

Universidad Católica de Santa María

Escuela de Postgrado

Doctorado en Matemática Aplicada



**ESTUDIO DE LA MOVILIDAD DE ELECTRONES EN GRAFENO
INTRÍNSECO Y EN LA INTERFASE GRAFENO-CU₂O USANDO
EL MÉTODO MONTE CARLO**

Tesis presentada por la Maestra:
Quispe Abarca, Hilda Maricela
Para optar el Grado Académico de:
Doctora en Matemática Aplicada

Asesor:
Dr. Alcazar Rojas, Leopoldo Oswaldo

Arequipa – Perú

2021

UCSM-ERP

UNIVERSIDAD CATÓLICA DE SANTA MARÍA
ESCUELA DE POSTGRADO
DICTAMEN APROBACIÓN DE BORRADOR DE TESIS

Arequipa, 12 de Julio del 2021

Dictamen: 000683-C-EPG-2021

Visto el borrador del expediente 000683, presentado por:

2015006212 - QUISPE ABARCA HILDA MARICELA

Titulado:

**ESTUDIO DE LA MOVILIDAD DE ELECTRONES EN GRAFENO INTRÍNSECO Y EN LA INTERFASE
GRAFENO-CU₂O USANDO EL MÉTODO MONTE CARLO**

Nuestro dictamen es:

APROBADO

**1634 - ALCAZAR ROJAS HERMAN ENRIQUE
DICTAMINADOR**



**1748 - CALDERON RUIZ GUILLERMO ENRIQUE
DICTAMINADOR**



**2632 - GOMEZ VALDEZ BADHIN
DICTAMINADOR**



**2825 - CARRASCO BOCANGEL JULIO CESAR
DICTAMINADOR**



**2873 - CACERES HUAMBO ALBERTO
DICTAMINADOR**



Dedicatoria

Ut mater omnes Santa María virgo †.

A la madre y maestra de todos, a Santa María, Virgen



Agradecimientos

A Dios por darme la vida y tener la oportunidad de seguir los estudios doctorales en la UCSM.

A mis amados hijos y esposo por la paciencia y comprensión durante todo este tiempo.

A mis amados padres y hermanos que me incentivaron en aprender y hacer algo nuevo cada día, sobre todo darme ánimo frente a las dificultades.

Al estimado, Dr. Leopoldo Alcazar, por la revisión exhaustiva de este trabajo como asesor.

Al estimado, PhD. Hermann Alcazar, coordinador del laboratorio de Investigación de Materiales Avanzados de la UCSM, por permitirme participar en el proceso experimental de la obtención del grafeno sobre láminas de cobre.

A todo el staff de Catedráticos que participaron en el Doctorado en Matemática Aplicada, por haber transmitido los diversos conocimientos que permitieron encaminar y llegar al término de esta tesis.

A todos mis queridos amigos y amigas que me alentaron a lo largo de la vida.

Epígrafe

*“Follow your interests, get the best available education and training, set your sights high,
be persistent, be flexible, keep your options open, accept help when offered, and be
prepared to help otros”.*

*- Mildred Dresselhaus -
Queen of Carbon (1930-2017)*



Resumen

El estudio de la movilidad de los electrones sometidos a campos eléctricos moderados aplicados sobre grafeno intrínseco y en grafeno sobre el sustrato de Cu₂O, manteniendo la temperatura constante, se realizó con la implementación de un programa en Matlab. En la simulación se utiliza el método numérico de Monte Carlo, para resolver la ecuación de transporte de Boltzmann semiclásica. Para una mayor aproximación con el fenómeno del transporte de electrones en el grafeno, se incluye diferentes mecanismos de dispersión tales como la dispersión con: fonones acústicos, fonones ópticos, fonones ópticos superficiales, impurezas remotas y la presencia de la rugosidad de la interfase. Además de considerar el principio de exclusión de Pauli mediante la discretización del espacio recíproco, siguiendo una simetría polar.

Los resultados obtenidos para la movilidad del grafeno intrínseco muestran valores, en el rango de $8 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ a 10^{12} cm^{-2} , cercanos a resultados bibliográficos dados por Shishir y Ferry (2009) y resultan ser entre 3 y 10 veces mayor que la movilidad en el grafeno sobre sustrato de Cu₂O, mostrando la gran influencia del sustrato, cuando se deposita grafeno sobre cobre. La movilidad de los electrones en el grafeno sobre sustrato de Cu₂O muestra un máximo alrededor de una densidad electrónica de $1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, prediciendo que hay valores óptimos de esta variable para la utilización de grafeno sobre este sustrato. Por otra parte, la energía media de electrones se mantiene casi constante con campos eléctricos hasta 1.5 kVcm^{-1} para grafeno sobre sustrato mientras que para el grafeno intrínseco es ligeramente proporcional al campo eléctrico. Al comparar los valores de la energía media de electrones, esta es mayor cuando el sustrato está presente debido mayormente a que los electrones ganan gran energía por absorción de fonones óptico superficiales, dentro del rango de energía estudiado. Esto refuerza la importancia del sustrato como fuente de degradación de las propiedades eléctricas del grafeno.

Palabras clave: Grafeno, sustrato de Cu₂O, Monte Carlo, Ecuación de Transporte de Boltzmann semiclásica, movilidad de electrones de conducción, dispersión electrón-fonón.

Abstract

The study of the mobility of electrons subjected to moderate electric fields applied on intrinsic graphene and on graphene on the Cu₂O substrate, keeping the temperature constant, was carried out with the implementation of a program in Matlab. In the simulation, the Monte Carlo numerical method is used to solve the semi-classical Boltzmann transport equation. For a better approach to the phenomenon of electron transport in graphene, different scattering mechanisms are included, such as scattering with: acoustic phonons, optical phonons, surface optical phonons, remote impurities and the presence of roughness at the interface. In addition to considering the Pauli exclusion principle through the discretization of the reciprocal space, following a polar symmetry.

The results obtained for the mobility of intrinsic graphene show values, in the range of $8 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ a 10^{12} cm^{-2} , close to bibliographic results given by Shishir y Ferry (2009) and they turn out to be between 3 and 10 times greater than the mobility in graphene on Cu₂O substrate, showing the great influence of the substrate, when graphene is deposited on copper. Electron mobility in graphene on Cu₂O substrate shows a maximum around an electron density of $1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, predicting that there are optimal values of this variable for the use graphene on this substrate. Otherwise, the average energy of the electron remains almost constant with electric fields up to 1.5 kVcm^{-1} for graphene on substrate while for intrinsic graphene it is slightly proportional to the electric field. When comparing the energy values of the electron, this is higher when the substrate is present, mainly because the electrons gain great energy by absorption of surface optical phonons, within the energy range studied. This reinforces the importance of the substrate as a source of degradation of the electrical properties of graphene.

Key words: Graphene, Cu₂O substrate, Monte Carlo, semi-classical Boltzmann Transport Equation, mobility of conduction electrons, electron-phonon scattering.

Índice general

Resumen

Abstract

Introducción 1

Hipótesis 3

1. Marco Teórico 4

1.1. Revisión de los fundamentos teóricos 4

1.1.1. Aspectos cristalográficos para el grafeno 4

1.1.2. Relación de dispersión para el grafeno 7

1.2. Antecedentes en el transporte de electrones en grafeno intrínseco 9

1.3. Antecedentes en el transporte de electrones en grafeno sobre sustrato 11

1.4. Descripción de la ecuación de transporte de electrones en grafeno 12

1.4.1. Teorema de Liouville 13

1.4.2. Ecuación del transporte de Boltzmann (ETB) semiclásica 13

1.4.3. Función de Distribución de Fermi-Dirac 17

1.5. Método de Monte Carlo 18

1.6. Teorema de Birkhoff 20

1.7. Propiedades de Autocorrelación de modelos estacionarios en los procesos estocásticos 21

1.8. Propiedades del óxido cuproso (Cu_2O) 23

1.9. Movilidad de los electrones 24

2. Metodología 25

2.1. Modelo físico-matemático que representa al transporte de electrones en el grafeno intrínseco y en el grafeno sobre el sustrato de Cu_2O 25

2.1.1. Tasas de dispersión incluidas para el transporte de electrones en grafeno intrínseco 26

2.1.1.1. Tasa de dispersión debido al fonón acústico.....	27
2.1.1.2. Tasa de dispersión debido al fonón óptico.....	28
2.1.2. Tasas de dispersión incluidas para el transporte de electrones en grafeno sobre sustrato de Cu ₂ O.....	29
2.1.2.1. Tasa de dispersión debido a impurezas remotas	30
2.1.2.2. Tasa de dispersión debido a rugosidad en la interfase Grafeno-Cu ₂ O..	32
2.1.2.3. Tasa de dispersión debido a fonones óptico polares superficiales en la interfase Grafeno-Cu ₂ O.....	33
2.2. Implementación del método Monte Carlo en el estudio del transporte de electrones en el grafeno	35
2.2.1. Descripción estadística del sistema de partículas cargadas (electrones)	39
2.2.2. Inclusión de la degenerancia en el método Monte Carlo para el grafeno	41
2.2.3. Variación de la función de distribución en función de la energía	43
2.3. Descripción del procedimiento computacional del simulador implementado en Matlab.....	46
2.3.1. Planificación de la simulación.....	47
2.3.1.1. Ubicación espacial.....	47
2.3.1.2. Ubicación temporal.....	47
2.3.1.3. Unidades de estudio.....	48
2.3.2. Información generada por el simulador MC-grafeno	49
2.3.3. Análisis de la autocovarianza.....	49
3. Resultados y Discusión.....	50
3.1. Introducción	50
3.2. Análisis de la fluctuación de la velocidad.....	50
3.3. Resultados de las simulaciones con el método Monte Carlo para la solución de la ETB semiclásica para determinar la movilidad de electrones en el grafeno.....	56
3.3.1. Grafeno intrínseco	56

3.3.1.1. Evolución y comparación de la velocidad en función del tiempo para diferentes campos eléctricos, para grafeno intrínseco.....	56
3.3.1.2. Distribución de electrones en el espacio recíproco, para grafeno intrínseco	58
3.3.1.3. Velocidad en función al campo eléctrico para grafeno intrínseco para diferentes densidades electrónicas	61
3.3.1.4. Comparación de la velocidad y de la energía de los electrones en función al campo eléctrico para diferentes concentraciones de los portadores para grafeno intrínseco.....	64
3.3.1.5. Comparación de la movilidad en función de la concentración de los portadores para grafeno intrínseco.....	67
3.3.2. Grafeno sobre el sustrato de Cu ₂ O.....	68
3.3.2.1. Evolución y comparación de la velocidad en función del tiempo para diferentes campos eléctricos, para grafeno sobre sustrato de Cu ₂ O...	69
3.3.2.2. Distribución de electrones en el espacio recíproco, para grafeno sobre sustrato	70
3.3.2.3. Velocidad en función al campo eléctrico para el Grafeno sobre Cu ₂ O para diferentes densidades electrónicas.....	71
3.3.2.4. Comparación de la velocidad y de la energía de los electrones en función al campo eléctrico para diferentes concentraciones de los portadores, para grafeno sobre sustrato de Cu ₂ O	74
3.3.2.5. Comparación de la movilidad en función de la concentración de los portadores para grafeno sobre sustrato Cu ₂ O.....	77
3.4. Análisis de la influencia del sustrato de Cu ₂ O	78
Conclusiones.....	80
Sugerencias.....	82
Referencias Bibliográficas	83
Anexo A: Búsquedas en SCOPUS	
A.1. Publicaciones con la palabra ‘graphene’ en la base de datos SCOPUS	

A.2. Estadística de trabajos publicados con las palabras claves 'Boltzmann and graphene' buscados en la base de datos SCOPUS

A.3. Estadística de trabajos publicados con las palabras claves 'Monte Carlo and graphene' buscados en la base de datos SCOPUS

Anexo B: Alotropías del Carbono

B.1. Cristales de carbono

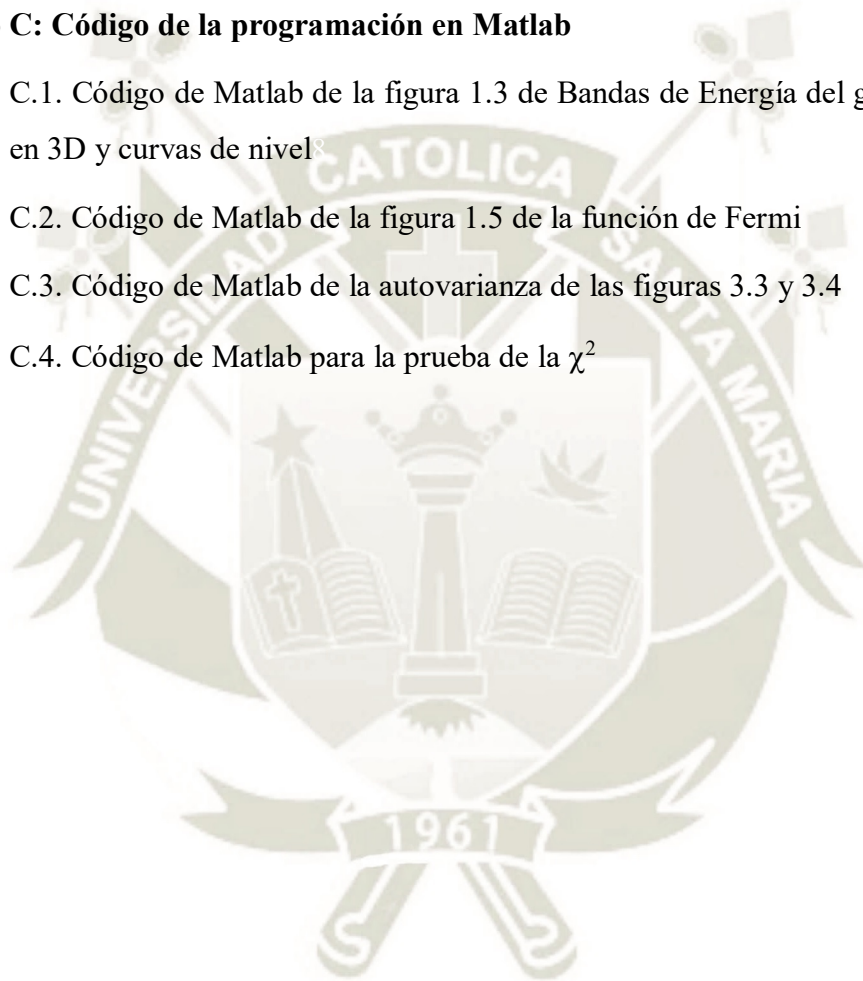
Anexo C: Código de la programación en Matlab

C.1. Código de Matlab de la figura 1.3 de Bandas de Energía del grafeno intrínseco en 3D y curvas de nivel

C.2. Código de Matlab de la figura 1.5 de la función de Fermi

C.3. Código de Matlab de la autovarianza de las figuras 3.3 y 3.4

C.4. Código de Matlab para la prueba de la χ^2



Índice de tablas

Tabla 1.1 – Parámetros físicos del Cu_2O	24
Tabla 2.1 – Parámetros usados en el transporte de electrones para el Grafeno, con sus respectivas referencias	48
Tabla 3.1 – Influencia en la velocidad deriva media en estado estacionario en función del número de electrones incluidos en la simulación para grafeno intrínseco.....	51
Tabla 3.2 – Influencia en la velocidad deriva media en estado estacionario en función del número de electrones incluidos para grafeno sobre sustrato de Cu_2O	53
Tabla 3.3 – Velocidad de los electrones en el grafeno intrínseco en estado transitoria (pico) y en estado estacionario, que se muestran en el grafico 3.5.....	57
Tabla 3.4 – Energía de los electrones en el grafeno sobre el sustrato de Cu_2O para diferentes densidades electrónicas con intensidades de campos eléctricos bajos	67
Tabla 3.5 – Velocidad de los electrones en el grafeno sobre el sustrato de Cu_2O tanto en estado transitorio (pico) y en estado estacionario, que se muestran en el grafico 3.12.	70
Tabla 3.6 – Energía de los electrones en el grafeno sobre el sustrato de Cu_2O para diferentes densidades electrónicas con intensidades de campos eléctricos bajos	77
Tabla 3.7 – Comparación de la movilidad del grafeno intrínseco y de grafeno sobre sustrato de Cu_2O para algunas densidades electrónicas.	79

Índice de figuras

Figura 1.1 – Red del grafeno, cuyos vectores primitivos son $\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(3, \sqrt{3})$ y $\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3})$ con parámetro de red $a = 0.142$ nm.....	5
Figura 1.2 – Red recíproca del grafeno de vectores primitivos recíprocos \vec{b}_1 y \vec{b}_2 . Fuente: elaboración adaptada de la referencia Castro Neto y col (2009).....	6
Figura 1.3 – Relación de dispersión para el grafeno según la ecuación (1.10), donde se puede observar los conos de Dirac encerrados de rojo. Así mismo, se observa la banda de conducción π y la banda de valencia π^*	7
Figura 1.4 – Relación de dispersión para la banda de conducción del grafeno, de acuerdo con la ecuación (1.10), se observa la posición de los puntos de Dirac K y K' en el plano k_x, k_y del espacio recíproco.....	8
Figura 1.5 – Evaluación de la derivada de la ecuación (1.10) en función del número de iteraciones, el valor final de esta aproximación es 1.70275×10^{-5}	8
Figura 1.6 – Representación del espacio de fase con el momento semiclassical $k = p/\hbar$ y la posición $r(x, y)$ de una muestra en $t = 0$ con las coordenadas del espacio de fase $d^2k d^2r$ y en un tiempo de evolución posterior t es el punto posterior en el espacio de fase $d^2k' d^2r'$, debido a un agente.....	14
Figura 1.7 – Función de distribución de Fermi Dirac, para $T = 0K$ es una función escalón, donde E_F limita los estados vacíos de los estados ocupados, que para el caso del grafeno es aproximadamente 0.117eV. Para otras temperaturas que se muestran los electrones pasan a ocupar otros estados vacíos próximos a la energía de Fermi.....	18
Figura 2.1 – Trayectoria de un electrón sometido a un campo eléctrico externo, velocidad de arrastre, \vec{v}_{ar} . También se muestra el cambio del vector de onda del electrón debido a algún tipo de potencial de dispersión.....	26
Figura 2.2 – Tasa de dispersión en función de la energía para los fonones acústicos.....	27
Figura 2.3 – Tasa de dispersión en función de la energía para los fonones ópticos, se muestra que es mayor la tasa de dispersión debido a fonones ópticos por absorción que de emisión.	28

Figura 2.4 – Tasas de dispersión para el grafeno sobre el sustrato de Cu2O para $n = 1 \times 10^{12}$ cm^{-2} se mantiene constante $ni = 8.86 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.	29
Figura 2.5 – Grafeno intrínseco ideal sobre el sustrato de Cu2O, con una capa rugosa del Cu2O de 1nm de espesor.	30
Figura 2.6 – Vector de onda del electrón incidente y dispersado a causa de una impureza remota.	30
Figura 2.7 – Tasa de dispersión por impurezas remotas para diferentes densidades electrónica $n = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $n = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ se mantiene constante $ni = 8.86 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.	32
Figura 2.8 – Tasa de dispersión debido a la rugosidad del sustrato para diferentes densidades electrónica $n = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $n = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, se mantiene constante $ni = 8.86 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.	33
Figura 2.9 – Tasa de dispersión por fonones ópticos superficiales para diferentes densidades electrónicas $n = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $n = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, se mantiene constante $ni = 8.86 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.	34
Figura 2.10 – Prueba de la aleatoriedad al generador de números aleatorios.	36
Figura 2.11 – Proceso de selección de los mecanismos de dispersión.	39
Figura 2.12 – Discretización del espacio recíproco para la función de distribución de estados, donde se muestra la forma como se van ocupando los electrones de los niveles más bajos.	43
Figura 2.13 – Evolución del conjunto de electrones en el tiempo respecto a la discretización (k, θ) , usando el principio de exclusión de Pauli para grafeno intrínseco con campo eléctrico de 0.5 kVcm^{-1} y densidad electrónica $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, para diferentes tiempos, en el inicio de la simulación $t = 0 \text{ ps}$, en un tiempo posterior $t = 0.25 \text{ ps}$ y $t = 15 \text{ ps}$.	44
Figura 2.14 – Evolución del conjunto de electrones en el tiempo respecto a la discretización (k, θ) usando el principio de exclusión de Pauli para grafeno sobre el sustrato con campo eléctrico de 0.5 kVcm^{-1} y densidad electrónica $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, para diferentes tiempos, en el inicio de la simulación $t = 0 \text{ ps}$, en un tiempo posterior $t = 0.25 \text{ ps}$ y $t = 15 \text{ ps}$.	45

- Figura 2.15 – Diagrama de operación del simulador MC-grafeno implementado en este trabajo.....47
- Figura 3.1 – Velocidad en función del tiempo para grafeno intrínseco, sujetos a campo eléctrico constante de $1.1 \times 10^5 \text{ Vcm}^{-1}$ en la dirección [100] y densidad electrónica de $n = 1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ para: 10000 electrones (línea naranja), 30000 electrones (línea dorada), 50000 electrones (línea verde), 70000 electrones (línea azul) y 100000 electrones (línea roja), para dos procesadores (a) INTEL y (b) AMD....51
- Figura 3.2 – Velocidad en función del tiempo para grafeno sobre sustrato de Cu_2O , sujetos a campo eléctrico constante de $1.1 \times 10^5 \text{ Vcm}^{-1}$ en la dirección [100], densidad electrónica $n = 1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y concentración de impurezas remotas de $n_i = 8.861 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ para simulaciones con diferentes números de electrones: línea naranja con 10000 electrones, línea dorada con 30000 electrones, línea verde con 50000 electrones, línea azul con 70000 electrones y línea roja con 100000 electrones.....52
- Figura 3.3 – Función de autocorrelación para grafeno intrínseco en función de los ‘lag’ para: (a) 10000 electrones, (b) 30000 electrones, (c) 50000 electrones, (d) 70000 electrones y (e) 100000 electrones, con densidad electrónica de $n = 1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, para un campo eléctrico de $1.1 \times 10^5 \text{ V cm}^{-1}$ en la dirección [100].....54
- Figura 3.4 – Función de autocorrelación para grafeno sobre sustrato Cu_2O en función de los ‘lag’ para: (a) 10000 electrones, (b) 30000 electrones, (c) 50000 electrones, (d) 70000 electrones y (e) 100000 electrones, con densidad electrónica $n = 1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, concentración de impurezas remotas de $n_i = 8.861 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, para un campo eléctrico de $1.1 \times 10^5 \text{ V cm}^{-1}$ en la dirección [100].....55
- Figura 3.5 – Comparación del comportamiento de la velocidad media de los electrones en el grafeno intrínseco con densidad electrónica de $n = 1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y campos eléctricos desde 0.3 kV cm^{-1} hasta 30 kVcm^{-1}57
- Figura 3.6 – Evolución de la distribución de electrones para la densidad electrónica de $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, en grafeno intrínseco a lo largo de k_x para campos eléctricos de: (a) $E = 0.4 \text{ kVcm}^{-1}$, (b) $E = 0.5 \text{ kVcm}^{-1}$, (c) $E = 0.6 \text{ k cm}^{-1}$, (d) $E = 0.7 \text{ kVcm}^{-1}$, (e) $E = 0.9 \text{ kVcm}^{-1}$ y (f) $E = 1.1 \text{ kVcm}^{-1}$, para el tiempo de 15 ps.....59
- Figura 3.7 – Evolución de la distribución de electrones para la densidad electrónica de $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, en grafeno intrínseco a lo largo de k_y para campos eléctricos de:

(a) $E = 0.4 \text{ kV cm}^{-1}$, (b) $E = 0.5 \text{ kV cm}^{-1}$, (c) $E = 0.6 \text{ kV cm}^{-1}$, (d) $E = 0.7 \text{ kV cm}^{-1}$, (e) $E = 0.9 \text{ kV cm}^{-1}$ y (f) $E = 1.1 \text{ kV cm}^{-1}$, para el tiempo de 15 ps.60

Figura 3.8 – Velocidad de arrastre en función del campo eléctrico para los electrones en el grafeno intrínseco para las concentraciones de (a) $n = 1 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, (b) $n = 2 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, (c) $n = 4 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, (d) $n = 5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, (e) $n = 6 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, (f) $n = 7 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, (g) $n = 8 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, (h) $n = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, (i) $n = 1.2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, (j) $n = 1.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, (k) $n = 2.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, (l) $n = 2.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, (m) $n = 3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, (n) $n = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, (ñ) $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, (o) $n = 7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, (p) $n = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y (q) $n = 1.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Donde μ_e representa a la movilidad para la respectiva densidad electrónica.....64

Figura 3.9 – Velocidad los electrones en el grafeno intrínseco en función del campo eléctrico, comparado para las densidades electrónicas de $n = 1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n = 5.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $n = 1.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$65

Figura 3.10 – Energía de los electrones en el grafeno intrínseco en función del campo eléctrico, comparado para diferentes densidades electrónicas de $n = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n = 7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 2.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 1.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 8 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ y $n = 7 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$66

Figura 3.11 – Movilidad de los electrones en el grafeno intrínseco, comparado con datos experimentales de Shishir y Ferry (2009).68

Figura 3.12 – Velocidad de los electrones en el grafeno sobre el sustrato de Cu₂O, con concentración de impurezas remotas de $n_i = 8.86 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, con densidad electrónica de $n = 1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y campos eléctricos desde 0.3 kV cm^{-1} hasta 25 kV cm^{-2}69

Figura 3.13 – Evolución de la distribución de electrones para la densidad electrónica de $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, en grafeno sobre Cu₂O a lo largo de k_x para campos eléctricos de: (a) $E = 0.4 \text{ kV cm}^{-1}$, (b) $E = 0.5 \text{ kV cm}^{-1}$, (b) $E = 0.6 \text{ kV cm}^{-1}$, (d) $E = 0.7 \text{ kV cm}^{-1}$, (e) $E = 0.9 \text{ kV cm}^{-1}$ y $E = 1.1 \text{ kV cm}^{-1}$, para el tiempo de 15 ps.....71

Figura 3.14 – Evolución de las distribución de electrones para la densidad electrónica de $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, en grafeno sobre Cu₂O a lo largo de k_y para campos eléctricos de: (a) $E = 0.4 \text{ kV cm}^{-1}$, (b) $E = 0.5 \text{ kV cm}^{-1}$, (b) $E = 0.6 \text{ kV cm}^{-1}$, (d) $E = 0.7 \text{ kV cm}^{-1}$, (e) $E = 0.9 \text{ kV cm}^{-1}$ y $E = 1.1 \text{ kV cm}^{-1}$, para el tiempo de 15 ps.72

- Figura 3.15 – Velocidad de arrastre en función del campo eléctrico para los electrones en el grafeno sobre el sustrato de Cu₂O con concentración de impurezas remotas de $n_i = 8.86 \times 10^{-11} \text{ cm}^{-2}$, donde μ_e representa a la movilidad para las diferentes densidades electrónicas de: $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n = 1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n = 1.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $n = 4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$74
- Figura 3.16 – Velocidad en función del campo eléctrico para los electrones en el grafeno sobre el sustrato de Cu₂O con concentración de impurezas remotas de $n_i = 8.86 \times 10^{-11} \text{ cm}^{-2}$, para (a) para densidades electrónicas de $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ (b) $n = 1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$75
- Figura 3.17 – Energía de los electrones en el grafeno sobre el sustrato de Cu₂O en función del campo eléctrico, con concentración de impurezas remotas de $n_i = 8.86 \times 10^{-11} \text{ cm}^{-2}$ y densidades electrónicas de: $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 1,0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n = 1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n = 1.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n = 2.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n = 3.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $n = 4.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$76
- Figura 3.18 – Movilidad de los electrones en el grafeno sobre el sustrato de Cu₂O para una concentración de impurezas remotas de $n_i = 8.86 \times 10^{-11} \text{ cm}^{-2}$78

Lista de abreviaturas

Cu	Cobre
Cu ₂ O	Oxido cuproso
CVD	Chemical Vapor Deposition
ETB	Ecuación de transporte de Boltzmann
ESTB	Ecuación semiclásica del transporte de Boltzmann
MC	Monte Carlo
GFET	Grafeno (G) transistores de efecto de campo
ZB	Zona de Brillouin
G-FET	transistor de efecto de campo de grafeno
2D	dos dimensiones
3D	tres dimensiones

Lista de símbolos

$\vec{\nabla}_r$	operador gradiente
\subseteq	subconjunto
\in	pertenece
\int	integración
∂	derivada parcial
δ_{ji}	delta de Kronecker
\vec{a}_i	vector primitivo de la red directa en 2D $i = 1, 2$
\vec{b}_j	vector primitivo de la red recíproca en 2D $j = 1, 2$
\vec{G}_{2D}	vector genérico de la red recíproca
\vec{T}_{2D}	vector de traslación en la red de Bravais
K, K'	puntos Dirac para el Grafeno
\mathbb{N}^2	número natural
\mathbb{Z}^2	número entero
\mathbb{R}^2	número real
E_k	energía del electrón con vector de onda k
k_x, k_y	vector de onda en la dirección x y y respectivamente

\sum	sumatoria
$D(k)$	densidad de estados en espacio recíproco
e	carga elemental
$\mathcal{F}^v(E_k)$	función de distribución de Fermi- Dirac
\hbar	constante de Planck reducida o constante de Dirac
k_F	radio de Fermi
μ	potencial químico
T	temperatura absoluta
v_F	velocidad de Fermi
\vec{E}	campo eléctrico
\vec{v}_{gr}	velocidad de grupo
d^2k, d^2r	coordenada en el espacio de fases
$\mathcal{T}(\vec{k}, \vec{k}')$	tasa de transición del estado k al estado k'
$f(P)$	función del espacio de fase
F_N	función que evoluciona con el tiempo
$\mathcal{F}^v(k, r, t)$	función de distribución fuera del equilibrio
$P(v_i)$	distribución de probabilidad
m_μ	media constante del proceso estocástico
σ_v^2	varianza
\bar{v}	media muestral
$\gamma_{\Delta t}$	autocovarianza
t	tiempo
Δt	intervalo de tiempo
$\mathfrak{S}(k)$	tasa de dispersión
D_{ac}^2	constante de potencial de deformación acústico
k_B	constante de Boltzmann
σ	la densidad de masa superficial del grafeno
v_s	velocidad del sonido
D_{opt}^2	constante de potencial de deformación óptico
N_{elec}	número de electrones simulados

n_{BE}	función de distribución de Bose-Einstein
ω_{opt}	frecuencia del fonón óptico
$\Theta(\chi)$	la función escalón Heaviside
n_i	densidad de impurezas
κ	es la constante dieléctrica efectiva del sistema grafeno-Cu ₂ O
q	diferencia entre los vectores de onda dispersado e incidente
$U(q)$	potencial de interacción
d	distancia
$\varepsilon(q)$	función dieléctrica estática
Δ_e	raíz cuadrática media de las alturas de las rugosidades
L_e	longitud de correlación de la superficie rugosa
n_{sup}	densidad de carga inducida
n	densidad electrónica
ε_0	función dieléctrica estática del vacío
$\mathcal{P}(q)$	función de polarización
$\mathcal{F}^{*v}(E_k)$	función de distribución de Fermi-Dirac compuesta
F_v^2	parámetro de acoplamiento
$I^{emi,abs}(x,u)$	integral adimensional
Ar	área efectiva
ω_{sup}	frecuencia de los fonones óptico superficiales
κ_{sub}^∞ y κ_{sub}^0	son las constantes dieléctricas del sustrato
N'	número de electrones
t_a	tiempo de vuelo libre
a	número aleatorio
Mc	número máximo de electrones por celda en una malla
$\mathcal{F}_c^{*v}(E_k)$	función de Fermi normalizada
μ_e	movilidad eléctrica
[100]	dirección del campo eléctrico paralelo al eje x

Introducción

El grafeno es un material bidimensional obtenido experimentalmente por Konstantin Novoselov y Andre Geim utilizando los métodos de exfoliación micromecánica con una cinta autoadhesiva, tal cual ha sido reportado en (Novoselov y col, 2004). Lo cual conllevó a la obtención del premio Nobel en Física del 2010, (NobelPrize.org, 2020).

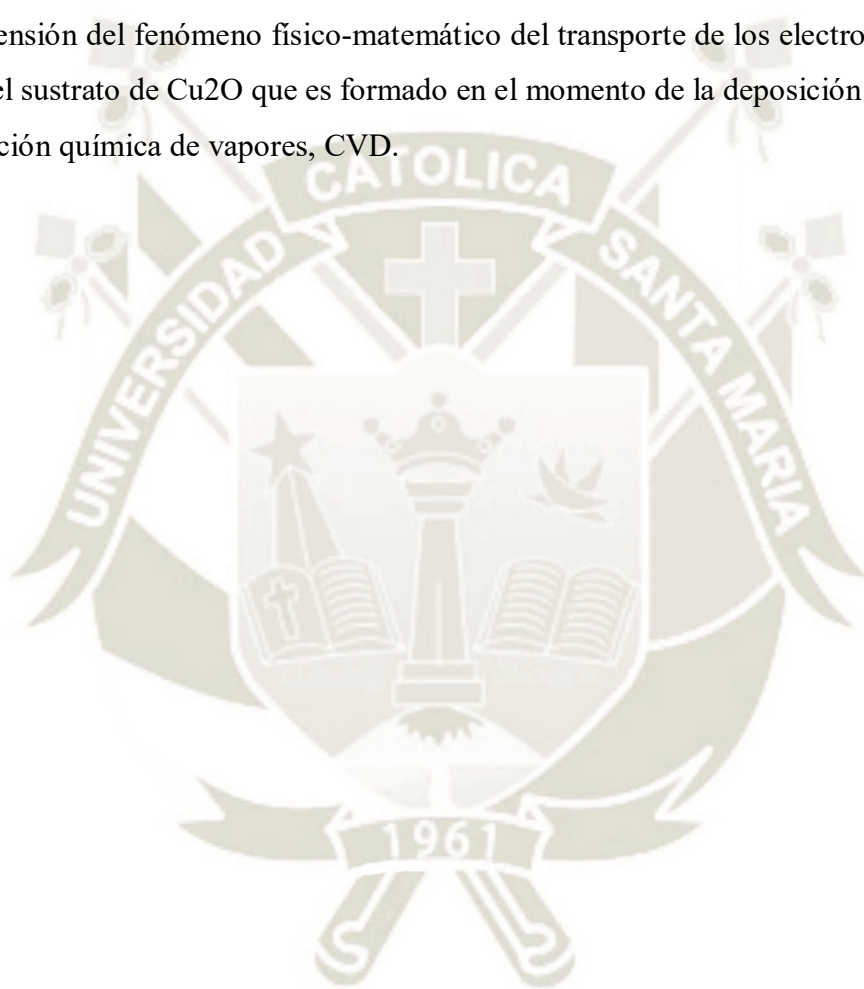
Desde entonces el grafeno ha sido uno de los materiales bidimensionales investigado por las fascinantes propiedades que se le atribuyen, tal cual se ha reportado en la literatura, por mencionar algunas publicaciones relacionadas como, las propiedades eléctricas (Novoselov y col, 2004), (Castro Neto y Novoselov, 2011), (Novoselov y col, 2012), (McCann y Koshino, 2013), (Belote y Revankar, 2016), alta ductibilidad y buena conductividad eléctrica (Qian y col, 2020), propiedades óptico-magnéticas (Liu y Dai, 2020).

Respecto a las aplicaciones en investigaciones a través de simulaciones se resaltan en la desalinación del agua (Liu y col. 2020) donde la simulación con dinámica molecular proporciona una comprensión de la permeabilidad del agua a través de membranas de grafeno, otra aplicación del grafeno es usarlo como un mecanismo de anticorrosión por su carácter hidrofóbico tal cual lo reporta Jishnu y col. (2020) y, Cai y col. (2012). En aplicaciones concernientes a la electrónica, el grafeno se considera un material prometedor para su uso en dispositivos electrónicos de alta velocidad como los transistores de campo, tal cual reporta Spinelli y col. (2020), caracterización de GFET (Pacheco-Sanchez y col. 2020; Ismail y col. 2020; Nastasi y Romano, 2020; Acharya y col. 2020; Brown y col. 2020). Cabe resaltar que en el laboratorio de Investigación de Materiales Avanzados de la UCSM, se está investigando desde el 2017, la obtención de nanofibras y nanotubos de carbono y la deposición del grafeno sobre alambres de cobre, respecto a ésta investigación se ha observado en la tesis ‘Deposición de Grafeno Sobre Alambres de Cobre por el Método de Deposición Química de Vapor a Partir de Gas Metano’ (Rodríguez Vizcarra, 2018), el reporte de algunas mediciones iniciales de la resistividad del grafeno depositado sobre alambres de cobre.

Dada la complejidad de la obtención experimental de la resistividad y por ende de la movilidad de los electrones en grafeno y más aún la complejidad de la movilidad de los electrones del grafeno sobre el sustrato de cobre, debido a que se requiere equipos de medición muy sofisticados, es que por estas razones se plantea en este trabajo, investigar mediante la simulación numérica, la movilidad de los electrones sobre el grafeno y sobre el

grafeno sobre sustrato, para lo cual se ha desarrollado un programa en Matlab para determinar la movilidad de los electrones cuando se aplica campos eléctricos moderados a temperatura constante utilizando el Método Monte Carlo, dada la naturaleza aleatoria del transporte de electrones.

Por último, el hecho de que el sustrato utilizado en este trabajo sea el óxido cuproso (Cu_2O) se debe a la observación del oxígeno en los análisis hechos por fluorescencia en el Laboratorio de Microscopía electrónica de la UCSM. Lo cual conlleva a buscar la comprensión del fenómeno físico-matemático del transporte de los electrones en el grafeno sobre el sustrato de Cu_2O que es formado en el momento de la deposición por el método de deposición química de vapores, CVD.



Hipótesis

Es factible determinar la movilidad de los electrones de conducción tanto en grafeno intrínseco como en grafeno sobre el sustrato de Cu_2O (óxido cuproso), cuando se aplica un campo eléctrico moderado, a través de una simulación estocástica donde se incluya a un modelo matemático del transporte de electrones en dos dimensiones a temperatura constante.

Objetivos

Objetivo General

Determinar la movilidad de los electrones de conducción, para campos eléctricos moderados tanto en el grafeno intrínseco como en grafeno sobre Cu_2O , utilizando el método numérico estocástico Monte Carlo.

Objetivos específicos

- Definir un modelo matemático que permita determinar la movilidad electrónica en el grafeno intrínseco y en el grafeno sobre el sustrato del Cu_2O .
- Definir una estrategia de resolución numérica usando el método numérico Monte Carlo para aplicarlo en el estudio del transporte de electrones en el grafeno.
- Implementar un procedimiento computacional que permita resolver el modelo planteado.
- Analizar la influencia del sustrato del Cu_2O en la movilidad de los electrones sobre el grafeno.

1. Marco Teórico

1.1. Revisión de los fundamentos teóricos

En el presente capítulo se presenta las definiciones necesarias de la estructura cristalográfica del grafeno además de algunos antecedentes y conceptos físicos y matemáticos relacionados con el transporte de electrones en el grafeno intrínseco y grafeno sobre sustrato respectivamente.

1.1.1. Aspectos cristalográficos para el grafeno

Desde el punto de vista de la cristalografía el grafeno presenta una red como se muestra en la figura 1.1, en la cual, se puede interpretar matemáticamente como un espacio bidimensional de un cristal ideal donde se observa a un subconjunto conectado $C \subseteq \mathbb{R}^2$ denominado celda primitiva de la red de Bravais, cuyos vectores primitivos de la red de Bravais para el grafeno están dados por:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(3, \sqrt{3}) \quad (1.1)$$

y

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3}) \quad (1.2)$$

donde $a = 0.142\text{nm}$ es la distancia de los vecinos más próximos y la repetición de la traslación de esta celda C llenará todo el plano \mathbb{R}^2 sin dejar vacíos.

Además, se tiene que el producto el producto $|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2| = \frac{6}{4}a^2\sqrt{3} = 0.0524 \text{ nm}^2$, cuyo valor es un tercio del área del hexágono convencional.

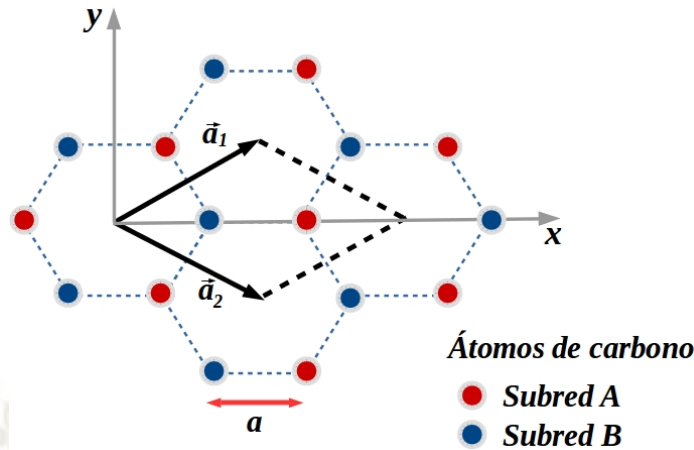


Figura 1.1 – Red del grafeno, cuyos vectores primitivos son $\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(3, \sqrt{3})$ y $\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3})$ con parámetro de red $a = 0.142$ nm.

Fuente: elaboración adaptada de la referencia Castro Neto y col. (2009)

Por otra parte, el vector de traslación en la red directa es:

$$\vec{T}_{2D} = n_1 \frac{a}{2}(3, \sqrt{3}) + n_2 \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3}) \quad (1.3)$$

donde $n_1, n_2 \in \mathbb{Z}$

A partir de los vectores primitivos de la red directa \vec{a}_1 y \vec{a}_2 se llega a construir la red recíproca que se muestra en la figura 1.2, donde los vectores primitivos de la red recíproca se muestran en las ecuaciones (1.4) y (1.5).

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3}) \quad (1.4)$$

y

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{3a}(1, -\sqrt{3}) \quad (1.5)$$

mientras que el vector de traslación recíproco es:

$$\vec{G}_{2D} = v_1 \vec{b}_1 + v_2 \vec{b}_2 \quad (1.6)$$

$$\vec{G}_{2D} = v_1 \frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3}) + v_2 \frac{2\pi}{3a}(1, -\sqrt{3}) \quad (1.7)$$

donde $v_1, v_2 \in \mathbb{Z}$.

Según Ashcroft y Mermin (1976) la red recíproca es: “el conjunto de todos los vectores de onda que producen ondas planas con la periodicidad de una red de Bravais” (pág. 86), la importancia de este espacio es que en esta tesis se usa para la formulación físico - matemática y para la simulación de la movilidad de electrones en el grafeno.

Por otra parte, en la figura 1.2 se muestra los puntos especiales de la red recíproca para el grafeno. En el espacio recíproco a la celda primitiva se le denomina Primera Zona de Brillouin, (ZB), la cual se ha representado en esta figura por la región sombreada del hexágono regular de lado $(4\pi / 3a)$, así como a los puntos especiales dentro de esta zona como son: el punto Γ que es el centro de la primera ZB y en las seis esquinas de la primera ZB se ubican los puntos de Dirac K y K' con coordenadas que se calculan con esta misma figura como:

$$K = \frac{4\pi}{3a} (\cos 30^\circ, \text{sen}30^\circ) = \frac{2\pi}{3a} \left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}\right) = (14.749, 8.515) \times 10^9 \text{ m}^{-1} \quad (1.8)$$

$$K' = \frac{4\pi}{3a} (\cos 30^\circ, -\text{sen}30^\circ) = \frac{2\pi}{3a} \left(1, -\frac{1}{\sqrt{3}}\right) = (14.749, -8.515) \times 10^9 \text{ m}^{-1} \quad (1.9)$$

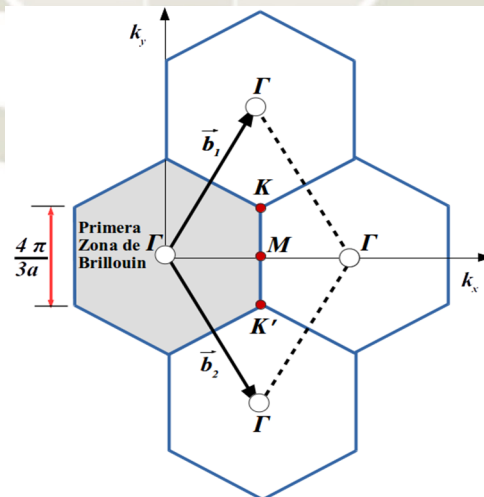


Figura 1.2 – Red recíproca del grafeno de vectores primitivos recíprocos \vec{b}_1 y \vec{b}_2 .
Fuente: elaboración adaptada de la referencia Castro Neto y col (2009).

1.1.2. Relación de dispersión para el grafeno

El primer estudio teórico del grafeno reportado, ha sido por Wallace en 1947, en su investigación acerca del grafito, donde utiliza los planos de átomos de carbono, lo que hoy conocemos como grafeno, para poder determinar las bandas de energía del grafito, Wallace (1947). Con la relación de dispersión es posible observar los cambios de la energía en función del vector de onda de los electrones en el grafeno. En el reporte de Castro Neto y col. (2009) la relación de dispersión se muestra con la ecuación (1.10), donde $sb = \pm 1$ indica el +1 para la banda de conducción, -1 para la banda de valencia, $\gamma = (2.7 - 3.1)$ eV es la energía del electrón para saltar a un átomo más próximo y $a' = a/2$ donde $a = 0.142$ nm es el parámetro de red.

$$E_k(\vec{k}) = sb\gamma\sqrt{1 + 4\cos(\sqrt{3}a'k_x)\cos(a'k_y) + 4\cos^2(a'k_y)} \quad (1.10)$$

En la figura 1.3 se muestra el gráfico de la ecuación (1.10) generada utilizando Matlab cuyo código se muestra anexo C.1. Cabe resaltar que la ubicación de los puntos de Dirac, son los puntos de los vértices de los conos encerrados por la elipse en rojo y es donde se encuentra el mínimo de la banda de conducción.

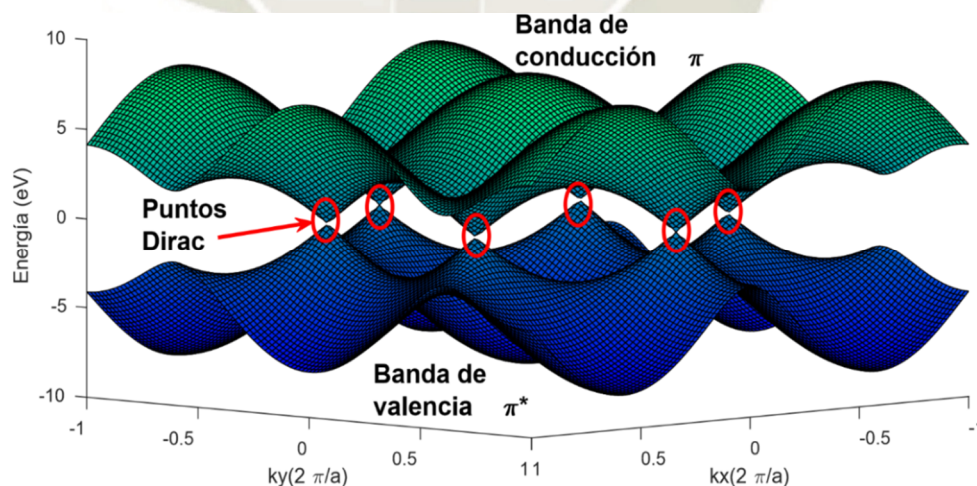


Figura 1.3 – Relación de dispersión para el grafeno según la ecuación (1.10), donde se puede observar los conos de Dirac encerrados de rojo. Así mismo, se observa la banda de conducción π y la banda de valencia π^* .

Fuente: elaboración propia

En la figura 1.4 se muestra en curvas de nivel la ecuación (1.10), remarcando la ubicación de los puntos Dirac K y K' en la banda de conducción.

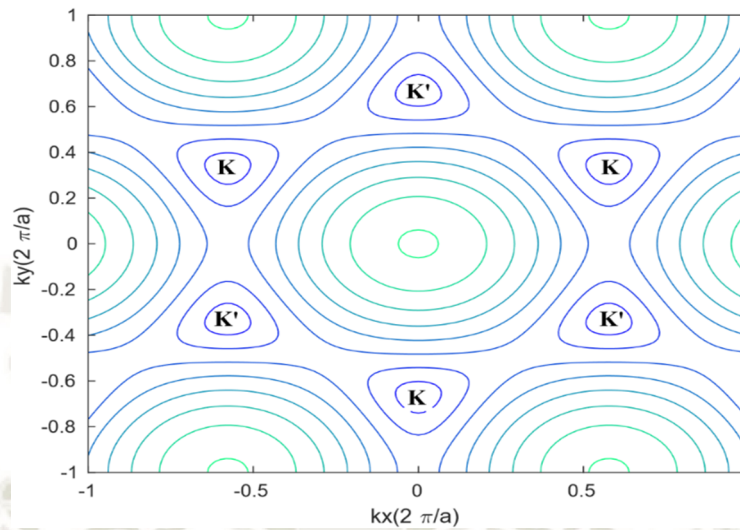


Figura 1.4 – Relación de dispersión para la banda de conducción del grafeno, de acuerdo con la ecuación (1.10), se observa la posición de los puntos de Dirac K y K' en el plano k_x, k_y del espacio recíproco.

Fuente: elaboración propia.

Para encontrar el mínimo global de la ecuación (1.10) se realizó el siguiente procedimiento: Primero: utilizando Matlab se halló los puntos críticos de la ecuación (1.10), el resultado de las iteraciones se muestra graficado en la figura 1.5.

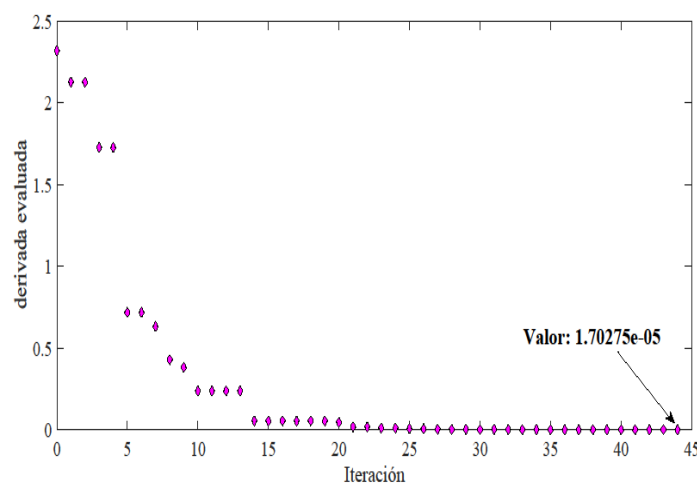


Figura 1.5 – Evaluación de la derivada de la ecuación (1.10) en función del número de iteraciones, el valor final de esta aproximación es 1.70275×10^{-5} .

Fuente: elaboración propia.

Segundo: se calcula, la matriz Hessiana, cuyo determinante calculado fue mayor a cero, lo cual indica que el punto de Dirac representa un mínimo global en la superficie de energía de la banda de conducción. En el apéndice C.1 se encuentra el programa en Matlab, implementado para este análisis.

Finalmente, para valores de vector de onda próximos a los puntos de Dirac, se observa que la energía es proporcional al vector de onda, k tal como en la expresión (1.11) donde \hbar es la constante de Planck reducida igual a $1.05 \times 10^{-34} \text{ Js}^{-1}$ y v_F la velocidad de Fermi. Esta aproximación, válida para energías no muy grandes, es incluida en la simulación del presente trabajo para estudiar el transporte de electrones alrededor del punto de Dirac en la estructura de banda de conducción, lo cual es posible refrendar con artículos por mencionar de Hirai y col. (2014), y Majorana y col. (2019).

$$E_k(k) = \hbar k v_F \quad (1.11)$$

1.2. Antecedentes en el transporte de electrones en grafeno intrínseco

En esta sección se hizo la recopilación de algunos antecedentes de investigaciones, en el anexo A.1 se muestra la estadística de búsqueda de la palabra ‘graphene’ para el área de matemáticas. En el siguiente párrafo, se muestran trabajos dentro del esquema de modelación numérica acerca del transporte de electrones en el grafeno, realizadas por el grupo del Departamento de Matemática y ciencias de la computación de la ‘Università degli Studi di Catania’, mientras que en los siguientes párrafos se incluyeron otros trabajos de diferentes afiliaciones relacionados con el transporte de electrones en grafeno.

En cuanto a los artículos científicos publicados con la afiliación de ‘Università degli Studi di Catania’ relacionados con el transporte de electrones usando la ecuación de transporte de Boltzmann en grafeno, se encuentran cronológicamente los de: Coco y Nastasi (2020) y Majorana y col. (2019) donde se aplican al transporte de carga en grafeno donde utilizaron al método numérico de Galerkin discontinuo para encontrar la solución de la ecuación de transporte de Boltzmann semiclásica. De acuerdo con Nastasi y Romano (2019), el transporte de carga en el grafeno es crucial para el diseño de dispositivos electrónicos a nanoescala. También expresan que un modelo razonable está representado por las ecuaciones de Boltzmann semiclásicas para electrones, y que por otra parte el Método Monte Carlo con la adecuada inclusión del Principio de exclusión de Pauli son una forma eficiente de solución, la cual emplearemos en este trabajo. En la

revista 'Journal of Mathematics in Industry', Majorana y col. (2016), reportan lo importante de las soluciones numéricas para el modelo semiclásico de la ecuación de Boltzmann, en la simulación del transporte de electrones en el grafeno. Por otra parte Coco y col. (2016), reportan el trabajo de la modelación del transporte de electrones en dos enfoques: uno es el método estocástico de Monte Carlo y el segundo es utilizando el método de elementos finitos de Galerkin discontinuo, en otro artículo Coco y col. (2017) realiza la validación de estos métodos para resolver la ecuación del transporte de Boltzmann para el grafeno. Romano y col. (2015) en el estudio del transporte de electrones en el grafeno utilizan el algoritmo para simulaciones de Monte Carlo y las comparaciones con soluciones de la ecuación de Boltzmann obtenidas mediante el uso de un método discontinuo de Galerkin de tal forma proporcionar una validación cruzada del enfoque propuesto.

Otro trabajo relacionado con el cálculo del transporte de electrones en el grafeno de otra afiliación es presentado por Kammerer y col. (2016), donde, a través de la ecuación de Dirac se determina los valores propios y las singularidades canónicas de esta ecuación, las cuales son responsables de las transiciones no adiabáticas. Aquí también se incluye el término de transferencia Landau - Zener además de un operador de salto para conservar la energía durante las transiciones.

En este mismo contexto Hirai y col. (2014), realizan cálculos de la movilidad de electrones para el grafeno utilizando el método estocástico, Monte Carlo, en cuyas simulaciones toman en cuenta las dispersiones de fonones ópticos polares y no polares con electrones. Los fonones son vibraciones cuantizadas de la red (Kittel, 1996) , y su importancia en el transporte de electrones en grafeno fue reportada por Nika y Balandin (2012).

Un trabajo análogo realizan Sule y col. (2013), donde investigan la simulación del transporte con varias técnicas como el método Monte Carlo, Diferencias finitas en dominio del tiempo y dinámica molecular de corto rango para la presencia de impurezas para el cálculo de la conductividad para corriente directa y alterna.

Un trabajo con resultados experimentales en el cual se puede encontrar comparación de datos experimentales con los datos de simulación lo realiza Bresciani y col. (2013) para láminas de grafeno y nanoanillos de grafeno.

En el trabajo de Peres (2010), se resume los resultados teórico-experimental de las propiedades del transporte de electrones en el grafeno, aquí se usa el concepto de quiralidad y electrones Dirac.

En otro trabajo, Armour y col. (2010) investigan la simulación Monte Carlo en el estudio de electrones de bajas energías en una capa de grafeno para un fuerte acoplamiento de fase Mott, aquí el principal resultado es que la simulación numérica se pudo identificar el punto crítico cuántico correspondiente de la transición de semimetal - aislante para el modelo de fermiones Dirac y las simetrías a bajas energía de una monocapa de grafeno.

En el trabajo experimental de Li y col. (2009) se hace el crecimiento del grafeno por deposición química de vapor (CVD) con metano sobre películas de cobre. Las películas son predominantemente de grafeno de una sola capa, con un pequeño porcentaje (menos del 5%) del área que tiene pocas capas y son continuas a través de pasos de la superficie del cobre y limitada por los granos. La baja solubilidad del carbono en cobre parece ayudar a que este proceso de crecimiento sea autolimitado. Por otra parte, reportó movibilidades de hasta $4050 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ a temperatura ambiente.

1.3. Antecedentes en el transporte de electrones en grafeno sobre sustrato

Similarmente a la sección anterior, se presenta la recopilación de algunos trabajos publicados sobre el grafeno sobre sustrato, ya sea que se hayan realizado con simulaciones o de forma experimental.

Shishir, Ferry y Goodnick (2009) reportan los distintos mecanismos de dispersión y el transporte usando el método de Rode, que es un procedimiento iterativo usado para resolver la ecuación de Boltzmann linealizada, para estudiar el transporte de electrones en grafeno a temperatura ambiente. Los resultados obtenidos indican que el transporte está dominado por la carga atrapada en la interface del grafeno-SiO₂.

En el trabajo experimental de Yang y col. (2018) se reporta que la resistividad eléctrica del grafeno crecido sobre alambres de cobre por el método de deposición química (CVD) muestran valores casi constantes con temperaturas crecientes de hasta 175 °C, mientras que la degradación de la resistividad de los cables de Cu sin grafeno comienza a aumentar

desde 70 °C. Por ende, mejorando efectivamente las propiedades eléctricas del alambre de Cu.

En el trabajo reportado por Liu y col. (2013) se estudia la resistencia de contacto entre el grafeno y los electrodos de metal, lo cual es crucial para la construcción de dispositivos de grafeno.

En el trabajo reportado por Vanin y col. (2010) se utiliza la teoría funcional de la densidad (DFT) con un funcional de densidad de van der Waals para estudiar la adsorción de grafeno en superficies de Co, Ni, Pd, Ag, Au, Cu, Pt y Al (111). En contraste con la aproximación de densidad local (LDA) que predice una unión relativamente fuerte para Ni, Co y Pd, con esto se predice una unión débil para todos los metales y distancias de metal-grafeno en el rango 3.40–3.72 Å.

Resultados experimentales de la movilidad del grafeno sobre sustrato de SiO₂ fueron reportados por Chen y col. (2008) y Dorgan y col. (2010) los que fueron de $4 \times 10^4 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ y $4500 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ respectivamente.

Consecuencia de todos estos trabajos mencionados se considera importante conocer que fenómeno ocurre en la interface grafeno - sustrato de tal forma de ampliar las aplicaciones del grafeno. Adicionalmente, en el trabajo de Nagashio y col. (2009) se presentan un buen número de aplicaciones del grafeno.

1.4. Descripción de la ecuación de transporte de electrones en grafeno

Como se ha podido observar en las secciones previas 1.2 y 1.3 son muchos artículos publicados con el interés de conocer alguna propiedad en el transporte de carga en el grafeno que dan sustento a la investigación que se realiza en este trabajo y es en esta sección que se presenta la función de distribución de Fermi-Dirac debido a que trabajamos con una muestra de electrones, la ecuación de transporte de Boltzmann en el límite semiclásico, el teorema de Liouville-Neumann que sustenta la invarianza del conjunto de electrones en el espacio recíproco, el Teorema de Birchoff, el cual es importante en este trabajo cuando el sistema llegue al estado estacionario sea verificable, pues asegura que los valores promedio temporales, del conjunto de electrones simulados, también representan al promedio sobre el espacio del material, cuando se llega al estado estacionario.

1.4.1. Teorema de Liouville

La ecuación de Liouville (1838) es una ecuación cardinal de la mecánica estadística. Esta ecuación describe el desarrollo de la función de distribución de espacio de fase (momento-posición) para un sistema conservativo y también proporciona una descripción completa del sistema tanto en equilibrio y lejos del equilibrio como lo refieren Abadi y col. (2011). Por otro lado, la ecuación de Liouville es también conocida como el teorema de Liouville que se expresa en la ecuación (1.12) donde se considera una función F_N que evoluciona con el tiempo debido a un movimiento de cada miembro en el espacio de fase. Así mismo, esta ecuación (1.12), nos da la evolución temporal del sistema, es decir, la historia temporal de todas las partículas en el sistema.

$$\frac{dF_N}{dt} = 0 \quad (1.12)$$

Lo cual implica que F_N es constante a lo largo de la trayectoria en el espacio de fases, que expresado en términos de volumen es:

Teorema 1 *El volumen V encerrado por una superficie cerrada en el espacio de fases es constante mientras la superficie se mueve a través del espacio de fases.*

Este teorema establece que no importa cómo evolucione el sistema, el volumen que contiene a las partículas siempre permanecerá constante.

Por tanto, recurrimos a una descripción estadística de la trayectoria de las partículas. En la descripción estadística utilizamos funciones de distribución de no equilibrio, que dependen no solo de la energía y la temperatura del sistema, sino también de las posiciones y otras variables.

1.4.2. Ecuación del transporte de Boltzmann (ETB) semiclásica

Boltzmann formuló su ecuación integro-diferencial (ETB) en 1872, tal como lo menciona el matemático Carlo Cercignani en su libro *'Ludwig Boltzmann: the man who trusted atoms'* (Cercignani, 2006), donde en los dos primeros capítulos se puede encontrar la biografía de Boltzmann además del contexto en el cual se desarrolla esta ecuación. Por otra parte, en otro de sus libros *'Mathematical methods in kinetic*

theory', Cercignani y col. (1990), encuentran el problema de los estados fuera del equilibrio con la ETB.

La ecuación de transporte de Boltzmann (ETB) aplicada al estudio de las propiedades de transporte semiclásico es de amplia data, por mencionar al grupo de Matemática Aplicada de la Universidad de Texas en Austin quienes aplican la ETB en el estudio de materiales semiconductores; cabe mencionar también al grupo del Departamento de Matemáticas y Ciencias de la Computación de la Universidad de Catania por las investigaciones en el grafeno, lo cual muestra que en otros grupos existe el interés de conocer el comportamiento de los electrones en el grafeno.

- **Derivación de la ecuación del transporte de Boltzmann semiclásica**

Sea una función de distribución $\mathcal{F}^v(\vec{k}, \vec{r}, t)$ fuera del equilibrio, sin eventos de dispersión. Consideramos el espacio de fases como un espacio cuya coordenada \mathbf{r} representa a (x, y) mientras que \mathbf{k} , representa a la cantidad de movimiento o momento (k_x, k_y) . Por tanto la $d^2\mathbf{k} = (dk_x, dk_y)$ y $d\mathbf{r}^2 = (dx, dy)$, corresponden a las áreas en el espacio de momentos y espacio real, respectivamente y, donde estudiamos una muestra encerrada por un área en el espacio recíproco $d^2k d^2r$ el cual evoluciona en el tiempo a una nueva posición de área $d^2k' d^2r'$ como se muestra en la figura 1.6.

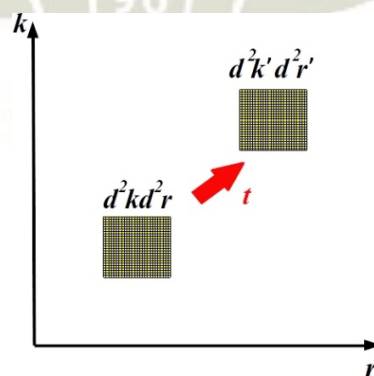


Figura 1.6 – Representación del espacio de fase con el momento semiclásico $k = p/\hbar$ y la posición $r(x, y)$ de una muestra en $t = 0$ con las coordenadas del espacio de fase $d^2k d^2r$ y en un tiempo de evolución posterior t es el punto posterior en el espacio de fase $d^2k' d^2r'$, debido a un agente.

Fuente: elaboración propia.

Si,

$$\mathcal{F}^v(\vec{k}', \vec{r}', t)(d^2k'd^2r') = \mathcal{F}^v(\vec{k}, \vec{r}, t)(d^2kd^2r) \quad (1.13)$$

donde $d^2k'd^2r' = d^2kd^2r$, por el teorema de Liouville 1.4.2

Consecuencia de aplicar un campo eléctrico, se tiene la siguiente expresión

$$\mathcal{F}^v(k + \dot{k}dt, \vec{r} + \dot{\vec{r}}_{gr}dt, t + dt) = \mathcal{F}^v(\vec{k}, \vec{r}, t) \quad (1.14)$$

considerando

$$\mathcal{F}^v(\vec{k}, \vec{r}, t) = \mathcal{F}^v(\vec{k}, \vec{r}, t) + \frac{d\mathcal{F}^v}{dt}dt \quad (1.15)$$

se tiene

$$\frac{d\mathcal{F}^v}{dt} = \frac{\partial \mathcal{F}^v}{\partial k} \dot{k} + \frac{\partial \mathcal{F}^v}{\partial r} \dot{r} + \frac{\partial \mathcal{F}^v}{\partial t} = 0 \quad (1.16)$$

en el límite semiclásico de la mecánica, la fuerza eléctrica

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -e\vec{E} \quad (1.17)$$

y la velocidad de grupo

$$\vec{v}_{gr} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_k}{\partial k} \quad (1.18)$$

Reemplazando las ecuaciones (1.17) y (1.18) en (1.16) y generalizando se tiene, la ecuación del transporte de Boltzmann (ETB) semiclásica

$$\frac{\partial \mathcal{F}^v}{\partial t} + \vec{v}_{gr} \cdot \vec{\nabla}_r \mathcal{F}^v - \frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \vec{\nabla}_k \mathcal{F}^v = 0 \quad (1.19)$$

Cuando se introducen eventos de dispersión, que va dar nuevos estados \vec{k}' que pueden lograr cambios en la función de distribución, (1.19) tomando la forma análoga que en las publicaciones de Coco y Majorana (2016), Majorana y col, (2016) y Romano y col. (2015):

$$\left. \frac{\partial \mathcal{F}^v}{\partial t} + \vec{v}_{gr} \cdot \vec{\nabla}_r \mathcal{F}^v - \frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \vec{\nabla}_k \mathcal{F}^v = \frac{d\mathcal{F}^v}{dt} \right|_{\text{electrón-fonón}} \quad (1.20)$$

donde:

- $\mathcal{F}^v = \mathcal{F}^v(\vec{k}, \vec{r}, t)$ representa a la función de distribución que depende del vector de onda \vec{k} , posición \vec{r} , y del tiempo t para los electrones fuera del equilibrio.
- $\vec{v}_{gr} = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_k E_k(k)$ es la velocidad de grupo y con buena aproximación representa a la velocidad de los electrones como se indica en Kittel, (1996), cabe indicar que $E_k(k)$ está dado en la ecuación (1.11)
- $\vec{\nabla}_r$ es el gradiente con respecto a la posición \vec{r} y $\vec{\nabla}_k$ el gradiente con respecto al vector de onda \vec{k}
- e es la carga elemental y \vec{E} es el campo eléctrico que se aplica externamente y que se define como la fuerza por unidad de carga eléctrica sobre los electrones en el grafeno.
- El término, $\left. \frac{d\mathcal{F}^v}{dt} \right|_{\text{electrón- fonón}}$ representa a las tasas de dispersiones que sufrirá los electrones en el grafeno con los diferentes mecanismos de interacción de los electrones con los fonones tanto para grafeno intrínseco como para el grafeno sobre el sustrato y está definido por la siguiente ecuación:

$$\left. \frac{d\mathcal{F}^v}{dt} \right|_{\text{electrón- fonón}} = \int_{\mathbb{R}^2} \mathcal{T}(\vec{k}', k) \mathcal{F}^v(\vec{r}, t, \vec{k}') (1 - \mathcal{F}^v(\vec{r}, t, \vec{k})) dk' - \int_{\mathbb{R}^2} \mathcal{T}(\vec{k}, k') \mathcal{F}^v(\vec{r}, t, \vec{k}) (1 - \mathcal{F}^v(\vec{r}, t, \vec{k}')) dk' \quad (1.21)$$

donde

$\mathcal{T}(\vec{k}, \vec{k}')$ es la tasa de transición del estado \vec{k} al estado \vec{k}' y $(1 - \mathcal{F}^v(\vec{r}, t, \vec{k}'))$ corresponde al principio de exclusión de Pauli.

En la sección 2.1.1 se muestran los tipos de interacciones incluidas en la implementación de la simulación del transporte de electrones en el grafeno intrínseco y en el grafeno sobre sustrato.

Como se puede observar en el lado izquierdo de la ETB descrito en la ecuación (1.20) se muestra la evolución de la trayectoria de una partícula utilizando un movimiento semiclásico de la partícula sujeta a un campo eléctrico externo moviéndose en el espacio recíproco, mientras que por el lado derecho de esta ecuación se describe las dispersiones cuántico probabilísticas de un estado energético a otro, donde se

considera que los estados propios de energía no se determinan durante la solución, sino que son calculados por un método independiente.

Debido a que la ecuación integro-diferencial es difícil resolverla por métodos directos, en este trabajo se usó para resolverla un método estocástico de Monte Carlo, el cual se explica en la sección 2.2.

1.4.3. Función de Distribución de Fermi-Dirac

Para contar los estados de energía ocupados por los electrones del gas de electrones libres, donde se considera que los electrones no interactúan entre sí es necesario incluir a la función de distribución de Fermi-Dirac, la misma que se muestra en la ecuación (1.22).

$$\mathcal{F}^v(E_k) = \frac{1}{e^{\frac{E_k - \mu}{k_B T}} + 1} \quad (1.22)$$

donde E_k es la energía del electrón con vector de onda k , μ es el potencial químico que a $T \approx 0$ que es igual a la energía de Fermi, que representa la energía que delimita los estados ocupados de los estados vacíos, T es la temperatura del sistema, k_B constante de Boltzmann.

Solo para $T = 0$ K como se ve en la figura 1.7 se forma la función escalón (step) (Griffiths, 1995) en las siguientes condiciones

$$e^{\frac{E_k - \mu}{k_B T}} \rightarrow \begin{cases} 0 & \text{si, } E_k < \mu(0) \\ \infty & \text{si, } E_k > \mu(0) \end{cases} \quad (1.23)$$

así, la función de distribución toma los valores

$$\mathcal{F}^v(E_k) \rightarrow \begin{cases} 1 & \text{si } E_k < \mu(0) \\ 0 & \text{si } E_k > \mu(0) \end{cases} \quad (1.24)$$

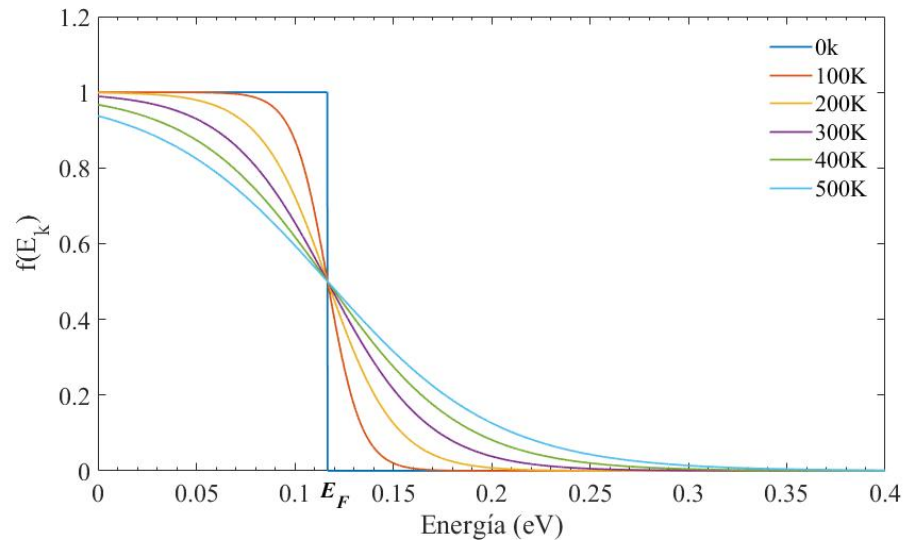


Figura 1.7 – Función de distribución de Fermi Dirac, para $T = 0K$ es una función escalón, donde E_F limita los estados vacíos de los estados ocupados, que para el caso del grafeno es aproximadamente 0.117eV. Para otras temperaturas que se muestran los electrones pasan a ocupar otros estados vacíos próximos a la energía de Fermi.

Fuente: elaboración propia, se muestra el código para el cálculo de la ecuación (1.22) en Matlab, en el apéndice C.2.

1.5. Método de Monte Carlo

El Método Monte Carlo fue desarrollado en el laboratorio de Los Alamos por científicos que desarrollaban la primera bomba nuclear, en donde se encontraron con el problema de aproximar expresiones matemáticas complejas.

La filosofía de este método numérico se basa en la idea de usar repetitivamente una secuencia de eventos aleatorios para resolver problemas de naturaleza estocástica y algunos de naturaleza determinística Kalos y Whitlock (2009). En cuanto a las aplicaciones del Método Monte Carlo, Kroese y col. (2014) recopilan los múltiples usos de este método aplicados hoy en día en: física, matemática, economía, computación, estadística e ingenierías.

A continuación, se hace una compilación de algunos artículos científicos en los que se ha usado al método Monte Carlo en la simulación del transporte de electrones en el grafeno, En el anexo A.3 se puede ver la estadística de búsqueda de Monte Carlo y grafeno en la base datos SCOPUS. El trabajo tanto experimental como de simulación ab

inicio reportado por Taioli (2014) acerca del crecimiento de grafeno en sustrato de cobre, de forma experimental por el método CVD usando propileno (C_3H_6), así como en simulación investigado previamente por cálculos con Monte Carlo ab initio que caracterizan la difusión del carbono en la superficie de cobre en los planos (111) usando el código SURPRISES, en sus cálculos se destaca una fuerte interacción entre los bordes de la película en crecimiento y el sustrato de cobre, indicando la importancia de los límites del grano. Además, las simulaciones ab initio del Monte Carlo del sistema fuera de equilibrio apuntan hacia un modelo de crecimiento sorprendentemente diferente al del crecimiento de película estándar.

Por otra parte Harada y col. (2011) trabajan con el método Monte Carlo semiclásico junto con la ecuación de Poisson. Ambos métodos son aplicados simultáneamente y utilizados en la investigación de las propiedades del transporte en diodos de grafeno; utilizado un modelo con la inclusión de la banda de dispersión lineal, asumiendo el valor de 8.6×10^5 ms^{-1} para la velocidad de grupo y solo dos mecanismos de dispersión. Los resultados que reportaron indican que la dispersión elástica también degrada la ballisticidad y la corriente de drenaje; sin embargo, el aumento de la dispersión inelástica compensa estos efectos. Descubrieron también que la dispersión elástica debe suprimirse para mejorar el rendimiento de los diodos.

En la divulgación de Shishir, Chen y col. (2009) se encuentra los estudios de la velocidad en grafeno intrínseco a temperatura ambiente, usando el Monte Carlo (MC). Los parámetros para las dispersiones con los fonones son obtenidos de datos experimentales del grafeno en una variedad de medios dieléctricos, en los cuales se observaron movilidades tan altas como $44\,000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ a 300 K. En el modelo de la simulación que emplea, solo consideraron a las dispersiones debidas a los fonones acústicos y a los fonones ópticos en el punto K de la primera zona de Brillouin, además llegan a la velocidad de saturación con la densidad electrónica de $5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y si la densidad es menor a $5.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, la velocidad de saturación es de $5.4 \times 10^7 \text{ cm/s}$. Mientras que este mismo autor junto a D. K. Ferry y a Goodnick reportan en las publicaciones de Shishir y Ferry (2009) y Shishir, Ferry y Goodnick (2009) respectivamente, los gráficos correspondientes a la movilidad en función a la densidad electrónica indicando de nuevo que la dispersión por impurezas sigue siendo el factor determinante para la movilidad, comparando con resultados experimentales debido al sustrato dieléctrico del SiO_2 .

También se tiene más detalles acerca de la obtención de la movilidad en el grafeno, como las expresiones usadas para los potenciales de deformación, así como valores de los parámetros usados en la simulación.

En el artículo de Chauhan y Guo (2009), hay estudios del transporte de electrones para altas intensidades de campo eléctrico, mediante la simulación de Monte Carlo donde sus resultados a los que llegan para la velocidad de saturación de corriente son comparados con los resultados experimentales por Meric y col. (2008), quienes a su vez reportan resultados para la corriente de saturación medida en transistores de efecto de campo hechos con grafeno depositado sobre SiO₂.

En el 2008, Akturk y Goldsman (2008), desarrollan un simulador de Monte Carlo semiclásico para investigar el transporte de electrones en grafeno. Para lograr este propósito, primero se ha de determinar las curvas de dispersión de electrones y fonones empleando el método de enlace fuerte en los átomos que conforman la celda unitaria. Posteriormente desarrollan metodologías basadas en sumas de Riemann e integraciones de Monte Carlo para calcular las tasas de dispersión entre electrones y fonones en conjunto con la regla de oro de Fermi y la aproximación del potencial de deformación. Como se ha podido observar con estos trabajos el uso del Método Monte Carlo en el cálculo de la movilidad de los electrones en el grafeno es de amplia data como se muestra en el anexo A.3. Es en el capítulo 2, sección 2.2 en la cual se describe el uso del Método de Monte Carlo en este trabajo.

1.6. Teorema de Birkhoff

Calvin C. Moore, matemático de la universidad de Berkley, en su trabajo citado en Moore (2015) realiza una revisión en perspectiva del teorema ergódico que fuera publicado entre 1931 y 1932 por George Birkhoff y John von Neumann en las publicaciones (Birkhoff, 1931) y (Neumann, 1932) respectivamente.

Específicamente, acerca de los sistemas de mecánica estadística, se ha considerado una situación típica en la dinámica de los electrones tratado como un gas bidimensional (2DEG) en la que se tiene una cantidad de electrones libres. Estos electrones están en movimiento dispersándose con las vibraciones de la red. Cabe indicar que se ha incluido una fuerza externa, debido a un campo electrostático. Asumimos que el espacio de fase P consta de una superficie de energía constante, a la que denominamos la superficie de

Fermi. Esta suposición, junto con la extensión finita del contenedor, asegura que P es compacto y que la medida invariante derivada del teorema de Liouville es finita.

Una forma de verificación de los resultados de la simulación Monte Carlo que correspondan al estado estacionario es a través del análisis de Autocorrelación (AR). Para ello se ha de verificar que la velocidad media de los electrones, debe permanecer invariante en el tiempo una vez que se llegue al estado estacionario.

1.7. Propiedades de Autocorrelación de modelos estacionarios en los procesos estocásticos

Siendo necesario para el análisis de los resultados de la velocidad de arrastre que se obtendrá con el simulador de MC-grafeno, se muestran algunos conceptos adaptados de Box y col. (2015), que se dan a continuación.

- Series de tiempo, es un conjunto de observaciones generadas secuencialmente en el tiempo, pueden ser series temporales continuas o series temporales discretas, esta última es la que se ajusta en la velocidad de arrastre para este trabajo. Por tanto, las observaciones de una serie de tiempo discreta para tiempos discretos t_1, t_2, \dots, t_n puede ser denotado por $v(t_1), v(t_2), \dots, v(t_n)$.
- Proceso estocástico, es un fenómeno estadístico que evoluciona en el tiempo según la probabilidad.
- Proceso estocástico estacionario, se basa en el supuesto de que el proceso se encuentra en un estado de equilibrio estadístico donde sus propiedades no se ven afectadas por el cambio temporal, por ende, la distribución de probabilidad conjunta asociada con n observaciones $v_{t_1}, v_{t_2}, \dots, v_{t_n}$, registradas en los tiempos t_1, t_2, \dots, t_n , es la misma que las registradas con las observaciones n $v_{t_1+r}, v_{t_2+r}, \dots, v_{t_n+r}$ hechas para los tiempos $t_1+r, t_2+r, \dots, t_n+r$. Así, para un proceso discreto estrictamente estacionario, la distribución conjunta de cualquier conjunto de observaciones no debe verse afectado por los tiempos de observación hacia adelante o hacia atrás por cualquier cantidad entera r .
- La media y la varianza de un proceso estacionario. Cuando $n = 1$, el supuesto de estacionariedad implica que la distribución de probabilidad $P(v_i)$ es la misma para

todos los tiempos t y puede escribirse como $P(v)$. Por tanto, el proceso estocástico tiene una media constante que sigue:

$$m_{\mu} = E [v_t] = \int_{-\infty}^{\infty} vP(v)dv \quad (1.25)$$

Lo cual define el nivel sobre el que fluctúa, y una variación constante

$$\sigma_v^2 = E [(v_t - m_{\mu})^2] = \int_{-\infty}^{\infty} (v - m_{\mu})^2 P(v)dv \quad (1.26)$$

que mide su propagación sobre este nivel. Dado que la distribución de probabilidad $P(v)$ es el mismo para todos los tiempos t , su forma se puede inferir formando el histograma de las observaciones v_1, v_2, \dots, v_N , que forman la serie de tiempo observada. Además, la media m_{μ} del estocástico, se puede estimar mediante la media muestral

$$\bar{v} = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N v_t \quad (1.27)$$

La varianza del proceso estocástico puede ser estimada por la varianza de la muestra

$$\sigma_v^2 = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{t=1}^N (v_t - \bar{v})^2} \quad (1.28)$$

- Coeficientes de autocovarianza y autocorrelación

La suposición de la estacionariedad implica que la distribución de probabilidad conjunta $P(v_{t_1}, v_{t_2})$ es la misma para todos los tiempos t_1, t_2 , que están separados por un intervalo constante. En particular, se deduce que la covarianza entre valores v_t y $v_{t+\Delta t}$, separados por intervalos de tiempo Δt , o por el 'lag', que en español es traducido como retardo, en este trabajo se optó por utilizar 'lag', la misma que es utilizada en el análisis estadístico. Δt , deben ser iguales para todo t bajo el supuesto de estacionariedad. Esta covarianza se llama autocovarianza en el 'lag' Δt y es definido por

$$\rho_{\Delta t} = \frac{E[(v_t - m_\mu)(v_{t+\Delta t} - m_\mu)]}{\sigma_v^2} \quad (1.29)$$

Como para un proceso estacionario, $\sigma_v^2 = \gamma_0$ la varianza es la misma para el tiempo $t + \Delta t$ como para el tiempo t . Así, la autocorrelación del 'lag' Δt , que es, la correlación entre v_t y $v_{t+\Delta t}$, es la ecuación 1.32 en la cual $\gamma_0 = 1$

$$\rho_{\Delta t} = \frac{\gamma_{\Delta t}}{\gamma_0} \quad (1.30)$$

La implementación de la autocovarianza se realiza para analizar los resultados de la velocidad obtenidos con el simulador MC-grafeno, y verificar si efectivamente llegan al estado estacionario además de que esta forma también verifica el cumplimiento del teorema de Birkhoff (sección 1.6). Para esto se incluye un programa en Matlab que se muestra en el apéndice C.3, el mismo que fue utilizado en el análisis de los datos de la velocidad.

1.8. Propiedades del óxido cuproso (Cu₂O)

Al realizar la deposición de grafeno sobre cobre usando el método de deposición química de vapores (CVD, en la siglas en inglés, "*Chemical vapor deposition*"), se reporta la formación de la presencia del Cu₂O (Kareem y col. 2015; Ikenoue y col. 2019).

A continuación, algunas características interesantes de este material. En principio el cobre, multivalente forma varios óxidos; entre ellos, está el Cu₂O (óxido de cobre) que es un semiconductor de tipo p como lo indica Murali y col. (2015). Su banda prohibida es directa con $E_g > 2,1$ eV así lo indican Zoolfakar y col. (2014). Otras propiedades se pueden encontrar en la tabla 1.1 donde se presenta un resumen de los parámetros empleados en este trabajo para la simulación del transporte de electrones en el grafeno sobre el sustrato de Cu₂O.

Algunas posibles aplicaciones del Cu₂O son reportadas por Kuo y Huang (2010) y se indica su uso en sensores de gas, fotocatalisis, generación de fotocorriente entre otras.

Además se destaca que el Cu₂O no es tóxico, es abundante, disponible, no es costoso y ambientalmente correcto El Kasmí y col. (2016).

Tabla 1.1 – Parámetros físicos del Cu₂O

Parámetros a 300 K	Valor
Densidad de masa (g/cm ³)	5.749-6.1407
Constante de red (Å)	(4.2696 ± 0.0010)
Punto de fusión (°C)	1235
Constante de rigidez elástica c_{11} (10 ⁹ Pa)	116.5-126.1
Constante de rigidez elástica c_{12} (10 ⁹ Pa)	105.3-108.6
Constante de rigidez elástica c_{44} (10 ⁹ Pa)	12.1-13.6
Constante dieléctrica a baja frecuencia	7.11
Constante dieléctrica a alta frecuencia	6.46

Fuente: Meyer y col. (2013), de la cual se toman algunas constantes para la simulación

1.9. Movilidad de los electrones

De acuerdo a Kittel (1996). La movilidad está referida a que tan rápido se mueven los portadores de carga cuando están sujetos en la presencia del campo eléctrico externo moderado y, está definida por ‘la magnitud de la velocidad promedio por unidad de campo eléctrico’. De acuerdo a Özdemir y col. (2016), la movilidad en el grafeno se puede obtener de la pendiente del grafico de la velocidad en función al campo eléctrico pero a bajas intensidades del campo eléctrico aplicado, procedimiento que se implementa en el capítulo de resultados.

$$\mu_e = \frac{|\vec{v}|}{|\vec{E}|} \quad (1.31)$$

En el artículo de Shishir y Ferry, (2009) quienes utilizando el método Monte Carlo, a temperatura 300 K y con diferentes concentraciones de electrones, reportaron valores de la movilidad, en sus trabajos se comparan con resultados experimentales. Por otra parte, valores de la movilidad simulados usando Monte Carlo para grafeno sobre sustrato SiO₂ se encuentra en Özdemir y col, (2016), Dorgan y col, (2010), Shishir y Ferry, (2009), Chen y col, (2008) entre otros mencionados ya en la sección 1.3.

2. Metodología

En este capítulo se presenta el modelo Físico-Matemático que se utiliza para investigar el transporte de los electrones en grafeno a temperatura ambiente, cuando se aplica un campo eléctrico externo. En relación a la implementación de la solución del modelo planteado para el estudio del transporte de electrones en el grafeno se describe el método numérico empleado en esta tesis que es el método Monte Carlo (MC), el mismo que es presentado en la sección 2.2. Por último, en la sección 2.3 se presenta la descripción acerca del procedimiento de la simulación realizado en este trabajo, además de la planificación de la simulación.

2.1. Modelo físico-matemático que representa al transporte de electrones en el grafeno intrínseco y en el grafeno sobre el sustrato de Cu₂O

El modelo físico que muestra la dinámica de los electrones se explica con la ayuda de la figura 2.1, la cual muestra el espacio recíproco bidimensional, donde un electrón sigue una trayectoria aleatoria, el cual está sometido a un campo eléctrico externo \vec{E} que es igual a la ecuación (1.17), pero que interrumpe su viaje debido a algún tipo de potencial de dispersión que se explican en la sección 2.1.1, lo cual hace que cambie el vector de onda incidente del electrón de \vec{k}_{inc} a otro vector de onda del electrón \vec{k}_{sal} después de la dispersión. Cabe indicar que esta dinámica, en promedio, se puede representar para todos los electrones mediante la velocidad de arrastre, es la misma para todos los electrones y se toma la velocidad de arrastre, (\vec{v}_{ar}). El término velocidad de arrastre (en la literatura también se la conoce como velocidad deriva y proviene de la palabra en inglés ‘drift velocity’)

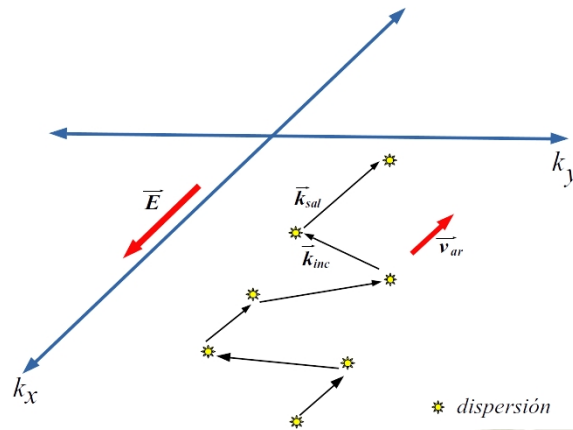


Figura 2.1 – Trayectoria de un electrón sometido a un campo eléctrico externo, velocidad de arrastre, \vec{v}_{ar} . También se muestra el cambio del vector de onda del electrón debido a algún tipo de potencial de dispersión.

Fuente: adaptada de Datta (1997).

2.1.1. Tasas de dispersión incluidas para el transporte de electrones en grafeno intrínseco

Para mayor aproximación a la realidad en el proceso del transporte de electrones se debe considerar también que los electrones sufren dispersiones por la dinámica de la red, por medio de ondas elásticas cuantizadas, a las que denominamos fonones. En artículos como de Nika y Balandin (2012), se puede encontrar explícitamente el transporte de fonones en el grafeno que es útil cuando se quiere estudiar otras propiedades del grafeno. La implicancia de los fonones en el transporte de electrones en grafeno ya ha sido estudiada por algunos autores, (Özdemir y col, 2016), (Konar, y col. 2009; 2010) resultando en diferentes tasas de dispersión que están presentes en la implementación del modelo.

Los electrones al moverse en la estructura del material, sufren dispersiones debido a los fonones del mismo grafeno y del sustrato, así como dispersiones cuánticas debido a las impurezas del sustrato.

Las tasas de dispersión consideradas para el Grafeno intrínseco son:

- (1) la tasa de dispersión debido al fonón acústico (sección 2.1.1.1)
- (2) la tasa de dispersión debido al fonón óptico (sección 2.1.1.2)

Estas dispersiones son descritas por Özdemir y col. (2016) y se presentan a seguir:

2.1.1.1. Tasa de dispersión debido al fonón acústico

Los fonones acústicos, creados por los movimientos coherentes de los átomos de la red, pueden interaccionar con los electrones haciendo que estos se dispersen.

De acuerdo con Özdemir se tiene la expresión 2.1, para la tasa de dispersión con fonones acústicos cuyo comportamiento se muestra en la figura 2.2. Esta y las demás tasas de dispersión descritas, son utilizadas en proceso de simulación Monte Carlo.

$$\mathfrak{T}(k) = \frac{\pi D_{ac}^2 k_B T}{4\sigma v_s^2 \hbar^3 v_F^2} E_k \quad (2.1)$$

donde D_{ac}^2 es la constante de potencial de deformación acústico, k_B la constante de Boltzmann, T temperatura absoluta, σ es la densidad de masa superficial del grafeno, v_s velocidad del sonido, \hbar la constante de Planck entre 2π , v_F velocidad de Fermi y E_k es la energía de los electrones.

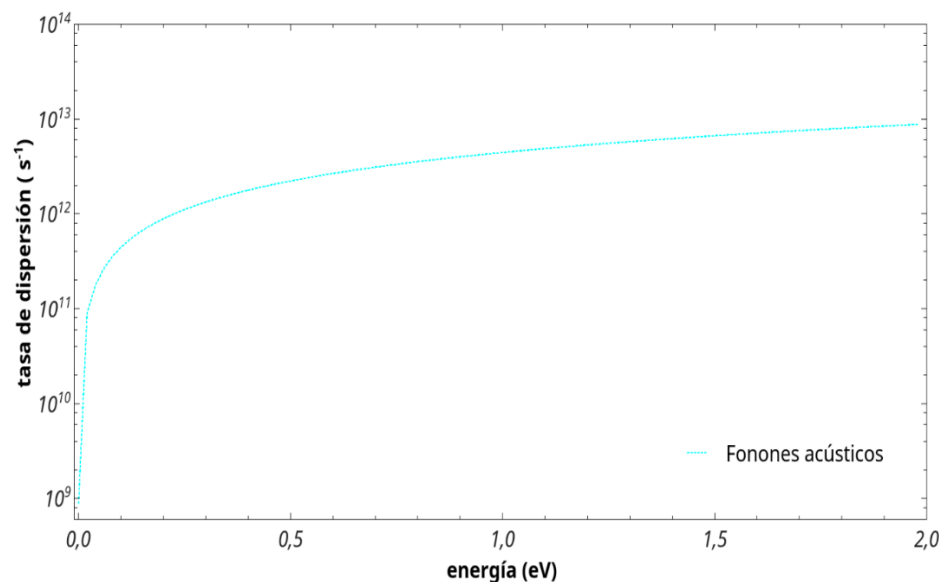


Figura 2.2 – Tasa de dispersión en función de la energía para los fonones acústicos.

Fuente: elaboración propia, con los datos obtenidos del simulador MC-grafeno implementado en este trabajo.

2.1.1.2. Tasa de dispersión debido al fonón óptico

Los fonones ópticos debido a la polarización del material también pueden dispersar los electrones de conducción. De acuerdo con Özdemir y col. (2016), se ha empleado la expresión 2.2 para la tasa de dispersión de fonones ópticos, la misma que se muestra su comportamiento en la figura 2.3.

$$\mathcal{T}(k) = \frac{D_{opt}^2}{4\sigma\omega_{opt}(\hbar v_F)^2} \left\{ n_{BE}(E_k + \hbar\omega_{opt}) + (n_{BE} + 1)\Theta(E_k - \hbar\omega_{opt}) \right\} \quad (2.2)$$

donde D_{opt}^2 es la constante de potencial de deformación óptico, σ es la densidad de masa superficial del grafeno, n_{BE} función de distribución de Bose-Einstein, $\omega_{opt} = 2.29 \times 10^{14}$ rad s^{-1} frecuencia del fonón óptico, \hbar constante de Planck entre 2π , v_F velocidad de Fermi, E_K energía de los electrones de vector de onda k y Θ es la función escalón Heaviside

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x > 0 \\ 0 & \text{si } x \leq 0 \end{cases} \quad (2.3)$$

Esta expresión toma en cuenta tanto la absorción como la emisión de fonones ópticos.

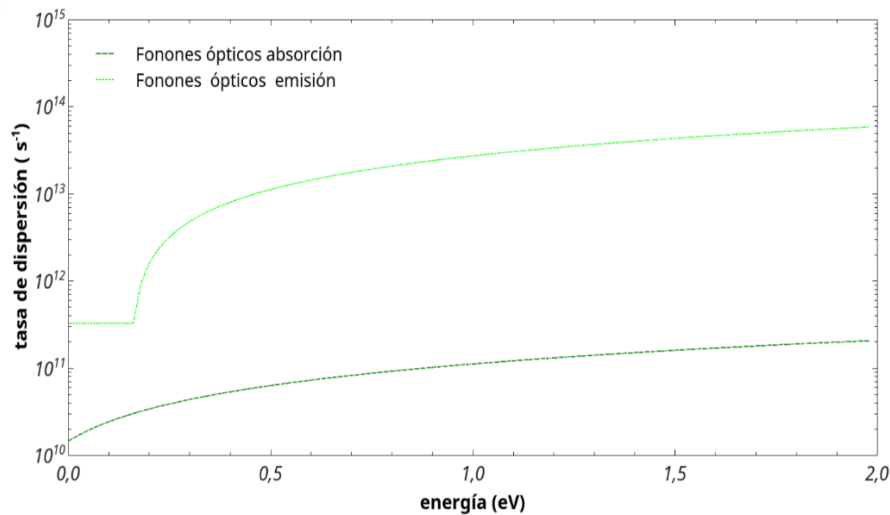


Figura 2.3 – Tasa de dispersión en función de la energía para los fonones ópticos, se muestra que es mayor la tasa de dispersión debido a fonones ópticos por absorción que de emisión.

Fuente: elaboración propia, con los datos obtenidos del simulador MC-grafeno implementado en este trabajo.

2.1.2. Tasas de dispersión incluidas para el transporte de electrones en grafeno sobre sustrato de Cu₂O

Para el transporte de electrones en grafeno sobre el sustrato de Cu₂O se incluyen las siguientes tasas de dispersión: (1) tasa de dispersión debido al fonón acústico (sección 2.1.1.1), (2) la tasa de dispersión debido al fonón óptico (sección 2.1.1.2), (3) la tasa de dispersión debido a impurezas remotas (sección 2.1.2.1), (4) la tasa de dispersión debido a rugosidad en la interfase Grafeno-Cu₂O (sección 2.1.2.2) y (5) la tasa de dispersión debido a fonones óptico polares superficiales en la interfase Grafeno-Cu₂O (sección 2.1.2.3). La suma de todas estas tasas de dispersión es mostrada en la figura 2.4.

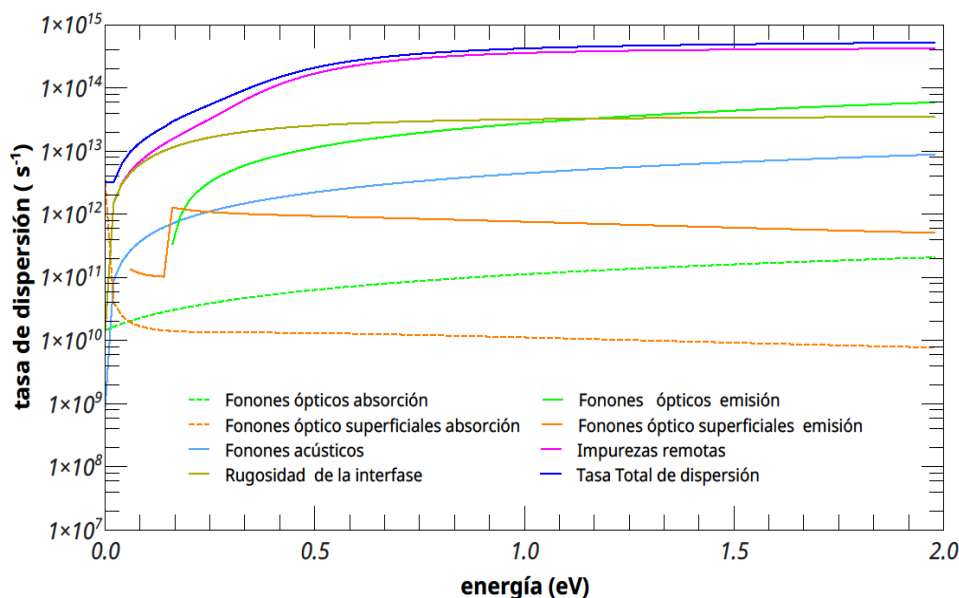


Figura 2.4 – Tasas de dispersión para el grafeno sobre el sustrato de Cu₂O para $n = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ se mantiene constante $n_i = 8.86 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

Fuente: elaboración propia, con los datos obtenidos del simulador MC-grafeno implementado en este trabajo.

En la figura 2.5 se muestra la red hexagonal ideal del grafeno sobre el sustrato de Cu₂O, ambos separados por una distancia de 1 nm correspondiente a las rugosidades superficiales del Cu₂O.

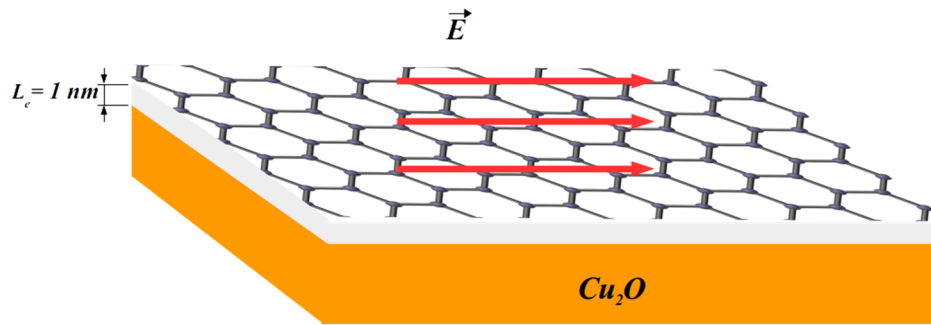


Figura 2.5 – Grafeno intrínseco ideal sobre el sustrato de Cu_2O , con una capa rugosa del Cu_2O de 1nm de espesor.

Fuente: elaboración propia.

2.1.2.1. Tasa de dispersión debido a impurezas remotas

Para tomar en cuenta al sustrato, es necesario considerar a las impurezas que en el proceso de dispersión se muestra en la figura 2.6 con un esquema de como el vector de onda del electrón incidente y dispersado por una impureza remota dentro de un plano polar tienen dependencia angular.

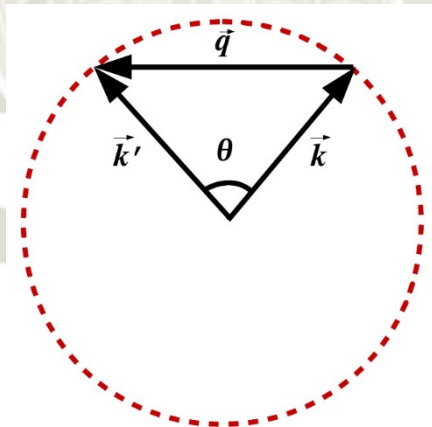


Figura 2.6 – Vector de onda del electrón incidente y dispersado a causa de una impureza remota.

Fuente: elaboración propia.

De acuerdo con Özdemir y col. (2016) se tiene la expresión (2.6) para esta dispersión, la misma que se muestra su comportamiento en la figura 2.7, para diferentes densidades electrónicas de $n = 1 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$, $n = 5 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ y $n =$

$1 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$, donde se observa que no hay dependencia de esta densidad electrónica, más si de la densidad de impurezas remotas.

$$\mathfrak{T}(k) = \frac{n_{imp} E_k}{\pi \hbar^3 v_F^2 k} \int_0^{2k} |U(q)|^2 \left[1 - \left(\frac{q}{2k} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} dq \quad (2.4)$$

donde: n_{imp} densidad de impurezas, \hbar constante de Planck entre 2π , v_F velocidad de Fermi, k vector de onda, E_k energía de los electrones de vector de onda k , y el potencial de interacción entre portadores de carga e impurezas remotas a una distancia d es:

$$U(q) = \frac{2\pi e^2}{\kappa q \varepsilon(q)} e^{-qd} \quad (2.5)$$

donde e es la carga del electrón, κ es la constante dieléctrica efectiva del sistema grafeno-Cu₂O $q = |k' - k| = 2k \text{sen} \frac{\theta}{2}$, vea la figura 2.6, $\varepsilon(q)$ es la función dieléctrica estática que sigue la expresión:

$$\varepsilon(q) = 1 + \frac{2\pi e^2}{\kappa q} \mathcal{P}(q) \quad (2.6)$$

Donde $\mathcal{P}(q)$ es la función de polarización,

$$\mathcal{P}(q) = \frac{g_s g_v}{2\pi \hbar v_F} \left\{ \int_0^\infty \mathcal{F}^{*v}(E_k) dk - \int_0^{q/2} \mathcal{F}^{*v}(E_k) \sqrt{1 - \left(\frac{2k^2}{q} \right)} dk \right\} \quad (2.7)$$

donde la función de distribución de Fermi-Dirac compuesta $\mathcal{F}^v(E_k)$, es de la forma

$$\mathcal{F}^{*v}(E_k) = \mathcal{F}^v(E_k) + \mathcal{F}^v(E_k + 2\mu) \quad (2.8)$$

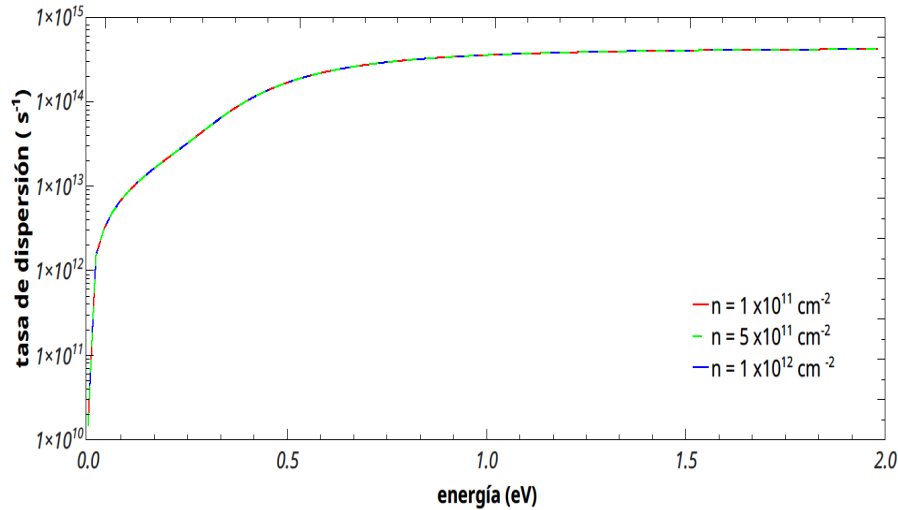


Figura 2.7 – Tasa de dispersión por impurezas remotas para diferentes densidades electrónica $n = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $n = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ se mantiene constante $ni = 8.86 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

Fuente: elaboración propia, con los datos obtenidos del simulador MC-grafeno implementado en este trabajo.

2.1.2.2. Tasa de dispersión debido a rugosidad en la interfase Grafeno-Cu2O

Para tomar en cuenta la influencia de las rugosidades en la interfase grafeno-Cu2O, usamos la tasa de dispersión debido a estas rugosidades dada por Özdemir, la cual se muestra en la ecuación 2.9, y cuya dependencia con el vector de onda está en la figura 2.8, para diferentes densidades electrónicas.

$$\mathfrak{T}(k) = \frac{E_k}{2\hbar} \left(\frac{\Delta_e L_e n_{sup} e^2}{2\varepsilon \hbar v_F} \right) \int_0^\pi \left(1 + 2L_e^2 k^2 \text{sen}^2 \frac{\theta}{2} \right)^{-\frac{3}{2}} (1 + \cos\theta) d\theta \quad (2.9)$$

Donde Δ_e es la raíz cuadrática media de las alturas de las rugosidades, L_e es 1nm, es la longitud de correlación de la superficie rugosa, $n_{sup} = (ni + 0.8n) \text{ cm}^{-2}$ densidad de carga inducida y n la densidad electrónica, \hbar constante de Planck entre 2π , v_F velocidad de Fermi, e es la carga del electrón, $\varepsilon = 0.8\varepsilon_0$ es la función dieléctrica estática y E_k energía de los electrones de vector de onda k .

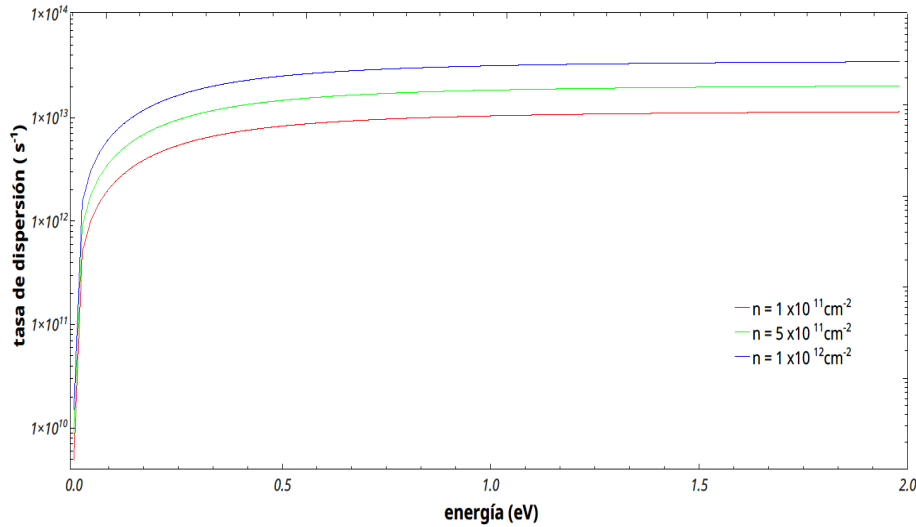


Figura 2.8 – Tasa de dispersión debido a la rugosidad del sustrato para diferentes densidades electrónica $n = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $n = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, se mantiene constante $n_i = 8.86 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

Fuente: elaboración propia, con los datos obtenidos del simulador MC-grafeno implementado en este trabajo.

2.1.2.3. Tasa de dispersión debido a fonones óptico polares superficiales en la interfase Grafeno-Cu2O

De acuerdo con Konar y col, (2009; 2010) se ha empleado la expresión (2.10) para la tasa de dispersión debido a fonones óptico polares en la superficie de la interfase Grafeno-Cu2O, la misma que se muestra su comportamiento en la figura 2.9,

$$\mathcal{T}^{emi,abs}(x) = \frac{n_{q,v}^{emi,abs} e^2 F_v^2 A}{2\pi \hbar^2 v_F} \left(\frac{x+1}{x} \right) \times I^{emi,abs}(x,u) \quad (2.10)$$

donde: $n_{q,v}^{emi,abs}$ es el número de ocupación de fonones en equilibrio, e es la carga elemental, A es el área del grafeno, \hbar constante de Planck entre 2π , v_F velocidad de Fermi, F_v^2 es el parámetro de acoplamiento dado por la expresión (2.11)

$$F_v^2 = \frac{\hbar \omega_{sup}}{2A\epsilon_0} \left(\frac{1}{\kappa_{sub}^\infty} - \frac{1}{\kappa_{sub}^0} \right) \quad (2.11)$$

en esta expresión, κ_{sub}^{∞} y κ_{sub}^0 son las constantes dieléctricas del sustrato a alta y baja frecuencia, ω_{sup} frecuencia del sustrato y ϵ_0 permitividad del vacío.

Finalmente, en la expresión 2.10, $I^{emi,abs}(x,u)$ representa una integral adimensional que debe evaluarse numéricamente a partir de la expresión de (2.12)

$$I^{emi,abs}(x,u) = \int_0^{\pi} d\theta e^{-2u p^{emi,abs}(x,\theta)} p^{emi,abs}(x,u) \cos\theta \times \frac{(1 + \cos\theta)}{|p^{emi,abs}(x,\theta) + \lambda_v|^2} \quad (2.12)$$

que a su vez $p^{emi,abs}(x,u)$ y λ_v están dadas por:

$$p^{emi,abs}(x,u) = \sqrt{x(x \mp 1)(1 - \cos\theta) + 1} \quad \text{y} \quad \lambda_v = \frac{e^2 k_F}{(\pi \epsilon_0 \kappa_{prom} \hbar \omega_{sup})} \quad \text{respectivamente,}$$

donde: κ_{prom} es la constante dieléctrica efectiva del Cu₂O y $\omega_{sup} = 8.98 \times 10^{13} \text{ rad}^{-1}$ es la frecuencia de fonones óptico superficiales

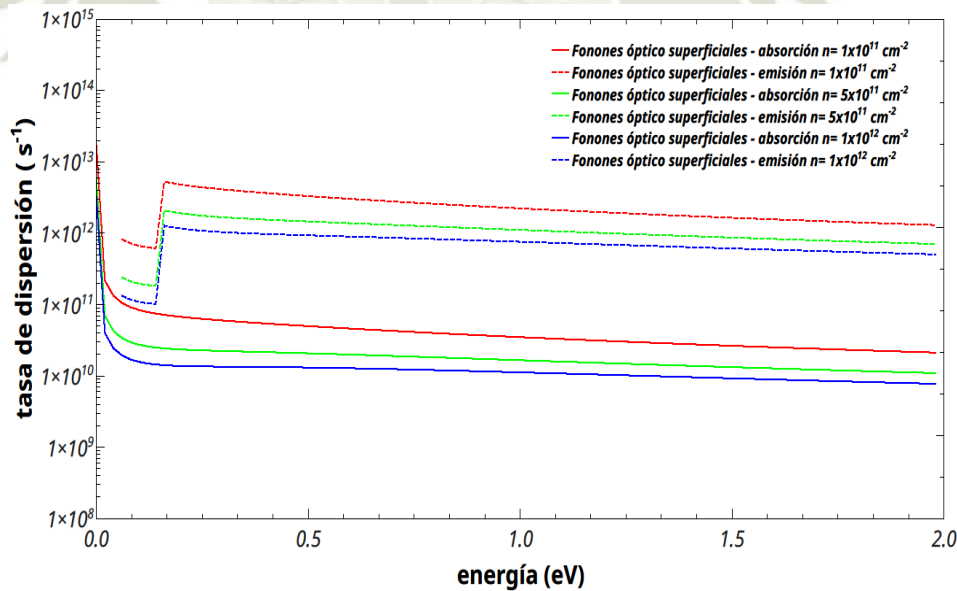


Figura 2.9 – Tasa de dispersión por fonones óptico superficiales para diferentes densidades electrónicas $n = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $n = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, se mantiene constante $ni = 8.86 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

Fuente: elaboración propia, con los datos obtenidos del simulador MC-grafeno implementado en este trabajo.

En resumen, las tasas de dispersión consideradas para el Grafeno sobre el sustrato de Cu₂O son las tasas de dispersión debido a fonones acústicos, fonones ópticos, fonones ópticos superficiales, rugosidad de la interfase grafeno-sustrato e impurezas remotas. Como ejemplo se muestran en la figura 2.4 estas tasas de dispersión para una densidad electrónica de $n = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y concentración de impurezas remotas de $n_i = 8.86 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Cabe también indicar que según la figura 2.4 para los parámetros del grafeno intrínseco, es importante la dispersión por fonones ópticos mientras que para grafeno sobre sustrato de Cu₂O es más importante la dispersión por impurezas remotas.

2.2. Implementación del método Monte Carlo en el estudio del transporte de electrones en el grafeno

De acuerdo a lo visto anteriormente, uno de los métodos más precisos de solucionar la ecuación de transporte de Boltzmann aplicado al transporte de carga, es mediante la simulación con Monte Carlo. Esta idea fue usada en simulaciones de semiconductores (Bosi y Jacoboni, 1976), (Lugli y Ferry, 1985), de quienes en la sección 2.2.1 se comentará con mayor detalle. En la sección 2.2.2 se detalla la estructura de la simulación con Monte Carlo para obtener la velocidad de los electrones para el grafeno intrínseco y grafeno sobre sustrato para el transporte estacionario y homogéneo. El método Monte Carlo permite obtener la solución del BTE. El objetivo es simular el movimiento de los portadores debido a campos eléctricos externos a través de la red del grafeno al cual denominamos grafeno intrínseco y en grafeno sobre sustrato. Se debe tomar en cuenta que la red del grafeno proporciona la energía en relación a la dinámica de los electrones dentro de la teoría de la estructura de bandas y también es la red responsable de las colisiones con los fonones ya explicados en las secciones 2.1.1 y 2.1.2.1.

Usando el método de Monte Carlo, la simulación del transporte de carga en el grafeno, consiste en una simulación de un conjunto de electrones N' los cuales se mueven en el espacio recíproco sujeto a la acción del campo eléctrico externo, ecuación 1.20. El tiempo de vuelo, denominado así al vuelo entre dos dispersiones sucesivas es afectado por la red. En la simulación, se seleccionan estocásticamente los procesos de dispersión de los electrones, de acuerdo con probabilidades dadas por las tasas de dispersión. El método Monte Carlo se aplica con la generación de una secuencia de números aleatorios, en nuestro caso en Matlab, distribuidos uniformemente entre 0 y 1. Para esto, todas las

probabilidades son normalizadas a la unidad. Para la generación de números aleatorios en el Matlab se usa la función estándar RAND, el cual utiliza al método Mersenne Twister (MT) que es un algoritmo de generación de números pseudoaleatorios entre $[0,1-2^{-53}]$ desarrollado por M. Matsumoto y T. Nishimura en 1997 y mejorado en el 2002, antes que se repita la secuencia de nuevo es $T = 2^{19937} - 1$ un período mucho más que cualquier otro generador implementado y otras bondades que se pueden ver en la página web del Dr. Makoto Matsumoto (Matsumoto, 2009), profesor del Departamento de Matemáticas de la Universidad de Hiroshima-Japón.

Se realizó la prueba de χ^2 para el generador de números aleatorios, el código se muestra en el anexo C.4. Los resultados de esta prueba se muestran en la figura 2.10. Para 61 intervalos la χ^2 obtenida es de 43.9238 y con los 60 grados libertad, la χ^2 reducida es 0.7321 y el test de rechazo a la hipótesis de distribución normal de los números aleatorios da $h = 1$ lo que significa que los números aleatorios no están distribuidos normalmente, pero que por el χ^2 reducido cercano a la unidad, es consistente con una distribución uniforme.

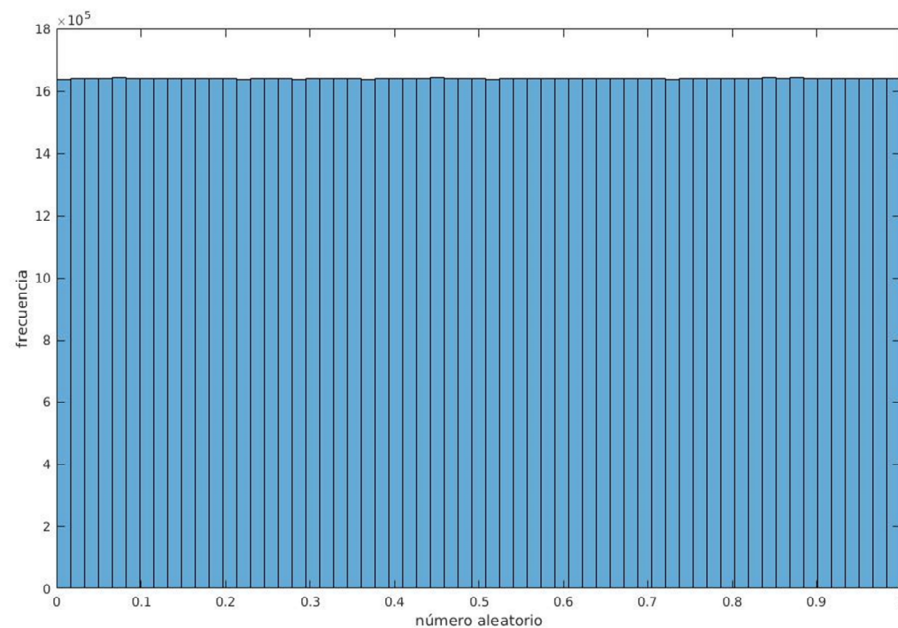


Figura 2.10 – Prueba de la aleatoriedad al generador de números aleatorios.

Fuente: elaboración propia usando el código que se muestra en el anexo C.4

El análisis del fenómeno será en el estado estacionario y del teorema de Birkhoff se podrá suponer que una ruta de esta nos dará la información del gas de electrones 2D sobre el grafeno intrínseco y si fuera el caso en el grafeno sobre sustrato.

Finalmente, para determinar la incertidumbre estadística de la velocidad de arrastre se utilizó el error típico o desviación estándar de la media S/\sqrt{N} .

En la figura 2.14 se muestra un diagrama de flujo del proceso del método Monte Carlo utilizado en este trabajo y en la siguiente sección 2.2.1 se hace la descripción estadística.

El conjunto de electrones a simular donde cada electrón que lo conforma es una super partícula con un peso estadístico que representa un sub-conjunto, que siguen el siguiente comportamiento.

- Sea $N' \in \mathbb{N}$ el número de los electrones y N_{elec} el número de electrones simulados, el peso estadístico es $\frac{N'}{N_{elec}}$
- Si el número partículas a simular es muy grande del conjunto, el valor promedio de la velocidad, $v_{ar} = \langle \vec{v}(t) \rangle = \frac{1}{N_{elec}} \sum_j \vec{v}_j(t)$ será muy próximo a la velocidad promedio del gas de electrones 2D, cuyo error estándar es calculado por $D_s = \frac{\sigma}{\sqrt{N_{elec}}}$, donde σ^2 es la varianza (Kalos y Whitlock, 2009).
- El seguimiento del movimiento para cada partícula en un intervalo de tiempo Δt está sincronizado.
- La dinámica está regida por las ecuaciones semiclásicas, y el intervalo de tiempo entre dos dispersiones se denomina tiempo de vuelo libre, estas dispersiones son de origen aleatorio y generarán cambios en la energía y el vector de onda del electrón.
- El método Monte Carlo consiste en escoger aleatoriamente:
 - (1) el tiempo de vuelo libre,
 - (2) el tipo de dispersión,
 - (3) la nueva energía y vector de onda del electrón.

La descripción anterior se continúa hasta que el electrón alcance el intervalo de tiempo Δt para seguidamente extraer la velocidad y energía promedios.

Se considera que el vector de onda del electrón $\vec{k}(t)$ cambia continuamente durante el vuelo libre debido al campo aplicado, de acuerdo con la ecuación 1.20. Si la probabilidad que un electrón sufra una dispersión en un intervalo de tiempo dt centrado en t es igual a $\mathfrak{I}(\vec{k}(t))dt$ donde $\mathfrak{I}(\vec{k}) = \sum_i \mathfrak{I}_i(\vec{k})$ representa a la tasa total de dispersión del electrón

debido a todos los mecanismos de dispersión presentes en el simulador para: grafeno intrínseco o grafeno sobre sustrato de Cu₂O. Entonces la probabilidad de que un electrón en el estado k sufra una dispersión en el tiempo t durante el intervalo de tiempo dt después del vuelo libre es

$$\mathcal{P}(t)dt = e^{-\int_0^t \mathfrak{I}(\vec{k}(t'))dt'} \mathfrak{I}(\vec{k}(t))dt \quad (2.13)$$

los tiempos de vuelo libre t_a pueden ser generados de acuerdo a la densidad de probabilidad $\mathcal{P}(t)$ y la probabilidad normalizada de una interacción en el tiempo t_a es

$$a = \int_0^{t_a} \mathcal{P}(t)dt \quad (2.14)$$

donde a es un número aleatorio distribuido en el rango $[0,1]$, reemplazando 2.13 en 2.14, se tiene:

$$a = \int_0^{t_a} e^{-\int_0^{t'} \mathfrak{I}(\vec{k}(t''))dt''} \mathfrak{I}(\vec{k}(t'))dt' \quad (2.15)$$

Se obtiene integrando

$$a = 1 - e^{-\int_0^{t_a} \mathfrak{I}(\vec{k}(t'))dt'} \quad (2.16)$$

Dado que la distribución de a y $1-a$ es similar desde el punto de vista estadístico

$$a = e^{-\int_0^{t_a} \mathfrak{I}(\vec{k}(t'))dt'} \quad (2.17)$$

Luego de aplicar el logaritmo natural a ambos lados de la ecuación se tiene

$$\ln a = -\int_0^{t_a} \mathfrak{I}(\vec{k}(t'))dt' \quad (2.18)$$

Para resolver numéricamente esta ecuación sin implicar mucho costo computacional es que se utiliza el término ‘autodispersión’ que fuera utilizado por Bosi y Jacoboni (1976). Esta autodispersión no hace variar el vector de onda ni la energía, por otra parte, la tasa de dispersión permanece constante, entonces la incluimos de forma aditiva junto a la tasa de dispersión total, de tal forma se obtenga un valor de probabilidad constante independiente del tiempo, así:

$$\mathfrak{T} = \sum_i \mathfrak{T}_i(\vec{k}(t)) + \mathfrak{T}_{adisp}(\vec{k}(t)) \quad (2.19)$$

Reemplazando \mathfrak{T} en 2.18 y despejando t_a , se tiene

$$t_a = -\frac{1}{\mathfrak{T}} \tau_0 \ln(a) \quad (2.20)$$

Cabe indicar que \mathfrak{T} se escoge de tal forma que sea un valor grande para la simulación y como se indicó anteriormente, como los mecanismos de dispersión interrumpen el vuelo libre de los electrones en forma aleatoria, al generar un número aleatorio a , comparamos con $a\mathfrak{T}$ las posibles combinaciones de $C_1 \dots C_5$ que se indican en la figura 2.11 donde se muestran los valores de probabilidad acumulados para los diferentes tipos de dispersión como $C_1 = \mathfrak{T}_1$, $C_2 = \sum_{i=1}^2 \mathfrak{T}_i$, $C_3 = \sum_{i=1}^3 \mathfrak{T}_i$, $C_4 = \sum_{i=1}^4 \mathfrak{T}_i$ y $C_5 = \sum_{i=1}^5 \mathfrak{T}_i$. De aquí podemos elegir un proceso de dispersión real o una autodispersión.

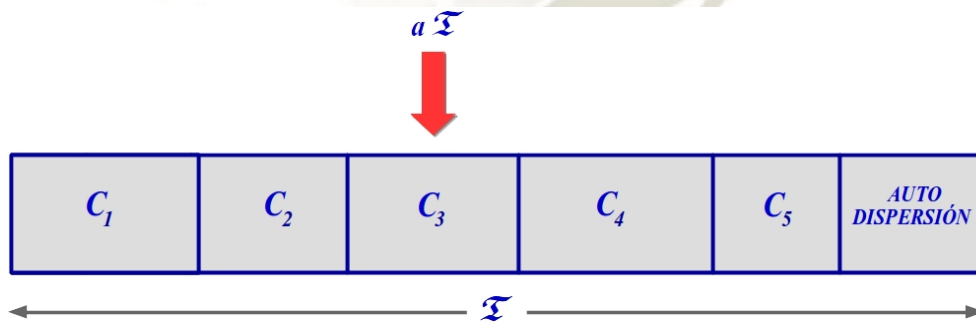


Figura 2.11 – Proceso de selección de los mecanismos de dispersión.

Fuente: elaboración propia.

2.2.1. Descripción estadística del sistema de partículas cargadas (electrones)

Considerando que la densidad electrónica en el grafeno reportada por Tan y col. (2007) es de $n \approx 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, lo que nos da alrededor de 3 billones de electrones en un cm^2

de este material, se necesita mantener una adecuada respuesta estadística de los resultados. Para un análisis de esta situación, donde se requiere conocer la movilidad de arrastre, es decir, la razón de la velocidad arrastre (deriva o promedio) respecto al campo eléctrico externo aplicado de intensidades moderadas sobre este material, se ha requerido considerar los siguientes aspectos:

1. Se trabaja en escala microscópica ya que de esta forma será independiente del tamaño del material.
2. Las trayectorias del electrón en el espacio recíproco, según la figura 2.1, son líneas rectas, por lo que, entre dispersiones sucesivas aleatorias, la acción del campo eléctrico externo se trata clásicamente.
3. Considerando que se tendrían que resolver billones de ecuaciones diferenciales para encontrar la movilidad de arrastre en el grafeno, lo cual resulta inviable, se ha de especificar el estado del sistema, según el modelo del gas de electrones con la marcada diferencia que en este trabajo se considera un gas de electrones bidimensional, (2DEG); este modelo es utilizado desde 1967 en semiconductores, así lo refiere Hwang y col (2016).
4. En el modelo 2DEG, los electrones en el material 2D, siguen trayectorias aleatorias aun cuando son sometidos a campos eléctricos externos. Se debe considerar que los electrones sufren dispersiones por la dinámica de la red, con las ondas elásticas cuantizadas, que denominamos fonones. Su influencia se desarrolló con mayor detalle en las secciones 2.1.1 y 2.1.2. Además de los fonones, se incluyen a las impurezas ionizantes en el proceso de dispersión de los electrones sobre sustrato.
5. Se recalca que el transporte de electrones en el grafeno puede ser considerado de naturaleza estocástica, y para encontrar la movilidad de los electrones se ha de trabajar con un conjunto de electrones que consta de un gran número, \mathfrak{N} , de sistemas idénticos de la misma naturaleza (en nuestro caso los electrones), donde la probabilidad de ocurrencia de un evento se define con respecto al conjunto de electrones y está dado por la fracción de sistemas dentro del conjunto de electrones con ocurrencia del evento específico.

2.2.2. Inclusión de la degenerancia en el método Monte Carlo para el grafeno

En sistemas de partículas que por su naturaleza deben cumplir el principio de exclusión de Pauli, se debe incluir la degenerancia de estados de electrones. Bosi y Jacoboni (1976) utilizaron el Método de Monte Carlo para una partícula en el transporte de carga en semiconductores, incluyendo la degenerancia de forma autoconsistente. Lugli y Ferry (1985) se enfocan en el esquema del método Monte Carlo, donde incluyen el método de rechazo a la distribución del conjunto de electrones para tomar en cuenta la degenerancia. Algunas ideas de estos autores se adecuaron para el presente trabajo, las mismas que se presentan a continuación.

Se inicializa la implementación del modelo, con la distribución del conjunto de electrones, siguiendo el principio de exclusión de Pauli. Este punto es el más delicado dentro del método porque implica una correcta normalización de la función de distribución.

Tomamos N_{elec} como el número de electrones simulados en el conjunto de electrones, mientras que n , como la densidad electrónica y $Ar = N_{elec} / n$ el área en el espacio directo, la cual estará ocupada por los N_{elec} electrones. Siguiendo el razonamiento de Lugli y Ferry (1985) para 3D, la densidad de estados, por intervalo de vector de onda en el espacio recíproco bidimensional está dada por:

$$D(k) = \frac{Ar}{(2\pi)^2} \quad (2.21)$$

Entonces, multiplicando el área de una celda del espacio recíproco en la simulación, por la densidad de la ecuación (2.21), el número máximo de electrones por celda de la malla que discretiza el espacio recíproco en 2D es:

$$Mc = 2 \frac{A_c \cdot A_r}{(2\pi)^2} \quad (2.22)$$

Cuando se hace una discretización polar cada celda resulta en un sector circular, en el espacio recíproco, cuya área está dada por:

$$A_c = \left(j - \frac{1}{2} \right) \Delta\theta \Delta k^2 \quad (2.23)$$

El factor 2 en la ecuación (2.22) es debido al principio de exclusión de Pauli.

Cada sector identificado con los índices i, j ; con $i=1,2,\dots$ siendo el índice angular y $j=1,2,3,\dots$ el índice radial (figura 2.12). En esta figura se puede observar cómo se van ocupando los electrones en los niveles de energía más bajos.

Continuando con el método, se debe determinar para cada celda, la función de Fermi-Dirac normalizada, $\mathcal{F}_c^v(E_k)$, como el número de electrones que ocupan una celda entre A_c . Luego la $\mathcal{F}_c^v(E_k)$ y un número aleatorio r entre $[0,1]$ se ha de emplear para decidir si un electrón puede acomodarse en esa celda en particular: si $r \leq \mathcal{F}_c^{*v}(E_k)$, la transición estará prohibida y en su lugar se produce una autocolisión, pero si $r > \mathcal{F}_c^{*v}(E_k)$, se procede con la transición. De esta forma, se toma en cuenta el principio de exclusión de Pauli y se considera de forma correcta la degenerancia en los estados de electrones.

En el enfoque tomado en esta parte, podemos indicar las diferencias incluidas respecto a los trabajos de Lugli y Ferry (1985) y Nederveen (1989). Estos investigadores trabajan con un material en 3D, pero el primero de ellos considera un diferencial de volumen cúbico en el espacio recíproco, es decir un $dk_x dk_y dk_z$; mientras que Nederveen usa un volumen diferencial esférico, es decir $k^2 \sin\theta d\theta d\phi dk$. En este último trabajo se propone que 'con un volumen esférico se refleja más de cerca la simetría del problema'. En este trabajo se ha seguido esta idea y es en la ecuación 2.23 donde se incluye a las coordenadas polares del espacio recíproco, ya que el grafeno es un material en 2D y la energía es proporcional a la magnitud del vector de onda.

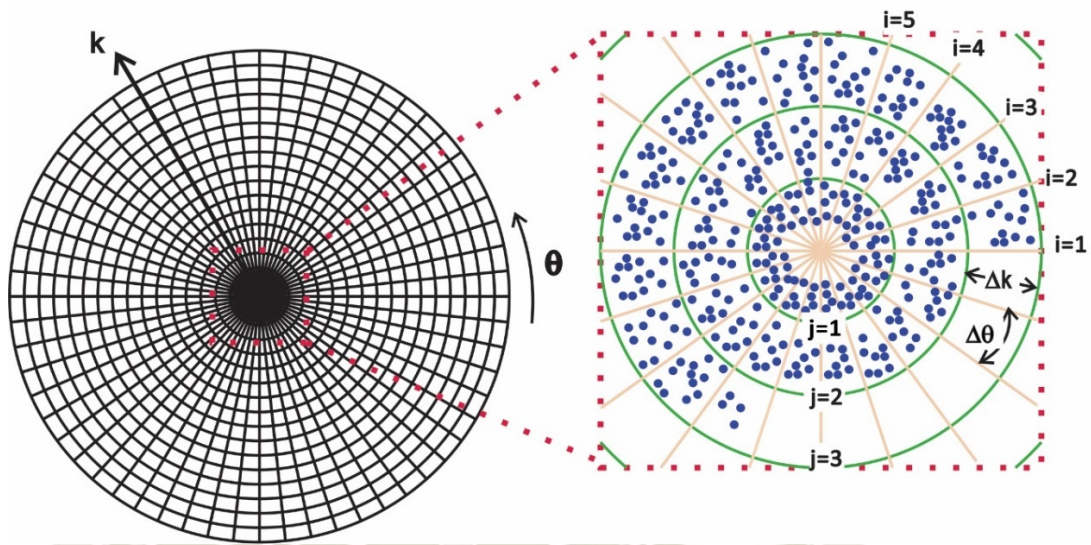
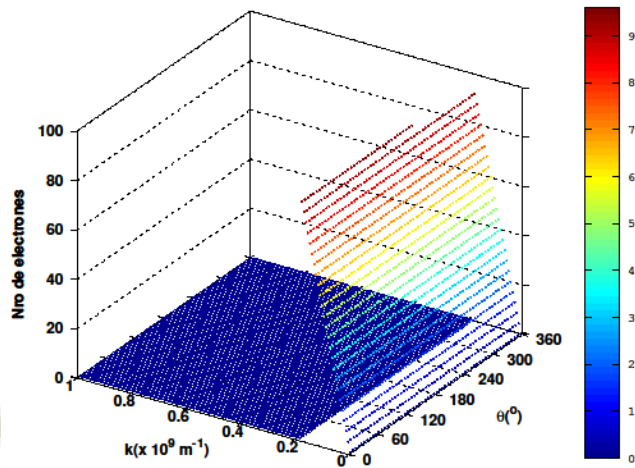


Figura 2.12 – Discretización del espacio recíproco para la función de distribución de estados, donde se muestra la forma como se van ocupando los electrones de los niveles más bajos.

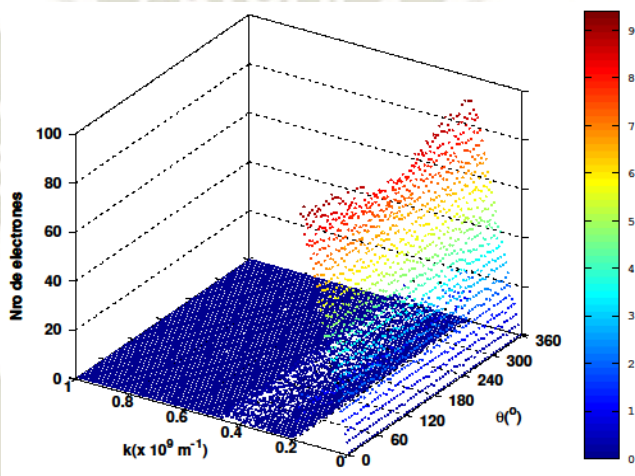
Fuente: elaboración propia.

2.2.3. Variación de la función de distribución en función de la energía

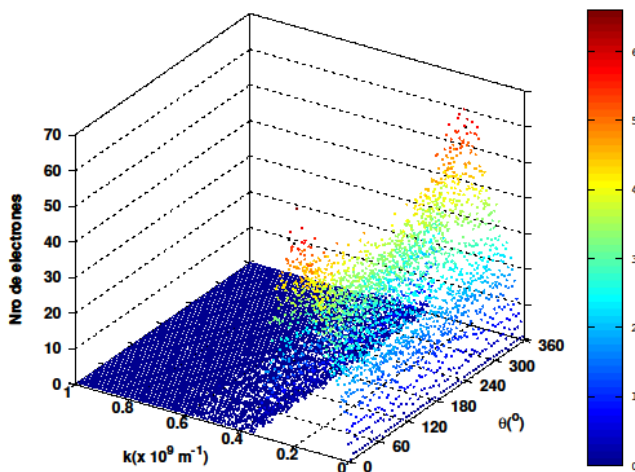
Para observar el correcto comportamiento de la función distribución en función de la energía se toma una muestra de 70000 electrones. Inicialmente ($t = 0$), para este conjunto de electrones, con la distribución electrónica almacenada en una matriz. El campo eléctrico fue definido en 0.5 kVcm^{-1} , con una densidad electrónica de $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. A un incremento de tiempo ($t = 0.25 \text{ ps}$) los electrones ocupan nuevas posiciones debido al campo eléctrico externo y los procesos de dispersión, generando una nueva configuración, que es actualizada y almacenada en una nueva matriz. El proceso se repite hasta alcanzar el tiempo final ($t = 15 \text{ ps}$), obteniendo la configuración final, como se muestra la figura 2.13 para grafeno intrínseco y en la figura 2.14 para grafeno sobre sustrato de Cu_2O .



(a) $t=0$ ps



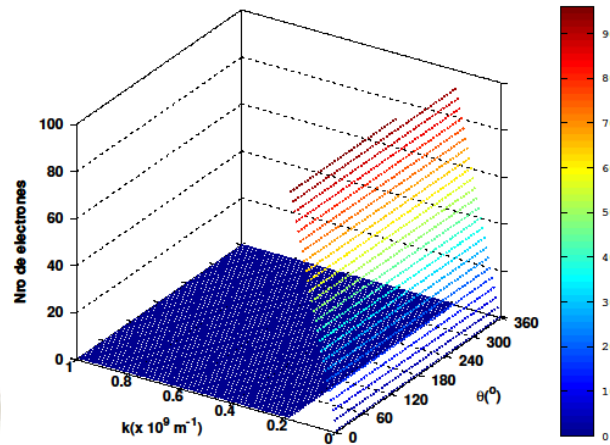
(b) $t=0.25$ ps



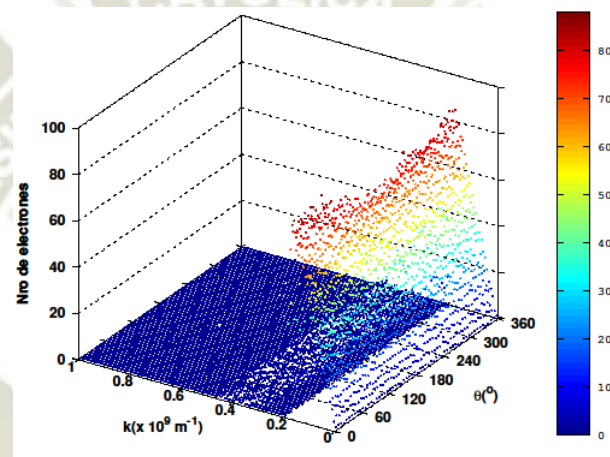
(c) $t=15$ ps

Figura 2.13 – Evolución del conjunto de electrones en el tiempo respecto a la discretización (k, θ) , usando el principio de exclusión de Pauli para grafeno intrínseco con campo eléctrico de 0.5kVcm^{-1} y densidad electrónica $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, para diferentes tiempos, en el inicio de la simulación $t = 0$ ps, en un tiempo posterior $t = 0.25\text{ps}$ y $t = 15\text{ps}$.

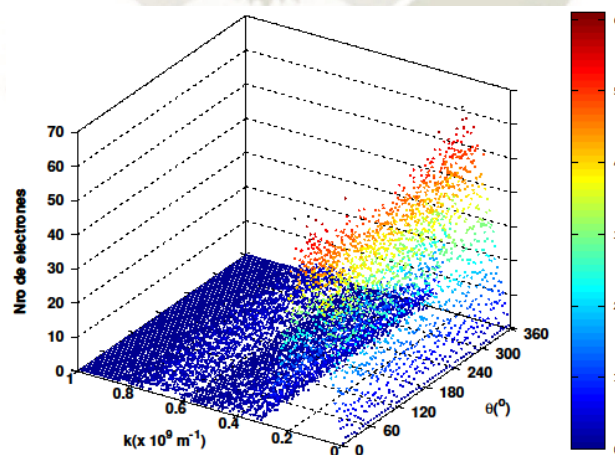
Fuente: elaboración propia, con los datos obtenidos con el simulador MC-grafeno implementado en este trabajo.



(a) $t=0$ ps



(b) $t=0.25$ ps



(c) $t=15$ ps

Figura 2.14 – Evolución del conjunto de electrones en el tiempo respecto a la discretización (k, θ) usando el principio de exclusión de Pauli para grafeno sobre el sustrato con campo eléctrico de 0.5 kVcm^{-1} y densidad electrónica $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, para diferentes tiempos, en el inicio de la simulación $t = 0$ ps, en un tiempo posterior $t = 0.25$ ps y $t = 15$ ps.

Fuente: elaboración propia, con los datos obtenidos con el simulador MC-grafeno implementado en este trabajo.

2.3. Descripción del procedimiento computacional del simulador implementado en Matlab

En la implementación computacional se ha optado por el lenguaje Matlab debido a las funciones numéricas que ya vienen debidamente implementadas. Las etapas de ejecución de un problema en particular están diagramadas en la figura 2.15 y se explica a continuación:

- La inicialización de parámetros está referida a la inclusión de constantes físicas, parámetros del material que se mantienen constantes (grafeno y sustrato de Cu₂O) y de los parámetros variables dentro de la simulación como son la densidad electrónica, etc.
- La construcción de las tablas de dispersión almacenadas en tablas temporales, que son usadas para interpolar los valores de tasa de dispersión para cada proceso de interacción en función de la energía del electrón, durante la simulación. Este proceso en particular usa funciones numéricas implementadas en Matlab.
- La inicialización de energía de los electrones se realiza a partir de la función de distribución de Fermi ocupando los niveles de energía más bajos.
- Se realiza cálculo de los histogramas de la función de distribución dentro del conjunto de electrones, al comienzo de la simulación y en diferentes etapas temporales predeterminadas, para verificar la correcta ubicación de los electrones dentro de la malla que discretiza el espacio recíproco y su normalización.
- El cálculo del tiempo de vuelo se realiza a partir de las tasas de transición al comienzo de cada paso temporal y cada vez que ocurra una autocolisión.
- El registro de los datos (velocidad, energía, tiempo,..) se realiza solo cada cierto número de pasos temporales de forma predefinida para no ralentizar la simulación. Al cumplirse el tiempo de simulación se calculan los valores promedio y sus incertidumbres los cuales se graban en archivos de texto para ser graficados y analizados posteriormente.

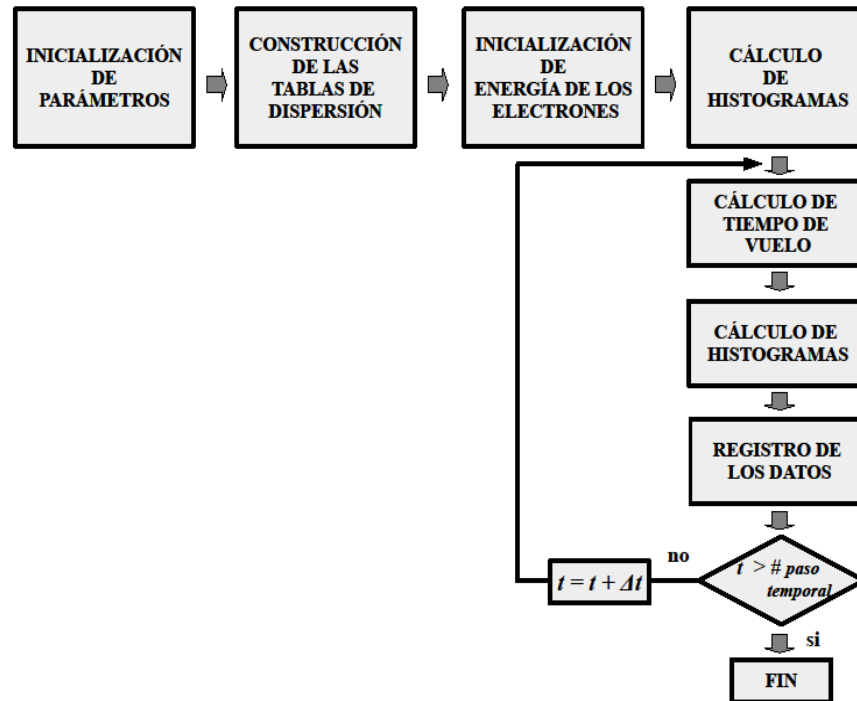


Figura 2.15 – Diagrama de operación del simulador MC-grafeno implementado en este trabajo.

Fuente: elaboración propia.

2.3.1. Planificación de la simulación

2.3.1.1. Ubicación espacial

Las simulaciones en este trabajo se realizaron en una computadora personal de las características: Intel(R) Core (TM) i7-7700K CPU @ 4.20GHz 800,00MHz y Memoria Total de 65925424 kB, tarjetas de video NVIDIA [Quadro P2000] y NVIDIA [GeForce GT 1030]. También se hizo algunas pruebas en una computadora con otra arquitectura (con procesador AMD Ryzen 7 3700X 8-Core y Memoria 16404MB, tarjeta de video GeForce GTX 1660 SUPER/PCIe/SSE2) para verificar la independencia del código computacional con el Hardware.

2.3.1.2. Ubicación temporal

Las simulaciones realizadas que se han llevado a cabo fueron desde el 2019 hasta setiembre del 2020.

2.3.1.3. Unidades de estudio

La unidad de estudio en este trabajo es el grafeno intrínseco y el grafeno sobre sustrato de Cu₂O, y el estudio se ha conformado por todas las simulaciones que se han realizado para determinar la movilidad de los electrones en el grafeno intrínseco y para determinar la movilidad de los electrones en grafeno sobre sustrato de Cu₂O.

El muestreo es del tipo estadístico, obtenido de las corridas computacionales aplicadas sobre las unidades de estudio. Se pretende demostrar la obtención de la movilidad de los electrones sobre el grafeno intrínseco con fiabilidad estadística, contrastando los resultados obtenidos de la simulación con fuentes bibliográficas existentes. Para el grafeno sobre el sustrato de Cu₂O, la fiabilidad estadística nos permite dar juicio de los resultados en la obtención de la movilidad de los electrones lo cual tiene dependencia del campo eléctrico y de la concentración de electrones. En este último caso no se tiene información sobre resultados experimentales o teóricos.

Finalmente, en la siguiente tabla 2.1 se presenta los parámetros empleados en el cálculo.

Tabla 2.1 – Parámetros usados en el transporte de electrones para el Grafeno, con sus respectivas referencias.

Parámetros a 300 K	Valor	Referencia
Densidad de masa (g/cm ²)	7.6×10^{-8}	(Bolotin y col., 2008)
Constante de red (Å)	2.46	(Reich y col., 2002)
Constante dieléctrica	3.9	(Özdemir y col., 2016)
Velocidad de Fermi (ms ⁻¹)	0.815×10^6	(Shishir y col., 2009)
Velocidad del sonido en el grafeno (cms ⁻¹)	2.1×10^6	(Fischetti y col., 2013)
Constante dieléctrica a baja frecuencia	3.9	(Özdemir y col., 2016)
Constante dieléctrica a alta frecuencia	2.5	(Özdemir y col., 2016)

Fuente: elaboración propia.

2.3.2. Información generada por el simulador MC-grafeno

En la recolección de datos se hará uso de la técnica de experimentación la cual está representada en este trabajo por las simulaciones hechas con el programa implementado en MATLAB para el transporte de electrones exclusivamente para el grafeno y en grafeno sobre sustrato de Cu_2O , con los observables: velocidad media, energía, vectores de onda, matrices de evolución y velocidad deriva. Por otra parte, para la validación de los resultados con la finalidad de comprobar la hipótesis se plantea utilizar la contrastación de observación.

Finalmente, la validación de los instrumentos, en este caso está referido a la validación de las simulaciones lo cual será por contrastación con otros resultados especialmente con los del tipo experimental o de otras simulaciones que se puedan hallar en la literatura referida a la movilidad del grafeno, por medio de la comparación.

2.3.3. Análisis de la autocovarianza

La implementación de la autocovarianza se realiza para analizar los resultados de la velocidad obtenidos con el simulador MC-grafeno, y verificar si efectivamente llegan al estado estacionario además de que esta forma también se verifica el cumplimiento del teorema de Birkhoff (sección 1.6). Para esto se incluye un programa en Matlab que se muestra en el apéndice, el mismo que fue utilizado en el análisis de los datos de la velocidad.

3. Resultados y Discusión

3.1. Introducción

En este capítulo se presenta los resultados obtenidos de la simulación del transporte de electrones en el grafeno intrínseco y transporte de electrones en grafeno sobre sustrato utilizando al método numérico de Monte Carlo en la solución de la ETB semiclásica en el siguiente orden: en la sección 3.2 se muestra los resultados de la verificación del cumplimiento del estado estacionario. En la sección 3.3 se presentan los resultados de la movilidad para el grafeno intrínseco y para grafeno sobre sustrato de Cu₂O. Así también se analiza en esta sección, la velocidad de los portadores para ambos materiales, por último, en la sección 3.4 se analiza la influencia del sustrato en la movilidad de electrones del grafeno.

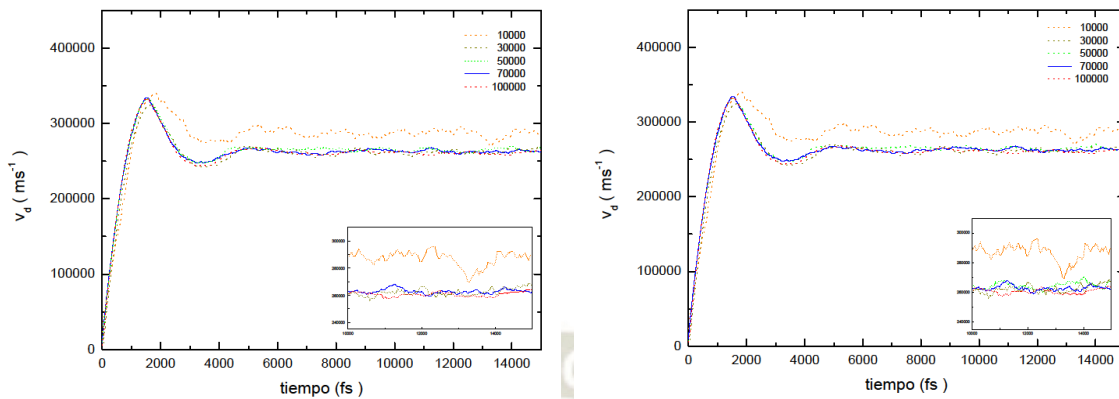
3.2. Análisis de la fluctuación de la velocidad

El análisis de la fluctuación del conjunto de electrones permite conocer cuando se llega al estado estacionario, para luego encontrar la velocidad promedio del conjunto de electrones.

Para conocer la estabilidad de la solución en función del número de electrones, se ha hecho simulaciones con 10000 electrones, 30000 electrones, 50000 electrones, 70000 electrones y 100000 electrones, sujeto a las mismas condiciones de campo eléctrico de $1.1 \times 10^5 \text{ V cm}^{-1}$ en la dirección $[111]$ y $n = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y densidad electrónica, lo cual se muestra en la figura 3.1, observándose mayor fluctuación en la velocidad para 10000 electrones respecto al de 70000 electrones y 100000 electrones donde se encuentra que las fluctuaciones son menores entre los tiempos de 10 ps a 14 ps.

Cabe indicar que para verificar la independencia del hardware del procedimiento computacional implementado usando el generador de números aleatorios del Matlab, se hizo la corrida del programa de simulación en una computadora con procesador AMD, cuyas características esta detallada en la sección 2.3.1. Los resultados de esto se muestran en la figura 3.1 y se resumen en la tabla 3.1, donde se observa que entre los resultados de la velocidad obtenidos con la computadora con procesador AMD y la computadora

con procesador INTEL, no hay ninguna diferencia. Para el resto de simulaciones solo se realizó en la computadora con procesador INTEL.



(a) Con procesador INTEL

(b) Con procesador AMD

Figura 3.1 – Velocidad en función del tiempo para grafeno intrínseco, sujetos a campo eléctrico constante de $1.1 \times 10^5 \text{ Vcm}^{-1}$ en la dirección [100] y densidad electrónica de $n = 1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ para: 10000 electrones (línea naranja), 30000 electrones (línea dorada), 50000 electrones (línea verde), 70000 electrones (línea azul) y 100000 electrones (línea roja), para dos procesadores (a) INTEL y (b) AMD.

Fuente: elaboración propia, con los datos obtenidos con el simulador MC-grafeno implementado en este trabajo.

Tabla 3.1 – Influencia en la velocidad deriva media en estado estacionario en función del número de electrones incluidos en la simulación para grafeno intrínseco

Nro de electrones	Velocidad deriva media en estado estacionario con procesador INTEL (ms^{-1})	Tiempo de simulación en INTEL (hh:mm:ss)	Velocidad deriva media en estado estacionario con procesador AMD (ms^{-1})	Tiempo de simulación en AMD (hh:mm:ss)	Error relativo %
10000	284688±899	00:06:56	284688±899	00:05:53	0.32
30000	263052±379	00:27:17	263052±379	00:23:17	0.14
50000	265297±339	01:03:33	265297±339	00:52:26	0.13
70000	262790±163	03:37:01	262790±163	01:30:45	0.06
100000	260827±253	06:59:11	260827±253	03:45:59	0.10

Fuente: elaboración propia, con el simulador MC-grafeno implementado en este trabajo.

Se han empleado condiciones de simulación análogas para el grafeno sobre el sustrato de Cu₂O, cuyos resultados se muestra en la figura 3.2, donde, también se observa mayor fluctuación en la velocidad con 10000 electrones respecto a 70000 y 100000 electrones donde las fluctuaciones son menores entre los tiempos de 10 ps a 14 ps.

Comparando las figuras 3.1 y 3.2 se observan en todos los gráficos un pico dentro de los primeros 2000 fs aproximadamente, que es denominado transporte transitorio, el cual es consecuencia de la aceleración debida al campo eléctrico antes del efecto de cualquier tipo de dispersión que pueda sufrir el electrón, mientras que después del tiempo de 4 ps ya se encuentra en estado estacionario para grafeno intrínseco y 2 ps para grafeno sobre sustrato.

En la tabla 3.1 se muestra los resultados de la velocidad media de los últimos 50 datos para el grafeno intrínseco, análogamente se presenta en la tabla 3.2 para el grafeno sobre sustrato. De estas tablas concluimos que es suficiente con 70000 electrones tanto para grafeno intrínseco como para grafeno sobre sustrato por cuanto los resultados para 70000 electrones presentan uno de los menores errores estadísticos además que el tiempo computacional no es tan costoso con respecto a la simulación de 100000 electrones que es el doble que para 70000 electrones en el caso del grafeno intrínseco.

Por otra parte, se observa que en los resultados para grafeno sobre el sustrato de Cu₂O presenta mayor fluctuación en la velocidad media en función al tiempo.

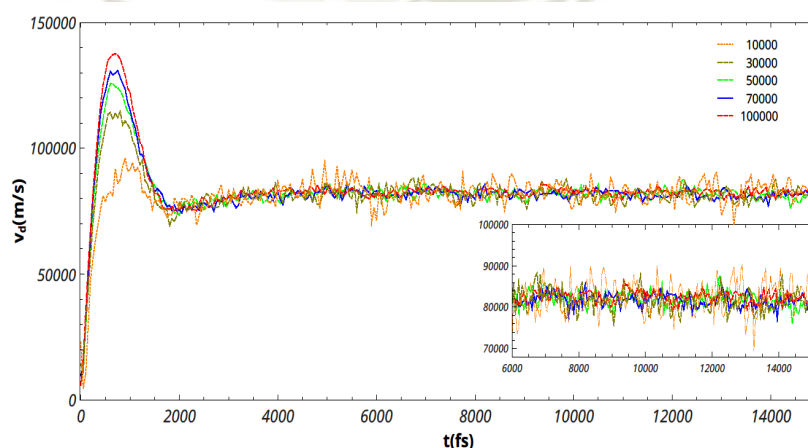


Figura 3.2 – Velocidad en función del tiempo para grafeno sobre sustrato de Cu₂O, sujetos a campo eléctrico constante de $1.1 \times 10^5 \text{ Vcm}^{-1}$ en la dirección [100], densidad electrónica $n = 1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y concentración de impurezas remotas de $n_i = 8.861 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ para simulaciones con diferentes números de electrones: línea naranja con 10000 electrones, línea dorada con 30000 electrones, línea verde con 50000 electrones, línea azul con 70000 electrones y línea roja con 100000 electrones.

Fuente: elaboración propia, obtenida con el simulador MC-grafeno implementado en este trabajo

Tabla 3.2 – Influencia en la velocidad deriva media en estado estacionario en función del número de electrones incluidos para grafeno sobre sustrato de Cu₂O

Nro de electrones	Velocidad deriva media en estado estacionario (ms ⁻¹)	Error relativo %	Tiempo de simulación (hh:mm:ss)
10000	83664 ± 634	0.76	00:29:11
30000	81386 ± 327	0.40	01:44:33
50000	81199 ± 232	0.29	04:28:18
70000	81160 ± 199	0.25	13:53:59
100000	82120 ± 184	0.22	24:17:52

Fuente: elaboración propia, con el simulador MC-grafeno implementado en este trabajo.

Otra característica de los resultados para estos conjuntos de electrones se verifica mediante el análisis de la función de autocovarianza que se muestra en las figuras 3.3 para el grafeno intrínseco y 3.4 para el grafeno sobre sustrato Cu₂O. Para esto se ha seguido las ecuaciones de la sección 1.7 donde la ecuación 1.30 es implementada con las funciones de Matlab mencionadas en la sección 2.2 cuyo código se muestra en el anexo C.3.

Como se observa después de un decaimiento agudo inicial, una parte negativa de la autocorrelación se hace presente. La autocovarianza ayuda a verificar el estado estacionario, requerido por el Teorema de Birkhoff (sección 1.6) que pasado un tiempo el conjunto de electrones llega al equilibrio y también por el Teorema de Liouville (sección 1.4.2) el volumen del conjunto de electrones es el mismo.

Como se puede observar para el caso de la figura 3.3 para la simulación con 70000 electrones, a partir de alrededor 125 ‘lag’, la función de autocorrelación es constante de modo aceptable.

En la figura 3.4 se repite este análisis para el grafeno sobre sustrato Cu₂O. En este caso, la convergencia es aceptable solo a partir de 70000 electrones, debido a la inclusión de una mayor cantidad de procesos aleatorios (procesos de dispersión con el sustrato).

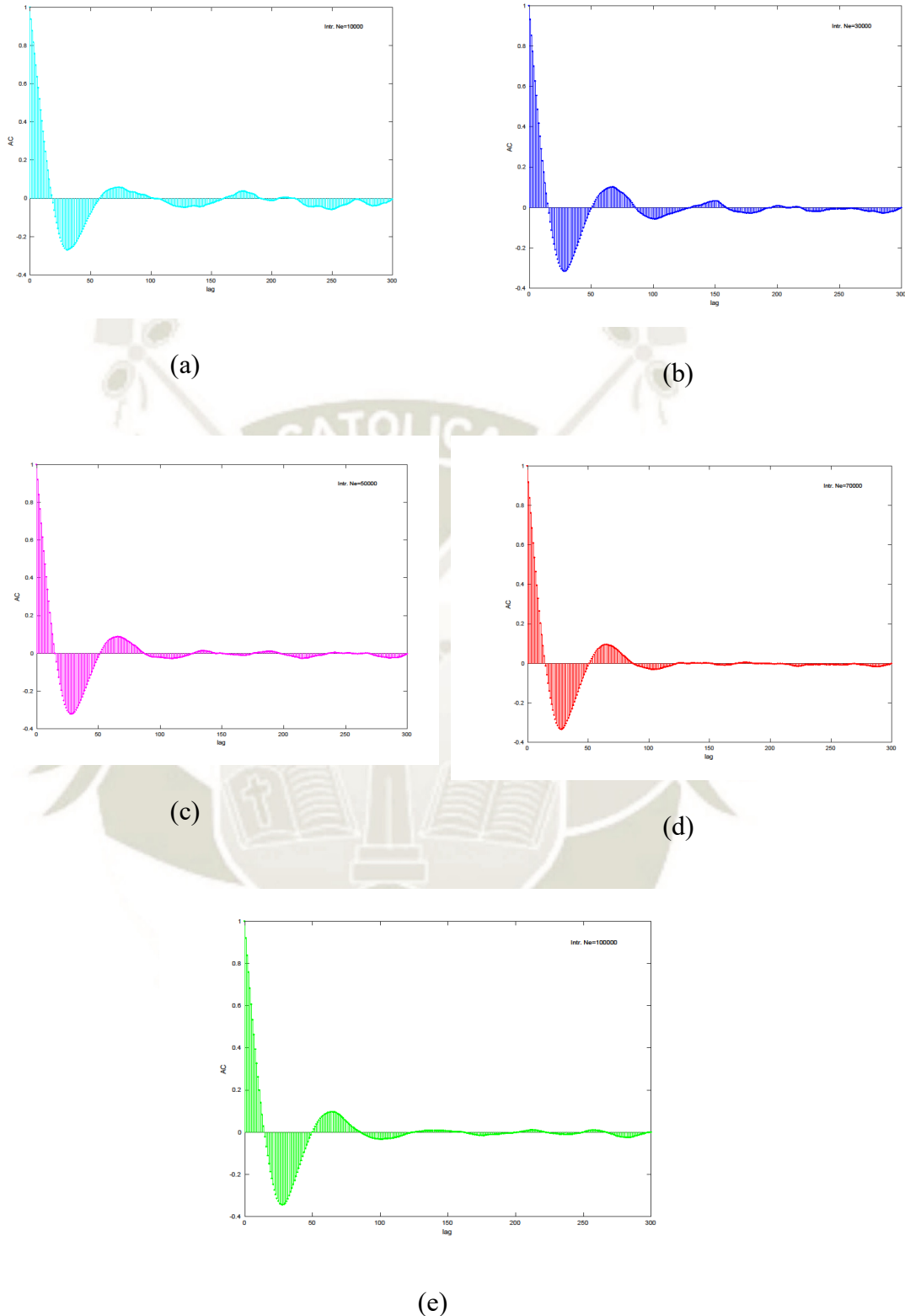


Figura 3.3 – Función de autocorrelación para grafeno intrínseco en función de los ‘lag’ para: (a) 10000 electrones, (b) 30000 electrones, (c) 50000 electrones, (d) 70000 electrones y (e) 100000 electrones, con densidad electrónica de $n = 1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, para un campo eléctrico de $1.1 \times 10^5 \text{ V cm}^{-1}$ en la dirección [100].

Fuente: elaboración propia, cuyo código se muestra en el anexo C.3

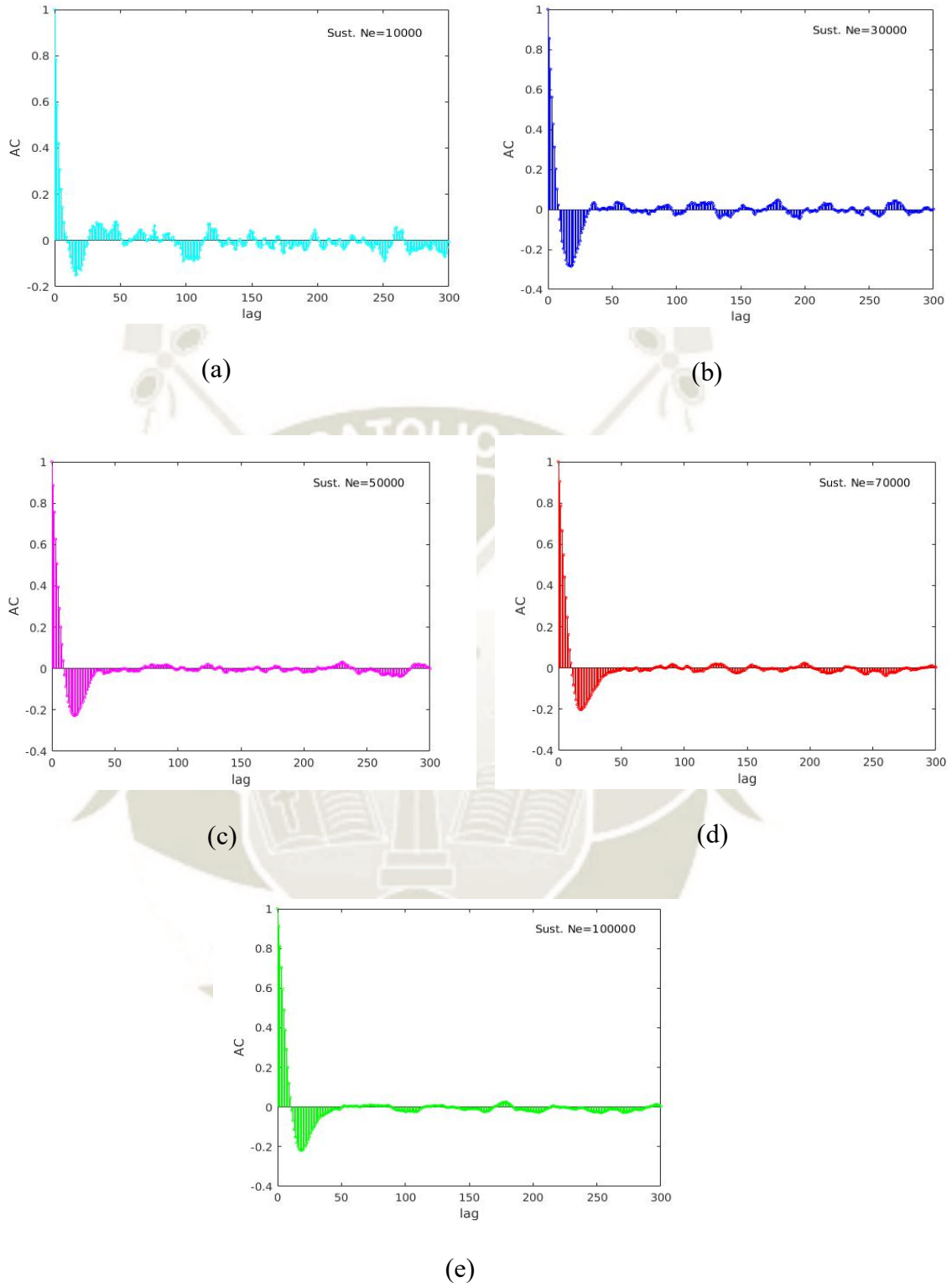


Figura 3.4 – Función de autocorrelación para grafeno sobre sustrato Cu₂O en función de los ‘lag’ para: (a) 10000 electrones, (b) 30000 electrones, (c) 50000 electrones, (d) 70000 electrones y (e) 100000 electrones, con densidad electrónica $n = 1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, concentración de impurezas remotas de $n_i = 8.861 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, para un campo eléctrico de $1.1 \times 10^5 \text{ V cm}^{-1}$ en la dirección [100].

Fuente: elaboración propia, cuyo código se muestra en el anexo C.3

3.3. Resultados de las simulaciones con el método Monte Carlo para la solución de la ETB semiclásica para determinar la movilidad de electrones en el grafeno

Los resultados de las simulaciones para determinar la movilidad de los electrones se presentan en la sección 3.3.1 para el grafeno intrínseco y en la sección 3.3.2 para el grafeno sobre el sustrato de Cu₂O.

3.3.1. Grafeno intrínseco

Para estudiar el comportamiento de la movilidad de los electrones en el grafeno intrínseco; primero se ha realizado las simulaciones con 70000 electrones, que manteniendo constante la densidad electrónica pero haciendo variar la intensidad del campo eléctrico (figura 3.5), subsecuentemente se ha repetido este procedimiento para otras concentraciones de portadores de carga (figura 3.9), también se ha estudiado cual es el comportamiento de la energía de los electrones en el grafeno en función al campo eléctrico (figura 3.10), finalmente previo cálculo de la movilidad se grafica la movilidad de arrastre en función de la concentración de portadores de carga para ser comparada con otros resultados (figura 3.11).

3.3.1.1. Evolución y comparación de la velocidad en función del tiempo para diferentes campos eléctricos, para grafeno intrínseco

En la figura 3.5 se observa la comparación de la velocidad para estudiar el comportamiento de los electrones frente a la intensidad del campo eléctrico que varía desde 0.3 kV cm^{-1} hasta 30 kVcm^{-1} , para este estudio se mantiene constante la densidad electrónica en $n = 1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ en el grafeno intrínseco. Se observa que, para campos eléctricos altos, la velocidad es mayor respecto a campos eléctricos bajos, pero sin embargo se tiende a una saturación. También se puede encontrar diferencia en el tiempo de los transitorios, siendo menores para campos eléctricos altos. Esto es consistente con el hecho de que campos eléctricos altos alinean más rápidamente la velocidad de los portadores de carga. En la tabla 3.3 se puede observar el tiempo del pico de la velocidad y la

velocidad en el estado estacionario. Además, se puede ver que para intensidades de campo eléctricos mayores el pico de la velocidad es de menor duración en el grafeno sobre Cu₂O y la velocidad decrece gradualmente por disipación de la energía en el grafeno debido al efecto de los fonones ópticos y subsecuentemente los fonones acústicos.

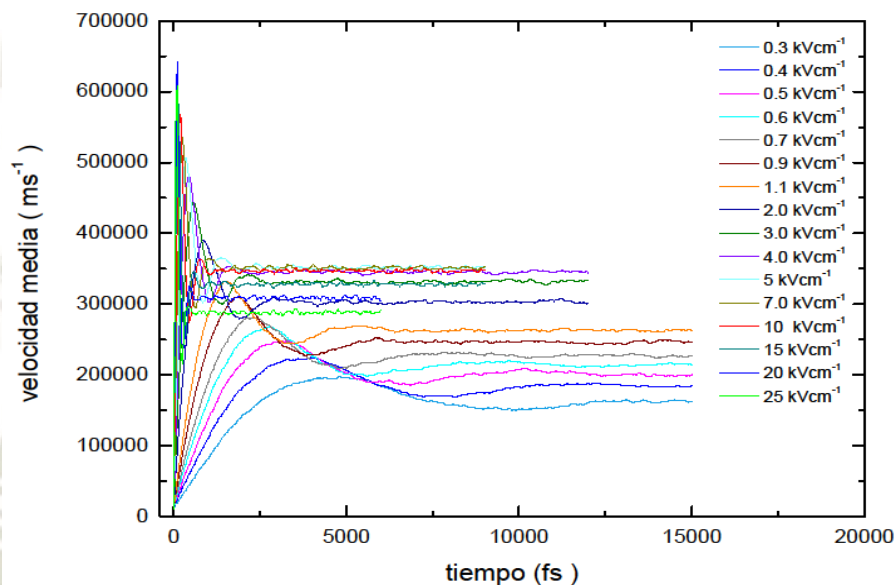


Figura 3.5 – Comparación del comportamiento de la velocidad media de los electrones en el grafeno intrínseco con densidad electrónica de $n = 1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y campos eléctricos desde 0.3 kV cm^{-1} hasta 30 kV cm^{-1} .

Fuente: elaboración propia, con los datos obtenidos con el simulador MC-grafeno implementado en este trabajo.

Tabla 3.3 – Velocidad de los electrones en el grafeno intrínseco en estado transitoria (pico) y en estado estacionario, que se muestran en el gráfico 3.5

Campo eléctrico (kVcm^{-1})	Tiempo del pico (fs)	Velocidad en el pico (ms^{-1})	Velocidad estacionaria (ms^{-1})
0.3	4548	199493	162613.23 ± 168.80
0.4	3682	223499	184285.58 ± 172.41
0.5	2782	246678	199467.89 ± 153.88
0.6	2634	270758	214073.91 ± 186.54
0.7	2111	283696	226902.35 ± 220.95

0.9	1802	310650	246357.66 ± 282.90
1.1	1461	331529	262701.03 ± 174.77
2.0	845	391885	303633.88 ± 246.97
3.0	554	445528	332098.50 ± 259.68
4.0	429	482976	345593.04 ± 197.28
5.0	350	505681	351543.40 ± 230.39
7.0	251	535873	350836.45 ± 223.73
10.0	196	572493	347016.07 ± 238.90
15.0	124	580308	327629.25 ± 231.33
20.0	100	641956	308604.93 ± 293.64
25.0	99	605482	288257.98 ± 263.44

Fuente: elaboración propia, con el simulador MC-grafeno implementado en este trabajo.

3.3.1.2. Distribución de electrones en el espacio recíproco, para grafeno intrínseco

La evolución de los 70000 electrones en el espacio recíproco 2D que son acelerados por campos eléctricos en la dirección [100] de: 0.4 kVcm⁻¹, 0.5 kVcm⁻¹, 0.6 kVcm⁻¹, 0.7 kVcm⁻¹, 0.9 kVcm⁻¹ y 1.1 kVcm⁻¹ se muestra en la figura 3.6, como el conjunto de electrones se desplaza ligeramente hacia la izquierda del vector de onda k_x , que es paralelo a la dirección del campo eléctrico, a medida que éste aumenta. En la figura 3.7 se muestra como los electrones evolucionan en la dirección vector de onda de k_y , se observa que la distribución es simétrica.

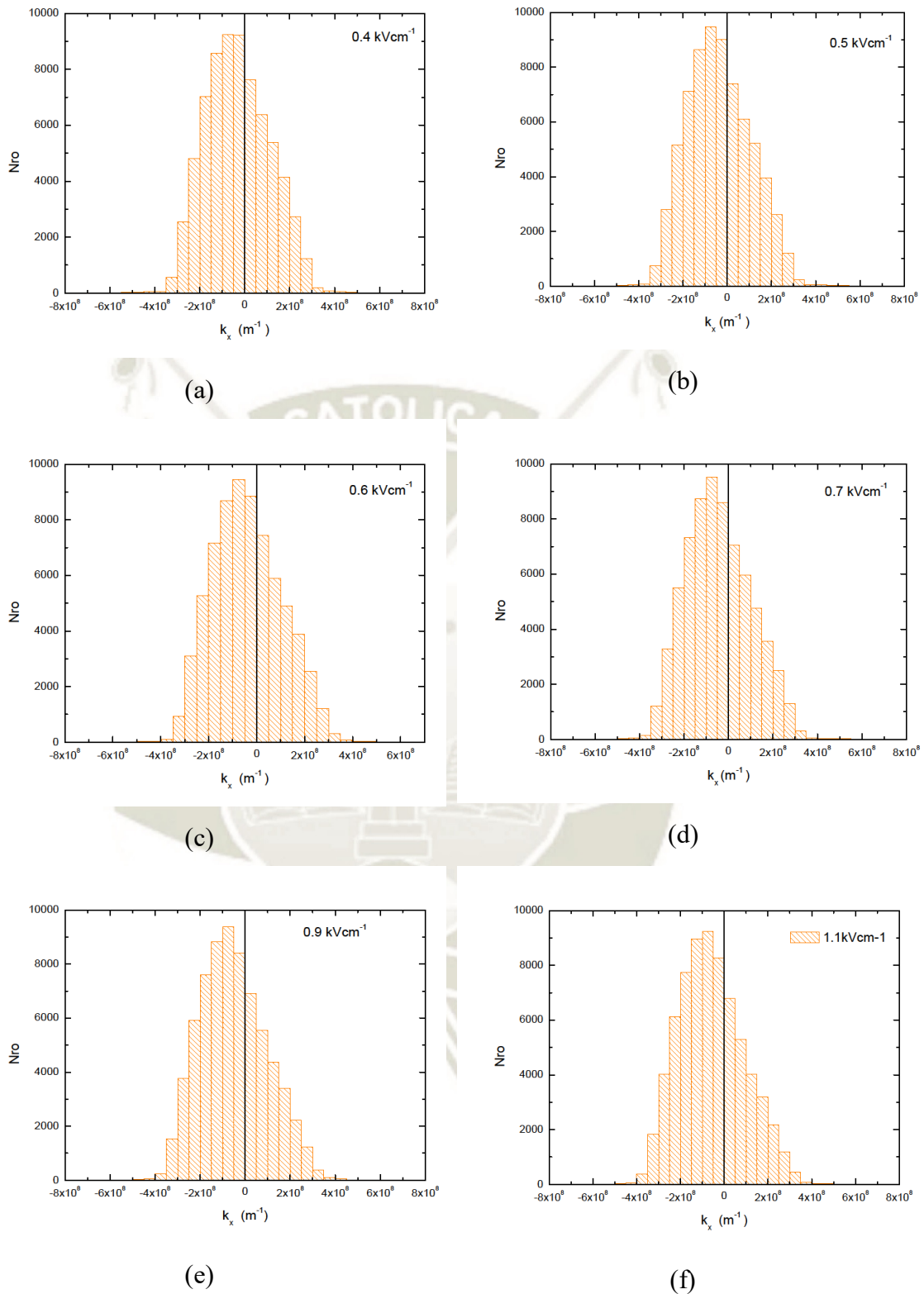


Figura 3.6 – Evolución de la distribución de electrones para la densidad electrónica de $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, en grafeno intrínseco a lo largo de k_x para campos eléctricos de: (a) $E = 0.4 \text{ kVcm}^{-1}$, (b) $E = 0.5 \text{ kVcm}^{-1}$, (c) $E = 0.6 \text{ kVcm}^{-1}$, (d) $E = 0.7 \text{ kVcm}^{-1}$, (e) $E = 0.9 \text{ kVcm}^{-1}$ y (f) $E = 1.1 \text{ kVcm}^{-1}$, para el tiempo de 15 ps.

Fuente: elaboración propia con el simulador MC-grafeno implementado en este trabajo.

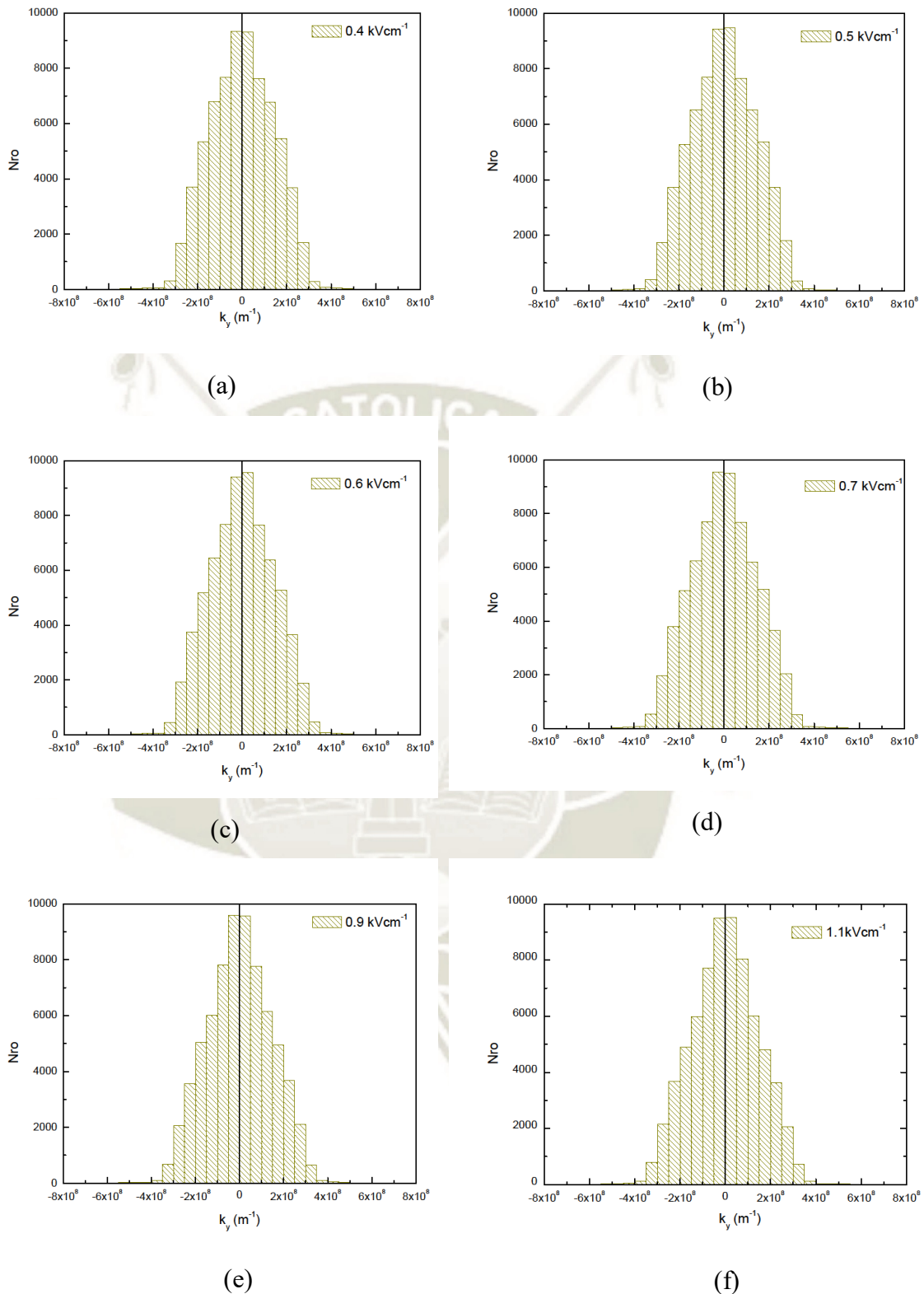


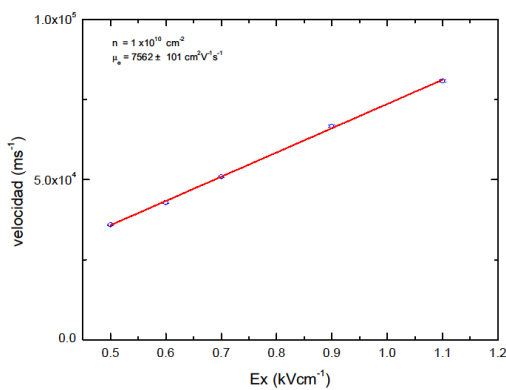
Figura 3.7 – Evolución de la distribución de electrones para la densidad electrónica de $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, en grafeno intrínseco a lo largo de k_y para campos eléctricos de: (a) $E = 0.4 \text{ kVcm}^{-1}$, (b) $E = 0.5 \text{ kV cm}^{-1}$, (c) $E = 0,6 \text{ kV cm}^{-1}$, (d) $E = 0.7 \text{ kV cm}^{-1}$, (e) $E = 0.9 \text{ kV cm}^{-1}$ y (f) $E = 1.1 \text{ kV cm}^{-1}$, para el tiempo de 15 ps.

Fuente: elaboración propia con el simulador MC-grafeno implementado en este trabajo.

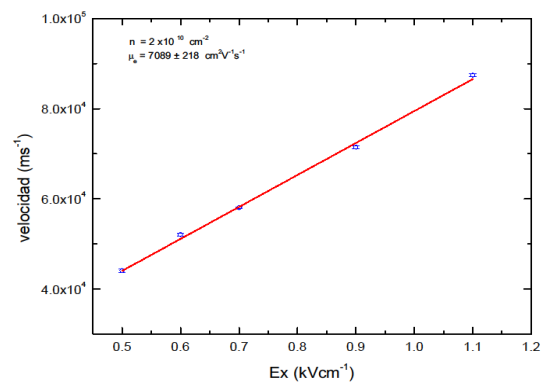
3.3.1.3. Velocidad en función al campo eléctrico para grafeno intrínseco para diferentes densidades electrónicas

En la figura 3.8 se muestra la velocidad de arrastre en función del campo eléctrico de bajas intensidades, para las densidades electrónicas de: $n = 1 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, $n = 2 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, $n = 4 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, $n = 5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, $n = 6 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, $n = 7 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, $n = 8 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, $n = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 1.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 2, 0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 2.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $n = 1.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

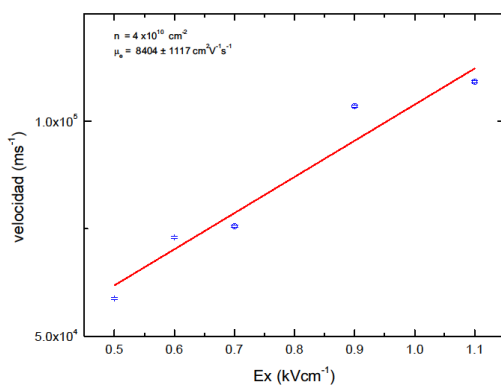
Para el rango de campos eléctrico entre 0.5 kVcm^{-1} y 1.2 kVcm^{-1} , se determina la movilidad para los electrones de conducción. La movilidad se determina de acuerdo con la ecuación (1.31), que es la pendiente de esta gráfica. Los resultados son mostrados para cada una en la figura 3.8



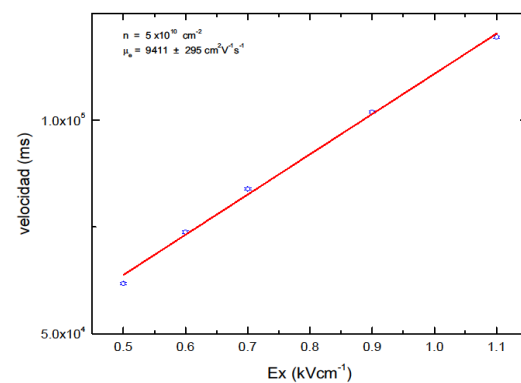
(a) $n = 1 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, $\mu_e = 7562 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$



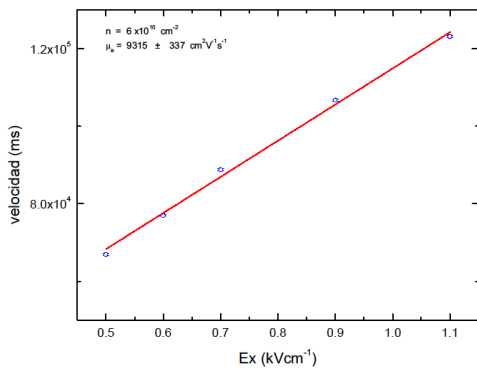
(b) $n = 2 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, $\mu_e = 7089 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$



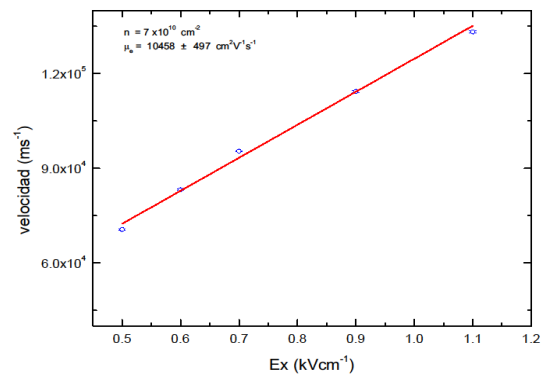
(c) $n = 4 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, $\mu_e = 8404 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$



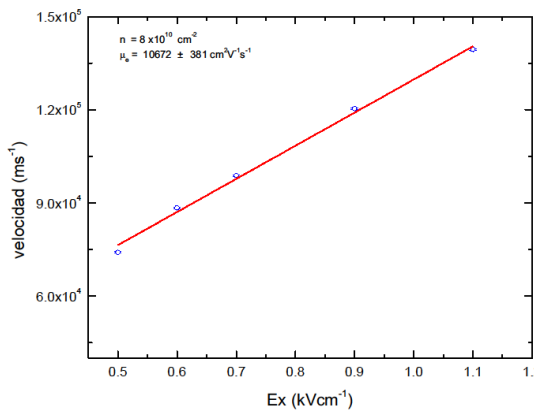
(d) $n = 5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, $\mu_e = 9411 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$



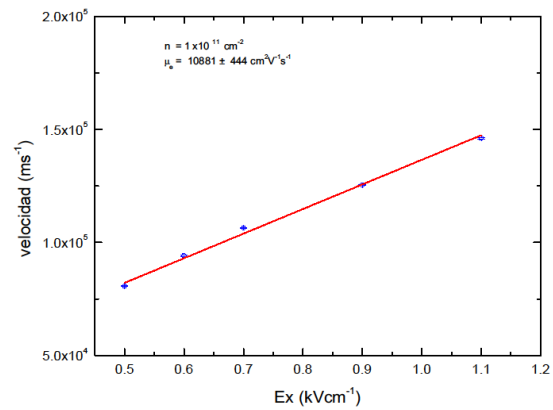
(e) $n = 6 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, $\mu_e = 9315 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$



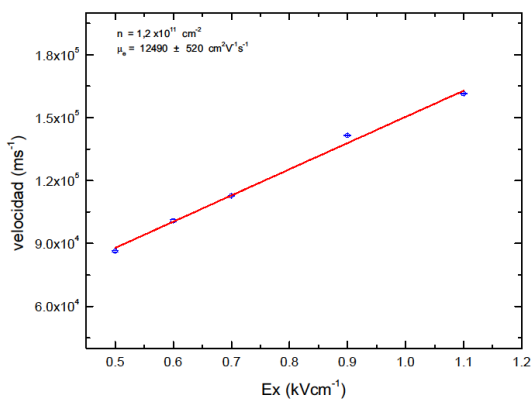
(f) $n = 7 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, $\mu_e = 10458 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$



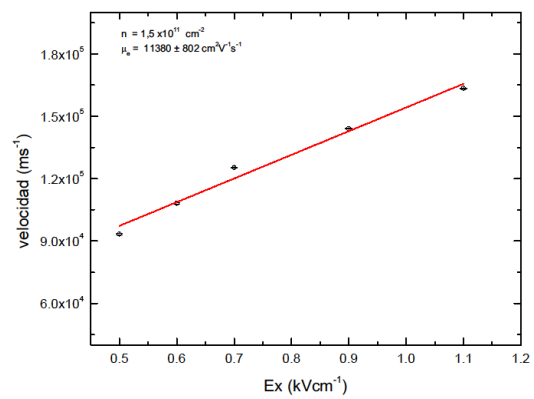
(g) $n = 8 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, $\mu_e = 10672 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$



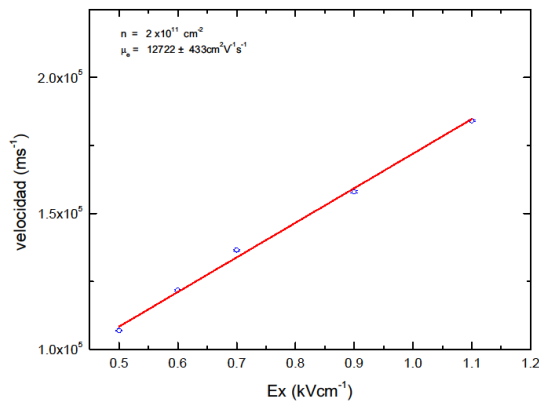
(h) $n = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $\mu_e = 10881 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$



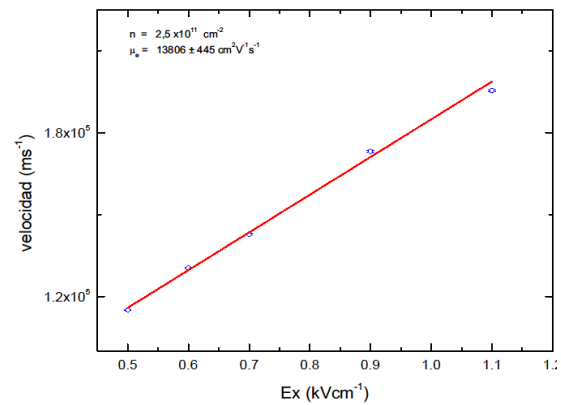
(i) $n = 1.2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $\mu_e = 12490 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$



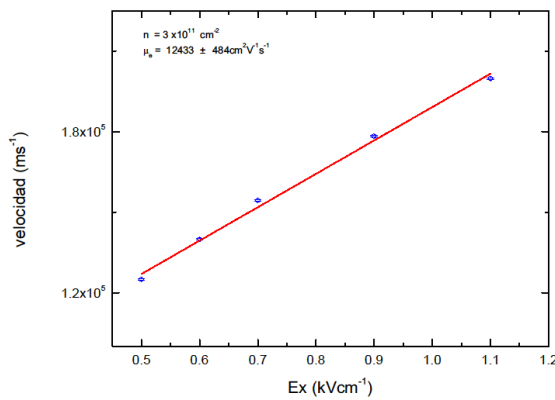
(j) $n = 1.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $\mu_e = 11380 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$



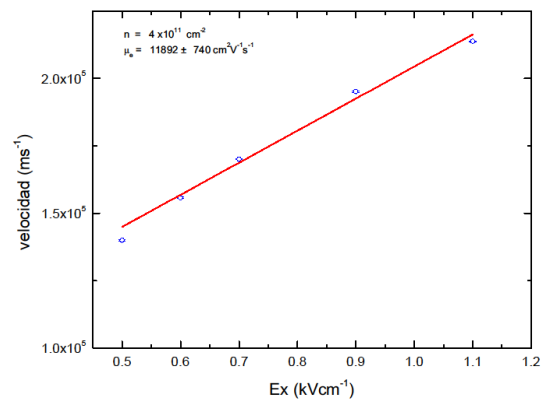
(k) $n = 2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $\mu_e = 12722 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$



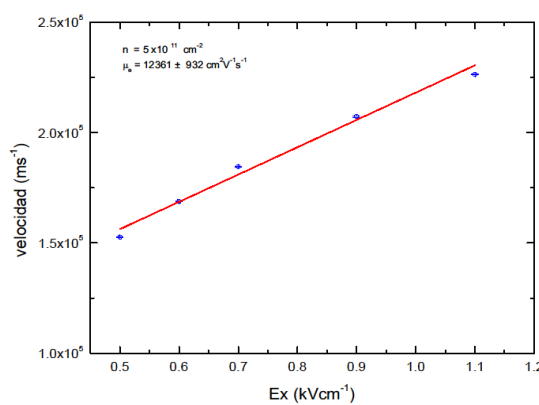
(l) $n = 2.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $\mu_e = 13806 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$



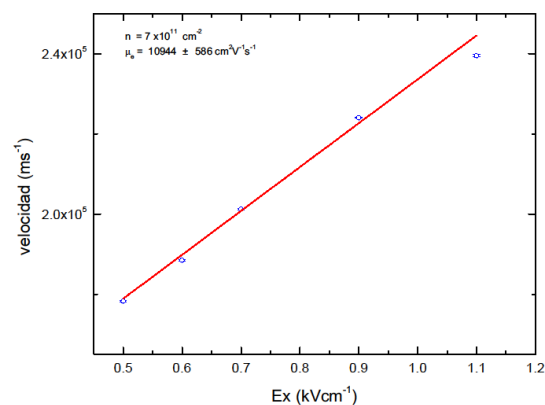
(m) $n = 3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $\mu_e = 12433 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$



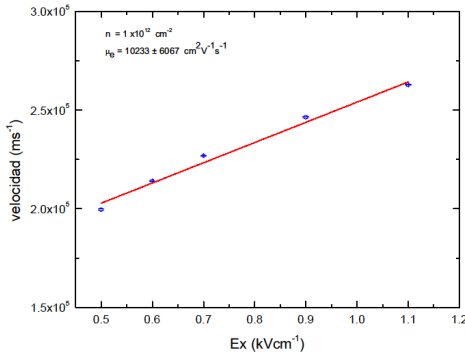
(n) $n = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $\mu_e = 11892 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$



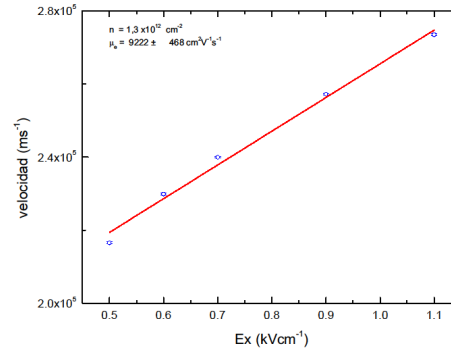
(ñ) $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $\mu_e = 12361 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$



(o) $n = 7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $\mu_e = 10944 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$



(p) $n = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $\mu_e = 10233 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$



(q) $n = 1.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $\mu_e = 9222 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$

Figura 3.8 – Velocidad de arrastre en función del campo eléctrico para los electrones en el grafeno intrínseco para las concentraciones de (a) $n = 1 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, (b) $n = 2 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, (c) $n = 4 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, (d) $n = 5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, (e) $n = 6 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, (f) $n = 7 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, (g) $n = 8 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, (h) $n = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, (i) $n = 1.2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, (j) $n = 1.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, (k) $n = 2.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, (l) $n = 2.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, (m) $n = 3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, (n) $n = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, (ñ) $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, (o) $n = 7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, (p) $n = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y (q) $n = 1.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Donde μ_e representa a la movilidad para la respectiva densidad electrónica.

Fuente: propia con los datos obtenidos con el simulador MC-grafeno implementado en este trabajo

3.3.1.4. Comparación de la velocidad y de la energía de los electrones en función al campo eléctrico para diferentes concentraciones de los portadores para grafeno intrínseco

En la figura 3.9 se hace la comparación para tres diferentes densidades electrónicas de $n = 1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n = 5.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $n = 1.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Se observa que a mayor concentración de portadores la velocidad es mayor, así mismo en la figura 3.10 se observa como cambia la energía de los electrones en función del campo eléctrico para diferentes concentraciones. La velocidad de los electrones presenta un máximo entre 7 y 10 kVcm^{-1} y luego esta se reduce para campos eléctricos grandes. Esto es consecuencia de movilidades diferenciales negativas en el grafeno intrínseco. Para campos eléctricos de mayor intensidad aplicados se muestra los resultados en la figura 3.9 para las densidades electrónicas de $n = 1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n = 5.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $n = 1.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Se observa que se forma un máximo de la velocidad mayor si la densidad electrónica es mayor, además este valor se traslada más a la izquierda.

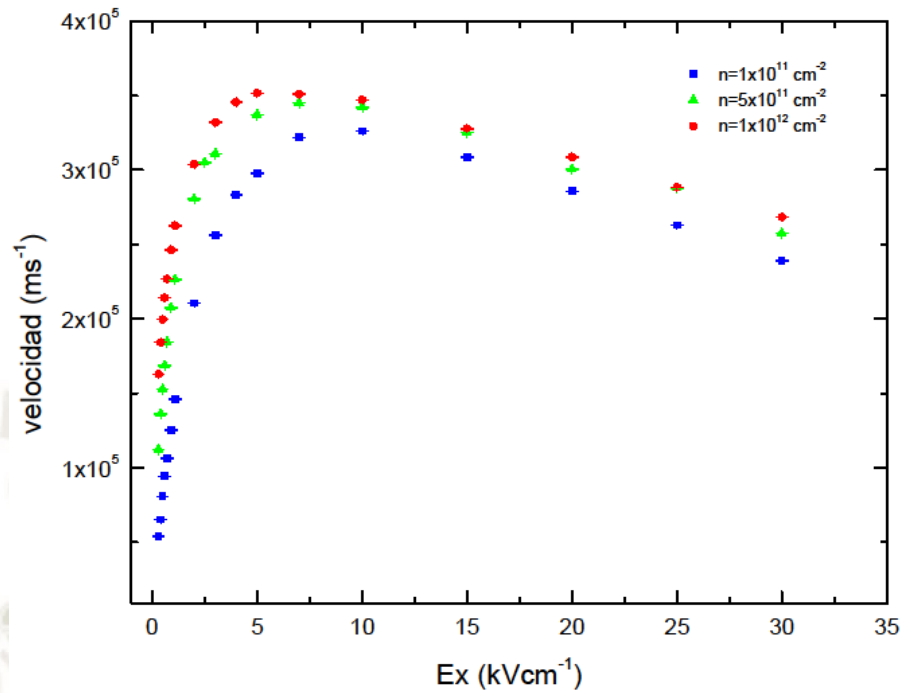


Figura 3.9 – Velocidad los electrones en el grafeno intrínseco en función del campo eléctrico, comparado para las densidades electrónicas de $n = 1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n = 5.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $n = 1.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

Fuente: elaboración propia, con los datos obtenidos con el simulador MC-grafeno implementado en este trabajo.

En la figura 3.10 se muestra la variación de la energía de los electrones en el grafeno intrínseco con diferentes densidades electrónicas, para el mismo rango de campo eléctrico, mostrando un comportamiento constante para este rango, en la tabla 3.4 se muestran los respectivos valores promedios de la energía.

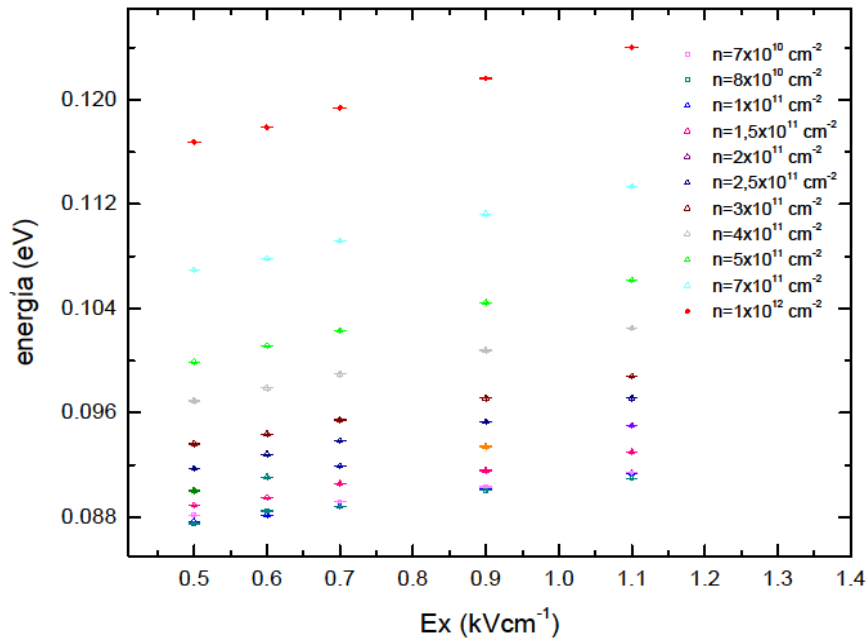


Figura 3.10 – Energía de los electrones en el grafeno intrínseco en función del campo eléctrico, comparado para diferentes densidades electrónicas de $n = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n = 7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 2.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 1.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 8 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ y $n = 7 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$.

Fuente: elaboración propia, con los datos obtenidos con el simulador MC-grafeno implementado en este trabajo.

Tabla 3.4 – Energía de los electrones en el grafeno sobre el sustrato de Cu2O para diferentes densidades electrónicas con intensidades de campos eléctricos bajos

Densidad electrónica (cm⁻²)	Energía promedio (eV)
7.0x10 ¹⁰	0.090 ± 0.001
8.0x10 ¹⁰	0.089 ± 0.001
1.0x10 ¹¹	0.089 ± 0.001
1.5x10 ¹¹	0.091 ± 0.002
2.0x10 ¹¹	0.092 ± 0.002
2.5x10 ¹¹	0.094 ± 0.002
3.0x10 ¹¹	0.096 ± 0.002
4.0x10 ¹¹	0.099 ± 0.003
5.0x10 ¹¹	0.103 ± 0.003
7.0x10 ¹¹	0.110 ± 0.003
1.0x10 ¹²	0.120 ± 0.003

Fuente: elaboración propia, con el simulador MC-grafeno implementado en este trabajo.

3.3.1.5. Comparación de la movilidad en función de la concentración de los portadores para grafeno intrínseco

En la figura 3.11 se muestra los resultados de la simulación para la movilidad del grafeno intrínseco en función de la concentración de portadores de carga, comparando los resultados con otros resultados de Shishir y Ferry (2009). Como se puede observar los datos obtenidos con el simulador MC-grafeno están en el orden de magnitud respecto a los datos experimentales reportados por Shishir y Ferry mostrados por las líneas azul, negro y rojo en esta figura, se observa que el comportamiento es diferente entre estos. Los valores de movilidad fueron calculados utilizando los gráficos que se muestran en el anexo 3.3.1.3.

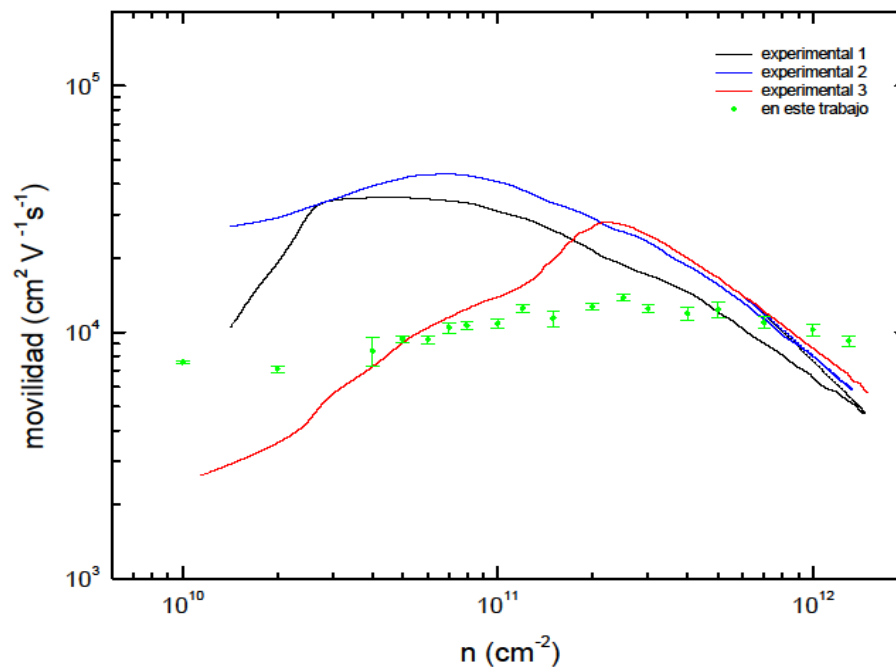


Figura 3.11 – Movilidad de los electrones en el grafeno intrínseco, comparado con datos experimentales de Shishir y Ferry (2009).

Fuente: elaboración propia, con los datos obtenidos con el simulador MC-grafeno implementado en este trabajo.

3.3.2. Grafeno sobre el sustrato de Cu₂O

De modo análogo que para el grafeno intrínseco mostrado en la sección 3.3.1, para estudiar el comportamiento de la movilidad de los electrones en el grafeno sobre el sustrato de Cu₂O, se ha realizado las simulaciones de 70000 electrones, y manteniendo constante la densidad electrónica, pero haciendo variar la intensidad del campo eléctrico (figura 3.12), que se ha repetido para otros valores de densidad electrónica como se muestra en la figura 3.16. También se muestra el comportamiento de la energía de los electrones en el grafeno en función al campo eléctrico (figura 3.17). Finalmente, en la figura 3.18 se presenta la movilidad en función de la densidad electrónica.

3.3.2.1. Evolución y comparación de la velocidad en función del tiempo para diferentes campos eléctricos, para grafeno sobre sustrato de Cu₂O

En la figura 3.12 se observa la comparación de la velocidad para estudiar el comportamiento de los electrones frente a la intensidad del campo eléctrico que varía desde 0.3 kVcm^{-1} hasta 25 kVcm^{-1} , para este estudio se mantiene constante la densidad electrónica de $n = 1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ en el grafeno. Se observa que, para campos eléctricos altos, la velocidad es mayor respecto a campos eléctricos bajos. Los tiempos transitorios duran menos tiempo comparado con el grafeno intrínseco, tal cual se puede comparar los datos de las tablas 3.3 y 3.5.

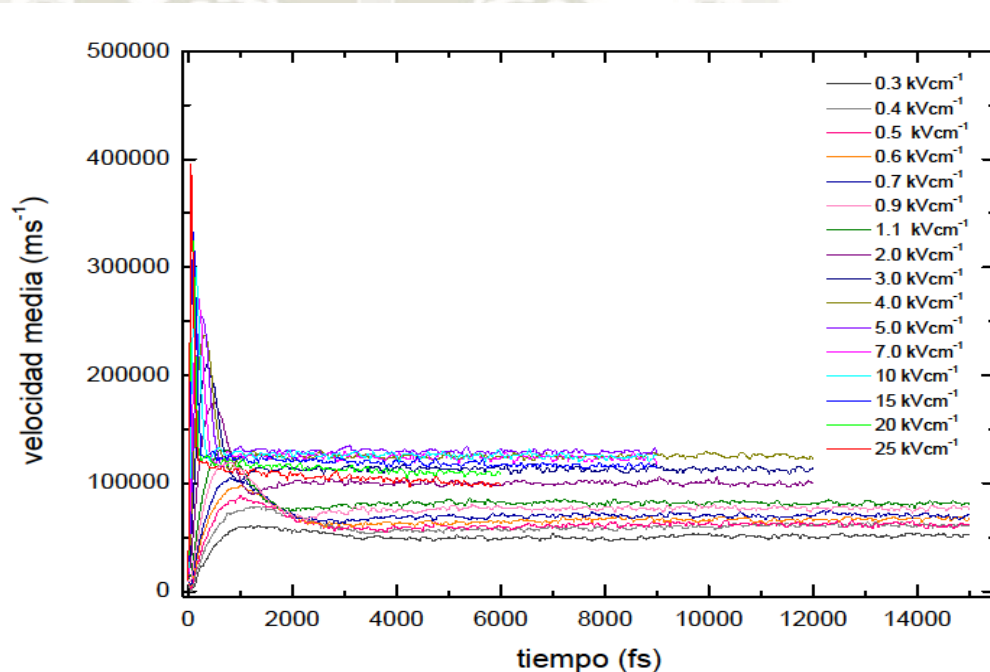


Figura 3.12 – Velocidad de los electrones en el grafeno sobre el sustrato de Cu₂O, con concentración de impurezas remotas de $n_i = 8.86 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, con densidad electrónica de $n = 1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y campos eléctricos desde 0.3 kVcm^{-1} hasta 25 kV cm^{-2} .

Fuente: elaboración propia, con el simulador MC-grafeno implementado en este trabajo.

Tabla 3.5 – Velocidad de los electrones en el grafeno sobre el sustrato de Cu2O tanto en estado transitorio (pico) y en estado estacionario, que se muestran en el grafico 3.12.

Campo eléctrico (kVcm ⁻¹)	Tiempo del pico (fs)	Velocidad en el pico (ms ⁻¹)	Velocidad estacionaria (ms ⁻¹)
0.3	1348	60842	51903. 13 ± 171. 32
0.4	1182	78868	61337. 99 ± 183. 58
0.5	1005	88075	61708. 72 ± 263. 92
0.6	990	98590	67232. 60 ± 173. 31
0.7	805	105181	70324. 07 ± 208. 86
0.9	744	118943	76776. 96 ± 209. 54
1.1	601	131105	81160. 43 ± 198. 60
2.0	495	174230	99746. 82 ± 241. 70
3.0	354	207231	112808. 66 ± 238. 71
4.0	304	237520	125436. 62 ± 253. 63
5.0	271	253685	128966. 18 ± 218. 93
7.0	199	268879	123284. 18 ± 264. 68
10.0	145	300885	124836. 86 ± 306. 53
15.0	98	328782	116118. 22 ± 232. 90
20.0	73	327909	110107. 58 ± 288. 85
25.0	48	393791	101631. 81 ± 353. 17

Fuente: elaboración propia, con el simulador MC-grafeno implementado en este trabajo.

3.3.2.2. Distribución de electrones en el espacio recíproco, para grafeno sobre sustrato

Como respuesta del conjunto de electrones del grafeno sobre el sustrato, frente a la aplicación del campo eléctrico en la dirección [100] de intensidades de: 0.4 kV cm⁻¹, 0.5 kV cm⁻¹, 0.6 kVcm⁻¹, 0.7 kVcm⁻¹, 0.9 kV cm⁻¹ y E = 1.1 kV cm⁻¹, se muestra en la figura 3.13, donde el conjunto de electrones se desplaza ligeramente hacia la izquierda a medida que el campo eléctrico aumenta, de modo análogo que el grafeno intrínseco. La diferencia que se encuentra con respecto a la figura 3.13 mostrada es que la distribución de la componente paralela al campo eléctrico es más ensanchada en el grafeno intrínseco, esto es debido a la polarización en el sustrato que contribuye también en la alineación de los portadores de carga. En la figura 3.14 se muestra la distribución de electrones en la componente k_y para los campos eléctricos mencionados.

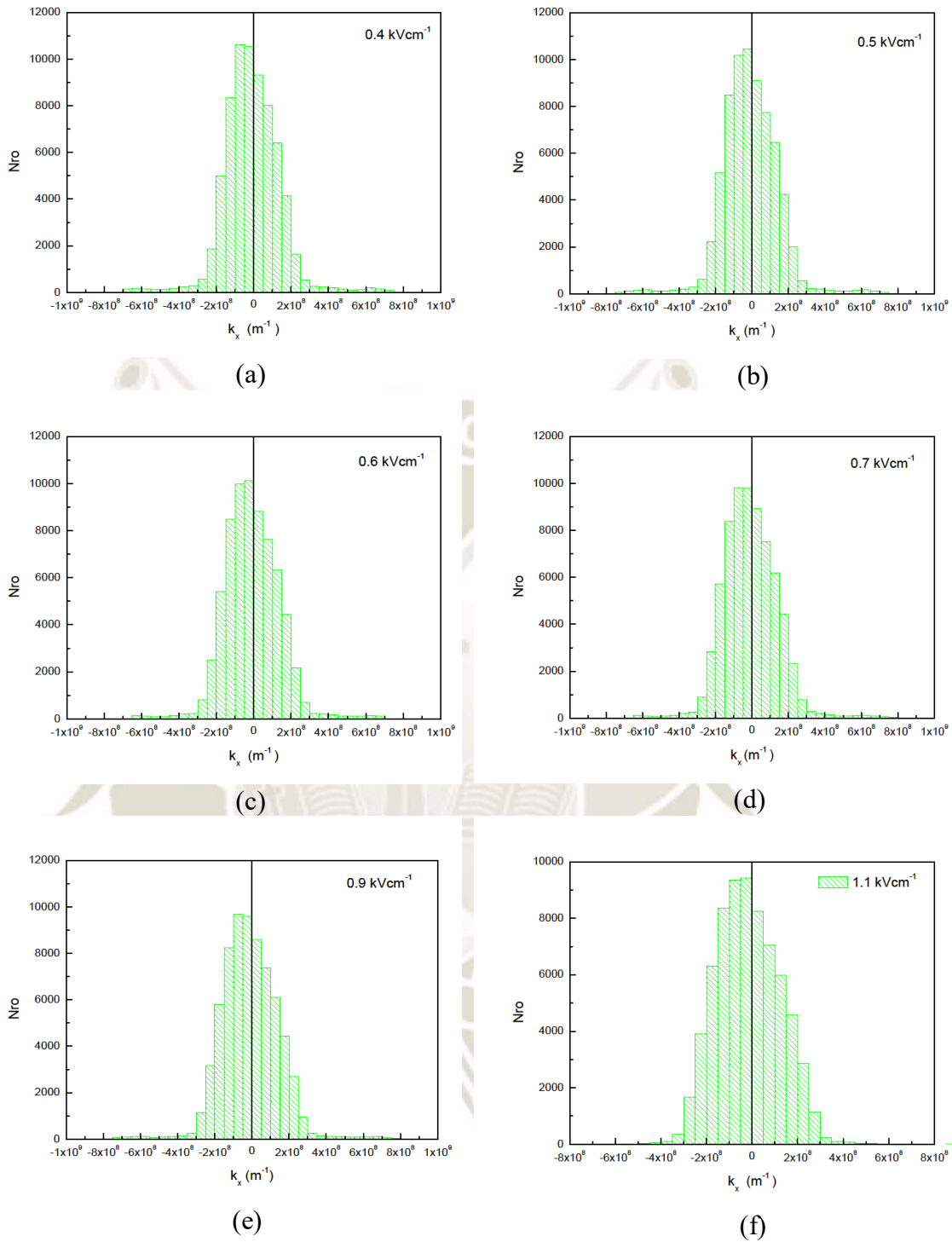


Figura 3.13 – Evolución de la distribución de electrones para la densidad electrónica de $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, en grafeno sobre Cu_2O a lo largo de k_x para campos eléctricos de: (a) $E = 0.4 \text{ kV cm}^{-1}$, (b) $E = 0.5 \text{ kV cm}^{-1}$, (b) $E = 0.6 \text{ kV cm}^{-1}$, (d) $E = 0.7 \text{ kV cm}^{-1}$, (e) $E = 0.9 \text{ kV cm}^{-1}$ y $E = 1.1 \text{ kV cm}^{-1}$, para el tiempo de 15 ps.

Fuente: elaboración propia con el simulador MC-grafeno implementado en este trabajo.

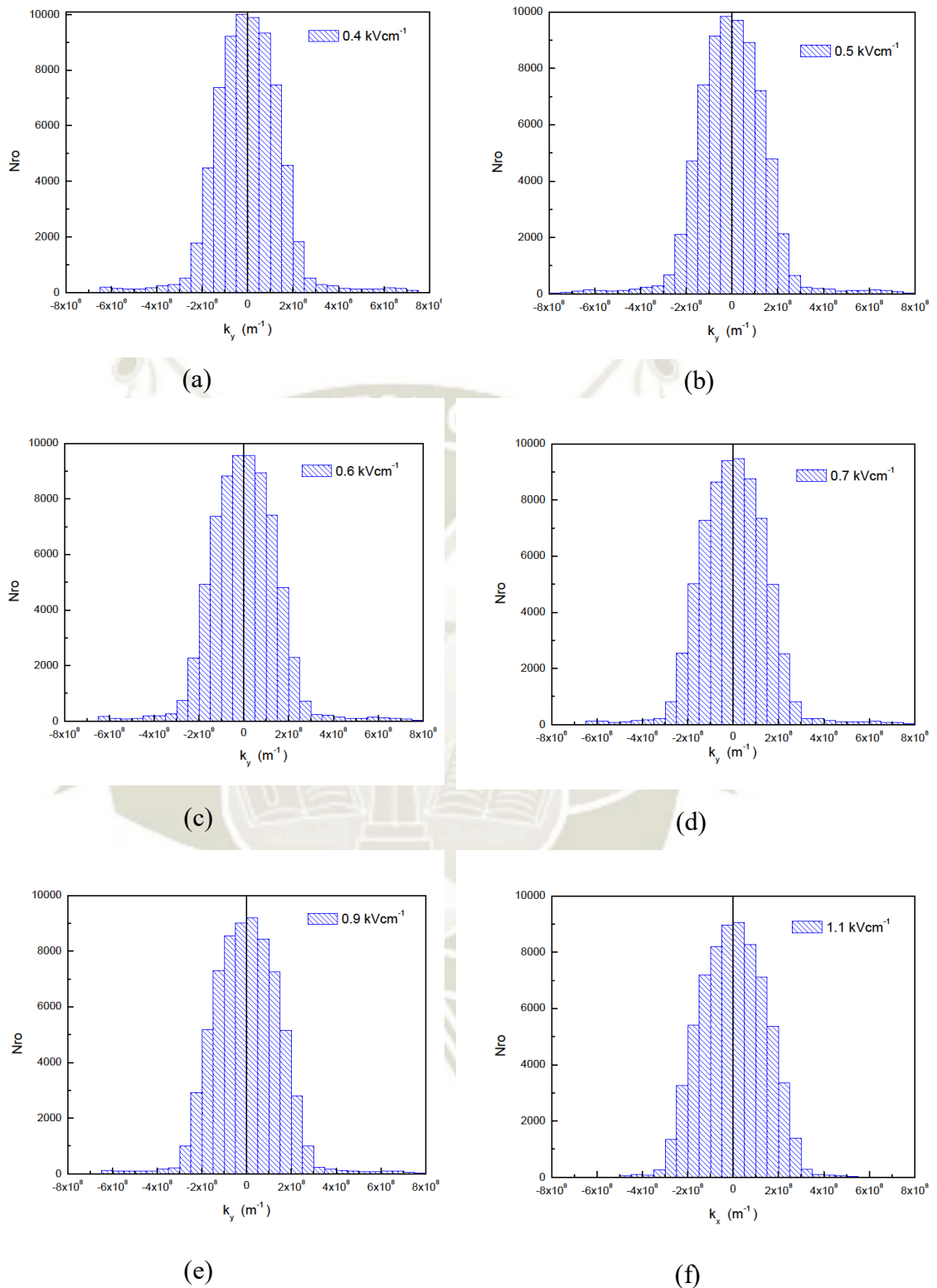


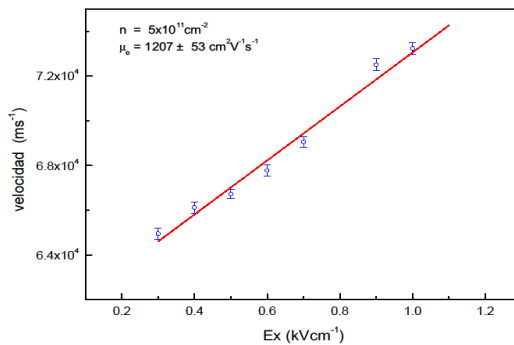
Figura 3.14 – Evolución de las distribución de electrones para la densidad electrónica de $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, en grafeno sobre Cu₂O a lo largo de k_y para campos eléctricos de: (a) $E = 0.4 \text{ kV cm}^{-1}$, (b) $E = 0.5 \text{ kV cm}^{-1}$, (b) $E = 0.6 \text{ kVcm}^{-1}$, (d) $E = 0.7 \text{ kVcm}^{-1}$, (e) $E = 0.9 \text{ kVcm}^{-1}$ y $E = 1.1 \text{ kV cm}^{-1}$, para el tiempo de 15 ps.

Fuente: elaboración propia con el simulador MC-grafeno implementado en este trabajo.

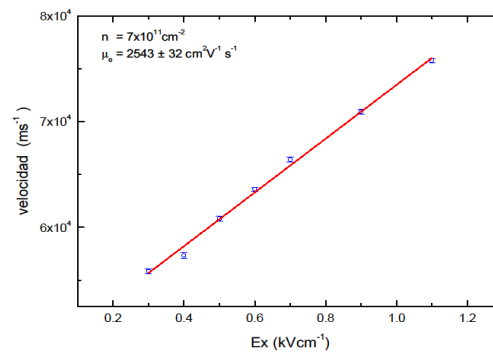
3.3.2.3. Velocidad en función al campo eléctrico para el Grafeno sobre Cu2O para diferentes densidades electrónicas

En esta sección se presentan los resultados para la velocidad de arrastre en función del campo eléctrico para las densidades electrónicas de: $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n = 1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n = 1.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $n = 4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

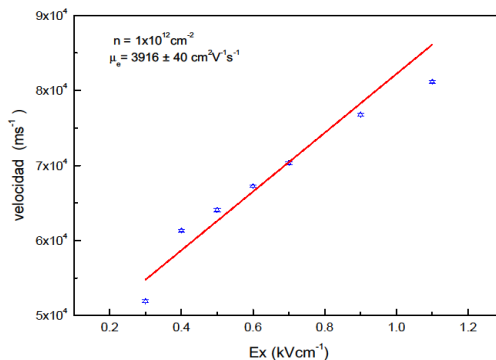
Para campos eléctricos bajos, se puede obtener la movilidad como la pendiente, que en la figura 3.15 se muestra para los electrones en el grafeno sobre el sustrato de Cu2O con concentración de impurezas remotas de $n = 8.86 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, donde μ_e indica la pendiente de la recta que representa a la movilidad para las diferentes densidades electrónicas de: $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n = 1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n = 1.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $n = 4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Se puede observar de las diferentes pendientes remarcado en cada uno de los gráficos, las cuales son graficadas en la figura 3.18.



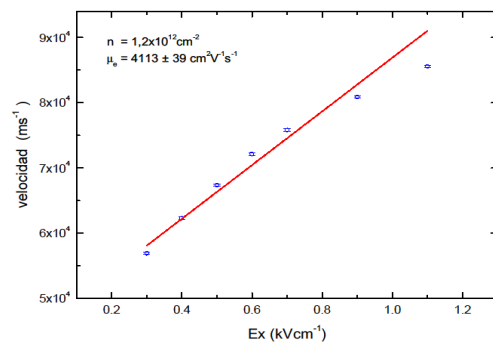
(a) $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $\mu_e = 1207 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$



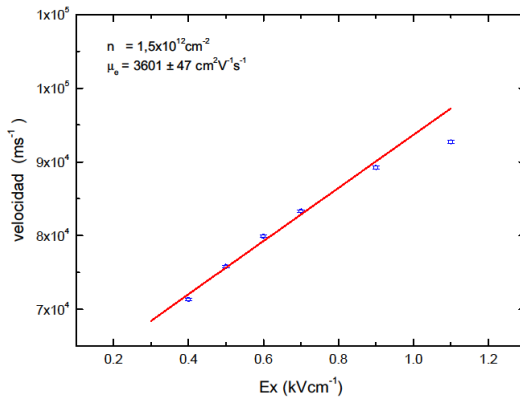
(b) $n = 7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $\mu_e = 2543 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$



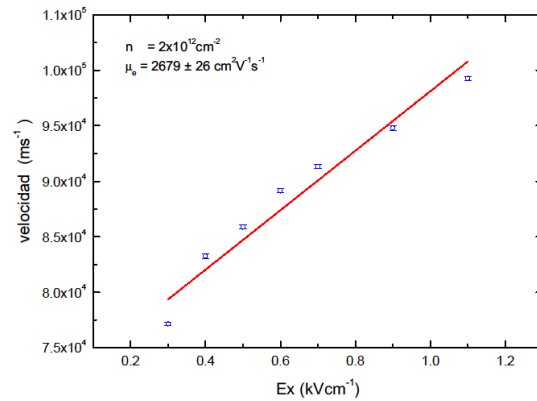
(c) $n = 1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $\mu_e = 3916 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$



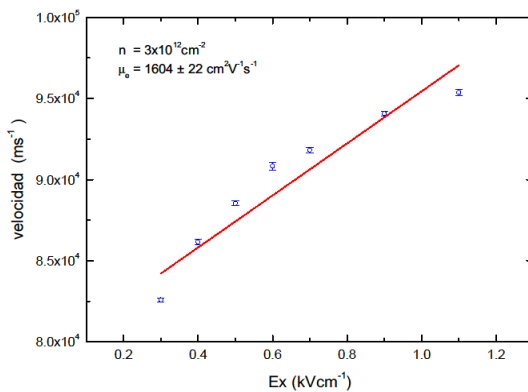
(d) $n = 1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $\mu_e = 4113 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$



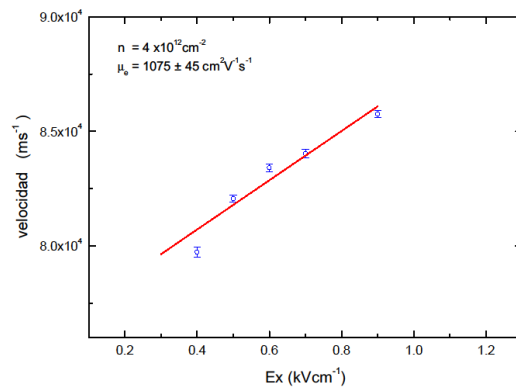
(e) $n = 1.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $\mu_e = 3601 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$



(f) $n = 2.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $\mu_e = 2679 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$



(g) $n = 3.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $\mu_e = 1604 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$



(h) $n = 4.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $\mu_e = 1075 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$

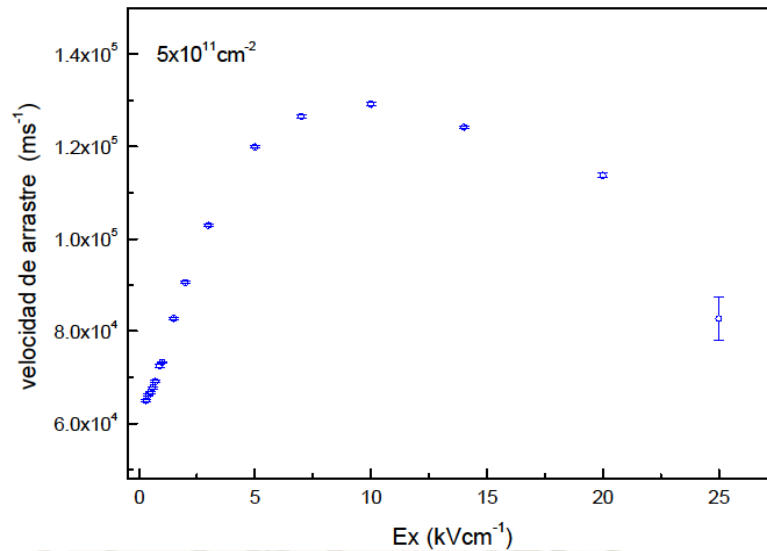
Figura 3.15 – Velocidad de arrastre en función del campo eléctrico para los electrones en el grafeno sobre el sustrato de Cu₂O con concentración de impurezas remotas de $n_i = 8.86 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, donde μ_e representa a la movilidad para las diferentes densidades electrónicas de: $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n = 1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n = 1.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $n = 4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

Fuente: elaboración propia con los datos obtenidos con el simulador MC-grafeno implementado en este trabajo.

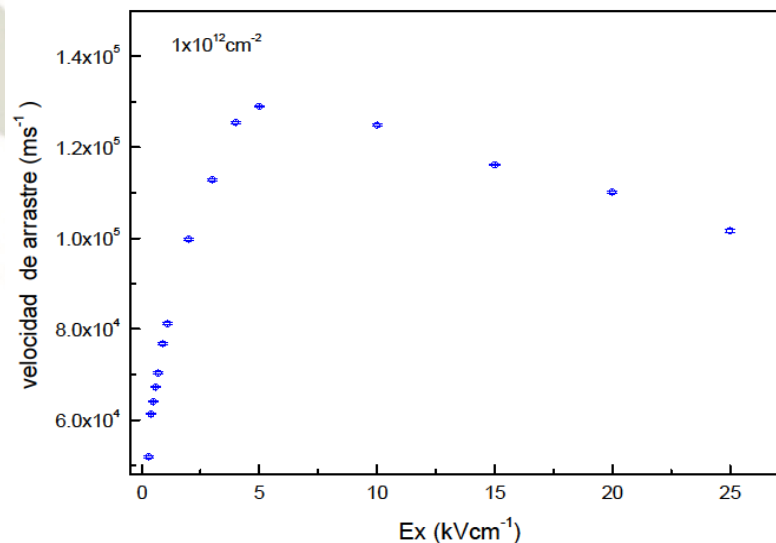
3.3.2.4. Comparación de la velocidad y de la energía de los electrones en función al campo eléctrico para diferentes concentraciones de los portadores, para grafeno sobre sustrato de Cu₂O

Cuando se aplica campos eléctricos de mayor intensidad al grafeno sobre sustrato como se muestra en la figura 3.16 donde se hace la comparación para las diferentes densidades electrónicas de: $n = 1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $n = 5.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

Se observa que la velocidad presenta un máximo que es dependiente de la densidad electrónica. Así mismo, la disminución de la velocidad es un poco más lenta con la densidad electrónica de $n = 1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, la mayor influencia aparece en la movilidad.



(a) $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$



(b) $n = 1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$

Figura 3.16 – Velocidad en función del campo eléctrico para los electrones en el grafeno sobre el sustrato de Cu₂O con concentración de impurezas remotas de $n_i = 8.86 \times 10^{-11} \text{ cm}^{-2}$, para (a) para densidades electrónicas de $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ (b) $n = 1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$

Fuente: elaboración propia, con el simulador MC-grafeno implementado en este trabajo.

En la figura 3.17 se muestra que, para el mismo rango de campo eléctrico utilizado para determinar la movilidad, la energía de los electrones permanece casi constante con mayor influencia de la densidad de portadores de carga. Los valores promedio de estas energías se muestra en la tabla 3.6

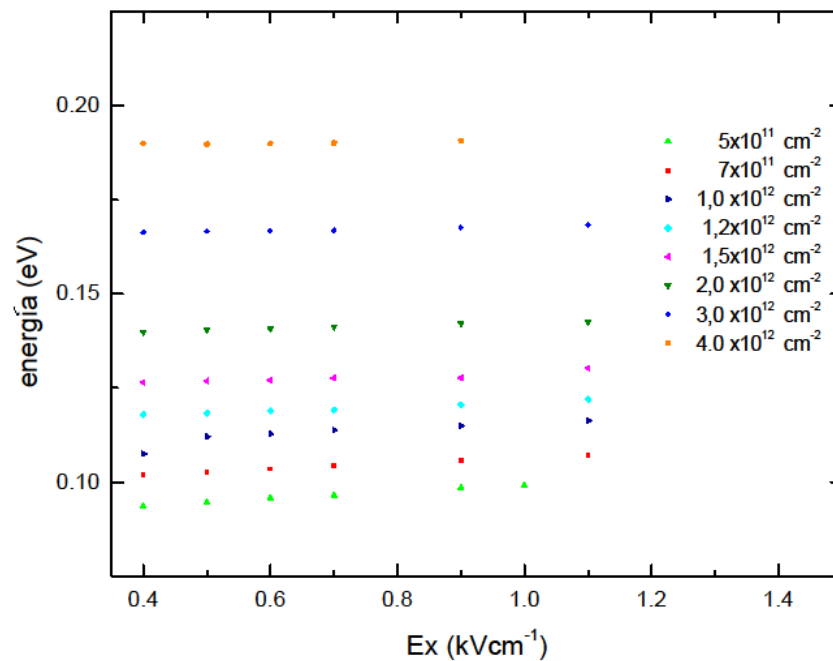


Figura 3.17 – Energía de los electrones en el grafeno sobre el sustrato de Cu₂O en función del campo eléctrico, con concentración de impurezas remotas de $n_i = 8.86 \times 10^{-11} \text{ cm}^{-2}$ y densidades electrónicas de: $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $n = 1,0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n = 1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n = 1.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n = 2.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $n = 3.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $n = 4.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

Fuente: elaboración propia, con datos del simulador MC-grafeno implementado en este trabajo.

Tabla 3.6 – Energía de los electrones en el grafeno sobre el sustrato de Cu2O para diferentes densidades electrónicas con intensidades de campos eléctricos bajos

Densidad electrónica (cm^{-2})	Energía promedio (eV)
5.0×10^{11}	0.0959 ± 0.0023
7.0×10^{11}	0.1036 ± 0.0022
1.0×10^{12}	0.1127 ± 0.0028
1.2×10^{12}	0.1192 ± 0.0016
1.5×10^{12}	0.1274 ± 0.0013
2.0×10^{12}	0.1409 ± 0.0011
3.0×10^{12}	0.1669 ± 0.0007
4.0×10^{12}	0.1900 ± 0.0003

Fuente: elaboración propia, con el simulador MC-grafeno implementado en este trabajo.

3.3.2.5. Comparación de la movilidad en función de la concentración de los portadores para grafeno sobre sustrato Cu2O

En la figura 3.18 se muestran la movilidad en función a la concentración de portadores de carga, manteniendo la concentración de impurezas remotas de $n_i = 8.86 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Se observa que la movilidad aumenta proporcionalmente con la densidad electrónica hasta llegar al valor el máximo de $4000 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ con aproximadamente $n = 4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y que después de este valor decae rápidamente. Cabe aclarar que cada uno de los valores de movilidad fueron calculados utilizando los gráficos que se muestran en la sección 3.3.2.3.

El máximo observado, predice una densidad de portadores de alrededor de $2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, apropiada para una máxima movilidad de electrones en el grafeno sobre el sustrato de Cu2O.

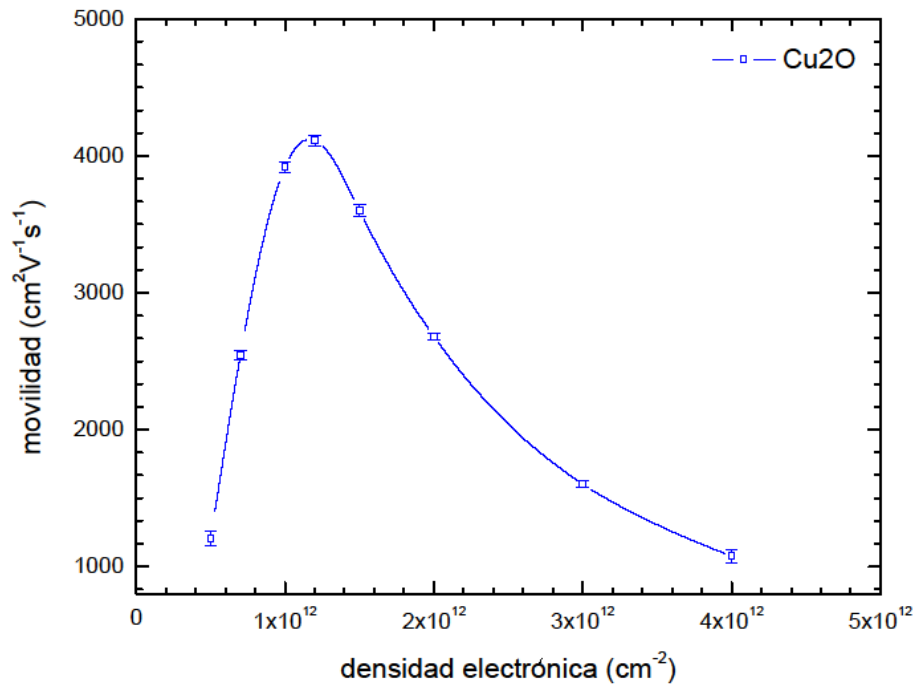


Figura 3.18 – Movilidad de los electrones en el grafeno sobre el sustrato de Cu2O para una concentración de impurezas remotas de $n_i = 8.86 \times 10^{-11} \text{ cm}^{-2}$.

Fuente: elaboración propia, con el simulador MC-grafeno implementado en este trabajo.

3.4. Análisis de la influencia del sustrato de Cu2O

En la siguiente tabla 3.7 se presenta algunos valores de la movilidad obtenida con el simulador MC para grafeno intrínseco y grafeno sobre sustrato Cu2O. Se observa la disminución en aproximadamente un factor 10, además el error obtenido de la movilidad del grafeno sobre el sustrato es mayor respecto al grafeno intrínseco.

Considerando que en las simulaciones para el grafeno intrínseco se incluyó a los mecanismos de dispersión de fonones ópticos y acústicos de acuerdo a la curva de velocidad de la figura 3.9, los portadores llegan a una energía clásica del alrededor de 100meV que es consistente con la energía de los fonones ópticos ω_{opt} , que hacen eficiente el proceso de emisión de fonones como mecanismo de pérdida de energía.

Además, en los resultados de las figuras 3.5 y 3.12 se observan los picos de velocidad que después decrecen gradualmente por la pérdida de energía de los electrones debido a los fonones ópticos y fonones acústicos; se puede afirmar que estos son propiedades

intrínsecas del material, cabe indicar que de acuerdo a Fang y col. (2011) es difícil realizar experimentos para determinar las propiedades intrínsecas del grafeno. Como se observa en la figura 3.12, los fonones ópticos y acústicos son también los responsables en que decaiga el pico de la velocidad en el grafeno sobre Cu₂O, pero se debe recordar que en las simulaciones con el grafeno sobre Cu₂O se incluyen otros tres mecanismos de dispersión: por la influencia de las rugosidades del sustrato, impurezas remotas del sustrato y a los fonones ópticos superficiales debido a la naturaleza polar del sustrato, por lo que se puede observar que la velocidad es menor en el grafeno sobre Cu₂O por cuanto estos tres mecanismos mencionados influyen en los resultados, lo cual se muestra más aún en la figura 3.18 donde la dependencia con la densidad electrónica de la tasa de dispersión por fonones óptico superficiales que se muestra en la figura 2.8 hace que sea el mecanismo más importante en limitar el transporte de los electrones cuando está sometido a campos eléctricos externos. Estos fonones inducen al decaimiento de la energía de los electrones.

Por otra parte, son los efectos de rugosidad del sustrato que también influyen en los resultados de la movilidad en función de la densidad electrónica, lo cual se puede ver su influencia en el gráfico de la figura 2.7. Finalmente, la influencia de las impurezas remotas en los resultados de la movilidad en función de la densidad electrónica, según lo observado de la figura 2.6, es constante e independiente de esta densidad.

Tabla 3.7 – Comparación de la movilidad del grafeno intrínseco y de grafeno sobre sustrato de Cu₂O para algunas densidades electrónicas.

Densidad electrónica (cm ⁻²)	Grafeno intrínseco (cm ² V ⁻¹ s ⁻¹)	Grafeno sobre sustrato Cu ₂ O (cm ² V ⁻¹ s ⁻¹)
5.0x10 ¹¹	12800.52 ± 0.17	1207 ± 53
7.0x10 ¹¹	10707.77 ± 0.17	2543 ± 32
1.0x10 ¹²	10928.65 ± 0.17	3916 ± 40

Fuente: elaboración propia, con el simulador MC-grafeno implementado en este trabajo.

Conclusiones

Se ha logrado determinar la movilidad de los electrones de conducción en el grafeno intrínseco y en grafeno sobre sustrato de Cu₂O, utilizando el método Monte Carlo.

El modelo matemático para el transporte de electrones en el grafeno usado en este trabajo es a través de la ecuación de Boltzmann semiclásica, la misma que es solucionada con método de Monte Carlo. Esto resultó adecuado para simular el transporte de carga en el grafeno para determinar, a temperatura ambiente, la movilidad de los electrones de conducción tanto en grafeno intrínseco como en grafeno sobre el sustrato de Cu₂O, cuando se aplica campos eléctricos externos moderados hasta aproximadamente 1.5 kV cm^{-1} , región donde la velocidad es directamente proporcional al campo eléctrico como se muestra en las figuras de las secciones 3.3.1.3 y 3.3.2.3. Para campos eléctricos de mayor intensidad, la velocidad de los electrones disminuye a medida que el campo eléctrico aumenta, como se deduce de las figuras 3.9 y 3.12, debido a los fonones ópticos (Fang y col, 2011).

Con el procedimiento computacional implementado en el simulador MC-grafeno en este trabajo se logró obtener la movilidad de los electrones para el grafeno intrínseco en el rango de las densidades electrónicas de $8 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ a 10^{12} cm^{-2} como se muestra en la figura 3.11, están en el orden de magnitud respecto a los datos experimentales reportados por Shishir y Ferry (2009). La movilidad del grafeno sobre el sustrato de Cu₂O, en el rango de la densidad electrónica de $5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ a $4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, es 10 veces menor que del grafeno intrínseco como se ve en la figura 3.18, con un máximo alrededor de $1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Cabe destacar que hasta donde se conoce en la literatura, estos resultados, son los primeros, además podrían ser útiles cuando se realice la parte experimental del grafeno sobre cobre.

Con el modelo físico-matemático definido en este trabajo y procedimientos computacionales planteados en este trabajo se ha logrado analizar que el sustrato de Cu₂O hace que la movilidad disminuya en un factor 10 respecto al grafeno intrínseco para una densidad electrónica de $5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, sin embargo, a una densidad electrónica mayor la disminución es de solo un factor 3, aproximadamente. Esto es resultado de la influencia de la dispersión por rugosidades en la interfase que tiene una dependencia con la densidad electrónica como se observa en la figura 2.7. Los otros mecanismos o no dependen de la densidad electrónica o son de menor influencia. Una implicancia de los resultados mencionados es en el diseño y construcción de nuevos dispositivos en base a grafeno sobre sustrato de Cu₂O y la importancia de la influencia de las rugosidades del mismo, en la disminución de la movilidad

de los electrones de conducción. Por otra parte, la energía media es influenciada a su vez por los mecanismos de dispersión de los portadores debido al sustrato, lo que produce que esta se mantenga casi constante con campos eléctricos bajos hasta 1.5 kV/cm para grafeno sobre sustrato y ligeramente proporcional al campo eléctrico para grafeno intrínseco. Esta energía es mayor cuando el sustrato está presente debido mayormente a que a bajas energías los electrones ganan gran energía por absorción de fonones óptico superficiales. Esto hace también que la componente del vector de onda, transversal al campo eléctrico, se extienda sobre rangos mayores que en el caso del grafeno intrínseco.



Sugerencias

Aspectos importantes que se consideran recomendables en futuros trabajos son:

Proponemos que se pueda implementar un solucionador para la ecuación de Boltzmann homogénea en el espacio basado en método Galerkin discontinuo (GD), como método numérico determinista ya que rara vez se ha estudiado esta aplicación. Así mismo se pueda ahorrar el costo computacional en lo relacionado al tiempo, ya que en este trabajo usando el método Monte Carlo el costo computacional en tiempo ha sido muy alto y conlleva a muchos meses para obtener un resultado de la movilidad. Las referencias bibliográficas que sugerimos revisar son las del grupo de Matemática Aplicada de la de la Universidad de Texas en Austin.

Se sugiere que se pueda medir experimentalmente la movilidad de los electrones sobre el sustrato de Cu_2O , para verificar el grado de aproximación de los resultados simulados en este trabajo, lo cual es también es un tema sin explorar.

Referencias Bibliográficas

- Abadi, A., Rezazadeh, H., Mehrpooya, M., Morovvatpoor, A., y Golgoii F. (2011). Some Aspects of the Liouville Equation in Mathematical Physics and Statistical Mechanics. *International Journal of Theoretical Physics*, 50(10), 3251–3274.
- Acharya, S., Babu, A. V., Khadar, R. A., y Kottantharayil, A. (2020). Mobility improvement in CVD graphene by using local metal side-gate. *Semiconductor Science and Technology*, 35(4).
- Akturk, A., y Goldsman, N. (2008). Electron transport and full-band electron-phonon interactions in graphene. *Journal of Applied Physics*, 103(5).
- Armour, W., Hands, S., y Strouthos, C. (2010). Monte Carlo simulation of the semimetal-insulator phase transition in monolayer graphene. *Physical Review B*, 81(12), 125105.
- Ashcroft, N. W., y Mermin, N. D. (1976). *Solid State Physics*. Holt-Saunders.
- Barhoum, A., Shalan, A. E., El-Hout, S. I., Ali, G. A., Abdelbasir, S. M., Abu Serea, E., Ibrahim, A. H., y col (2019). A Broad Family of Carbon Nanomaterials: Classification, Properties, Synthesis, and Emerging Applications. *Handbook of Nanofibers; Springer International Publishing: New York City, NY, USA*, 1–40.
- Belote, N., y Revankar, S. (2016). Graphene and its applications: a survey. *Asian Journal of Science and Technology*, 07(03), 2596–2599.
- Birkhoff, G. D. (1931). Proof of the ergodic theorem. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 17(12), 656–660.
- Bolotin, K. I., Sikes, K. J., Hone, J., Stormer, H. L., y Kim, P. (2008). Temperature-Dependent Transport in Suspended Graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 101(9), 096802. doi:10.1103/PhysRevLett.101.096802

- Bosi, S., y Jacoboni, C. (1976). Monte Carlo high-field transport in degenerate GaAs. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 9(2), 315.
- Box, G. E., Jenkins, G. M., Reinsel, G. C., y Ljung, G. M. (2015). *Time series analysis: forecasting and control*. John Wiley y Sons.
- Bresciani, M., Palestri, P., Esseni, D., Selmi, L., Szafranek, B., y Neumaier, D. (2013). Interpretation of graphene mobility data by means of a semiclassical Monte Carlo transport model. *Solid-state electronics*, 89, 161–166.
- Brown, B., Arun Kumar, K. B., Dhivagar, B., y Udaiyakumar, R. (2020). Modelling, Performance and Characteristic study of Graphene based Transistors (GFET). *2020 6th International Conference on Advanced Computing and Communication Systems, ICACCS 2020* (pp. 734–738).
- Cai, M., Thorpe, D., Adamson, D. H., y Schniepp, H. C. (2012). Methods of graphite exfoliation. *Journal of Materials Chemistry*, 22(48), 24992–25002.
- Castro Neto, A. H., Guinea, F., Peres, N. M. R., Novoselov, K. S., y Geim, A. K. (2009). The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.*, 81(1), 109–162.
- Castro Neto, A. H., y Novoselov, K. (2011). New directions in science and technology: two-dimensional crystals. *Reports on Progress in Physics*, 74(8), 082501.
- Cercignani, C. (2006). *Ludwig Boltzmann: the man who trusted atoms*. Oxford University Press Inc.
- Cercignani, C., y otros. (1990). *Mathematical methods in kinetic theory* (2nd ed.). Springer Science Business, Media New York.
- Chauhan, J., y Guo, J. (2009). High-field transport and velocity saturation in graphene. *Applied Physics Letters*, 95(2), 023120.

- Chen, J.-H., Jang, C., Xiao, S., Ishigami, M., y Fuhrer, M. S. (2008). Intrinsic and extrinsic performance limits of graphene devices on SiO₂. *Nature Nanotechnology*, 3(4), 206–209. doi:10.1038/nnano.2008.58
- Chung, D. (2002). Review graphite. *Journal of materials science*, 37(8), 1475–1489.
- Coco, M., Majorana, A., y Romano, V. (2017). Cross validation of discontinuous Galerkin method and Monte Carlo simulations of charge transport in graphene on substrate. *Ricerche di Matematica*, 66(1), 201–220.
- Coco, M., Mascali, G., y Romano, V. (2016). Monte Carlo analysis of thermal effects in monolayer graphene. *Journal of Computational and Theoretical Transport*, 45(7), 540–553.
- Coco, M., y Nastasi, G. (2020). Simulation of bipolar charge transport in graphene on h-BN. *COMPEL - The International Journal for Computation and Mathematics in Electrical and Electronic Engineering*, 39(2), 449–465.
- Datta, S. (1997). *Electronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge University press.
- Dorgan, V. E., Bae, M.-H., y Pop, E. (2010). Mobility and saturation velocity in graphene on SiO₂. *Applied Physics Letters*, 97(8), 082112.
- El Kasmi, A., Tian, Z.-Y., Vieker, H., Beyer, A., y Chafik, T. (2016). Innovative CVD synthesis of Cu₂O catalysts for CO oxidation. *Applied Catalysis B: Environmental*, 186, 10–18.
- Fang, T., Konar, A., Xing, H., y Jena, D. (2011). High-field transport in two-dimensional graphene. *Phys. Rev. B*, 84(12), 125450.
- Fermanian Kammerer, C., Méhats, F., y otros. (2016). A kinetic model for the transport of electrons in a graphene layer. *Journal of Computational Physics*, 327.

- Fischetti, M. V., Kim, J., Narayanan, S., Ong, Z.-Y., Sachs, C., Ferry, D. K., y Aboud, S. J. (2013). Pseudopotential-based studies of electron transport in graphene and graphene nanoribbons. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 25(47), 473202.
- Griffiths, D. J. (1995). *Introduction to quantum mechanics*. Prentice Hall.
- Harada, N., Awano, Y., Sato, S., y Yokoyama, N. (2011). Monte Carlo simulation of electron transport in a graphene diode with a linear energy band dispersion. *Journal of Applied Physics*, 109(10), 104509.
- Hirai, H., Tsuchiya, H., Kamakura, Y., Mori, N., y Ogawa, M. (2014). Electron mobility calculation for graphene on substrates. *Journal of Applied Physics*, 116(8), 083703.
- Hwang, S., Heo, J., Lee, M.-H., Byun, K.-E., Cho, Y., y Park, S. (2016). *Graphene and Atom-Thick 2D Materials: DEvice Application Prospects. Future Trends in Microelectronics: Journey into the Unknown* (pp. 127–146). doi:10.1002/9781119069225.ch2-2
- Iijima, S. (2002). Carbon nanotubes: past, present, and future. *Physica B: Condensed Matter*, 323(1-4), 1–5.
- Ikenoue, T., Kawai, T., Wakashima, R., Miyake, M., y Hirato, T. (2019). Hole mobility improvement in Cu₂O thin films prepared by the mist CVD method. *Applied Physics Express*, 12(5), 055509.
- Ismail, M. A., Zaini, K. M. M., y Syono, M. I. (2020). Modeling of dirac voltage for highly p-doped graphene field-effect transistor measured at atmospheric pressure. *Bulletin of Electrical Engineering and Informatics*, 9(5), 2117–2124.
- Jishnu, A., Jayan, J. S., Saritha, A., Sethulekshmi, A., y Venu, G. (2020). Superhydrophobic graphene-based materials with self-cleaning and anticorrosion performance: An appraisal of neoteric advancement and future perspectives. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 125395.

- Kalos, M. H., y Whitlock, P. A. (2009). *Monte carlo methods*. John Wiley y Sons.
- Kareem, M. M., Al-Fouadi, A. H. A., y Hussain, D. H. (2015). Preparation and study of Cu₂O thin film at low temperature by Chemical vapor deposition (CVD) route. *International Journal of Application or Innovation in Engineering y Management*, (4), 2319–4847.
- Kittel, C. (1996). *Introduction to Solid State Physics* (7th ed.). John Wiley.
- Konar, A., Fang, T., y Jena, D. (2009). Effect of high-K dielectrics on charge transport in graphene. *arXiv preprint arXiv:0902.0819*.
- Konar, A., Fang, T., y Jena, D. (2010). Effect of high- κ gate dielectrics on charge transport in graphene-based field effect transistors. *Physical Review B*, 82(11), 115452.
- Kroese, D. P., Brereton, T., Taimre, T., y Botev, Z. (2014). Why the Monte Carlo method is so important today. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Statistics*, 6, 386–392.
- Kroto, H. W., Heath, J. R., O'Brien, S. C., Curl, R. F., y Smalley, R. E. (1985). C₆₀: Buckminsterfullerene. *nature*, 318(6042), 162–163.
- Kuo, C.-H., y Huang, M. H. (2010). Morphologically controlled synthesis of Cu₂O nanocrystals and their properties. *Nano Today*, 5(2), 106–116.
- Li, X., Cai, W., An, J., Kim, S., Nah, J., Yang, D., Piner, R., y col (2009). Large-Area Synthesis of High-Quality and Uniform Graphene Films on Copper Foils. *Science*, 324(5932), 1312–1314. doi:10.1126/science.1171245
- Liu, J., y Dai, X. (2020). Anomalous Hall effect, magneto-optical properties, and nonlinear optical properties of twisted graphene systems. *npj Computational Materials*, 6(1).
- Liu, Q., Chen, M., Mao, Y., y Liu, G. (2020). Theoretical study on Janus graphene oxide membrane for water transport. *Frontiers of Chemical Science and Engineering*, 1–9.

- Liu, W., Wei, J., Sun, X., y Yu, H. (2013). A Study on Graphene—Metal Contact. *Crystals*, 3, 257–274. doi:10.3390/cryst3010257
- Lugli, P., y Ferry, D. (1985). Degeneracy in the ensemble Monte Carlo method for high-field transport in semiconductors. *IEEE transactions on electron devices*, 32(11), 2431–2437.
- Majorana, A., Mascali, G., y Romano, V. (2016). Charge transport and mobility in monolayer graphene. *Journal of Mathematics in Industry*, 7(1), 4.
- Majorana, A., Nastasi, G., y Romano, V. (2019). Simulation of bipolar charge transport in graphene by using a discontinuous Galerkin method. *Communications in Computational Physics*, 26(1), 114–134.
- Matsumoto, M. (2009). Mersenne Twister Home Page A very fast random number generator.
- McCann, E., y Koshino, M. (2013). The electronic properties of bilayer graphene. *Reports on Progress in Physics*, 76(5), 056503.
- Meric, I., Han, M. Y., Young, A. F., Ozyilmaz, B., Kim, P., y Shepard, K. L. (2008). Current saturation in zero-bandgap, top-gated graphene field-effect transistors. *Nature nanotechnology*, 3(11), 654–659.
- Meyer, B. K., Polity, A., Reppin, D., Becker, M., Hering, P., Kramm, B., Klar, P. J., y col (2013). The physics of copper oxide (Cu₂O). *Semiconductors and Semimetals* (Vol. 88, pp. 201–226). Elsevier.
- Moore, C. C. (2015). Ergodic theorem, ergodic theory, and statistical mechanics. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 112(7), 1907–1911.
- Murali, D. S., Kumar, S., Choudhary, R., Wadikar, A. D., Jain, M. K., y Subrahmanyam, A. (2015). Synthesis of Cu₂O from CuO thin films: Optical and electrical properties. *AIP advances*, 5(4), 047143.

- Nagashio, K., Nishimura, T., Kita, K., y Toriumi, A. (2009). Metal/graphene contact as a performance Killer of ultra-high mobility graphene analysis of intrinsic mobility and contact resistance. *2009 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)* (pp. 1–4). doi:10.1109/IEDM.2009.5424297
- Nastasi, G., y Romano, V. (2019). Improved mobility models for charge transport in graphene. *Communications in Applied and Industrial Mathematics*, 10(1), 41–52.
- Nastasi, G., y Romano, V. (2020). A full coupled drift-diffusion-Poisson simulation of a GFET. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 87.
- Nederveen, K. (1989). *Ensemble Monte Carlo simulation of electron transport in AlGaAs/GaAs heterostructures*. Technische Universiteit Eindhoven, Eindhoven, Netherland.
- Neumann, J. v. (1932). Proof of the quasi-ergodic hypothesis. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 18(1), 70–82.
- Nika, D., y Balandin, A. (2012). Phonon Transport in Graphene. *Journal of physics. Condensed matter : an Institute of Physics journal*, 24, 233203.
- NobelPrize.org. (2020). The Nobel Prize in Physics 2010.
- Novoselov, K., I., F. V., L., C., R., G. P., Schwab, G., M., y K., K. (2012). A roadmap for graphene. *Nature*, 490(192).
- Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S. V., Grigorieva, I. V., y col (2004). Electric field effect in atomically thin carbon films. *science*, 306(5696), 666–669.
- Özdemir, M. D., Atasever, Ö., Özdemir, B., Yarar, Z., y Özdemir, M. (2016). Transport Properties of Graphene and Suspended Graphene with EMC: The Role of Various Scattering Mechanisms. *Journal of Electronic Materials*, 45(8), 4468–4475.

- Pacheco-Sanchez, A., Feijoo, P. C., y Jiménez, D. (2020). Contact resistance extraction of graphene FET technologies based on individual device characterization. *Solid-State Electronics*, 172.
- Peres, N. (2010). Colloquium: The transport properties of graphene: An introduction. *Reviews of Modern Physics*, 82(3), 2673.
- Qian, S. Y., Xu, Z. H., Xie, H. N., Shi, C. S., Zhao, N. Q., He, C. N., y Liu, E. Z. (2020). Effect of rare metal element interfacial modulation in graphene/Cu composite with high strength, high ductility and good electrical conductivity. *Applied Surface Science*, 533.
- Reich, S., Maultzsch, J., Thomsen, C., y Ordejon, P. (2002). Tight-binding description of graphene. *Physical Review B*, 66(3), 035412.
- Rodríguez Vizcarra, A. R. (2018). Deposición de Grafeno Sobre Alambres de Cobre por el Método de Deposición Química de Vapor a Partir de Gas Metano.
- Romano, V., Majorana, A., y Coco, M. (2015). DSMC method consistent with the Pauli exclusion principle and comparison with deterministic solutions for charge transport in graphene. *Journal of Computational Physics*, 302, 267–284.
- Shishir, R., Chen, F., Xia, J., Tao, N., y Ferry, D. (2009). Room temperature carrier transport in graphene. *Journal of computational electronics*, 8(2), 43.
- Shishir, S., y Ferry, D. (2009). Intrinsic mobility in graphene. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 21(23), 232204.
- Shishir, S., Ferry, K., y Goodnick, M. (2009). Room temperature velocity saturation in intrinsic graphene. *Journal of Physics: Conference Series* (Vol. 193).
- Spinelli, G., Lamberti, P., Tucci, V., Pasadas, F., y Jiménez, D. (2020). Sensitivity analysis of a Graphene Field-Effect Transistors by means of Design of Experiments. *Mathematics and Computers in Simulation*.

- Sule, N., Willis, K., Hagness, S., y Knezevic, I. (2013). EMC/FDTD/MD simulation of carrier transport and electrostatics in two-dimensional electron systems. *Journal of Computational Electronics*, 12(4), 563–571.
- Taioli, S. (2014). Computational study of graphene growth on copper by first-principles and kinetic Monte Carlo calculations. *Journal of molecular modeling*, 20(7), 2260.
- Tan, Y.-W., Zhang, Y., Stormer, H. L., y Kim, P. (2007). Temperature dependent electron transport in graphene. *The European Physical Journal Special Topics*, 148(1), 15–18.
- Vanin, M., Mortensen, J. J., Kelkkanen, A. K., Garcia-Lastra, J. M., Thygesen, K. S., y Jacobsen, K. W. (2010). Graphene on metals: A van der Waals density functional study. *Phys. Rev. B*, 81(8), 081408.
- Wallace, P. R. (1947). The band theory of graphite. *Physical review*, 71(9), 622.
- Yang, H., Chen, C., Wang, H., Liu, Z., y Chen, Y. (2018). Spatially resolved photoemission studies on aligned square graphene sheets grown on copper substrate. *Bulletin of the American Physical Society*.
- Zoolfakar, A. S., Rani, R. A., Morfa, A. J., O'Mullane, A. P., y Kalantar-Zadeh, K. (2014). Nanostructured copper oxide semiconductors: a perspective on materials, synthesis methods and applications. *journal of materials chemistry c*, 2(27), 5247–5270.

Anexos

Anexo A. Búsquedas en SCOPUS

A.1. Publicaciones con la palabra ‘graphene’ en la base de datos SCOPUS

En la figura A.1 se muestran los resultados frente a la búsqueda de la palabra clave ‘graphene’, entre los años 2000 al 2020, mientras que en la figura A.2 se muestra la búsqueda restringida dentro del área ‘mathematics’.

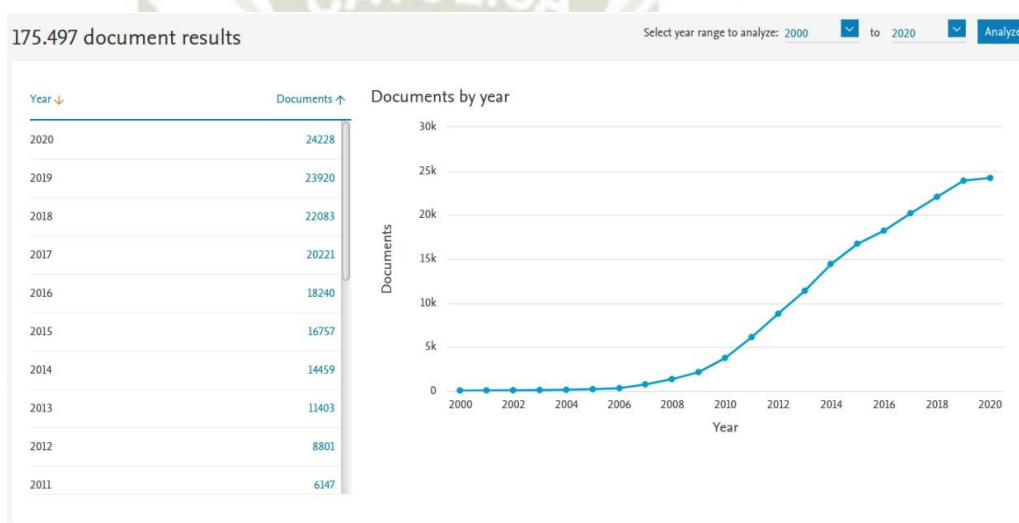


Figura A.1 – Búsqueda en la base de datos SCOPUS de publicaciones hechas con grafeno, en el área de matemáticas el 1.1% del total de 175 497 artículos. Fuente: <https://www.scopus.com>, consultado al 31 de enero 2021

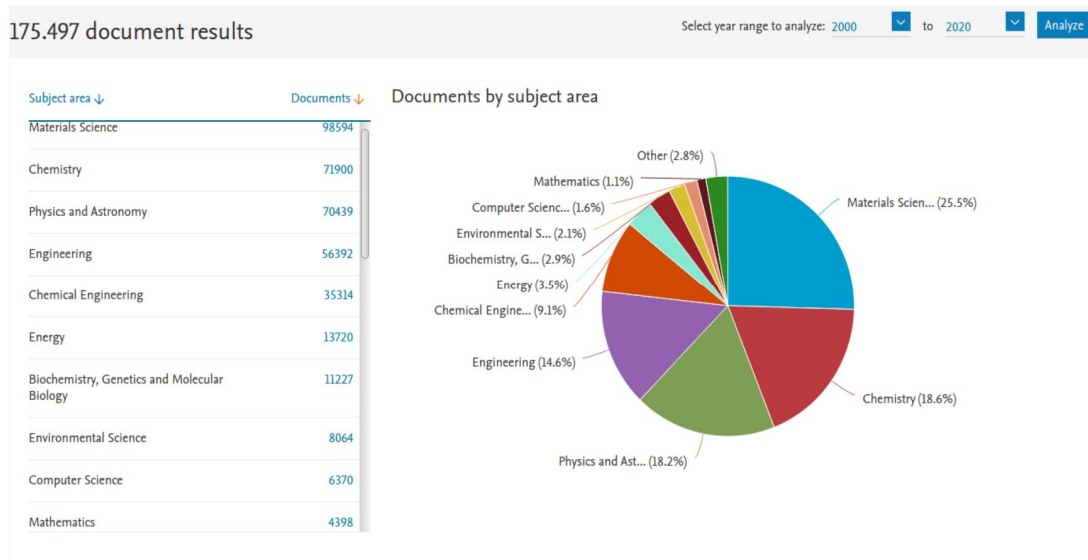


Figura A.2 – Búsqueda en la base de datos SCOPUS de publicaciones hechas con grafeno.
Fuente: <https://www.scopus.com>, consultado al 31 de enero 2021

A.2. Estadística de trabajos publicados con las palabras claves ‘Boltzmann and graphene’ buscados en la base de datos SCOPUS

Al realizar la búsqueda en la base de datos SCOPUS a la fecha del 31 de enero del 2021 se muestran en los siguientes resultados delimitados desde el 2001 al 2020. En la figura A.3 se muestra la evolución en el tiempo de artículos publicados. En la figura A.4 se tiene que del total de publicaciones, en el área de matemáticas el 5.2%, en Ciencias de la computación 4.4%, en ingeniería 12.5%, ciencias e materiales 25.6% y en física 36.1%. En la figura A.5 se muestra que Estados Unidos, China e Italia ocupan los tres primeros lugares de procedencia en artículos con la búsqueda ‘Boltzmann’ y ‘graphene’.

534 document results

Select year range to analyze: 2001 to 2020 Analyze

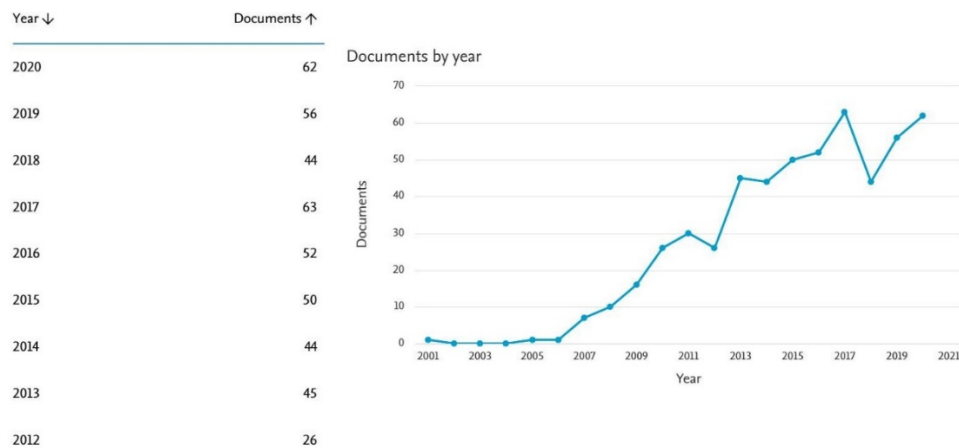


Figura A.3 – Se muestra la evolución de artículos que incluyen Boltzmann y graphene dentro de su exposición en el periodo 2001-2020. Fuente: <https://www.scopus.com>, consultado al 31 de enero 2021

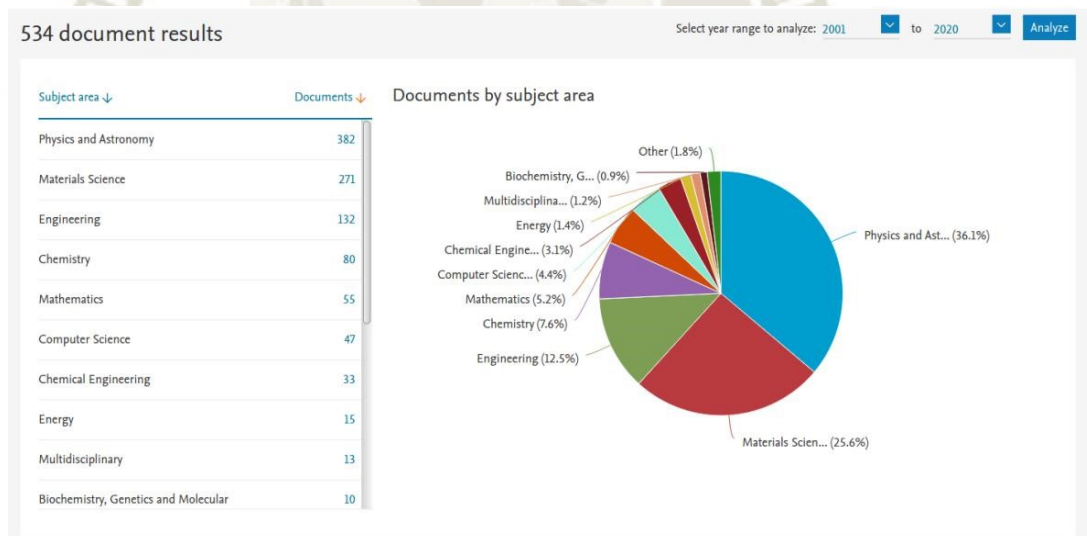


Figura A.4 – Del total de publicaciones se tiene el 5.2% en el área de matemáticas, 4.4% en Ciencias de la computación, 12.5% en ingeniería, 25.6% ciencias de materiales y 36.1% en física. Fuente: <https://www.scopus.com>, consultado al 31 de enero 2021

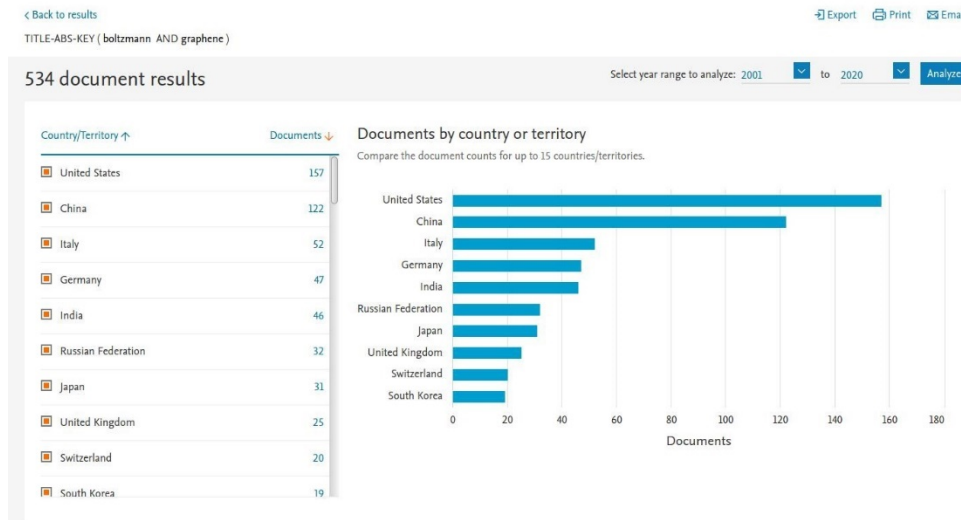


Figura A.5 – Países de procedencia de los artículos con la búsqueda ‘Boltzmann’ y ‘graphene’. Fuente: <https://www.scopus.com>, consultado al 31 de enero 2021.

A.3. Estadística de trabajos publicados con las palabras claves ‘Monte Carlo and graphene’ buscados en la base de datos SCOPUS

En la figura A.6 se muestra la búsqueda en la base de datos SCOPUS a la fecha del 31 enero del 2021 se muestran en los siguientes resultados delimitados desde el 2001 al 2020. En la figura A.7 se muestra que del total de publicaciones, en el área de matemáticas el 3.5% , en Ciencias de la computación 4.0%, en ingeniería 12.5%, ciencias e materiales 29.7% y en física 30.3%.

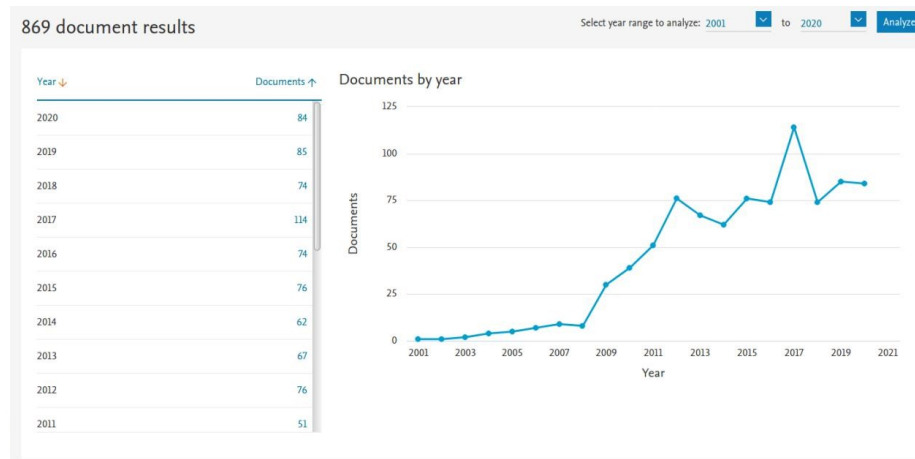


Figura A.6 – Se muestra la evolución de artículos que incluyen Monte Carlo y ‘graphene’ dentro de su exposición en el periodo 2001-2020. Fuente: <https://www.scopus.com>, consultado al 31 de enero 2021.

TITLE-ABS-KEY (monte AND carlo AND graphene)

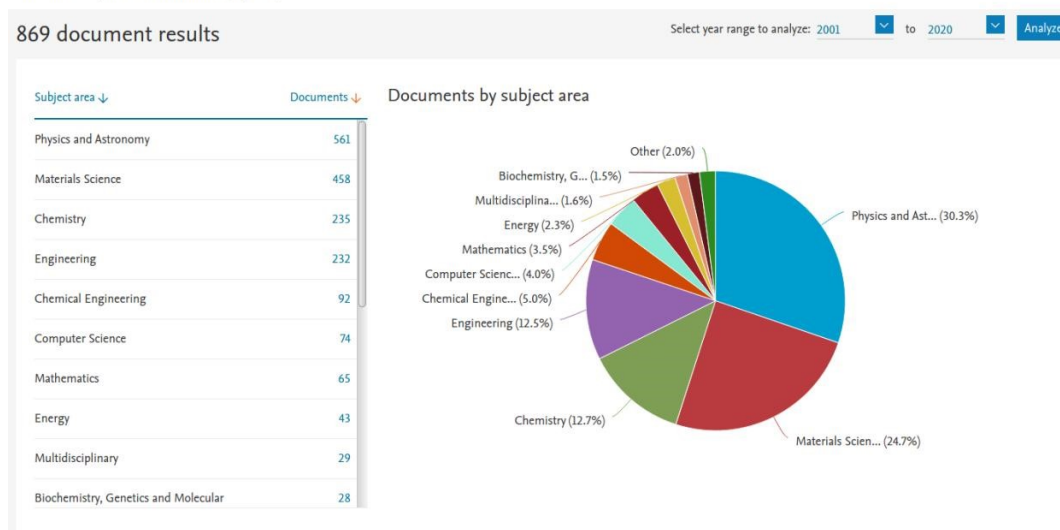


Figura A.7 – Del total de publicaciones se tiene el 3.5% en el área de matemáticas, 4.0% en Ciencias de la computación, 12.5% en ingeniería, 4.0% ciencias de materiales y 29.7% en física. Fuente: <https://www.scopus.com>, consultado al 31 de enero 2021.

Anexo B Alotropías del Carbono

B.1. Cristales de carbono

Los átomos de carbono se ordenan en diferentes maneras en 1D, 2D y 3D, tal cual se muestra en la figura B.1, donde se puede observar que el diamante y el grafito con redes cristalográficas tridimensionales, que para el caso del diamante están enlazados en enlaces tetraédricos sp^3 ; mientras, el grafito está compuesto de monocapas de grafeno apiladas que están enlazadas por las fuerzas de Van der Waals. Para las redes unidimensionales encontramos en los nanotubos de carbono (CNT), descubiertos en 1991 por Iijima (Iijima, 2002) y por último en 0D moléculas separadas, está la molécula de fullureno C_{60} que fue reportada en 1985 (Kroto, Heath, O'Brien, Curl, y Smalley, 1985).

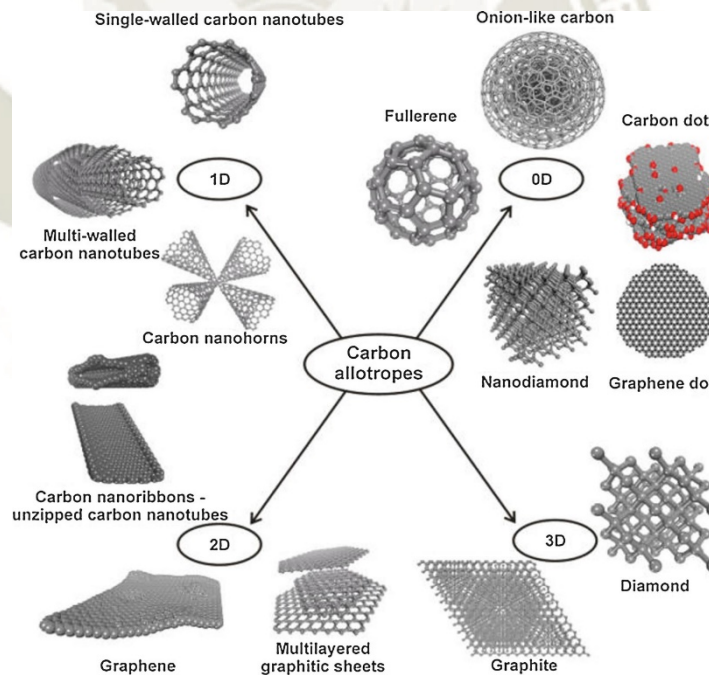


Figura B.1 – Alotropías del carbono. Referencia (Barhoum y col, 2019)

Las monocapas de grafeno con hibridación sp^2 de átomos de carbono forman una red bidimensional hexagonal tal cual se puede apreciar en figura B.2.

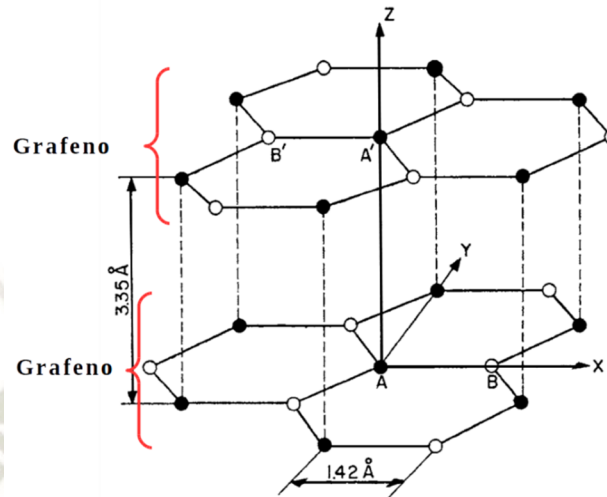


Figura B.2 – Red del grafito, donde se puede apreciar las capas de grafeno. Adaptado de la referencia (Chung, 2002).

Anexo C. Código de la programación en Matlab

C.1. Código de Matlab de la figura 1.3 de Bandas de Energía del grafeno intrínseco en 3D y curvas de nivel

% Bandas de Energía del grafeno intrínseco en 3D y en curvas de nivel

% Autora: Hilda Maricela Quispe Abarca

%

%%%%%%%%%

%%%%%%%%%

%%% % Bandas de energía 3D del
grafeno %

%%%%%%%%%

%%%%%%%%%

%%%%%%%%% close all; clc; clear all;

tic;

% parametros de la red directa y

recíproca a=sqrt(3)*0.142; % nm

li=(2*pi)/(a);

% construcción de la matriz recíproca

[kx,ky]=meshgrid(-li/li/60:li,-li/li/60:li);

% E(k) del modelo Tight binding Castro Neto

2009 gamma=2.7; % eV x=cos(sqrt(3)*a*kx/2);

y=cos((a/2)*ky);

Ec =
1*gamma*sqrt(1+4*x.*y+4*y.*y)

; Ev = -
1*gamma*sqrt(1+4*x.*y+4*y.*y)

; surface(kx/li,ky/li,Ec)

xlabel('kx(2\pi/a)')

ylabel('ky(2\pi/a)')

```

xlabel('Energía (eV)') %colormap
summer hold on
surface(kx/li,ky
/li,Ev) colormap
winter view(3)
figure
contour(kx/li,ky/li,EC) xlabel('kx(2\pi/a)')
ylabel('ky(2\pi/a)')
xlabel('Energía (eV)')
colormap Winter

%calculo del punto crítico
FEc=@(k)1*gamma*sqrt(1+4*cos(sqrt(3)*a*k(1)/2).*cos((a/2)*k(2))+4*cos((a/2)*k
(2)).*cos((a/2)*k(2)));
options = optimset('PlotFcns',@optimplotfval);
%options = optimoptions('fmincon','Display','iter','Algorithm','sqp')
x0=[10,10];
xv = fminsearch(FEc,x0,options);
disp(xv*a/(2*pi))
disp('En unidades de 2pi/a')
% disp(xv)
%xv = fmincon(FEc ,[-1.1,-10.1],options);
%disp(xv)

%Cálculo del Hessiano
[xv,~,~,~,~,grad,hessian] = fmincon(FEc,xv)
FEc=[1*gamma*sqrt(1+4*cos(sqrt(3)*a*kx/2)*cos((a/2)*ky)+4*cos((a/2)*ky)*cos((
a/2)*ky))];
det(hessian)

```


-----**Matriz de salida**

$$hessian = 1.0 \times 10^5 \begin{bmatrix} 1.5041 & 2.3007 \\ 2.3007 & 3.5191 \end{bmatrix}$$

det(hessian) = 4.3146e+05 > 0 , por tanto es un mínimo

C.2. Código de Matlab de la figura 1.5 de la función de Fermi

```
%
% Función de distribución de Fermi_Dirac
% Autora: Hilda Maricela Quispe Abarca
%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%
% Función de distribución de
Fermi_Dirac %
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%% close all; clc; clear all; tic;
% parametros
kB=1.3807e-23; % J/K constante de Boltzmann
qe=1.6021892e-19; % C carga elemental
hbar=1.0546e-34; % J/s
muJ= 0.255 % potencial quimico(Ef,T,gamma);
E=[0:0.00001:0.5]; % eV;

% estado base
T=0.00000000000000000001; %K
beta=kB*T/qe;
dE0=(E-muJ);
x0=exp(dE0/bet
```

```

a);      F0=
1./(x0+1);
p0=plot(E,F0)
set(p0,'LineWi
dth',1.3)  hold
on
%T=300 % K temperatura
ambiente  beta=kB*T/qe;
dE=E-muJ;
x=exp(dE/beta);      F=
1./(x+1);      p=plot(E,F);
ylim([0      1.2])
set(p,'LineWidth',1.3)
xlabel('Energía      (eV)')
ylabel('f(E,T)')
legend('0k', '100K', '200K', '300K', '400K', '500K')

```

C.3.Código de Matlab de la autovarianza de las figuras 3.3 y 3.4

```

% aatocovar.m
% evaluación de la estacionaridad de datos aleatorios mediante el
% cálculo de la autocovariancia
% Autora: Hilda Maricela Quispe Abarca
% Fecha de Actualización: 2 de enero del 2021
%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%      %
Inicialización del programa
%
%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%% close all; clc;
clear all; format long;

```

```

formatSpec = '%f %f %f %f';
archivonames='VdmediaGrSOt15ps11kVcm1e4e1Ne4T300n1e12cCu2Oni8p86e11c
onv.txt';
%sustrato 1e4
fileID = fopen(archivonames);
B=textscan(fileID,formatSpec,'HeaderLines', 1);
A=cell2mat(B(:,2)); [C, lags] =
xcov(A,'coeff'); figure
md=length(lags);
%stem(lags,C,'MarkerSize',3,'Color','
m');
stem(lags(round(md/2):end),C(round(md/2):end),'MarkerSize',3,'Color','g');
xlabel('lags'); ylabel('AC'); txt = 'Sustrato Ne=1e5';
text(280,0.9,txt,'HorizontalAlignment','right')

fclose(fileID);

fileID = fopen(archivonamei);
B=textscan(fileID,formatSpec,'HeaderLines', 1);
A=cell2mat(B(:,2)); [C, lags] =
xcov(A,'coeff'); figure
md=length(lags);
%stem(lags,C,'MarkerSize',3,'Color','
m');
stem(lags(round(md/2):end),C(round(md/2):end),'MarkerSize',3,'Color','g');
xlabel('lags'); ylabel('AC'); txt = 'Intrínseco Ne=1e5';
text(280,0.9,txt,'HorizontalAlignment','right')

fclose(fileID);
%display(A)

```

C.4. Código de Matlab para la prueba de la χ^2

```

% Test de la secuencia de números aleatorios
%
% Autora: Hilda Maricela Quispe Abarca
% Fecha de Actualización: 26 de junio del 2021
% Fecha de revision ultima: 26 de junio del 2021
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Inicialización del programa %
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
close all;
clc;
clear all;
tic;

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Inicializa el número aleatorio y calcula el tiempo máximo %

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
t0=datetime('now');
tiemposim(1)=t0;
dummyrand=202818;
rng(dummyrand,'twister');
nro=1e8; % número de números aleatorios generados
nrobin=round(1+3.322*log(nro))-1 %regla de Sturge
vector=rand(nro,1);
binwidth=1/nrobin;
binedges=zeros(nrobin+1,1);
binedges(1)=0;
for i=1:nrobin
    binedges(i+1)=i*binwidth;

```

end

```
hts=histogram(vector,binedges);  
[freq,binedges1] = histcounts(vector,binedges);  
nrosporbinteorico=nro/nrobin;  
sum=0;  
for j=1:nrobin  
    dif=((freq(j)-nrosporbinteorico)^2)/nrosporbinteorico;  
    sum=sum+dif;  
end  
chi2=sum  
gradoslibertad=nrobin-1  
chi2reducido=chi2/gradoslibertad  
h=chi2gof(vector)  
totaltime = toc;  
disp(totaltime/60);
```