

Transporte electrónico en nanocintas hexagonales dopadas y sus efectos termoeléctricos

Kevin González^{1†}, Pedro Orellana¹, Luis Rosales¹

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

†kevin.gonzalez@sansano.usm.cl

Resumen

Investigamos el transporte electrónico a través de redes hexagonales[1] con “buckling”, dopadas y en presencia de un potencial efectivo generado por las impurezas, para esto consideramos una nanocinta en forma de “armchair” dividida en tres regiones: dos guías semi-infinitas y un conductor central donde las impurezas están ligadas a los sitios A(B) en el cristal, como se muestra en la Figura 1.

Reducimos el problema a una cadena unidimensional diatómica con parámetros de “hopping” alternados, presentado en la Figura 2, y usando el modelo de “tight-binding”[2] para describir el Hamiltoniano del sistema (1), podemos describir las ecuaciones de movimiento para los átomos A(B) y asumiendo una solución de onda plana, obtenemos de forma analítica la probabilidad de transmisión en función de la energía $T(\epsilon)$. Con este resultado obtenemos la conductancia eléctrica G y el coeficiente Seebeck S .

$$H_T = \sum_{i=1}^N \epsilon_i^\beta c_i^{(\beta\dagger)} c_i^\beta + \gamma \sum_{\langle i,j \rangle} (c_i^{(\beta\dagger)} c_i^\beta + h.c.)$$

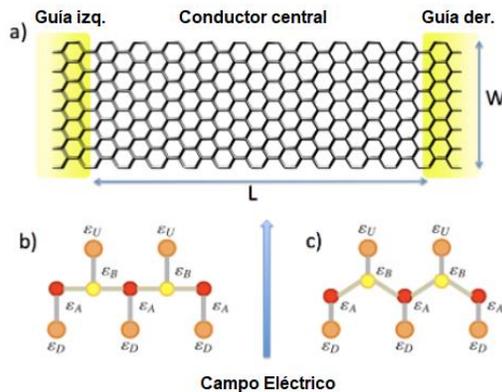


Figura 1: a) Vista esquemática de las nanocintas consideradas; b) Vista lateral de una nanoestructura plana, c) Vista lateral de una nanoestructura no plana.

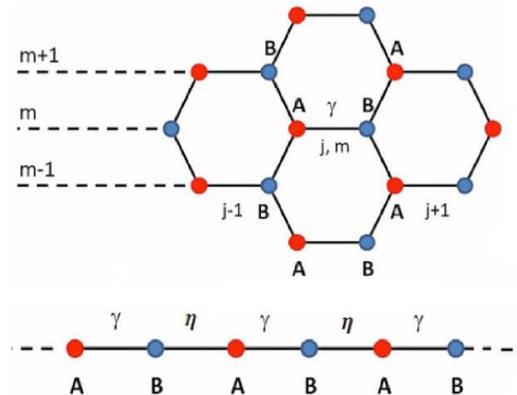


Figura 2: Vista esquemática de la cadena diatómica unidimensional con parámetros de hopping alternados γ y η . Cada dímerno está descrito por una coordenada (j,m) .

Agradecimientos: K.G, L.R y P.A.O agradecen el apoyo de FONDECYT, proyectos 1180914 y 1201876.

Referencias

[1] Castro Neto A H, Guinea F, Peres N M R, Novoselov K S and Geim A K, 2009, <http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.81.109>

[2] Reich S, Maultzsch J, Thomsen C and Ordejón P, 2002, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.035412>