la distancia para ambos bordes, la distancia donde se calcula la densidad de estados se normaliza a $\zeta = \hbar v_F/t_1 \approx 3a_0/5$.



Figura 5-7: a) Densidad local de estados para una bicapa de grafeno semi-infinita cuando estamos a una posición del borde de $x = -20\zeta$ para cada tipo de frontera. b) y c) Densidad espectral para cada tipo de borde cuando $x = -20\zeta$, siendo b) para el borde α y c) para el borde β con $q_{max} = 7t_1/(\hbar v_F)$.

 $E/t_1 < 1$ las densidades de estados para el borde α (fig. 5-7b) y el borde β (fig. 5-7c) difieren ya que el borde β la densidad espectral es simétrica. Esto se debe a que en esta frontera los átomos de ambas capas presentan las mismas condiciones de frontera, mientras que para el otro tipo de frontera tenemos una asimetría al estar en la capa de abajo el átomo acoplado con el de arriba. Esto contrasta con la densidad de estados encontrada en [48], donde se muestra un comportamiento distinto para cada tipo de frontera, siempre y cuando no estemos en el borde donde el estado superficial es dominante o muy cerca de donde la densidad de estados se aproxima a la de la bicapa de grafeno infinita.



Figura 5-8: Lente de Veselago con dos bicapas de grafeno semi-infinitas, las cuales se juntan en x = 0, la bicapa izquierda (bGB_L) tiene una energía de Fermi E_F y la derecha (bGB_R) una energía $-E_F$. La lente de Veselago se estudia para los dos tipos de frontera α y β , con $\zeta = t_1/(\hbar v_F)$.

5.2.1. Aplicación al estudio de lentes de Veselago

Con los resultados obtenidos analizaremos una lente de Veselago con bordes definidos por medio de bicapas de grafeno semi-infinitas con diferentes energías de Fermi que formarán una estructura np; así, la bGB de la derecha tiene energía de Fermi E_F , la cual será una bicapa de grafeno Bernal tipo n (bGB_L); y la de la izquierda será una energía de Fermi $-E_F$, bicapa de grafeno Bernal tipo p (bGB_R), como se muestra en la fig. **5-8**.

El proceso de unión entre las dos bicapas semi-infinitas se puede representar por medio de la ecuación de Dyson

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{LR/RL}^{}(x_i, x_j) = \hat{\boldsymbol{g}}_{L/R}^{}(x_i, 0)\hat{T}_{LR/RL}(1 - \hat{\boldsymbol{g}}_{R/L}^{>/<}(0, x_c)\hat{T}_{RL/LR}\hat{\boldsymbol{g}}_{L/R}^{}(0, 0)\hat{T}_{LR/RL})^{-1} \\ \hat{\boldsymbol{g}}_{R/L}^{}(0, x_j),$$
(5-33)

donde $\hat{\boldsymbol{g}}_{L/R}^{</>}(x_i, x_j)$ es la función de Green de la bicapa semi-infinita derecha o izquierda y \hat{T}_{LR} la matriz de acople dependiente de la frontera, la cual para la frontera α puede escribirse como

$$\hat{T}_{c}^{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$
(5-34)



Figura 5-9: Mapa de probabilidad de transmisión electrón-electrón cuando la inyección se realiza a $x = -78\zeta$ para una lente de Veselago con monocapas de grafeno.

mientras para un borde zigzag β es de la forma

Con esta función de Green para todo el sistema se puede calcular la probabilidad de transmisión electrón-electrón como

$$T_{ee}^{i,j} \propto \left| \hat{G}_{LR,ee}^{i,j}(x,0,x',y',E) \right|^2,$$
 (5-36)

donde $\hat{\boldsymbol{G}}_{RL,ee}^{ij}(x,0,x',y',E)$ es la función de Green de una lente de Veselago formada con una bicapa que propaga desde el punto (x,0) en el átomo *i* de la izquierda, al átomo *j* de la derecha en el punto (x',y').

Cuando se inyecta a una distancia $-x_1\zeta$ en la lente de Veselago con grafeno se obtiene un solo punto de enfoque que aparece a una distancia igual a $x_1\zeta$, ver fig. **5-9**, [38]. Para la bicapa de grafeno se encuentra que, para puntos cercanos a los puntos de inyección, ambos bordes muestran un solo punto de enfoque a la misma distancia que el de una lente de Veselago de grafeno. Esta similitud es debida a que cuando se encuentra cerca de las interfases el tunelamiento Klein de la monocapa y la bicapa de grafeno tienen una contribución angular similar [66, 116] (ver fig.**2-6**b y fig.**2-11**b).

Conforme la inyección se hace más lejos, la contribución angular será más normal a la interfase, lo que genera diferencias en la transmisión relacionadas con el comportamiento de la paradoja de Klein para bicapas, (fig. 5-11 y 5-12). Estas diferencias son dependientes



Figura 5-10: Diagrama de las lentes de Veselago vistas de lado para los dos tipos de bordes zigzag, a) borde α donde se aprecia una simetría alrededor de la interfase, b) borde β donde es asimétrica en el punto de unión y c) diagrama del cambio de la energía de Fermi para la juntura.

del tipo de unión en la frontera de la lente de Veselago, cuando el borde de la izquierda es α con átomos A y A', se obtiene a la derecha un borde α con átomos B y B' (fig. 5-10a). En el caso en el que a la izquierda de la interfase tengamos el borde β , a la derecha de la interfase no tenemos ni borde α ni borde β (fig. 5-10b). Estos efectos ocasionan cambios en las probabilidades de transmisión electrón-electrón como mostraremos más adelante, para ello inyectaremos electrones en el mismo tipo de átomos para las dos configuraciones y observaremos las probabilidades de transmisión de electrones para los átomos después de la interfase alrededor de los puntos focales.

Para ver el efecto de este cambio de la forma del borde vamos a graficar los mapas de probabilidad de transmisión electrón-electrón cuando se inyecta en el dímero superior a la izquierda y recolectamos en diversos átomos a la derecha para cada tipo de frontera. Para observar los casos no considerados, el lector puede remitirse al anexo D. Los mapas de probabilidad de transmisión se normalizan al máximo de la probabilidad de transmisión de una monocapa de grafeno T_v . En general, tenemos dos posibilidades para focalizar los electrones, que el punto se encuentre en la misma capa de inyección o en la capa opuesta, donde observamos que, para la interfase con frontera α todas las probabilidades de transmisión son relevantes (fig. 5-11) mientras que para la interfase con frontera β , las probabilidades que van de la capa superior a inferior son altamente suprimidas (quedando por debajo del 1%) (fig. 5-12 c y d), donde las probabilidades de transmisión relevantes serán las de la misma capa.



Figura 5-11: a) Imagen lateral de la lente de Veselago con bicapa de grafeno para frontera α donde se indica el punto de inyección y los diferentes puntos de detección de b) a e). Imágenes b-e) son mapas de probabilidad de transmisión electrón-electrón, donde se inyecta en un átomo del dímero B' de la capa superior, que se encuentra a -78 ζ , y recolectando en: b) la capa superior en un átomo A' que no pertenece al dímero, c) la capa superior en el átomo B' que pertenece al dímero, d) la capa inferior en el átomo A que pertenece al dímero A y e) la capa inferior en el átomo B que no pertenece al dímero.

Para ambas interfases se observa un ensanchamiento en los puntos focales cuando se va del átomo dímero al no dímero (ver fig. 5-11c y d) aunque es más relevante en la frontera β , donde la señal tiene una intensidad de $0.6T_v$, mientras en la frontera α es de $0.1T_v$. Adicionalmente, la presencia de dos puntos focales y la distancia de orden atómica indican que provienen de la interferencia por los dímeros que combinan la señal entre las capas.



Figura 5-12: a) Imagen lateral de la lente de Veselago con bicapa de grafeno para frontera β donde se indica el punto de inyección y los diferentes puntos de detección de b) a e). Imágenes b-e) son mapas de probabilidad de transmisión electrón-electrón, donde se inyecta en un átomo del dímero B' de la capa superior, que se encuentra a -78 ζ , y recolectando en: b) la capa superior en un átomo A' que no pertenece al dímero, c) la capa superior en el átomo B' que pertenece al dímero, d) la capa inferior en el átomo A que pertenece al dímero A y e) la capa inferior en el átomo B que no pertenece al dímero.

Esperamos que esta diferencia se refleje en experimentos en las bicapas de grafeno cuando la inyección se realice a más de -78ζ , donde la paradoja de Klein y los fenómenos de interferencia por los dímeros serán relevantes, y en particular permita observar en junturas con bordes α señales con un punto de enfoque más definido respecto a junturas que contenga un borde β , ya que la señal es desenfocada en este caso y hay poca transmisión a la capa inferior. Los resultados anteriores para las lentes de Veselago amplían resultados de otros autores [46, 66], y constituyen una posible forma de verificación de la calidad de la frontera de las bicapas de

grafeno.

Capítulo 6

Conclusiones y perspectivas

6.1. Conclusiones

A continuación, presentamos las conclusiones más relevantes de este trabajo, incluyendo la sección de la cual se derivan.

1. En la sección 3 se analizó la relación de auto-consistencia y la densidad de estados de un superconductor, cuyo potencial de pares tiene la periodicidad de una red cuadrada, donde se encontró que:

- Las esferas de Andreev en el espacio recíproco aparecen cuando la esfera de Fermi se extiende más allá de la primera zona de Brillouin. Se aprecian efectos de las componentes de la expansión de Fourier del potencial de pares $\Delta_{\mathbf{K}_n}$, sobre las bandas de energía. Ver sección 3.2.
- Se encuentra que el potencial $\Delta_{1,0}$ modifica el valor de la brecha superconductora sobre la superficie de Fermi, de tal manera que el valor de la brecha cerca de los planos de Bragg corresponde a la suma de $\Delta_{0,0}$ y $\Delta_{1,0}$, resultado similar a los arcos de Fermi en la fase "pseudogap". Ver sección 3.2.
- La relación de auto-consistencia cerca de la temperatura crítica, encontrada en la sección 3.3, muestra que el segundo término de la expansión de Fourier del potencial de pares Δ_{1,0}, es comparable con el término homogéneo del potencial de pares Δ_{0,0}, mientras que si la temperatura está cerca de cero, el potencial Δ_{1,0} es despreciable respecto a Δ_{0,0}.
- Se determinaron las condiciones para las que es posible diferenciar entre los dos tipos de potenciales usando la densidad de estados, encontrada en la sección 3.4. Para el potencial $\Delta_{0,0}$ la densidad de estados se comporta de forma similar al modelo BCS, y el

potencial de la red periódica no afecta en gran medida esta densidad. Para el potencial $\Delta_{1,0}$ los potenciales de la red de iones y el de pares periódico alteran considerablemente la densidad de estados, debido a la presencia de reflexiones en los planos de Bragg y reflexiones de Andreev en las esferas, lo que se observa como un segundo pico en la densidad de estados.

2. En la sección 4.3 se analizan las propiedades de transporte en una juntura entre una superred de grafeno y un superconductor. La superred está formada por una lámina de grafeno uniforme con dopaje E_F , a la cual se aplican voltajes "gate" que generan bloques periódicos np, obteniendo que:

- De acuerdo con la conductancia diferencial se observa que la aparición de nuevos puntos de Dirac, los cuales son propios de la superred, se mantiene para la juntura superred-superconductor, sin afectar el número de puntos. Su aparición se da para valores de energía cercanos a los que se observan en una superred de grafeno.
- Para energías finitas, la conductancia normalizada muestra cambios bruscos cuando la energía coincide con la separación entre picos, $E = \epsilon$, lo cual determina la energía de separación entre los puntos de Dirac que son observados en la relación de dispersión. En la segunda derivada de la corriente respecto al voltaje aparece un pico cuando $E = \epsilon$, lo cual hace de la conductancia diferencial de una juntura SL-S y su derivada herramientas para estudiar la creación de nuevos puntos de Dirac por una superred.
- También analizamos el caso de superredes no simétricas, cuando la asimetría es en los voltajes "gate" del bloque np, se encuentra que el comportamiento de los nuevos puntos de Dirac es equivalente al de una superred simétrica con un dopaje efectivo E_F^* . Para el caso en que la asimetría es en la relación entre el ancho de la región n con la región p, el punto de Dirac asociado al de la lámina de grafeno dopada sigue apareciendo en los mapas de conductancia diferencial para una energía E_F^* , pero los nuevos puntos de Dirac aparecen a energías de inyección por encima o por debajo de E_F^* , dependiendo de las características geométricas del bloque np. Se encuentran condiciones de asimetría en anchos para los cuales no pueden ser generados nuevos puntos de Dirac.
- Cuando la energía es menor que delta $(E \le |\Delta|)$ la conductancia diferencial se incrementa respecto a la observada en el sistema sin superconductividad debido a la presencia de reflexiones de Andreev.
- En la sección 4.3.1 analizamos el efecto de superredes finitas. Encontramos que los resultados de una superred semi-infinita se pueden reproducir usando una red finita de 50 o más bloques np.

3. En la sección 4.4.1 estudiamos lentes de Veselago $n_L S n_R$, con n_i una lámina de grafeno dopada tipo n y S un superconductor dopado tipo p. Se examinó el efecto de los parámetros

de acople en las interfaces entre el superconductor y las láminas de grafeno sobre el CAR y el cotunelameiento de electrones. Así mismo, se estudio cómo son afectados los puntos de enfoque la disminuir la Energía de Fermi respecto a un caso muy dopado, donde encontramos que:

- Cuando los parámetros de acople no tienen transparencia perfecta, las reflexiones de Andreev no locales son dominantes respecto al cotunelamiento de electrones. Los lugares donde se encuentran los puntos de enfoque en la conductancia diferencial no son modificados, pero el punto de enfoque más intenso depende de la transparencia en cada interfase.
- Las condiciones en las cuales pueden ocurrir aberraciones ópticas en los mapas de probabilidad de transmisión electrón-electrón y electrón-hueco, se presentan debido a la relación del potencial de pares respecto a las energías de Fermi del superconductor. Cuando la energía de Fermi es alta respecto al potencial de pares, $E_F \gtrsim 400\Delta$, las aberraciones son mínimas y en caso contrario, se observa un ensanchamiento de los puntos focales producto de que la aproximación de Andreev ya no es válida.

4. Se incluyeron superredes de grafeno en lentes de Veselago, para usar su efecto de colimación, generando sistemas de la forma $n_L - SL - S - SL - n_R$, $n_L - SL - S - n_R$ y $n_L - S - SL - n_R$, donde SL es una superred de grafeno. En la sección 4.4.2 se obtienen las probabilidades de transmisión electrón-electrón y electrón-hueco para estas lentes de Veselago, encontrado que:

- Cuando se incluye la superred a la derecha o izquierda en una lente de Veselago $n_L S n_R$, los mapas de probabilidad de transmisión electrón-electrón muestran una colimación de electrones, generando una señal de fondo con una intensidad similar al máximo de la probabilidad donde se enfocan los electrones. Por otro lado, los mapas de probabilidad electrón-hueco mantienen una focalización producto de reflexiones de Andreev cruzadas y no se ven tan afectados por la presencia de la superred.
- Cuando la superred de grafeno se encuentra tanto a la derecha como a la izquierda del superconductor, sistema $n_L SL S SL n_R$, se incrementa la probabilidad de transmisión electrón-hueco, respecto a un sistema donde la superred se encuentra solo a un lado.

5. Se encontró la función de Green de una bicapa de grafeno infinita y usando la ecuación de Dyson con un potencial de corte se obtuvo la densidad de estados de una bicapa de grafeno semi-infinita con bordes zigzag, definidos α y β . A partir de la función de Green semi-infinita se procedió a estudiar una lente de Veselago formada por una juntura pn de bicapas, sistema $bGB_L - bGB_R$, encontrando que:

- Para la bicapa semi-infinita independiente del tipo de borde α o β, el estado de superficie decae de la misma manera conforme nos adentramos, sin embargo, la densidad espectral del borde α presenta una forma diferente a la del borde β. Esto es debido a que el borde α tiene dos átomos no dímeros en la frontera, como se muestra en la sección 5.2. También se observa un salto en la conductancia diferencial cuando la energía es cercana a la de acople entre las monocapas, siendo este más pronunciado en el borde β debido a la cercanía del dímero con la frontera.
- En los mapas de probabilidad de transmisión electrón-electrón mostrados en la sección 5.2.1, el punto de enfoque es afectado por fenómenos de interferencia debido a los átomos que forman parte del dímero. Estos reducen las probabilidades de transmisión entre capas a menos del 1 % respecto a la probabilidad de transmisión de una lente de Veselago con monocapas de grafeno, a diferencia de la frontera α que mantiene probabilidades de transmisión del orden del 60 %. Los fenómenos de interferencia hacen que la frontera β no tenga punto focal bien definido. Estos resultados podrían ser usados para establecer el tipo de frontera en lentes de Veselago con bicapas de grafeno.

6.2. Perspectivas

Los resultados obtenidos en la tesis para superconductores con potencial de pares periódico contrastan con los de superconductividad de alta temperatura crítica en su fase "pseudogap". Un trabajo posterior consiste en solucionar las relaciones de auto-consistencia de manera más general, encontrando las posibles simetrías de cada componente de Fourier del potencial de pares y una correlación de estas con la fase "pseudogap".

En el sistema de lentes de Veselago con superredes de grafeno se pueden profundizar en estudios de los fenómenos de transporte como la conductancia diferencial y la eficiencia para el desdoblamiento de pares de Cooper.

A partir de las funciones de Green obtenidas para las bicapas de grafeno se pueden obtener las funciones de Green de nanocintas con bicapas de grafeno, que pueden ser usadas para construir superredes y examinar las mismas estructuras elaboradas con la monocapa de grafeno. Para realizar este paso es necesario construir, las funciones de Green de bicapas de grafeno superconductoras para realizar interfases bicapas-superconductor y analizar cambios en las reflexiones de Andreev al considerar bicapas de grafeno.

Capítulo 7

Publicaciones

Durante la realización de esta investigación se elaboraron las siguientes publicaciones:

S. Gómez Páez, C. Martínez, W. J. Herrera, A. Levy Yeyati, y P. Burset. Dirac point formation revealed by Andreev tunneling in superlattice-graphene/superconductor junctions, Phys. Rev. B, vol. 100, p. 205429, 2019. https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevB.100.205429.https://arxiv.org/abs/1906.08887. Abstract:

A graphene superlattice is formed by a one-dimensional periodic potential and is characterized by the emergence of new Dirac points in the electronic structure. The group velocity of graphene's massless Dirac fermions at the new points is drastically reduced, resulting in a measurable effect in the conductance spectroscopy. We show here that tunnel spectroscopy using a superconducting hybrid junction is more sensitive to the formation of Dirac points in the spectrum of graphene superlattices due to the additional contribution of Andreev processes. We examine the transport properties of a graphene-based superlattice-superconductor hybrid junction and demonstrate that a superlattice potential can coexist with proximity-induced superconducting correlations. Both effects contribute to change graphene's spectrum for subgap energies, and as a result, the normalized tunneling conductance features sharp changes for voltages proportional to the energy separation between the original and newly generated Dirac points. Consequently, the superconducting differential conductance provides an excellent tool to reveal how the new Dirac points emerge from the original band. This result is robust against asymmetries and finite-size effects in the superlattice potential and is improved by an effective doping comparable to the superconducting gap.

 Camilo Martínez, William J. Herrera, H. Vinck-Posada y Shirley Gómez Páez, Graphenesuperconducting-graphene nanostructures for electron focusing, optik, vol. 197, p. 163202, 2019. https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2019.163202.
 Abstract: Graphene has proven to be a promising candidate for nanotechnological applications, in particular, design Veselago's lenses where the use of pn interfaces could allow to focus electrons without need for magnetic fields. These lenses can study in graphenesuperconducting-graphene structures, where it is possible to focus electrons in electrons or electrons in holes. In this work, we study how tuning the Fermi energy or using imperfect interfaces affects the focusing of electrons or holes allowing to realize conditions that favor hole focusing over electron focusing.

Apéndice A

Ecuación general para el corte de una región usando la ecuación de Dyson

Para encontrar las ecuaciones de Dyson de corte de un sistema infinito se perturba el sistema con un potencial tipo de delta de Dirac $V(x) = U\delta(x - x_0)\hat{T}_l$. La matriz de corte T_c determinará las condiciones en el borde de la función de Green, para facilitar los cálculos usamos dos funciones de corte dependiendo si nos quedamos a la derecha o izquierda como

$$V_L(x) = U\delta(x - x_0)\hat{S}_L, \ x > x_0, \tag{A-1}$$

$$V_R(x) = U\delta(x - x_0)\hat{S}_R, \ x < x_0.$$
 (A-2)

El primer paso para obtener la función de Green semi-infinita o finita es con la ecuación de Dyson para este potencial. Cuando estamos a la derecha del potencial debemos acercarnos a este por la derecha y por lo tanto obtenemos

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{D}^{}(x,x',q,E) = \hat{\boldsymbol{g}}^{}(x,x',q,E) + U\hat{\boldsymbol{g}}^{>}(x,x_{0},q,E)\hat{S}_{R}\hat{\boldsymbol{G}}_{D}^{<}(x_{0},x',q,E).$$
(A-3)

En esta ecuación hemos supuesto que al interaccionar con el potencial de corte el electrón no pasa al otro lado del potencial de corte delta, con lo cual para obtener $\hat{G}_D^{<}(x_0, x', q, E)$ usamos la ecuación anterior para obtener

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{D}^{}(x_{0}, x', q, E) = \hat{\boldsymbol{g}}^{}(x_{0}, x', q, E) + U\hat{\boldsymbol{g}}^{>}(x_{0}, x_{0}, q, E)\hat{S}_{R}\hat{\boldsymbol{G}}_{D}^{<}(x_{0}, x', q, E).$$
(A-4)

Usando las dos ecuaciones anteriores obtenemos

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{D}^{}(x,x',q,E) = \hat{\boldsymbol{g}}^{}(x,x',q,E) + U\hat{\boldsymbol{g}}^{>}(x,x_{0},q,E)\hat{S}_{R}\hat{M}_{R}\hat{\boldsymbol{g}}^{<}(x_{0},x',q,E).$$
(A-5)

donde se definió

$$\hat{M}_R = \left(1 - U\hat{g}^{>}(x_0, x_0, q, E)\hat{S}_R\right)^{-1}.$$
(A-6)

Para realizar un corte a la izquierda simplemente debemos cambiar la matriz de corte y las direcciones de propagación al potencial de corte, con lo cual obtenemos

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{I}^{}(x,x',q,E) = \hat{\boldsymbol{g}}^{}(x,x',q,E) + U\hat{\boldsymbol{g}}^{<}(x,x_{0},q,E)\hat{S}_{L}\hat{M}_{L}\hat{\boldsymbol{g}}^{>}(x_{0},x',q,E).$$
(A-7)

 con

$$\hat{M}_L = \left(1 - U\hat{g}^{<}(x_0, x_0, q, E)\hat{S}_L\right)^{-1}.$$
(A-8)

Para obtener sistemas finitos se procede a hacer cortes de manera secuencial, primero cortando a la derecha en x_0 y posteriormente cortamos a la izquerda el resultado en x_1 , para encontrar la función de Green de una lámina entre x_0 a x_1 . Es de aclarar que, si tomáramos el límite antes de calcular la inversa, obtenemos que este en general no existe lo que hace que no se pueda intercambiar el orden, y en genera que sea conveniente primero calcular la inversa y luego tomar el límite.

Apéndice B

Cálculo de la función de un grafeno semi-infinito usando la ecuación de Dyson

A continuación ilustraremos el proceso de obtener la función de Green de un grafeno semiinfinito a partir de la función de Green de un sistema infinito para lo cual usamos las ecuaciones (2-63) y (2-64) que son

$$\hat{\boldsymbol{g}}^{<}(x,x',q,E) = \frac{-i}{\hbar v_F \cos(\alpha)} e^{-ik(x-x')} \begin{pmatrix} 1 & -e^{i\alpha} \\ -e^{-i\alpha} & 1 \end{pmatrix},$$
(B-1)

$$\hat{\boldsymbol{g}}^{>}(x,x',q,E) = \frac{-i}{\hbar v_F \cos(\alpha)} e^{ik(x-x')} \begin{pmatrix} 1 & e^{-i\alpha} \\ e^{i\alpha} & 1 \end{pmatrix}.$$
(B-2)

La ecuación de Dyson que usaremos es la obtenida en el anexo A

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{D}^{}(x,x',q,E) = \hat{\boldsymbol{g}}^{}(x,x',q,E) + U\hat{\boldsymbol{g}}^{>}(x,x_{0},q,E)\hat{S}_{L}\hat{M}_{R}\hat{\boldsymbol{g}}^{<}(x_{0},x',q,E),$$
(B-3)

donde se definió

$$\hat{M}_R = \left(1 - U\hat{\boldsymbol{g}}^>(x_0, x_0, q, E)\hat{S}_L\right)^{-1},\tag{B-4}$$

donde hacemos el corte en x_0 con una matriz de corte dada por

$$\hat{S}_L = \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{B-5}$$

donde reemplazando la función de Green infinito obtenemos

$$\hat{M}_R = \frac{1}{AUe^{i\alpha} - 1} \begin{pmatrix} AUe^{i\alpha} - 1 & -AU\\ 0 & -1e^{-i\alpha} - 1 \end{pmatrix},$$
(B-6)

 con

$$A = \frac{-i}{2\hbar v \cos \alpha},\tag{B-7}$$

reemplazando (B-6) en (B-3) obtenemos

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{D}^{}(x,x',q,E) = \hat{\boldsymbol{g}}^{}(x,x',q,E) + \frac{A^{2}Ue^{ik(x+x'-2x_{0})}}{AUe^{i\alpha}-1} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} & -1\\ 1 & e^{i\alpha} \end{pmatrix}.$$
(B-8)

Ahora, tomamos el límite cuando Utiende a infinito para obtener la función de Green semi-infinita derecho del grafeno como

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{RR}^{<}(x, x', q, E) = A \left(e^{ik(x'-x)} \begin{pmatrix} 1 & -e^{i\alpha} \\ -e^{-i\alpha} & 1 \end{pmatrix} + e^{ik(x+x')} e^{-2ikx_0} e^{-i\alpha} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} & -1 \\ 1 & -e^{i\alpha} \end{pmatrix} \right),$$

$$(B-9)$$

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{RR}^{>}(x, x', q, E) = A \left(e^{ik(x-x')} \begin{pmatrix} 1 & e^{-i\alpha} \\ e^{i\alpha} & 1 \end{pmatrix} + e^{ik(x+x')} e^{-2ikx_0} e^{-i\alpha} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} & -1 \\ 1 & -e^{i\alpha} \end{pmatrix} \right).$$

$$(B-10)$$

El proceso es similar para obtener la función de Green de la lámina de grafeno, en este se utiliza la función de Green anterior con un potencial de corte $V(x_1) = U\delta(x - x_1)$, pero con la ecuación de Dyson (A-8).

Apéndice C

Función de Green del bloque np y la superred de grafeno

Vamos a obtener la función de Green de un bloque np. Para ello tenemos un bloque n, que va desde x_a a x_c , a un bloque p, que va desde x_c a x_b , usando la ecuación de Dyson. Estamos interesados en la función de Green que van entre los extremos del bloque donde obtenemos

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{LR/RL}^{}(x_{i}, x_{j}) = \hat{\boldsymbol{g}}_{L/R}^{}(x_{i}, x_{c})\hat{T}_{LR/RL} \\
(1 - \hat{\boldsymbol{g}}_{R/L}^{>/<}(x_{c}, x_{c})\hat{T}_{RL/LR}\hat{\boldsymbol{g}}_{L/R}^{}(x_{c}, x_{c})\hat{T}_{LR/RL})^{-1} \\
\hat{\boldsymbol{g}}_{R/L}^{}(x_{c}, x_{j}),$$
(C-1)
$$\hat{\boldsymbol{G}}_{LL/RR}^{>/<}(x_{i}, x_{i}) = \hat{\boldsymbol{g}}_{L/R}^{>/<}(x_{i}, x_{i}) + \hat{\boldsymbol{g}}_{L/R}^{}(x_{i}, x_{c})\hat{T}_{LR/RL} \\
(1 - \hat{\boldsymbol{g}}_{R/L}^{>/<}(x_{c}, x_{c})\hat{T}_{RL/LR}\hat{\boldsymbol{g}}_{L/R}^{}(x_{c}, x_{c})\hat{T}_{LR/RL})^{-1} \\
\hat{\boldsymbol{g}}_{R/L}^{>/<}(x_{c}, x_{c})\hat{T}_{RL/LR}\hat{\boldsymbol{g}}_{L/R}^{}(x_{c}, x_{i}).$$
(C-2)

donde las funciones del bloque np son notadas en mayúsculas y la función de Green $\hat{\boldsymbol{g}}_{L}^{>/<}(x_{j}, x_{i})$ es la de la lámina de grafeno tipo n y la lámina de grafeno tipo p es $\hat{\boldsymbol{g}}_{R}^{>/<}(x_{j}, x_{i})$. Como ambas láminas de grafeno son de borde zigzag, tenemos la misma forma de función de Green

dada por

$$\hat{g}_{L/R}^{<}(x, x', q, E) = \frac{A_{L/R}}{D_{L/R}} e^{ik(x'-x)} \begin{pmatrix} 1 & -e^{i\alpha_{L/R}} \\ -e^{-i\alpha_{L/R}} & 1 \end{pmatrix} \\
+ \frac{A_{L/R}}{D_{L/R}} e^{ik(x+x'-2x_{a/c})} e^{-i\alpha_{L/R}} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha_{L/R}} & -1 \\ 1 & -e^{i\alpha_{L/R}} \end{pmatrix} \\
- \frac{A_{L/R}}{D_{L/R}} e^{-ik(x+x'-2x_{c/b})} e^{-i\alpha_{L/R}} \begin{pmatrix} e^{i\alpha_{L/R}} & 1 \\ -1 & -e^{-i\alpha_{L/R}} \end{pmatrix} \\
+ \frac{A_{L/R}}{D_{L/R}} e^{ik(x-x'+2W_{n/p})} e^{-2i\alpha_{L/R}} \begin{pmatrix} 1 & e^{-i\alpha_{L/R}} \\ e^{i\alpha_{L/R}} & 1 \end{pmatrix}, \quad (C-3)$$

$$\hat{g}_{L/R}^{>}(x, x', q, E) = \frac{A_{L/R}}{D_{L/R}} e^{ik(x-x')} \begin{pmatrix} 1 & e^{-i\alpha_{L/R}} \\ e^{i\alpha_{L/R}} & 1 \end{pmatrix} \\
- \frac{A_{L/R}}{D_{L/R}} e^{ik(x-x')} \begin{pmatrix} 1 & e^{-i\alpha_{L/R}} \\ e^{i\alpha_{L/R}} & 1 \end{pmatrix}$$

$$D_{L/R} \left(e^{i\alpha_{L/R}} - 1 \right) + \frac{A_{L/R}}{D_{L/R}} e^{ik(x+x')} e^{-2ikx_{a/c}} e^{-i\alpha_{L/R}} \left(e^{-i\alpha_{L/R}} - 1 \right) \\ - \frac{A_{L/R}}{D_{L/R}} e^{2ikx_{c/b}} e^{-ik(x+x')} e^{-i\alpha_{L/R}} \left(e^{i\alpha_{L/R}} - 1 \right) \\ - 1 - e^{-i\alpha_{L/R}} + \frac{A_{L/R}}{D_{L/R}} e^{ik(x'-x+2W_{n/p})} e^{-2i\alpha_{L/R}} \left(1 - e^{-i\alpha_{L/R}} \right) \\ + \frac{A_{L/R}}{D_{L/R}} e^{ik(x'-x+2W_{n/p})} e^{-2i\alpha_{L/R}} \left(1 - e^{-i\alpha_{L/R}} \right) , \quad (C-4)$$

 con

$$A_{L/R} = \frac{-i}{2\hbar v_F \cos \alpha_{L/R}} = \frac{-i}{\hbar v_F e^{i\alpha_{L/R}} \left(e^{-2i\alpha_{L/R}} + 1\right)},$$
 (C-5)

$$D_{L/R} = \left(e^{-2i\alpha_{L/R}} e^{2ik(W_{n/p})} + 1 \right).$$
 (C-6)

Se puede simplificar un término común presente en las ecuaciones (C-1) y (C-2) al notar que cuando se usa la función de Green del grafeno y un parámetro de acople dado por

$$\hat{T}_{RL} = \begin{pmatrix} 0 & t \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{C-7}$$

obtenemos

$$\hat{T}_{LR}(1 - \hat{\boldsymbol{g}}_{R}^{>}(x_{c}, x_{c}, q, E)\hat{T}_{RL}\hat{\boldsymbol{g}}_{L}^{<}(x_{c}, x_{c}, q, E)\hat{T}_{LR})^{-1} = K_{LR}\hat{T}_{LR},$$
(C-8)

$$\hat{T}_{RL}(1 - \hat{\boldsymbol{g}}_{L}^{<}(x_{c}, x_{c}, q, E)\hat{T}_{LR}\hat{\boldsymbol{g}}_{R}^{>}(x_{c}, x_{c}, q, E)\hat{T}_{RL})^{-1} = K_{RL}\hat{T}_{RL},$$
(C-9)

 con

$$K_{L/R} = e^{i\alpha_{L/R}} \left(1 - e^{2ikW_{p/n}}\right).$$

Con esto podemos reducir las ecuaciones (C-1) y (C-2) a

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{LR/RL}^{}(x_i, x_j, q, E) = \hat{\boldsymbol{g}}_{L/R}^{}(x_i, x_c, q, E) K_{RL} \hat{\boldsymbol{T}}_{LR/RL} \hat{\boldsymbol{g}}_{R/L}^{}(x_c, x_j, q, E), \quad (C-10)$$

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{LL/RR}^{>/<}(x_i, x_i, q, E) = \hat{\boldsymbol{g}}_{L/R}^{>/<}(x_i, x_i, q, E) + \hat{\boldsymbol{g}}_{L/R}^{}(x_i, x_c, q, E) C \hat{\boldsymbol{T}}_{LR/RL} \hat{\boldsymbol{g}}_{R/L}^{>/<}(x_c, x_c, q, E)$$

$$\hat{\boldsymbol{T}}_{RL/LR} \hat{\boldsymbol{g}}_{L/R}^{>/<}((x_c, x_i, q, E). \quad (C-11)$$

Reemplazando (C-10) y (C-11) en las ecuaciones (C-1) para L/R y R/L obtenemos

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{LR}^{<}(x_a, x_b, q, E) = \frac{\left(-t/\left(\hbar v_F\right)^2\right) e^{ik(W_n + W_p)}}{D_L D_R + \left(\frac{\mathbf{t}}{\hbar v}\right)^2 K_R K_L} \begin{pmatrix} 0 & 0\\ \left(1 + e^{-2i\alpha_R}\right) \left(1 + e^{-2i\alpha_L}\right) & 0 \end{pmatrix}, \quad (C-12)$$

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{RL}^{<}(x_{b}, x_{a}, q, E) = \frac{\left(-t^{*}/(\hbar v)^{2}\right) e^{ik(W_{n}+W_{p})}}{D_{L}D_{R} + \left(\frac{\mathbf{t}}{\hbar v_{F}}\right)^{2} K_{R}K_{L}} \begin{pmatrix} 0 & (1+e^{-2i\alpha_{R}})(1+e^{-2i\alpha_{L}}) \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (C-13)$$

Para determinar la forma de t buscamos que al unir dos láminas de la misma energía de Fermi obtengamos una de ancho $W_n + W_p$, considerando que para la película obtenemos

$$\hat{\boldsymbol{g}}_{L/R}^{<}(x_{a/c}, x_{c/b}, q, E) = \frac{A_L}{D_{L+R}} e^{ik(W_n + W_p)} e^{i\alpha_L} \begin{pmatrix} 0 & -(1 + e^{-2i\alpha_L})^2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$
(C-14)

$$\hat{\boldsymbol{g}}_{R}^{>}(x, x', q, E) = \frac{A_{L}}{D_{L+R}} e^{ik(W_{n}+W_{p})} e^{i\alpha_{L}} \begin{pmatrix} 0 & 0\\ (1+e^{-2i\alpha_{L}})^{2} & 0 \end{pmatrix}$$
(C-15)

con D_{L+R} dado por la ecuación c_6 para el ancho $W_n+W_p,$ donde obtenemos que t satisface la ecuación

$$\frac{A_L}{D_{L+R}}e^{i\alpha_{L/R}} = \frac{-t/\hbar v}{D_L D_R + \left(\frac{\mathbf{t}}{\hbar v_F}\right)^2 K_R K_L}e^{ik(W_n + W_p)},\tag{C-16}$$

que, resuelta, se obtiene que

$$t = \hbar v_F i. \tag{C-17}$$

Esto significa que para unir de manera transparente las películas es necesario que el parámetro sea complejo, para el trabajo normalizaremos el parámetro de acople a $\hbar v_F$, $t \longrightarrow t/\hbar v_F$ y explícitamente la parte compleja del parámetro de acople, con lo cual obtenemos la función de Green del bloque np en los extremos con

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{LL}^{>/<}(x_i, x_i, q, E) = \hat{\boldsymbol{g}}_{L}^{>/<}(x_i, x_i, q, E) - \frac{i}{\hbar v_F D_L} \frac{e^{-i\alpha_R} e^{i2kW_n} t^2}{D_L D_R + t^2 K_R K_L} \left(\begin{array}{cc} (1 + e^{-2i\alpha_L})^2 \left(1 - e^{2ikW_p}\right) & 0\\ 0 & 0 \end{array} \right), \quad (C-18)$$

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{RR}^{>/<}(x_i, x_i, q, E) = \hat{\boldsymbol{g}}_{R}^{>/<}(x_i, x_i, q, E) - \frac{i}{\hbar v_F D_R} \frac{e^{-i\alpha_L} e^{i2kW_p} t^2}{D_L D_R + t^2 K_R K_L} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & (1 + e^{-2i\alpha_R})^2 (1 - e^{i2kW_n}) \end{pmatrix}.$$
(C-19)

Ahora recordamos que

$$\hat{\boldsymbol{g}}_{R}^{<}(b, b, q, E) = \frac{-i}{\hbar v_{F} D_{R}} \begin{pmatrix} 0 & -1 - e^{-2i\alpha_{R}} e^{i2kW_{P}} \\ 0 & e^{-i\alpha_{R}} \left(1 - e^{i2kW_{P}}\right) \end{pmatrix}$$
$$\hat{\boldsymbol{g}}_{L}^{>}(a, a, q, E) = \frac{-i}{\hbar v_{F} D_{L}} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha_{L}} \left(1 - e^{2ikW_{R}}\right) & 0 \\ 1 + e^{-2i\alpha_{L}} e^{2ikW_{L}} & 0 \end{pmatrix}$$

La ecuación anterior permite encontrar la función de Green del bloque np, dada por

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{R}^{<}(b,b,q,E) = \frac{-i}{\hbar v_{F}} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 0 & C_{R} \end{pmatrix}, \qquad (C-20)$$

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{L}^{>}(a,a,q,E) = \frac{-i}{\hbar v_{F}} \begin{pmatrix} C_{L} & 0\\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad (C-21)$$

 con

$$C_{L/R} = \frac{e^{i\alpha_{L/R}} \left(1 - e^{i2kW_{n/p}}\right)}{D_{L/R}} + \frac{e^{-i\alpha_{L/R}} e^{i2kW_{n/p}t^2} \left(1 + e^{-2i\alpha_{L/R}}\right)^2 \left(1 - e^{i2kW_{p/n}}\right)}{D_{L/R} \left(D_L D_R + t^2 K_R K_L\right)}, \quad (C-22)$$

у,

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{LR}^{<}(x_a, x_b, q, E) = \frac{-i}{\hbar v_F} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -E & 0 \end{pmatrix}, \qquad (C-23)$$

$$\hat{\boldsymbol{G}}_{RL}^{<}(x_b, x_a, q, E) = \frac{-i}{\hbar v_F} \begin{pmatrix} 0 & E \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad (C-24)$$

 con

$$E = t \frac{e^{ik(W_n + W_p)}}{D_L D_R + t^2 K_R K_L} \left(1 + e^{-2i\alpha_R}\right) \left(1 + e^{-2i\alpha_L}\right).$$
(C-25)

Apéndice D

Mapas de probabilidad de transmisión para lentes de Veselago con bicapas de grafeno

Para el trabajo se encuentra la probabilidad de transmisión como

$$T_{ee}^{i,j} \propto \left| \hat{G}_{LR,ee}^{i,j}(x,0,x',y',E) \right|^2,$$
 (D-1)

donde $\hat{\boldsymbol{G}}_{RL,ee}^{ij}(x,0,x',y',E)$ es la función de Green de la lente de Veselago que propaga desde el punto x, 0 en el átomo i de la izquierda al átomo j de la derecha en el punto (x',y'). Con esto podemos estudiar dieciséis formas de propagación que están conformadas por los átomos si pertenecen a la capa superior o inferior, como si conforman el dímero $(B' \circ A)$, o no lo conforman $(B \circ A')$.

No es necesario revisar todos los casos debido a las simetrías del sistema, sin embargo, a continuación presentamos todos los casos posibles para la lente de Veselago con borde α o β .



Figura D-1: Mapas de probabilidad de transmisión electrón-electrón para una lente de Veselago con borde α donde se inyecta a -78 ζ , los átomos que conforman el dímero son B' y A.



Figura D-2: Mapas de probabilidad de transmisión electrón-electrón para una lente de Veselago con borde β donde se inyecta a -78 ζ , los átomos que conforman el dímero son B' y A.

Bibliografía

- J. Bardeen, L. N. Cooper, y J. R. Schrieffer, "Microscopic theory of superconductivity," *Phys. Rev.*, vol. 106, p. 16, 1957. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.106.162
- [2] P. G. D. Gennes, Superconductivity Of Metals And Alloys (Advanced Books Classics). Westview Press, 1999.
- [3] P. Monthoux, D. Pines, y G. G. Lonzarich, "Superconductivity without phonons," *Nature*, vol. 450, no. 7173, pp. 1177–1183, Dec 2007. https: //doi.org/10.1038/nature06480
- [4] H. Mohammadpour y A. Asgari, "Crossed andreev reflection in graphene normal-superconductor-normal structures with pseudo-diffusive interfaces," *Physics Letters A*, vol. 375, no. 10, pp. 1339 – 1343, 2011. http://www.sciencedirect.com/ science/article/pii/S0375960111000739
- [5] H. Mohammadpour y A. Asgari, "Enhanced nonlocal andreev reflection in f—s—f graphene spin-valve," *Physica C: Superconductivity and its Applications*, vol. 519, 2015. http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921453415002646
- [6] J. Cayssol, "Crossed andreev reflection in a graphene bipolar transistor," Phys. Rev. Lett., vol. 100, p. 147001, 2008. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.100.147001
- [7] B. Braunecker, P. Burset, y A. Levy Yeyati, "Entanglement detection from conductance measurements in carbon nanotube cooper pair splitters," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 111, p. 136806, 2013. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.111.136806
- [8] L. G. Herrmann, F. Portier, P. Roche, A. L. Yeyati, T. Kontos, y C. Strunk, "Carbon nanotubes as cooper-pair beam splitters," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 104, p. 026801, 2010. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.104.026801
- [9] J. Wang y S. Liu, "Crossed andreev reflection in a zigzag graphene nanoribbonsuperconductor junction," *Phys. Rev. B*, vol. 85, p. 035402, Jan 2012. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.85.035402

- [10] C. Bena, S. Vishveshwara, L. Balents, y M. P. A. Fisher, "Quantum entanglement in carbon nanotubes," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 89, p. 037901, Jun 2002. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.89.037901
- [11] L. Hofstetter, S. Csonka, J. Nygård, y C. Schönenberger, "Cooper pair splitter realized in a two-quantum-dot y-junction," *Nature volume*, vol. 461, 2009. https://doi.org/10.1038/nature08432
- [12] A. Das, Y. Ronen, M. Heiblum, D. Mahalu, A. V. Kretinin, y H. Shtrikman, "High-efficiency cooper pair splitting demonstrated by two-particle conductance resonance and positive noise cross-correlation," *Nature Communications*, vol. 3, no. 1, p. 1165, Nov 2012. https://doi.org/10.1038/ncomms2169
- [13] A. Wasserman, "Efecto del potencial de la red cristalina sobre el espectro de energía de las cuasipartículas en un superconductor," Tesis de pregrado, Colombia, 1999.
- [14] C. Martínez, "Espectro de energía de superconductores periódicos," Tesis de maestría, Bogota D.C. Colombia, 2014.
- [15] M. L. Kulić, "Interplay of electron-phonon interaction and strong correlations: the possible way to high-temperature superconductivity," *Physics Reports*, vol. 338, no. 1, pp. 1 – 264, 2000. http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370157300000089
- [16] M. M. Qazilbash, J. J. Hamlin, R. E. Baumbach, L. Zhang, D. J. Singh, M. B. Maple, y D. N. Basov, "Electronic correlations in the iron pnictides," *Nature Physics*, vol. 5, no. 9, pp. 647–650, Sep 2009. https://doi.org/10.1038/nphys1343
- [17] I. I. Mazin, "Superconductivity gets an iron boost," *Nature*, vol. 464, no. 7286, pp. 183–186, Mar 2010. https://doi.org/10.1038/nature08914
- [18] H. Ghosh, "Higher anisotropic d-wave symmetry in cuprate superconductors," Journal of Physics: Condensed Matter, vol. 11, no. 30, p. L371, 1999. http://stacks.iop.org/0953-8984/11/i=30/a=103
- [19] A. P. Durajski, "Anisotropic evolution of energy gap in bi2212 superconductor," *Frontiers of Physics*, vol. 11, no. 5, p. 117408, 2016. https://doi.org/10.1007/ s11467-016-0595-0
- [20] P. A. Lee, "Amperean pairing and the pseudogap phase of cuprate superconductors," *Phys. Rev. X*, vol. 4, p. 031017, 2014. http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.4. 031017
- [21] A. Kanigel, M. R. Norman, M. Randeria, U. Chatterjee, S. Souma, A. Kaminski, H. M. Fretwell, S. Rosenkranz, M. Shi, T. Sato, T. Takahashi, Z. Z. Li, H. Raffy,

K. Kadowaki, D. Hinks, L. Ozyuzer, y J. C. Campuzano, "Evolution of the pseudogap from fermi arcs to the nodal liquid," *Nature Physics*, vol. 2, no. 7, pp. 447–451, Jul 2006. https://doi.org/10.1038/nphys334

- [22] A. A. Kordyuk, "Pseudogap from arpes experiment: Three gaps in cuprates and topological superconductivity (review article)," *Low Temperature Physics*, vol. 41, no. 5, pp. 319–341, 2015. https://doi.org/10.1063/1.4919371
- [23] O. Fischer, M. Kugler, I. Maggio-Aprile, C. Berthod, y C. Renner, "Scanning tunneling spectroscopy of high-temperature superconductors," *Rev. Mod. Phys.*, vol. 79, pp. 353–419, Mar 2007. https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.79.353
- [24] N. P. Armitage, P. Fournier, y R. L. Greene, "Progress and perspectives on electron-doped cuprates," *Rev. Mod. Phys.*, vol. 82, pp. 2421–2487, Sep 2010. https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.82.2421
- [25] W. L. Yang, A. P. Sorini, C.-C. Chen, B. Moritz, W.-S. Lee, F. Vernay, P. Olalde-Velasco, J. D. Denlinger, B. Delley, J.-H. Chu, J. G. Analytis, I. R. Fisher, Z. A. Ren, J. Yang, W. Lu, Z. X. Zhao, J. van den Brink, Z. Hussain, Z.-X. Shen, y T. P. Devereaux, "Evidence for weak electronic correlations in iron pnictides," *Phys. Rev. B*, vol. 80, p. 014508, Jul 2009. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.80.014508
- [26] L. Degiorgi, "Electronic correlations in iron-pnictide superconductors and beyond: lessons learned from optics," New Journal of Physics, vol. 13, no. 2, p. 023011, feb 2011. https://doi.org/10.1088%2F1367-2630%2F13%2F2%2F023011
- [27] P. Burset, A. L. Yeyati, y A. Martín-Rodero, "Microscopic theory of the proximity effect in superconductor-graphene nanostructures," *Phys. Rev. B*, vol. 77, p. 205425, 2008. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.77.205425
- [28] C. W. J. Beenakker, "Specular andreev reflection in graphene," Phys. Rev. Lett., vol. 97, p. 067007, 2006. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.97.067007
- [29] D. K. Efetov, L. Wang, C. Handschin, K. B. Efetov, J. Shuang, R. Cava, T. Taniguchi, K. Watanabe, J. Hone, C. R. Dean, y P. Kim, "Specular interband andreev reflections at van der waals interfaces between graphene and nbse2," *Nat Phys*, vol. 12, pp. 328–332, 04 2016. http://dx.doi.org/10.1038/nphys3583
- [30] P. R. Wallace, "The band theory of graphite," Phys. Rev., vol. 71, p. 622, 1947. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.71.622
- [31] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos,
 I. V. Grigorieva, y A. A. Firsov, "Electric field effect in atomically thin carbon films," *Science*, vol. 306, p. 666, 2004. http://science.sciencemag.org/content/306/5696/666

- [32] S. Das Sarma, S. Adam, E. H. Hwang, y E. Rossi, "Electronic transport in two-dimensional graphene," *Rev. Mod. Phys.*, vol. 83, pp. 407–470, May 2011. https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.83.407
- [33] A. Rozhkov, G. Giavaras, Y. P. Bliokh, V. Freilikher, y F. Nori, "Electronic properties of mesoscopic graphene structures: Charge confinement and control of spin and charge transport," *Physics Reports*, vol. 503, no. 2, pp. 77 – 114, 2011. http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370157311000469
- [34] T. Wehling, A. Black-Schaffer, y A. Balatsky, "Dirac materials," Advances in Physics, vol. 63, no. 1, pp. 1–76, 2014. https://doi.org/10.1080/00018732.2014.927109
- [35] K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus, y M. S. Dresselhaus, "Edge state in graphene ribbons: Nanometer size effect and edge shape dependence," *Phys. Rev. B*, vol. 54, pp. 17954–17961, 1996. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.54.17954
- [36] T. Low y J. Appenzeller, "Electronic transport properties of a tilted graphene p-n junction," Phys. Rev. B, vol. 80, p. 155406, Oct 2009. https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevB.80.155406
- [37] S. P. Milovanović, D. Moldovan, y F. M. Peeters, "Veselago lensing in graphene with a p-n junction: Classical versus quantum effects," *Journal of Applied Physics*, vol. 118, no. 15, p. 154308, 2015. https://doi.org/10.1063/1.4933395
- [38] V. V. Cheianov, V. Fal'ko, y B. L. Altshuler, "The focusing of electron flow and a veselago lens in graphene p-n junctions," *Science*, vol. 315, p. 1252, 2007. http://science.sciencemag.org/content/315/5816/1252
- [39] K. J. A. Reijnders y M. I. Katsnelson, "Symmetry breaking and (pseudo)spin polarization in veselago lenses for massless dirac fermions," *Phys. Rev. B*, vol. 95, p. 115310, 2017. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.95.115310
- [40] S. Chen, Z. Han, M. M. Elahi, K. M. M. Habib, L. Wang, B. Wen, Y. Gao, T. Taniguchi, K. Watanabe, J. Hone, A. W. Ghosh, y C. R. Dean, "Electron optics with p-n junctions in ballistic graphene," *Science*, vol. 353, p. 1522, 2016. http://science.sciencemag.org/content/353/6307/1522
- [41] S. Gómez Páez, C. Martínez, W. J. Herrera, A. Levy Yeyati, y P. Burset, "Dirac point formation revealed by andreev tunneling in superlattice-graphene/superconductor junctions," *Phys. Rev. B*, vol. 100, p. 205429, 2019. https://link.aps.org/doi/10.1103/ PhysRevB.100.205429
- [42] Y. Cao, V. Fatemi, S. Fang, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, y P. Jarillo-Herrero, "Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices," *Nature*, vol. 556, no. 7699, pp. 43–50, Apr 2018. https://doi.org/10.1038/nature26160
- [43] E. McCann y M. Koshino, "The electronic properties of bilayer graphene," Reports on Progress in Physics, vol. 76, p. 056503, 2013. http://stacks.iop.org/0034-4885/76/i=5/ a=056503
- [44] Y. H. Lai, J. H. Ho, C. P. Chang, y M. F. Lin, "Magnetoelectronic properties of bilayer bernal graphene," *Phys. Rev. B*, vol. 77, p. 085426, 2008. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.77.085426
- [45] A. Orlof, J. Ruseckas, y I. V. Zozoulenko, "Effect of zigzag and armchair edges on the electronic transport in single-layer and bilayer graphene nanoribbons with defects," *Phys. Rev. B*, vol. 88, p. 125409, 2013. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.88.125409
- [46] C. G. Péterfalvi, L. Oroszlány, C. J. Lambert, y J. Cserti, "Intraband electron focusing in bilayer graphene," New Journal of Physics, vol. 14, p. 063028, 2012. http://stacks.iop.org/1367-2630/14/i=6/a=063028
- [47] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, y A. K. Geim, "Chiral tunnelling and the klein paradox in graphene," *Nature Physics*, vol. 22, p. 620, 2006. http://www.nature.com/nphys/journal/v2/n9/abs/nphys384.html
- [48] Z. F. Wang, Q. Li, H. Su, X. Wang, Q. W. Shi, J. Chen, J. Yang, y J. G. Hou, "Electronic structure of bilayer graphene: A real-space green's function study," *Phys. Rev.* B, vol. 75, p. 085424, Feb 2007. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.75.085424
- [49] E. V. Castro, N. M. R. Peres, J. M. B. Lopes dos Santos, A. H. C. Neto, y F. Guinea, "Localized states at zigzag edges of bilayer graphene," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 100, p. 026802, Jan 2008. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.100.026802
- [50] J. B. Oostinga, H. B. Heersche, X. Liu, A. F. Morpurgo, y L. M. K. Vandersypen, "Gate-induced insulating state in bilayer graphene devices," *Nature Materials*, vol. 7, p. 151, 2007. https://doi.org/10.1038/nmat2082
- [51] S.-M. Choi, S.-H. Jhi, y Y.-W. Son, "Controlling energy gap of bilayer graphene by strain," *Nano Letters*, vol. 10, no. 9, pp. 3486–3489, Sep 2010. https://doi.org/10.1021/nl101617x
- [52] E. McCann, D. S. L. Abergel, y V. I. Fal'ko, "The low energy electronic band structure of bilayer graphene," *The European Physical Journal Special Topics*, vol. 148, no. 1, pp. 91–103, Sep 2007. https://doi.org/10.1140/epjst/e2007-00229-1
- [53] C.-H. Park, L. Y. Y.-W. Son, M. L. Cohen, y S. G. Louie, "Anisotropic behaviours of massless dirac fermions in graphene under periodic potentials," *Nature Physics*, vol. 4, pp. 213–217, 2008. http://www.nature.com/nphys/journal/v4/n3/abs/nphys890.html

- [54] P. Burset, A. L. Yeyati, L. Brey, y H. A. Fertig, "Transport in superlattices on single-layer graphene," *Phys. Rev. B*, vol. 83, p. 195434, 2011. https: //link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.83.195434
- [55] M. Barbier, P. Vasilopoulos, y F. M. Peeters, "Single-layer and bilayer graphene superlattices: collimation, additional dirac points and dirac lines," *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 368, p. 5499, 2010. http://rsta.royalsocietypublishing.org/content/368/ 1932/5499
- [56] C.-H. Park, Y.-W. Son, L. Yang, M. L. Cohen, y S. G. Louie, "Electron beam supercollimation in graphene superlattices," *Nano Letters*, vol. 8, no. 9, pp. 2920–2924, 2008. https://doi.org/10.1021/nl801752r
- [57] R. Decker, Y. Wang, V. W. Brar, W. Regan, H.-Z. Tsai, Q. Wu, W. Gannett, A. Zettl, y M. F. Crommie, "Local electronic properties of graphene on a bn substrate via scanning tunneling microscopy," *Nano Letters*, vol. 11, no. 6, pp. 2291–2295, 2011. https://doi.org/10.1021/nl2005115
- [58] J. Xue, J. Sanchez-Yamagishi, D. Bulmash, P. Jacquod, A. Deshpande, K. Watanabe, T. Taniguchi, P. Jarillo-Herrero, y B. J. LeRoy, "Scanning tunnelling microscopy and spectroscopy of ultra-flat graphene on hexagonal boron nitride," *Nature Materials*, vol. 10, p. 282, Feb 2011. https://doi.org/10.1038/nmat2968
- [59] A. D. Palczewski, "Angle-resolved photoemission spectroscopy (arpes) studies of cuprate superconductors," Graduate Theses and Dissertations, 2010.
- [60] A. A. Kordyuk, S. V. Borisenko, M. S. Golden, S. Legner, K. A. Nenkov, M. Knupfer, J. Fink, H. Berger, L. Forró, y R. Follath, "Doping dependence of the fermi surface in (Bi, Pb)₂sr₂cacu₂o_{8+δ}," *Phys. Rev. B*, vol. 66, p. 014502, 2002. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.66.014502
- [61] M. Marinus, H. G. Miller, R. M. Quick, F. Solms, y D. M. van der Walt, "Order parameter for pairing systems," *Phys. Rev. C*, vol. 48, pp. 1713–1718, Oct 1993. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.48.1713
- [62] Y. Sera, T. Ueda, H. Adachi, y M. Ichioka, "Relation of superconducting pairing symmetry and non-magnetic impurity effects in vortex states," *Symmetry*, vol. 12, no. 1, 2020. https://www.mdpi.com/2073-8994/12/1/175
- [63] N. Hayashi, M. Ichioka, y K. Machida, "Effects of gap anisotropy upon the electronic structure around a superconducting vortex," *Phys. Rev. B*, vol. 56, pp. 9052–9063, 1997. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.56.9052

- [64] C. C. Tsuei y J. R. Kirtley, "Pairing symmetry in cuprate superconductors," Rev. Mod. Phys., vol. 72, 2000. https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.72.969
- [65] M. Horio, K. Koshiishi, S. Nakata, K. Hagiwara, Y. Ota, K. Okazaki, S. Shin, S. Ideta, K. Tanaka, A. Takahashi, T. Ohgi, T. Adachi, Y. Koike, y A. Fujimori, "d-wave superconducting gap observed in protect-annealed electron-doped cuprate superconductors Pr_{1.3-x}La_{0.7}Ce_xCuO₄," *Phys. Rev. B*, vol. 100, 2019. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.100.054517
- [66] B. V. Duppen y F. M. Peeters, "Klein paradox for a pn junction in multilayer graphene," EPL (Europhysics Letters), vol. 102, no. 2, p. 27001, 2013. https://doi.org/10.1209%2F0295-5075%2F102%2F27001
- [67] J. M. P. Jr, F. M. Peeters, A. Chaves, y G. A. Farias, "Klein tunneling in single and multiple barriers in graphene," *Semiconductor Science and Technology*, vol. 25, p. 033002, 2010. http://stacks.iop.org/0268-1242/25/i=3/a=033002
- [68] P. Ruffieux, S. Wang, C. S.-S. Bo Yang, J. Liu, T. Dienel, L. Talirz, P. Shinde, C. A. Pignedoli, D. Passerone, T. Dumslaff, X. Feng, K. Müllen, y R. Fasel, "On-surface synthesis of graphene nanoribbons with zigzag edge topology," *Nature letters*, vol. 531, p. 489, 2016. https://doi.org/10.1038/nature17151
- [69] D. Han, Q. Fan, J. D. Wang, J. Huang, Q. Xu, H. Ding, J. Hu, L. Feng, W. Zhang, Z. Z. J. M. Gottfried, y J. Zhu*, "On-surface synthesis of armchair-edged graphene nanoribbons with zigzag topology," J. Phys. Chem. C, vol. 124, pp. 5248–5256, 2020. https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c00018
- [70] C. Li, S. Guéron, A. Chepelianskii, y H. Bouchiat, "Full range of proximity effect probed with superconductor/graphene/superconductor junctions," *Phys. Rev. B*, vol. 94, p. 115405, 2016. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.94.115405
- [71] M. Hayashi, H. Yoshioka, y A. Kanda, "Superconducting proximity effect in graphene nanostructures," *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 248, p. 012002, 2010. https://doi.org/10.1088%2F1742-6596%2F248%2F1%2F012002
- [72] A. Ramasubramaniam, D. Naveh, y E. Towe, "Tunable band gaps in bilayer graphene-bn heterostructures," nano lett., vol. 11, no. 3, pp. 1070–1075, 2011. https://doi.org/10.1021/nl1039499
- [73] W. J. Herrera, P. Burset, y A. L. Yeyati, "A green function approach to graphene-superconductor junctions with well-defined edges," *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 22, no. 27, p. 275304, 2010. https://doi.org/10.1088% 2F0953-8984%2F22%2F27%2F275304

- [74] S. G. PAEZ, "Transporte eléctrico en superconductores no convencionales," Tesis de doctorado, Colombia, 2011.
- [75] J. C. Cuevas, A. Martín-Rodero, y A. L. Yeyati, "Hamiltonian approach to the transport properties of superconducting quantum point contacts," *Phys. Rev. B*, vol. 54, pp. 7366–7379, Sep 1996. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.54.7366
- [76] O. E. C. Barrera, "Transporte eléctrico en nanoestructuras topológicas," Tesis de Docotorado, Colombia, 2019.
- [77] R. Casalbuoni y G. Nardulli, "Inhomogeneous superconductivity in condensed matter and qcd," *Rev. Mod. Phys.*, vol. 76, pp. 263–320, Feb 2004. https: //link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.76.263
- [78] A. Bianconi, A. Valletta, A. Perali, y N. Saini, "High tc superconductivity in a superlattice of quantum stripes," *Solid State Communications*, vol. 102, 1997. http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0038109897000112
- [79] T. Sato, S. Souma, K. Nakayama, K. Terashima, K. Sugawara, T. Takahashi, Y. Kamihara, M. Hirano, y H. Hosono, "Superconducting gap and pseudogap in iron-based layered superconductor la(o1-xfx)feas," *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 77, no. 6, p. 063708, 2008. https://doi.org/10.1143/JPSJ.77.063708
- [80] M. V. Sadovskii, "Pseudogap in high-temperature superconductors," *Physics-Uspekhi*, vol. 44, no. 5, pp. 515–539, may 2001. https://doi.org/10.1070% 2Fpu2001v044n05abeh000902
- [81] C. Bruder, "Andreev scattering in anisotropic superconductors," Phys. Rev. B, vol. 41, pp. 4017–4032, Mar 1990. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.41.4017
- [82] M. Tinkham, Introduction to superconductivity 2nd edition. Krieger Pub Co, 1996.
- [83] Y. Bang, "Superfluid density of the ±s-wave state for the iron-based superconductors," *EPL* (*Europhysics Letters*), vol. 86, no. 4, p. 47001, may 2009. https: //doi.org/10.1209%2F0295-5075%2F86%2F47001
- [84] I. S. Osborne, "A guiding path for graphene circuits," Science, vol. 366, no. 6472, pp. 1468–1469, 2019. https://science.sciencemag.org/content/366/6472/1468.7
- [85] L. Brey y H. A. Fertig, "Emerging zero modes for graphene in a periodic potential," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 103, p. 046809, Jul 2009. https://link.aps.org/doi/10.1103/ PhysRevLett.103.046809

- [86] M. Barbier, P. Vasilopoulos, y F. M. Peeters, "Extra dirac points in the energy spectrum for superlattices on single-layer graphene," *Phys. Rev. B*, vol. 81, p. 075438, Feb 2010. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.81.075438
- [87] M. Yankowitz, J. Xue, D. Cormode, J. D. Sanchez-Yamagishi, K. Watanabe, T. Taniguchi, P. Jarillo-Herrero, P. Jacquod, y B. J. LeRoy, "Emergence of superlattice dirac points in graphene on hexagonal boron nitride," *Nature physics letter*, vol. 8, p. 382, 2012. http://www.nature.com/nmat/journal/v10/n4/abs/nmat2968.html
- [88] L. A. Ponomarenko, R. V. Gorbachev, G. L. Yu, D. C. Elias, R. Jalil, A. A. Patel, A. Mishchenko, A. S. Mayorov, C. R. Woods, J. R. Wallbank, M. Mucha-Kruczynski, B. A. Piot, M. Potemski, I. V. Grigorieva, K. S. Novoselov, F. Guinea, V. I. Fal'ko, y A. K. Geim, "Cloning of dirac fermions in graphene superlattices," *Nature*, vol. 497, p. 594, May 2013. https://doi.org/10.1038/nature12187
- [89] M. Lee, J. R. Wallbank, P. Gallagher, K. Watanabe, T. Taniguchi, V. I. Fal'ko, y D. Goldhaber-Gordon, "Ballistic miniband conduction in a graphene superlattice," *Science*, vol. 353, no. 6307, pp. 1526–1529, 2016. http://science.sciencemag.org/ content/353/6307/1526
- [90] Y. Cao, V. Fatemi, A. Demir, S. Fang, S. L. Tomarken, J. Y. Luo, J. D. Sanchez-Yamagishi, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, R. C. Ashoori, y P. Jarillo-Herrero, "Correlated insulator behaviour at half-filling in magic-angle graphene superlattices," *Nature*, vol. 556, p. 80, Mar 2018. https://doi.org/10.1038/nature26154
- [91] Y. Cao, V. Fatemi, S. Fang, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, y P. Jarillo-Herrero, "Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices," *Nature*, vol. 556, p. 43, Mar 2018, article. https://doi.org/10.1038/nature26160
- [92] P. Rickhaus, M. Weiss, L. Marot, y C. Schönenberger, "Quantum hall effect in graphene with superconducting electrodes," *Nano Letters*, vol. 12, no. 4, pp. 1942–1945, 2012. http://dx.doi.org/10.1021/nl204415s
- [93] V. E. Calado, S. Goswami, G. Nanda, M. Diez, A. R. Akhmerov, K. Watanabe, T. Taniguchi, T. M. Klapwijk, y L. M. K. Vandersypen, "Ballistic josephson junctions in edge-contacted graphene," *Nat Nano*, vol. 10, no. 9, pp. 761–764, 2015. http://dx.doi.org/10.1038/nnano.2015.156
- [94] M. Ben Shalom, M. J. Zhu, V. I. Fal[rsquor]ko, A. Mishchenko, A. V. Kretinin, K. S. Novoselov, C. R. Woods, K. Watanabe, T. Taniguchi, A. K. Geim, y J. R. Prance, "Quantum oscillations of the critical current and high-field superconducting proximity in ballistic graphene," *Nat Phys*, vol. 12, no. 4, pp. 318–322, 2016. http://dx.doi.org/10.1038/nphys3592

- [95] G.-H. Lee y H.-J. Lee, "Proximity coupling in superconductor-graphene heterostructures," *Reports on Progress in Physics*, vol. 81, no. 5, p. 056502, 2018. http://stacks.iop.org/0034-4885/81/i=5/a=056502
- [96] C. W. J. Beenakker, "Colloquium: Andreev reflection and klein tunneling in graphene," *Rev. Mod. Phys.*, vol. 80, pp. 1337–1354, 2008. https://link.aps.org/doi/10.1103/ RevModPhys.80.1337
- [97] T. Dirks, T. L. Hughes, S. Lal, B. Uchoa, Y.-F. Chen, C. Chialvo, P. M. Goldbart, y N. Mason, "Transport through andreev bound states in a graphene quantum dot," *Nature Physics*, vol. 7, pp. 386–390, 2011.
- [98] Z. B. Tan, D. Cox, T. Nieminen, P. Lähteenmäki, D. Golubev, G. B. Lesovik, y P. J. Hakonen, "Cooper pair splitting by means of graphene quantum dots," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 114, p. 096602, Mar 2015. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.114.096602
- [99] C. Tonnoir, A. Kimouche, J. Coraux, L. Magaud, B. Delsol, B. Gilles, y C. Chapelier, "Induced superconductivity in graphene grown on rhenium," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 111, p. 246805, December 2013. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.246805
- [100] B. M. Ludbrook, G. Levy, P. Nigge, M. Zonno, M. Schneider, D. J. Dvorak, C. N. Veenstra, S. Zhdanovich, D. Wong, P. Dosanjh, C. Straß er, A. Stöhr, S. Forti, C. R. Ast, U. Starke, y A. Damascelli, "Evidence for superconductivity in li-decorated monolayer graphene," *Proc. Natl Acad. Sci. USA*, vol. 112, p. 11795, May 2015. https://doi.org/10.1073/pnas.1510435112
- [101] J. Chapman, Y. Su, C. A. Howard, D. Kundys, A. N. Grigorenko, F. Guinea, A. K. Geim, I. V. Grigorieva, y R. R. Nair, "Superconductivity in ca-doped graphene laminates," *Sci. Rep.*, vol. 6, p. 23254, March 2016. https://doi.org/10.1038/srep23254
- [102] A. Di Bernardo, O. Millo, M. Barbone, H. Alpern, Y. Kalcheim, U. Sassi, A. K. Ott, D. De Fazio, D. Yoon, M. Amado, A. C. Ferrari, J. Linder, y J. W. A. Robinson, "p-wave triggered superconductivity in single-layer graphene on an electron-doped oxide superconductor," *Nature Communications*, vol. 8, p. 14024, 01 2017. https://doi.org/10.1038/ncomms14024
- [103] A. G. Moghaddam y M. Zareyan, "Graphene-based electronic spin lenses," Phys. Rev. Lett., vol. 105, p. 146803, Sep 2010. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.105. 146803
- [104] S. Gómez, P. Burset, W. J. Herrera, y A. L. Yeyati, "Selective focusing of electrons and holes in a graphene-based superconducting lens," *Phys. Rev. B*, vol. 85, p. 115411, 2012. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.85.115411

- [105] J. Cserti, A. Pályi, y C. Péterfalvi, "Caustics due to a negative refractive index in circular graphene p-n junctions," Phys. Rev. Lett., vol. 99, p. 246801, Dec 2007. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.99.246801
- [106] Y. Xing, J. Wang, y Q.-f. Sun, "Focusing of electron flow in a bipolar graphene ribbon with different chiralities," *Phys. Rev. B*, vol. 81, p. 165425, Apr 2010. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.81.165425
- [107] O. E. Casas, S. Gómez Páez, A. Levy Yeyati, P. Burset, y W. J. Herrera, "Subgap states in two-dimensional spectroscopy of graphene-based superconducting hybrid junctions," *Phys. Rev. B*, vol. 99, p. 144502, 2019. https://link.aps.org/doi/10.1103/ PhysRevB.99.144502
- [108] G.-H. Lee, G.-H. Park, y H.-J. Lee, "Observation of negative refraction of dirac fermions in graphene," *Nature physic letters*, vol. 11, p. 925, 2015. http://www.nature.com/nphys/journal/v11/n11/full/nphys3460.html
- [109] L. Lin, L. Liao, J. Yin, H. Peng, y Z. Liu, "Building graphene p-n junctions for next-generation photodetection," *Nano Today*, vol. 10, no. 6, pp. 701 – 716, 2015. http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1748013215001358
- [110] H. Cheraghchi, H. Esmailzadeh, y A. G. Moghaddam, "Superconducting electron and hole lenses," *Phys. Rev. B*, vol. 93, 2016. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB. 93.214508
- [111] A. G. Moghaddam y M. Zareyan, "Graphene-based electronic spin lenses," Phys. Rev. Lett., vol. 105, p. 146803, Sep 2010. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.105. 146803
- [112] P. Burset, W. J. Herrera, y A. L. Yeyati, "Microscopic theory of cooper pair beam splitters based on carbon nanotubes," *Phys. Rev. B*, vol. 84, 2011. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.84.115448
- [113] Y. Xu, Y. He, y Y. Yang, "Transmission gaps in graphene superlattices with periodic potential patterns," *Physica B: Condensed Matter*, vol. 457, pp. 188 – 193, 2015. http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921452614007881
- [114] M. Killi, S. Wu, y A. Paramekanti, "Band structures of bilayer graphene superlattices," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 107, p. 086801, 2011. https://link.aps.org/doi/10.1103/ PhysRevLett.107.086801
- [115] J. Li, A. F. Morpurgo, M. Büttiker, y I. Martin, "Marginality of bulk-edge correspondence for single-valley hamiltonians," *Phys. Rev. B*, vol. 82, p. 245404, 2010. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.82.245404

[116] M. Sanderson, Y. S. Ang, y C. Zhang, "Klein tunneling and cone transport in aa-stacked bilayer graphene," *Phys. Rev. B*, vol. 88, p. 245404, 2013. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.88.245404

Declaración

Me permito afirmar que he realizado la presente tesis de manera autónoma y con la única ayuda de los medios permitidos y no diferentes a los mencionados en la propia tesis. Todos los pasajes que se han tomado de manera textual o figurativa de textos publicados y no publicados, los he reconocido en el presente trabajo. Ninguna parte del presente trabajo se ha empleado en ningún otro tipo de tesis.

Bogotá, D.C., 26/01/2021

Camilo Andrés Martínez Montero