

**ANÁLISIS DE LAS PROPIEDADES DE TRANSPORTE ELECTRÓNICO EN  
NANOCINTAS DE BICAPAS DE BOROFENO: EFECTOS DE LA DIMENSIÓN Y  
TIPO DE BORDE**

CARLOS EDUARDO ARDILA GUTIERREZ

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE CIENCIAS  
ESCUELA DE FÍSICA  
BUCARAMANGA  
2023

**ANÁLISIS DE LAS PROPIEDADES DE TRANSPORTE ELECTRÓNICO EN  
NANOCINTAS DE BICAPAS DE BORO-FENO: EFECTOS DE LA DIMENSIÓN Y  
TIPO DE BORDE**

CARLOS EDUARDO ARDILA GUTIERREZ

Trabajo de Grado para optar al título de  
Físico

Director:  
Ph.D. Carlos José Páez González

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE CIENCIAS  
ESCUELA DE FÍSICA  
BUCARAMANGA  
2023

## **DEDICATORIA**

A mis padres y hermana.  
Gracias por su apoyo y cariño.

## **AGRADECIMIENTOS**

Agradezco a mis padres, Carlos y Mónica, por adentrarme en este mundo. Su cálida compañía y amor me motivan a lo largo del recorrido. A mi hermana Maria Alejandra que con su energía y ocurrencias me recupera el ánimo. Agradezco a Karen, por abrigarme con su cariño. A mis amigos, por aquellos cafés e instantes compartidos.

Un reconocimiento a mi director de trabajo de grado Carlos Jose Paéz González, guía esencial en el comienzo de mi vida científica. Gracias por su motivación y tiempo. Agradezco al profesor Darío Bahamon, por su minuciosa perspectiva de la física.

## CONTENIDO

	pág.
<b>INTRODUCCIÓN</b>	<b>14</b>
<b>1. Modelo Tight-Binding optimizado para la bicapa de borofeno</b>	<b>20</b>
1.1. Hamiltoniano Tight-Binding para la bicapa de borofeno a partir del método de Slater y Koster	22
1.2. Estructura de bandas a partir del TB	25
1.3. Optimización de los parámetros de hopping a partir del ajuste de la estructura de bandas TB con la obtenida por DFT	25
1.4. Conos de Dirac y línea nodal	27
1.5. Estructura de bandas para una bicapa de borofeno finita: Efectos del tamaño y de los bordes armchair y zigzag	30
<b>2. Propiedades electrónicas y de transporte en una bicapa de borofeno</b>	<b>34</b>
2.1. Formalismo de Landauer-Büttiker	35
2.2. Funciones de Green en la bicapa de borofeno	37
2.3. Conductancia en una bicapa de borofeno con bordes (nanocinta)	38
2.4. Efectos del tamaño y bordes sobre la conductancia en el punto de neutralidad de carga	40
2.5. Densidad local de estados	43
2.6. Densidad de corriente local	44
2.7. Modos normales de propagación en nanocintas de bicapa de borofeno	47
2.8. Efectos del tamaño sobre la densidad de corriente.	52
<b>3. CONCLUSIONES</b>	<b>55</b>

<b>4. PUBLICACIONES Y EVENTOS</b>	<b>57</b>
<b>BIBLIOGRAFÍA</b>	<b>58</b>
<b>ANEXOS</b>	<b>65</b>

## LISTA DE FIGURAS

	<b>pág.</b>
Figura 1. (a) Bicapa de borofeno. (b) Función de localización electrónica (ELF) para la bicapa de borofeno, donde se identifica un enlace covalente fuerte entre capas. Fuente: [27].	15
Figura 2. Imágenes de la síntesis de redes de bicapa de borofeno sobre sustratos de Ag (a) y Cu (b) capturadas utilizando microscopía de efecto túnel (STM). Fuentes: [20, 21]	18
Figura 3. Figura esquemática de una red de bicapa de borofeno. La región sombreada muestra la celda primitiva y en la parte derecha de la figura, se definen los vectores de red <b>a</b> y <b>b</b> . Adicionalmente, se especifican las 4 distancias del modelo TB.	21
Figura 4. Esquema de interacciones entre primeros vecinos para el modelo TB de la bicapa de borofeno. Fuente: [28].	24
Figura 5. Figura esquemática del método de Slater-Koster para la obtención de los parámetros de hopping necesarios para la construcción del hamiltoniano TB.	27
Figura 6. Comparación de la estructura de bandas para una red periódica de bicapa de borofeno utilizando DFT y el hamiltoniano TB. En verde se resalta la zona de los conos de Dirac y la línea nodal.	28
Figura 7. Tipos de cortes en una red hexagonal, como la bicapa de borofeno. En rojo(verde) se delimitan los bordes armchair(zigzag). A la derecha se plantean dos nanocintas semi-infinitas, donde los puntos indican periodicidad en esa dirección.	30

- Figura 8. Estructura de bandas para nanocintas armchair y zigzag de 3, 20 y 100 celdas de ancho. Para el sistema más grande se compara el resultado con las bandas del sistema periódico(Bulk), teniendo en cuenta efectos de folding. Los puntos  $\alpha$  corresponden a cortes de la línea nodal. 31
- Figura 9. Figura esquemática de la configuración del sistema para estudio de las propiedades de transporte en sistemas finitos. Esquema de nanocintas con bordes armchair (*b*) y zigzag (*c*) donde el recuadro rojo enmarca la celda expandida del sistema finito.  $L_x$  es constante mientras que  $W$  es el ancho variable medido en número de celdas primitivas,  $n$ . 36
- Figura 10. Estructura de bandas y conductancia en función de la energía para nanocintas armchair (*a*) y zigzag (*b*) con 6 celdas de ancho. La orientación de las gráficas permite trazar una línea horizontal para cada energía donde se cumple que el valor en conductancia es igual al número de bandas con pendientes del mismo signo. 39
- Figura 11. Conductancia en función del número de celdas de ancho para nanocintas armchair y zigzag. A la derecha se muestra un esquema de cada tipo de nanocinta, donde el borde delineado en azul corresponde a armchair y en amarillo a zigzag. También se ejemplifica el conteo de celdas,  $n$ , para cada sistema. 41
- Figura 12. Conductancia en función del número de celdas unitarias para nanocintas armchair (*a*) y zigzag (*b*). Para los tamaños señalados con líneas punteadas se muestran las estructuras de bandas del sistema asociado: nanocinta armchair de 5(*c*) y 6(*d*) celdas; nanocinta zigzag de 6(*e*) y 7(*f*) celdas. 42

- Figura 13. Estructura de bandas (*a, b*), densidad de corriente (*c, e*) y LDoS (*d, f*) para nanocintas armchair y zigzag de 6 celdas unitarias de ancho a energía de Fermi, respectivamente. La escala de colores para densidad de corriente (naranja) y LDoS (azul) hace referencia a diferentes intensidades. 45
- Figura 14. Estructura de bandas y densidad de corriente por modos para nanocinta armchair de 6 celdas de ancho a  $E = 0$  (*a*) y  $E = 0.1$  eV (*b*). Se resalta con dos líneas punteadas rojas en la estructura de bandas los niveles energéticos a estudiar y con puntos verdes se identifica cada modo disponible. 48
- Figura 15. Estructura de bandas y densidad de corriente por modos para nanocinta zigzag de 6 celdas de ancho a  $E = 0$  (*a*) y  $E = 0.1$  eV (*b*). Se resalta con dos líneas punteadas rojas en la estructura de bandas los niveles energéticos a estudiar y con puntos verdes se identifica cada modo disponible. 49
- Figura 16. Densidad de corriente para nanocintas armchair y zigzag con 6 celdas de ancho para 3 energías distintas. 51
- Figura 17. Densidad de corriente para nanocintas armchair y zigzag con 25 celdas de ancho a energía de Fermi. 53

## LISTA DE TABLAS

**pág.**

Tabla 1. Parámetros optimizados de Slater-Koster para cada distancia  $d_i$  y energías de sitio de los orbitales  $S$  y  $P_i$ . Las unidades están dadas en [eV]. 28

## ANEXOS

**pág.**

Anexo A. Matrices de enlace y energías de sitio para la bicapa de borofeno. 65

## RESUMEN

**TÍTULO:** ANÁLISIS DE LAS PROPIEDADES DE TRANSPORTE ELECTRÓNICO EN NANOCINTAS DE BICAPAS DE BOROFENO: EFECTOS DE LA DIMENSIÓN Y TIPO DE BORDE. \*

**AUTOR:** CARLOS EDUARDO ARDILA GUTIERREZ \*\*

**PALABRAS CLAVE:** BICAPA DE BOROFENO, TRANSPORTE ELECTRÓNICO, TIGHT-BINDING, SEMIMETAL DE LINEA NODAL.

### DESCRIPCIÓN:

En el presente estudio, se exploran los efectos estructurales, tales como la dimensión y los tipos de bordes, en las propiedades de transporte de nanocintas de bicapas de borofeno, clasificado como un semimetal de línea nodal de Dirac (DNLS). Mediante el método de Slater-Koster (SK), se desarrolla un hamiltoniano Tight-Binding (TB) para analizar el transporte electrónico en dichas bicapas, considerando bordes tipo armchair y zigzag. El enfoque TB es adecuado para representar sistemas electrónicos modelados como una red de átomos interconectados.

Se implementa el formalismo de Landauer-Büttiker en conjunto con las funciones de Green de la red para evaluar las propiedades de transporte. Dicho procedimiento es esencial para el estudio de sistemas mesoscópicos, en los cuales las características cuánticas del transporte electrónico son destacadas. A partir de esta metodología, se determinan la conductancia, densidad de corriente y densidad local de estados próximos al nivel de Fermi para nanocintas con dimensiones desde 3Å hasta 60nm, considerando bordes tipo armchair y zigzag. La realización de estos cálculos se efectúa mediante el lenguaje de programación *Python* y la librería *Kwant*<sup>1</sup>.

Se identifican particularidades en sistemas con dimensiones superiores o inferiores a 5 nm. Las nanocintas tipo armchair de menor amplitud muestran dispersión lineal y estados de borde cercanos al nivel de Fermi, en contraste con las de borde zigzag, que no evidencian dichas propiedades. Con el incremento de la dimensión, emergen estados adicionales que opacan los efectos de los conos de Dirac y su intersección. Pese a dichas variaciones, las estructuras de bandas conservan semejanza con el sistema en su representación periódica. Al ajustar la energía en sistemas de menor tamaño, los resultados son congruentes con las modificaciones dimensionales. El análisis subraya la relevancia del modelo TB para comprender comportamientos electrónicos en materiales innovadores como las bicapas de borofeno, proporcionando una perspectiva técnica y metodológica.

---

\* Trabajo de grado

\*\* Facultad de Ciencias. Escuela de Física.

<sup>1</sup> Christoph W. Groth et al. "Kwant: a software package for quantum transport". en. En: *New Journal of Physics* 16.6 (jun. de 2014). Publisher: IOP Publishing, pág. 063065. DOI: 10.1088/1367-2630/16/6/063065.

## ABSTRACT

**TITLE:** ANALYSIS OF ELECTRONIC TRANSPORT PROPERTIES IN BILAYER BOROPHENE NANORIBBONS: EFFECTS OF DIMENSION AND EDGE TYPE. \*

**AUTHOR:** CARLOS EDUARDO ARDILA GUTIERREZ \*\*

**KEYWORDS:** BILAYER BOROPHENE, ELECTRONIC TRANSPORT, TIGHT-BINDING, NODAL LINE SEMIMETAL.

### DESCRIPTION:

In this study, the structural effects, such as dimension and edge types, on the transport properties of bilayer borophene nanoribbons, a Dirac nodal line semimetal (DNLS), were explored. Through the Slater-Koster (SK) method, a Tight-Binding (TB) Hamiltonian was developed to analyze the electronic transport in these borophene bilayers, considering both armchair and zigzag edges. This TB approach, is suitable for describing electronic systems as a network of interconnected atoms.

The Landauer-Büttiker formalism was implemented, along with the Green's functions of the network, to calculate the transport properties. This procedure is essential for investigating mesoscopic systems, where quantum characteristics of electronic transport are predominant. With this framework, the conductance, current density, and local density of states near the Fermi level for nanoribbons with widths ranging from 3 Å to 60 nm, and with armchair and zigzag edges, were determined. These calculations were performed using programming language *Python* and the Kwant library<sup>1</sup>.

Our findings reveal notable peculiarities in systems with dimensions larger or smaller than 5 nm. The narrower armchair nanoribbons exhibit linear dispersion and edge states at the Fermi level, while those with zigzag edges do not show these features. As the dimension increases, more states appear that mask the effects of Dirac cones and their intersection. Despite these variations, the band structures retain similarities with the system in its periodic form. By modifying the energy in narrow systems, results consistent with size alterations were obtained. This study emphasizes the utility of the TB model for understanding and predicting electronic behaviors in advanced materials like borophene bilayers, providing a practical and methodological insight based on recognized techniques.

---

\* Bachelor Thesis

\*\* Facultad de Ciencias. Escuela de Física.

<sup>1</sup> Groth et al., ver n. 1.

## INTRODUCCIÓN

La investigación sobre materiales topológicos<sup>2</sup>, que engloba a semimetales de Weyl<sup>3</sup>, Dirac<sup>4</sup> y de línea nodal (DNLS)<sup>5</sup>, ha cobrado relevancia debido a la protección topológica en propiedades como la superconductividad<sup>6</sup>, el efecto Hall anómalo<sup>7</sup> y los estados en la superficie<sup>8</sup>. Estos materiales exhiben peculiaridades en su estructura de bandas asociadas a simetrías, como la traslacional, especular y de inversión temporal, las cuales son protegidas ante transformaciones adiabáticas. Están caracterizados por invariantes topológicos no triviales, tales como la curvatura de Berry y el número de Chern. En particular, las bandas de valencia y conducción en estos semimetales tienen contacto en uno o más puntos discretos, o incluso a lo largo de una línea no hibridizada, como lo es para los DNLS.

- 
- <sup>2</sup> A. A. Burkov. “Topological semimetals”. en. En: *Nature Materials* 15.11 (nov. de 2016). Number: 11 Publisher: Nature Publishing Group, págs. 1145-1148. DOI: 10.1038/nmat4788.
- <sup>3</sup> Shuang Jia, Su-Yang Xu y M. Zahid Hasan. “Weyl semimetals, Fermi arcs and chiral anomalies”. en. En: *Nature Materials* 15.11 (nov. de 2016). Number: 11 Publisher: Nature Publishing Group, págs. 1140-1144. DOI: 10.1038/nmat4787.
- <sup>4</sup> Jiaheng Li et al. “Topological semimetals from the perspective of first-principles calculations”. En: *Journal of Applied Physics* 128.19 (nov. de 2020), pág. 191101. DOI: 10.1063/5.0025396.
- <sup>5</sup> Chen Fang et al. “Topological nodal line semimetals”. En: *Chinese Physics B* 25.11 (nov. de 2016). arXiv:1609.05414 [cond-mat], pág. 117106. DOI: 10.1088/1674-1056/25/11/117106.
- <sup>6</sup> Jian Wang. “Superconductivity in topological semimetals”. En: *National Science Review* 6.2 (mar. de 2019), págs. 199-202. DOI: 10.1093/nsr/nwy155.
- <sup>7</sup> Gang Xu et al. “Chern Semimetal and the Quantized Anomalous Hall Effect in  $\text{HgCr}_2\text{Se}_4$ ”. En: *Physical Review Letters* 107.18 (oct. de 2011). Publisher: American Physical Society, pág. 186806. DOI: 10.1103/PhysRevLett.107.186806.
- <sup>8</sup> Qi-Feng Liang et al. “Node-surface and node-line fermions from nonsymmorphic lattice symmetries”. En: *Physical Review B* 93.8 (feb. de 2016). Publisher: American Physical Society, pág. 085427. DOI: 10.1103/PhysRevB.93.085427.

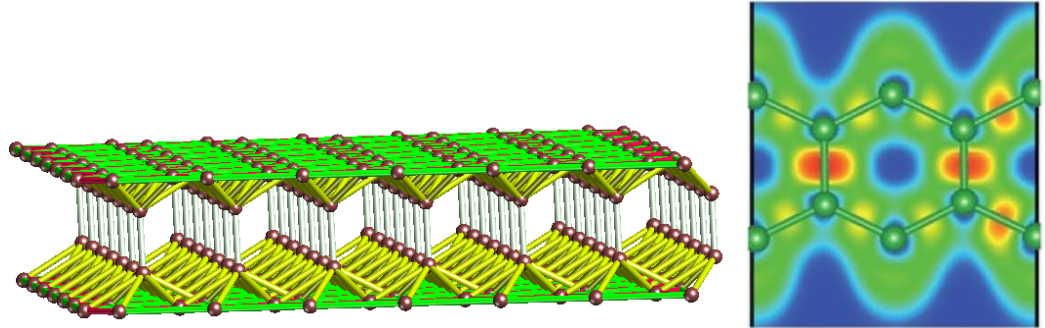


Figura 1. (a) Bicapa de borofeno. (b) Función de localización electrónica (ELF) para la bicapa de borofeno, donde se identifica un enlace covalente fuerte entre capas. Fuente: [27].

Los DNLS han sido identificados en varios materiales, incluyendo  $\text{SrAs}_3$ <sup>9</sup> y  $\text{ZrSiS}$ <sup>10</sup>. Estos materiales exhiben propiedades únicas, tales como modos colectivos<sup>11</sup>. Bajo ciertas condiciones, como el rompimiento de simetrías, pueden experimentar transiciones de fase que los convierte en semimetales de Weyl o Dirac<sup>12</sup>. Además, la interacción mediante el acoplamiento spin-orbital puede inducir la apertura de un gap significativo entre las bandas de valencia y conducción, dando lugar a aislantes topológicos<sup>13</sup>.

<sup>9</sup> Shichao Li et al. "Evidence for a Dirac nodal-line semimetal in  $\text{SrAs}_3$ ". En: *Science Bulletin* 63.9 (mayo de 2018), págs. 535-541. DOI: 10.1016/j.scib.2018.04.011.

<sup>10</sup> B.-B. Fu et al. "Dirac nodal surfaces and nodal lines in  $\text{ZrSiS}$ ". En: *Science Advances* 5.5 (mayo de 2019). Publisher: American Association for the Advancement of Science, eaau6459. DOI: 10.1126/sciadv.aau6459.

<sup>11</sup> Zhongbo Yan, Peng-Wei Huang y Zhong Wang. "Collective modes in nodal line semimetals". En: *Physical Review B* 93.8 (feb. de 2016). Publisher: American Physical Society, pág. 085138. DOI: 10.1103/PhysRevB.93.085138.

<sup>12</sup> Fang et al., ver n. 5.

<sup>13</sup> Rui Yu et al. "Topological nodal line semimetals predicted from first-principles calculations". en. En: *Frontiers of Physics* 12.3 (jun. de 2017), pág. 127202. DOI: 10.1007/s11467-016-0630-1.

Aunque fue teorizada en 1997<sup>14</sup>, no fue sino hasta 2016 que, mediante métodos de primeros principios y la teoría funcional de densidad (DFT), la bicapa de borofeno (BB) fue categorizada como DNLS<sup>15</sup> con una línea nodal no plana, curvatura de Berry no trivial y número de Chern  $C = 2$ <sup>16</sup>.

Los átomos de boro poseen 3 electrones de valencia,  $[He]2s_22p_1$ , que les facilitan formar enlaces iónicos y covalentes. En la bicapa de borofeno, esta característica electrónica da lugar a un acoplamiento fuerte entre las capas<sup>17</sup>, como se muestra en la figura 1. Esto le confiere una mayor estabilidad en comparación con otros alotropos<sup>18</sup>. La estructura pertenece al grupo espacial  $p6mm$ , que presenta simetría hexagonal y especular, aspectos responsables de la aparición de la línea nodal<sup>19</sup>. Dado que contiene 6 átomos de boro en su celda primitiva, esta estructura se iden-

- 
- <sup>14</sup> Ihsan Boustani. "New quasi-planar surfaces of bare boron". en. En: *Surface Science* 370.2 (ene. de 1997), págs. 355-363. DOI: 10.1016/S0039-6028(96)00969-7.
- <sup>15</sup> Fengxian Ma et al. "Graphene-like Two-Dimensional Ionic Boron with Double Dirac Cones at Ambient Condition". En: *Nano Letters* 16.5 (mayo de 2016). Publisher: American Chemical Society, págs. 3022-3028. DOI: 10.1021/acs.nanolett.5b05292.
- <sup>16</sup> M. Nakhaee, S. A. Ketabi y F. M. Peeters. "Dirac nodal line in bilayer borophene: Tight-binding model and low-energy effective Hamiltonian". En: *Physical Review B* 98.11 (sep. de 2018). Publisher: American Physical Society, pág. 115413. DOI: 10.1103/PhysRevB.98.115413.
- <sup>17</sup> Shobair Mohammadi Mozvashi, Mojde Rezaee Givi y Meysam Bagheri Tagani. "The effects of substrate and stacking in bilayer borophene". en. En: *Scientific Reports* 12.1 (ago. de 2022). Number: 1 Publisher: Nature Publishing Group, pág. 13661. DOI: 10.1038/s41598-022-18076-0.
- <sup>18</sup> Zhenqian Pang et al. "Super-stretchable borophene". en. En: *EPL (Europhysics Letters)* 116.3 (nov. de 2016), pág. 36001. DOI: 10.1209/0295-5075/116/36001.
- <sup>19</sup> Hassan Y. Aluhairan, H. M. Abdullah y U. Schwingenschlögl. "Transport and confinement in bilayer chiral borophene". en. En: *2D Materials* 9.2 (abr. de 2022). Publisher: IOP Publishing, pág. 025031. DOI: 10.1088/2053-1583/ac5f6c.

tífica con la notación  $6B:P6mmm$ .

Tras lograr la síntesis de redes de bicapa de borofeno con dimensiones del orden de decenas de nanómetros, utilizando el método de crecimiento epitaxial por haces moleculares (MBE) sobre sustratos de plata (Ag)<sup>20</sup>, cobre (Cu)<sup>21</sup> y rutenio (Ru)<sup>22</sup>, como se muestra en la figura 2, este material ha despertado un notable interés en campos como la óptica de plasmones<sup>23</sup>, el transporte electrónico<sup>24</sup> y los sectores energético<sup>25</sup> e industrial<sup>26</sup>. Dentro del marco de la teoría Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) y el DFT, se anticipa una superconductividad con temperaturas de transición

- 
- <sup>20</sup> Andrew J. Mannix et al. "Synthesis of borophenes: Anisotropic, two-dimensional boron polymorphs". En: *Science* 350.6267 (dic. de 2015). Publisher: American Association for the Advancement of Science, págs. 1513-1516. DOI: 10.1126/science.aad1080.
- <sup>21</sup> Caiyun Chen et al. "Synthesis of bilayer borophene". en. En: *Nature Chemistry* 14.1 (ene. de 2022). Number: 1 Publisher: Nature Publishing Group, págs. 25-31. DOI: 10.1038/s41557-021-00813-z.
- <sup>22</sup> Peter Sutter y Eli Sutter. "Large-Scale Layer-by-Layer Synthesis of Borophene on Ru(0001)". En: *Chemistry of Materials* 33.22 (nov. de 2021). Publisher: American Chemical Society, págs. 8838-8843. DOI: 10.1021/acs.chemmater.1c03061.
- <sup>23</sup> Chao Lian et al. "Integrated Plasmonics: Broadband Dirac Plasmons in Borophene". En: *Physical Review Letters* 125.11 (sep. de 2020). Publisher: American Physical Society, págs. 116802. DOI: 10.1103/PhysRevLett.125.116802.
- <sup>24</sup> Hongxia Zhong et al. "Electronic and mechanical properties of few-layer borophene". En: *Physical Review B* 98.5 (ago. de 2018). Publisher: American Physical Society, págs. 054104. DOI: 10.1103/PhysRevB.98.054104.
- <sup>25</sup> Hushan Chand, Ashish Kumar y Venkata Krishnan. "Borophene and Boron-Based Nanosheets: Recent Advances in Synthesis Strategies and Applications in the Field of Environment and Energy". en. En: *Advanced Materials Interfaces* 8.15 (2021). \_eprint: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/admi.202100045>, págs. 2100045. DOI: 10.1002/admi.202100045.
- <sup>26</sup> Zhi-Qiang Wang et al. "Review of borophene and its potential applications". en. En: *Frontiers of Physics* 14.3 (abr. de 2019), págs. 33403. DOI: 10.1007/s11467-019-0884-5.

( $T_c$ ) próximas a  $12\text{K}$ <sup>27</sup> y la presencia de estados topológicos<sup>19</sup>.

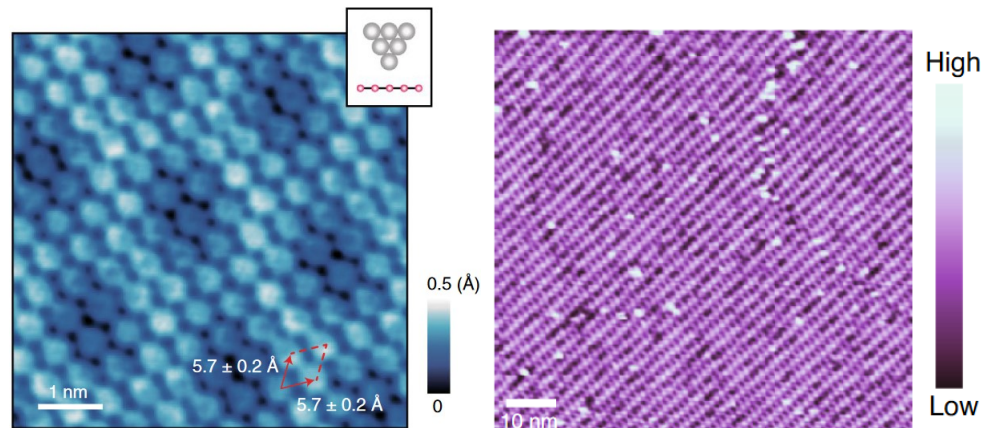


Figura 2. Imágenes de la síntesis de redes de bicapa de borofeno sobre sustratos de Ag (a) y Cu (b) capturadas utilizando microscopía de efecto tunel (STM). Fuentes: [20, 21]

La mayoría de los estudios hasta la fecha se han realizado utilizando métodos *ab-initio* para sistemas periódicos. Estos métodos generan una demanda computacional que limita la simulación de nanocintas con un alto número de átomos. No obstante, fenómenos inherentes a estos materiales topológicos, como la localización de estados de borde, la anisotropía relacionada con la variación angular de la línea nodal y los efectos asociados al tamaño, demandan un enfoque heurístico que permita modelar sistemas finitos a escalas mesoscópicas con diferentes bordes, como armchair y zigzag.

En el presente estudio, se pretende analizar los efectos derivados de la variación de parámetros estructurales, como los bordes y el tamaño, en las propiedades de

---

<sup>27</sup> Luo Yan et al. "Prediction of superconductivity in bilayer borophenes". en. En: *RSC Advances* 11.63 (2021). Publisher: Royal Society of Chemistry, págs. 40220-40227. DOI: 10.1039/D1RA08014H.

transporte de las bicapas de borofeno. Se enfoca específicamente en la conductancia, densidad de carga y densidad de corriente. Se adopta un modelo tight-binding (TB)<sup>28</sup>, optimizado a través del enfoque de Slater-Koster (SK)<sup>29,28</sup>. Con el apoyo del formalismo de Landauer-Büttiker y las funciones de Green, es posible modelar nanocintas de miles de átomos con bordes tipo armchair y zigzag.

---

<sup>28</sup> Mohammad Nakhaee, S. Ahmad Ketabi y Francois M. Peeters. "Tight-Binding Studio: A technical software package to find the parameters of tight-binding Hamiltonian". en. En: *Computer Physics Communications* 254 (sep. de 2020), pág. 107379. DOI: 10.1016/j.cpc.2020.107379.

<sup>29</sup> J. C. Slater y G. F. Koster. "Simplified LCAO Method for the Periodic Potential Problem". En: *Physical Review* 94.6 (jun. de 1954). Publisher: American Physical Society, págs. 1498-1524. DOI: 10.1103/PhysRev.94.1498.

## 1. Modelo Tight-Binding optimizado para la bicapa de borofeno

La construcción de un hamiltoniano Tight-Binding (TB) para la bicapa de borofeno responde a la necesidad de capturar la esencia del transporte electrónico para su implementación en situaciones más realistas. Este modelo permite incluir tanto los bordes armchair como zigzag de la bicapa de borofeno, además de un sistema con miles de átomos. Un modelo TB está constituido por un hamiltoniano efectivo para describir sistemas electrónicos interactivos, en particular aquellos que puedan representarse como una red de átomos considerablemente separados. En un escenario sin interacciones, la superposición de los electrones más externos conduce a una hibridación de los orbitales electrónicos; por ende, a la deslocalización de los estados de Bloch. El método TB, basado en el método LCAO (*Linear Combination of Atomic Orbitals*), se utiliza principalmente para calcular la estructura de bandas y los estados de Bloch de una partícula en materiales típicos. Al emplear funciones base similares a los estados atómicos, el método TB logra aproximar la función de onda molecular del cristal mediante una expansión en series, permitiendo así expresar el comportamiento del material en función de unos pocos parámetros ajustables, tal como lo realizaron Slater y Koster<sup>30</sup> y las funciones de Wannier máximamente localizadas<sup>31</sup>.

Dada la configuración electrónica del boro, el modelo TB para la bicapa de borofeno debe tener en cuenta las contribuciones de los orbitales  $S$ ,  $P_x$ ,  $P_y$  y  $P_z$ . Por su

---

<sup>30</sup> J. C. Slater y G. F. Koster. "Simplified LCAO Method for the Periodic Potential Problem". En: *Physical Review* 94.6 (jun. de 1954). Publisher: American Physical Society, págs. 1498-1524. DOI: 10.1103/PhysRev.94.1498.

<sup>31</sup> Gregory H. Wannier. "The Structure of Electronic Excitation Levels in Insulating Crystals". en. En: *Physical Review* 52.3 (ago. de 1937), págs. 191-197. DOI: 10.1103/PhysRev.52.191.

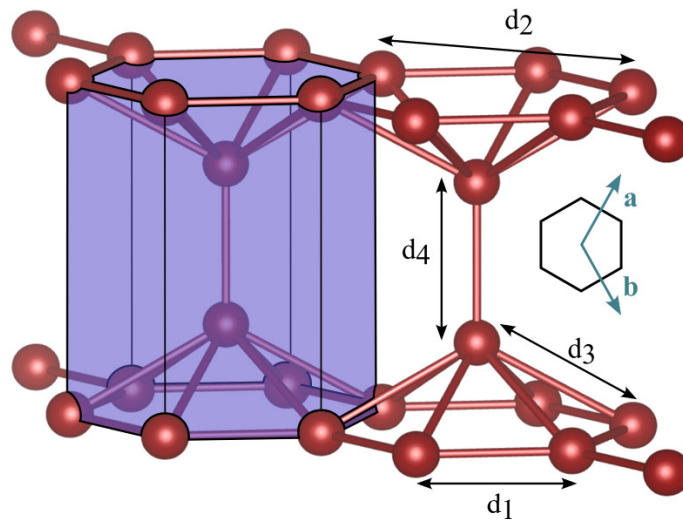


Figura 3. Figura esquemática de una red de bicapa de borofeno. La región sombreada muestra la celda primitiva y en la parte derecha de la figura, se definen los vectores de red **a** y **b**. Adicionalmente, se especifican las 4 distancias del modelo TB.

orientación, los orbitales  $P_z$  son responsables del enlace covalente que conecta las capas, formando pilares entre estas que se observan en la Figura 3, y están relacionados con factores como la estabilidad mecánica<sup>32</sup> y la distribución de estados<sup>33</sup>. El hamiltoniano TB proporciona la estructura electrónica del sistema a través de una representación en el espacio real, brindando así perspectivas sobre la naturaleza de los mecanismos de transporte.

<sup>32</sup> Zhenqian Pang et al. "Super-stretchable borophene". en. En: *EPL (Europhysics Letters)* 116.3 (nov. de 2016), pág. 36001. DOI: 10.1209/0295-5075/116/36001.

<sup>33</sup> Luo Yan et al. "Prediction of superconductivity in bilayer borophenes". en. En: *RSC Advances* 11.63 (2021). Publisher: Royal Society of Chemistry, págs. 40220-40227. DOI: 10.1039/D1RA08014H.

## 1.1. Hamiltoniano Tight-Binding para la bicapa de borofeno a partir del método de Slater y Koster

Se contruye un hamiltoniano Tight-Binding a través del esquema de Slater-Koster (SK)<sup>34</sup>, un algoritmo de ajuste no lineal de las bandas de energía. El método SK proporciona las integrales de solapamiento entre diferentes orbitales de los átomos, en términos de los coeficientes SK ( $V_{ss\sigma}$ ,  $V_{sp\sigma}$ ,  $V_{pp\sigma}$ ,  $V_{pp\pi}$ ) y la posición relativa entre los átomos de boro. Como se muestra en la figura 3, la distancia entre dos átomos de boro está indicada por  $d_i$ , en la que  $i$  abarca cuatro tipos de enlaces  $B-B$ . Las distancias después de optimizar las posiciones atómicas son:  $d_1 = 1.65\text{\AA}$ ,  $d_2 = 2.85\text{\AA}$ ,  $d_3 = 1.89\text{\AA}$  y  $d_4 = 1.70\text{\AA}$ <sup>35</sup>.

Para la bicapa de borofeno, se tiene una base de seis átomos de boro y asumimos cuatro orbitales armónicos cúbicos<sup>36</sup> por átomo. Los orbitales armónicos son diferentes de los orbitales usuales y están representados por la base de Lowdin de funciones de onda atómicas simétricamente ortogonalizadas  $\phi_{\nu,\nu'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{(m,n)\nu'})$ <sup>3738</sup>.

---

<sup>34</sup> Slater y Koster, ver n. 30.

<sup>35</sup> M. Nakhaee, S. A. Ketabi y F. M. Peeters. "Dirac nodal line in bilayer borophene: Tight-binding model and low-energy effective Hamiltonian". En: *Physical Review B* 98.11 (sep. de 2018). Publisher: American Physical Society, pág. 115413. DOI: 10.1103/PhysRevB.98.115413.

<sup>36</sup> T. Kwiatkowski, S. Olszewski y A. Wierzbicki. "Cubic harmonics in Cartesian coordinates". de. En: *International Journal of Quantum Chemistry* 11.1 (1977). \_eprint: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/qua.560110104>, págs. 21-47. DOI: 10.1002/qua.560110104.

<sup>37</sup> Per-Olov Löwdin. "On the Non-Orthogonality Problem Connected with the Use of Atomic Wave Functions in the Theory of Molecules and Crystals". En: *The Journal of Chemical Physics* 18.3 (dic. de 2004), págs. 365-375. DOI: 10.1063/1.1747632.

<sup>38</sup> Peter Y. Yu y Manuel Cardona. *Fundamentals of Semiconductors: Physics and Materials Properties*. en. Graduate Texts in Physics. Berlin, Heidelberg: Springer, 2010. DOI: 10.1007/978-3-642-00710-1.

Aquí,  $\nu$  recorre los orbitales  $S$ ,  $P_x$ ,  $P_y$  y  $P_z$  y  $\mathbf{r}_{(m,n)l'} = \mathbf{R}_{(m,n)} + \mathbf{r}_{l'}$  es la posición de un átomo de boro en la celda primitiva  $(m, n)$ .  $\mathbf{R}_{(m,n)}$  denota la posición de la celda primitiva  $(m, n)$  de la red de Bravais en términos de los vectores de red y  $\mathbf{r}_{l'}$  es la posición del átomo  $l'$  de boro dentro de la celda primitiva.

Los elementos independientes de la matriz de Hamiltoniano se pueden expresar como:

$$H_{\mu l, \nu l'}(\mathbf{k}) = \sum_{m,n} e^{i(\mathbf{r}_{(m,n)l'} - \mathbf{r}_l) \cdot \mathbf{k}} \times \langle \phi_{\mu l} | (\mathbf{r} - \mathbf{r}_l) | H | \phi_{\nu l'} (\mathbf{r} - \mathbf{r}_{(m,n)l'}) \rangle = \quad (1)$$

$$H_{\mu l, \nu l'}(\mathbf{k}) = \sum_{m,n} e^{i(\mathbf{r}_{(m,n)l'} - \mathbf{r}_l) \cdot \mathbf{k}} \times t_{\mu l, \nu l'}$$

Donde  $\mu$  y  $\nu$  corren sobre los orbitales de los átomos de boro  $l$  y  $l'$  en las posiciones  $\mathbf{r}_l$  y  $\mathbf{r}_{(m,n)l'} = \mathbf{R}_{(m,n)} + \mathbf{r}_{l'}$  en la celda primitiva  $(0, 0)$  y  $(m, n)$ , respectivamente. Aunque la suma corre sobre un número infinito de puntos discretos, para este modelo TB se incluye únicamente las celdas vecinas más cercanas.  $\mathbf{k}$  corre a lo largo de los principales puntos de simetría en la zona de Brillouin,  $K$ ,  $\Gamma$ , y  $M$ .

Los valores esperados  $t_{\mu l, \nu l'} = \langle \phi_{\mu l} | (\mathbf{r} - \mathbf{r}_l) | H | \phi_{\nu l'} (\mathbf{r} - \mathbf{r}_{(m,n)l'}) \rangle$  que representan el solapamiento orbital entre los orbitales  $\mu$  y  $\nu$  de los átomos de boro  $l$  y  $l'$ , llamados también parámetro de hopping, pueden ser calculados partiendo directamente de las funciones de onda atómicas de Löwdin conocidas. Sin embargo, el parámetro de hopping  $t_{\mu l, \nu l'}$  puede ser escrito en términos de los coeficientes de Slater-Koster (SK)<sup>39</sup> y los cosenos directores del vector a lo largo de la dirección de enlace  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_{(m,n)l'} - \mathbf{r}_l$  de la siguiente manera:

---

<sup>39</sup> Slater y Koster, ver n. 30.

$$\begin{aligned}
\langle s | H | s \rangle &= v_{ss\sigma} \\
\langle s | H | p_i \rangle &= n_i v_{sp\sigma} \\
\langle p_i | H | p_j \rangle &= (\delta_{ij} - n_i n_j) v_{pp\pi} + n_i n_j v_{pp\sigma}
\end{aligned} \tag{2}$$

donde

$$n_i = \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{e}_i}{|\mathbf{r}|}, \quad i, j = 1, 2, 3 \tag{3}$$

Se ha simbolizado uno de los valores esperados como  $\langle \phi_{\mu l} | (\mathbf{r} - \mathbf{r}_l) | H | \phi_{\nu l'} (\mathbf{r} - \mathbf{r}_{(m,n)l'}) \rangle = \langle S | H | P_i \rangle$ , en el cual la función  $\phi_{\mu}$  es un orbital tipo  $S$  y la  $\phi_{\nu}$  es un orbital tipo  $P$  entre dos átomos  $l$  y  $l'$ . Se debe utilizar la regla del número cuántico angular ( $\gamma$ ),  $\langle \gamma | H | \gamma' \rangle = (-1)^{\gamma+\gamma'} \langle \gamma' | H | \gamma \rangle$ , para evaluar el conjugado complejo.

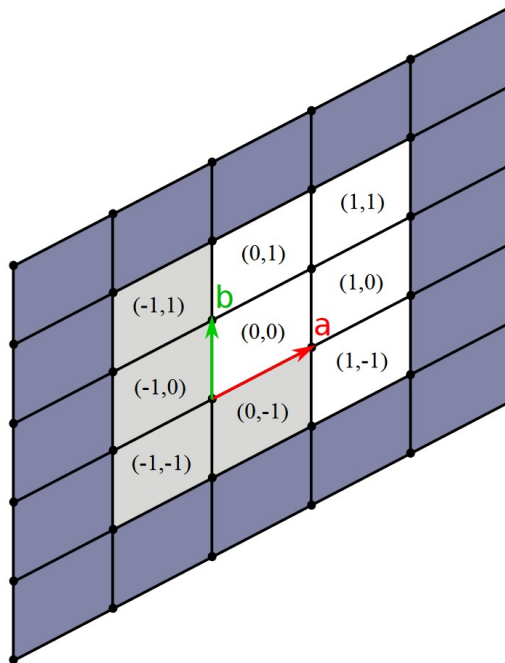


Figura 4. Esquema de interacciones entre primeros vecinos para el modelo TB de la bicapa de borofeno. Fuente: [28].

Este hamiltoniano TB, (ecuación 1), a primeros vecinos puede entenderse como una matriz formado por 9 submatrices organizadas como se muestra en la figura 4. Cada una de estas representa la interacción entre átomos de las celdas vecinas y están constituidas por sub-submatrices de 4x4 asociadas a cada orbital de los átomos correspondientes. Los elementos  $t_{\mu l, \mu l}$  de la diagonal en la matriz  $H_{00}$ , corresponden a las energías de sitio o potencial de ionización de cada orbital. El resto son los parámetros de hopping  $t_{\mu l, \nu l'}$  entre los orbitales  $\mu$  del átomo  $l$  de la celda  $(0, 0)$  y orbital  $\nu$  del átomo  $l'$  de la celda  $(m, n)$ .

## 1.2. Estructura de bandas a partir del TB

De esta manera, para construir la estructura de bandas TB se resuelve la ecuación generalizada de valores propios para un solo electrón:

$$\sum_{\mu, l} (H_{\mu l, \nu l'} - E_k \delta_{\mu \nu} \delta_{ll'}) C_{\nu l'}(\mathbf{k}) = 0, \quad (4)$$

Donde  $E_k$  son los valores propios de  $H$  y  $C_{\nu l'}(\mathbf{k})$  son los pesos asociados a cada estado  $\phi_{\nu l'}$ . Por lo tanto, se genera una estructura de bandas con número de bandas igual al numero de átomos de la celda unitaria multiplicado por el de orbitales. Así, para la bicapa de borofeno bajo condiciones periódicas generamos una estructura de bandas con 24 bandas.

## 1.3. Optimización de los parámetros de hopping a partir del ajuste de la estructura de bandas TB con la obtenida por DFT

Los coeficientes de SK ( $V_{ss\sigma}$ ,  $V_{sp\sigma}$ ,  $V_{pp\sigma}$ ,  $V_{pp\pi}$ ) , que son parámetros desconocidos, se determinan mediante un ajuste no lineal de mínimos cuadrados que minimiza

la diferencia ( $\delta\epsilon$ ) entre los autovalores de las bandas de energía obtenidas con el modelo Tigt-Binding  $E_k^{TB}(j)$  y los autovalores de las bandas de energía obtenidas por el método DFT  $E_k^{DFT}(j)$ :

$$\delta\epsilon = \sum_k \sum_{j=1}^N \frac{[E_k^{TB}(j) - E_k^{DFT}(j)]^2}{\sigma_j^2}, \quad (5)$$

Aquí,  $\delta\epsilon$  es simplemente una suma de residuos al cuadrado ponderados, donde  $j$  etiqueta los autovalores para un punto  $k$ .

Este es un proceso auto-consistente que parte de unos parámetros SK arbitrarios  $\beta_0$ , transformados aleatoriamente un  $\delta_{1,i}$  resultando un conjunto de parámetros  $\beta_1$ , de los cuales se eligen aquellos que al calcular 5, resulta un menor  $\delta\epsilon$ . Paso seguido, se genera un nuevo conjunto  $\beta_2$  a partir de variaciones  $\delta_{2,i}$  de los mejores parámetros del conjunto anterior. El proceso se repite continuamente hasta obtener coeficientes SK  $\beta_{m,j}$  que reproduzcan la estructura de bandas con un  $\delta\epsilon$  menor o igual a la convergencia deseada. En la figura 5 se muestra un esquema de este proceso.

Para la bicapa de borofeno, utilizamos una malla regular de 700 puntos  $k$  en la zona de Brillouin irreducible. Para mejorar la aproximación, se otorga un peso mayor  $\sigma_j = 1$  a los autovalores  $j$  cercanos a los puntos de alta simetría.

Las bandas de energía obtenidas por el método DFT se obtuvieron del artículo *Dirac nodal line in bilayer borophene: Tight-binding model and low-energy effective Hamiltonian*<sup>40</sup>. En dicho artículo, se empleó la Teoría del Funcional de la Densidad,

---

<sup>40</sup> Nakhaee, Ketabi y Peeters, "Dirac nodal line in bilayer borophene", ver n. 35.

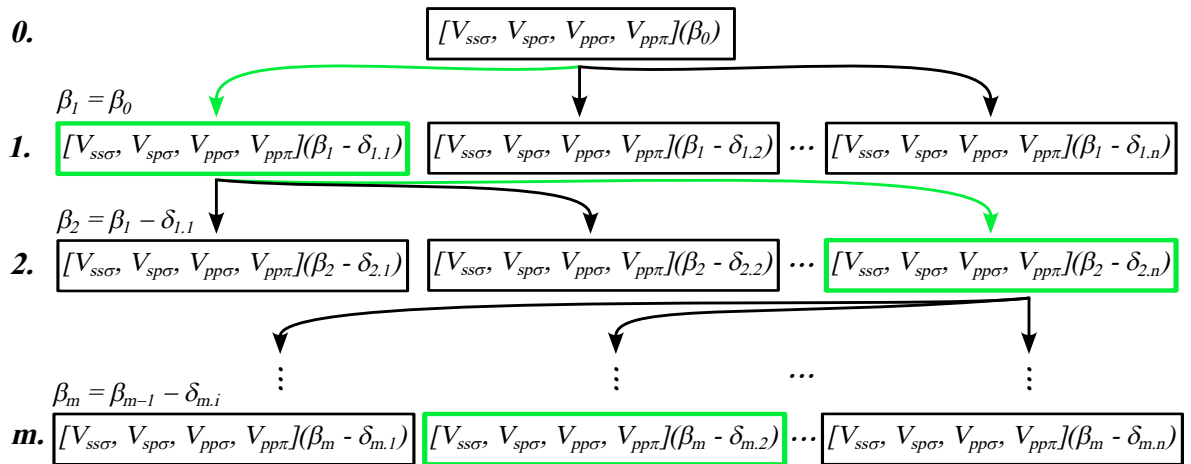


Figura 5. Figura esquemática del método de Slater-Koster para la obtención de los parámetros de hopping necesarios para la construcción del hamiltoniano TB.

implementada por medio del software OpenMX<sup>41</sup>, para determinar la estructura de bandas que modela dos capas de borofeno unidas químicamente por un enlace covalente.

Los coeficientes de Slater-Koster obtenidos y las energías de sitio para los átomos de boro se presentan en la Tabla 1. Por otro lado, las matrices completas para cada parámetro de solapamiento se proporcionan en el anexo 1.

#### 1.4. Conos de Dirac y línea nodal

Utilizando la Ecuación 4 y los coeficientes mostrados en la Tabla 1, se calcula la estructura de bandas que muestra la figura 6. Dicha figura compara la estructura de bandas optimizada obtenida mediante el modelo de Tight Binding y la estructura de

<sup>41</sup> Steven Boker et al. "OpenMx: An Open Source Extended Structural Equation Modeling Framework". en. En: *Psychometrika* 76.2 (abr. de 2011), págs. 306-317. DOI: 10.1007/s11336-010-9200-6.

Parámetros SK	$V_{ss\sigma}$	$V_{sp\sigma}$	$V_{pp\sigma}$	$V_{pp\pi}$	Orbital	Energía de sitio
$d_1$	-34.198	7.863	3.472	-2.447	$S$	-4.127
$d_2$	16.855	-2.405	-0.412	-0.088	$P_y$	2.535
$d_3$	1.342	1.944	2.375	-0.993	$P_z$	4.550
$d_4$	8.677	-0.141	1.484	1.455	$P_x$	2.361

Cuadro 1. Parámetros optimizados de Slater-Koster para cada distancia  $d_i$  y energías de sitio de los orbitales  $S$  y  $P_i$ . Las unidades están dadas en [eV].

bandas calculada por el método DFT. Cabe resaltar que el modelo de Tight Binding logra explicar la estructura de bandas calculada por DFT en la vecindad del nivel de Fermi, presentando un buen ajuste en cualquier punto  $k$  de toda la zona de Brillouin, con una diferencia en los autovalores  $\delta\epsilon = 0.001$ .

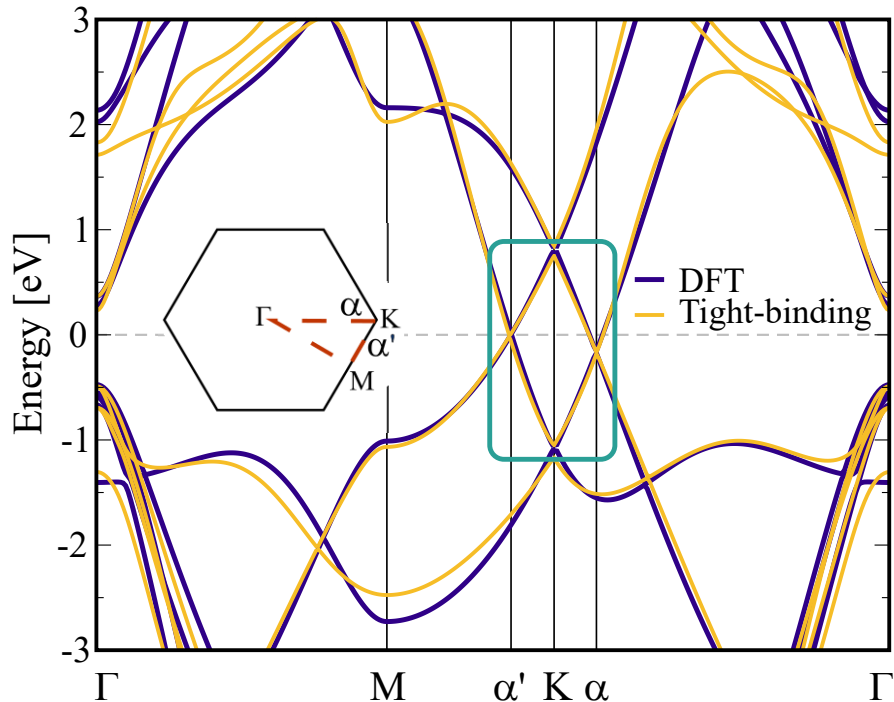


Figura 6. Comparación de la estructura de bandas para una red periódica de bicapa de borofeno utilizando DFT y el hamiltoniano TB. En verde se resalta la zona de los conos de Dirac y la línea nodal.

El espectro electrónico de la bicapa de borofeno, en las proximidades de la energía de Fermi ( $E=0$  eV), revela la existencia de cuatro ramas con dispersión lineal, las cuales se pueden apreciar en la Figura 6, enmarcadas dentro de un recuadro verde. Este espectro es indicativo de la formación de dos conos de Dirac que se cruzan en los puntos  $\alpha$ , situados por encima y por debajo del nivel de Fermi. Al examinar el resultado para las superficies de energía en el espacio recíproco tridimensional, se identifica el comportamiento característico de la formación de una línea nodal, definiéndose esta como una serie de puntos donde la banda de conducción y la banda de valencia se cruzan sin que exista una gap de energía entre ellas ni se hibridicen, lo que da lugar a un estado semimetálico protegido por las simetrías del material, en este caso, simetría especular entre capas<sup>42</sup>.

En el contexto de la bicapa de borofeno, la existencia de un estado semimetálico se manifiesta a través de las características únicas de su estructura de bandas. Los conos de Dirac presentes, centrados en el punto de alta simetría  $K$ , son una firma distintiva de este estado, mostrando la relevancia de las propiedades topológicas en el comportamiento electrónico del material.

Es importante destacar que, además de los conos de Dirac y la línea nodal que generan, no se observan estados disponibles en otras regiones del espacio recíproco para energías cercanas a la energía de Fermi. Este aspecto es crucial, ya que permite la manifestación de fenómenos físicos significativos, asociados a estas bandas particulares, ofreciendo un terreno fértil para la investigación de estados topológicos

---

<sup>42</sup> Hassan Y. Aluhairan, H. M. Abdullah y U. Schwingenschlögl. "Transport and confinement in bilayer chiral borophene". en. En: *2D Materials* 9.2 (abr. de 2022). Publisher: IOP Publishing, pág. 025031. DOI: 10.1088/2053-1583/ac5f6c.

de la materia<sup>43</sup>.

La bicapa de borofeno se presenta como un sistema fascinante, exhibiendo un estado semimetálico con características topológicas únicas. Los conos de Dirac y la línea nodal, elementos centrales de este estudio, juegan un papel crucial en la determinación de las propiedades electrónicas del material, abriendo puertas hacia nuevas aplicaciones y estudios más profundos en el ámbito de los estados topológicos de la materia.

### 1.5. Estructura de bandas para una bicapa de borofeno finita: Efectos del tamaño y de los bordes armchair y zigzag

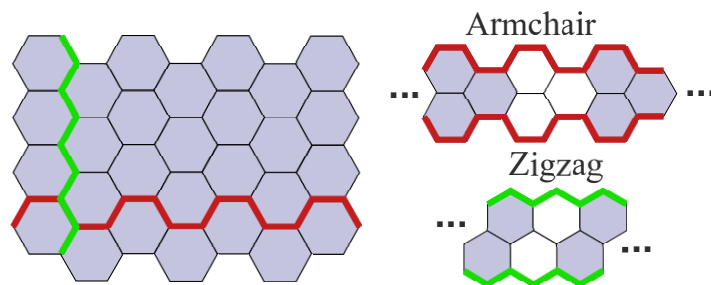


Figura 7. Tipos de cortes en una red hexagonal, como la bicapa de borofeno. En rojo(verde) se delinean los bordes armchair(zigzag). A la derecha se plantean dos nanocintas semi-infinitas, donde los puntos indican periodicidad en esa dirección.

Al cortar una hoja infinita de bicapa de borofeno, se pueden obtener dos tipos de bordes, como se ilustra en la Figura 7. Se presentan nanocintas con ambos tipos de bordes, cada uno delineado con un color distinto.

---

<sup>43</sup> Burkov, ver n. 2.

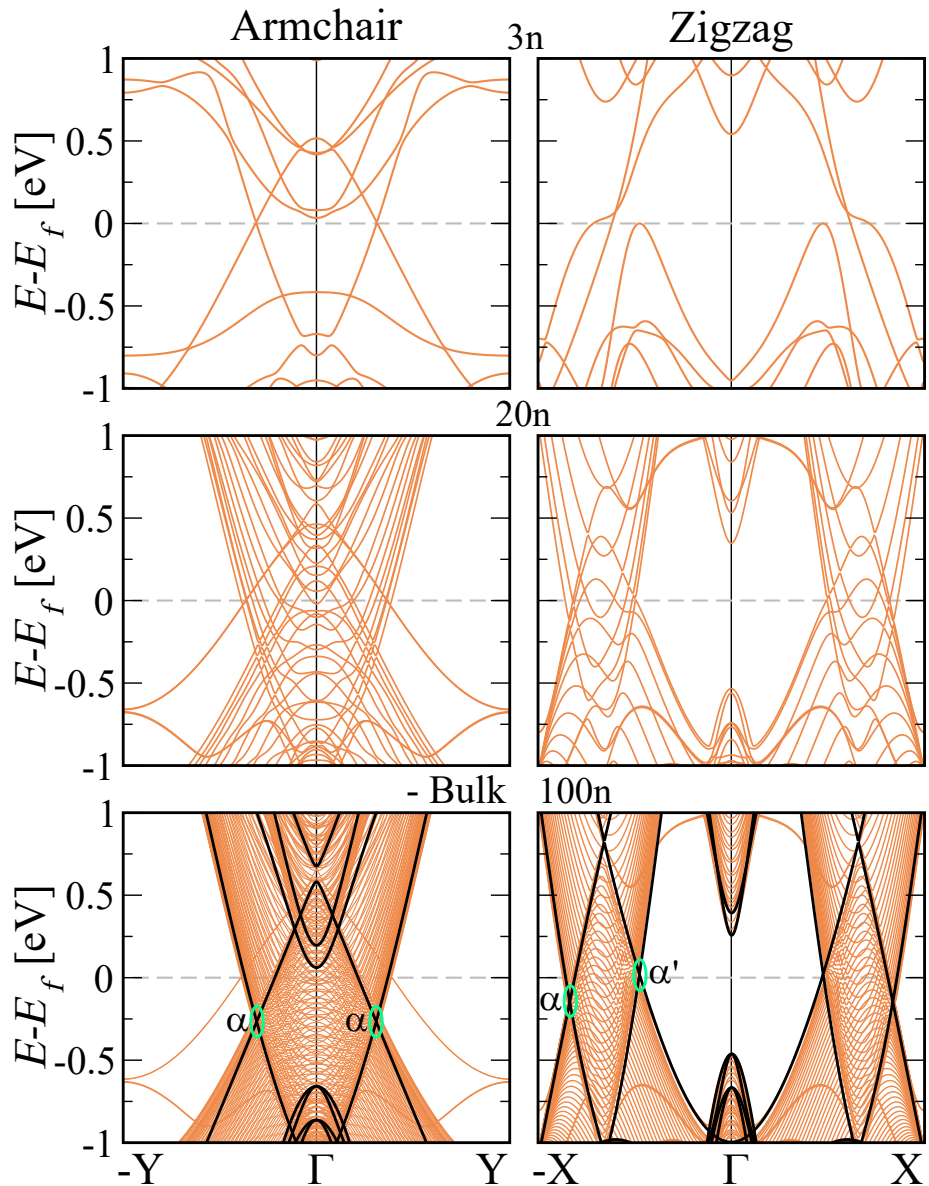


Figura 8. Estructura de bandas para nanocintas armchair y zigzag de 3, 20 y 100 celdas de ancho. Para el sistema más grande se compara el resultado con las bandas del sistema periódico (Bulk), teniendo en cuenta efectos de folding. Los puntos  $\alpha$  corresponden a cortes de la línea nodal.

Debido a que el sistema TB con condiciones periódicas exhibe dispersión electrónica en concordancia con el modelo DFT, es pertinente iniciar el análisis de los efectos estructurales en el sistema. Utilizando la ecuación de valores propios 4, se calcula

la estructura de bandas para un amplio intervalo de sistemas con anchos entre 3 Å y 60 nm y bordes armchair y zigzag.

Como resultado, se encuentra que, incluso cuando para la red periódica en dirección  $\Gamma \rightarrow M$  no hay estados disponibles cerca a la energía de Fermi, con una diferencia entre bandas de conducción y valencia de 0.754 [eV] para  $\Gamma$ , ninguna nanocinta con borde armchair mantiene un band gap.

Posteriormente, al analizar los resultados en función del tamaño, se identifican dos regiones de comportamiento, distinguiendo una transición entre anchos *pequeños* y *grandes*. Comenzando por los primeros, en la parte superior de la Figura 8 están las estructuras de bandas para un ancho de 3 celdas unitarias. Ambos bordes mantienen una baja concentración de bandas a nivel de Fermi. Sin embargo, las nanocintas armchair preservan mejor la dispersión lineal propia de los conos de Dirac, mientras que aquellas con bordes zigzag pierden los estados con esta característica.

Ante el aumento del ancho de las nanocintas, se identifica una transición con tamaños cercanos a 20 celdas, aproximadamente 5 nm. Con sistemas zigzag, se distingue un aumento progresivo de bandas cruzando el nivel de Fermi, con mínimos y máximos localizados en el punto equivalente K, hasta recuperar el cruce de los conos de Dirac. Incluso se evidencian las oscilaciones en energía de la línea nodal, donde dos puntos  $\alpha$  y  $\alpha'$ , asociados a esta y ubicados en partes no equivalentes de la zona de Brillouin, tienen energías distintas. Por su lado, las nanocintas armchair mantienen una dispersión propia de los conos de Dirac, con un aumento en la densidad de bandas entre los estados de dispersión lineal. Los puntos de la línea nodal  $\alpha$  en este caso son equivalentes y se dan a la misma energía.

Para tamaños mayores a 5 nm, donde los efectos del rompimiento de periodicidad por la presencia de bordes son despreciables, ambos tipos de borde muestran una dispersión electrónica comparable a la del sistema *bulk*, como se muestra para el último ancho de la Figura 8, correspondiente a 100 celdas unitarias, aproximadamente 25 nm. Tamaños aún mayores únicamente ocasionan un aumento en la densidad de bandas.

## 2. Propiedades electrónicas y de transporte en una bicapa de borofeno

En los últimos años se ha observado un creciente interés en el estudio del borofeno, un material bidimensional compuesto únicamente por átomos de boro, debido a sus novedosas propiedades electrónicas y de transporte. En particular, se ha puesto atención a las bicapas de borofeno<sup>44,45,46</sup>, donde la simetría y la configuración de las capas juegan un papel crucial en la determinación de las propiedades electrónicas y de transporte del sistema. Este trabajo se enfoca en analizar dichas propiedades, haciendo uso del método tight binding y el formalismo de Landauer-Büttiker, complementado con funciones de Green.

Una vez establecido el hamiltoniano mediante el método tight binding, (capítulo 1), es posible calcular las propiedades de transporte. El método tight binding resulta ser de gran utilidad en el estudio de materiales como el borofeno en su forma bicapa, ya que permite modelar la estructura electrónica considerando la superposición de funciones de onda de átomos aislados ubicados en cada sitio atómico.

Para el cálculo de las propiedades de transporte, empleamos el formalismo de Landauer-Büttiker en conjunto con las funciones de Green de la red. Este enfoque es particularmente efectivo para tratar sistemas mesoscópicos, en los cuales las propiedades cuánticas del transporte electrónico son dominantes. La aplicación

---

<sup>44</sup> Nakhaee, Ketabi y Peeters, “Dirac nodal line in bilayer borophene”, ver n. 35.

<sup>45</sup> Albuhairan, Abdullah y Schwingenschlögl, ver n. 42.

<sup>46</sup> Shao-Gang Xu et al. “Ideal Nodal Line Semimetal in a Two-Dimensional Boron Bilayer”. En: *The Journal of Physical Chemistry C* 123.8 (feb. de 2019). Publisher: American Chemical Society, págs. 4977-4983. DOI: 10.1021/acs.jpcc.8b12385.

del formalismo de Landauer-Büttiker, en combinación con el método recursivo de las funciones de Green, facilita la obtención de una descripción detallada de la conductancia en estos sistemas, abriendo las puertas a futuras investigaciones y aplicaciones en el campo de la nanotecnología y los materiales bidimensionales. Los cálculos numéricos se realizaron a través del lenguaje de programación *Python* utilizando la librería *Kwant*<sup>47</sup>.

## 2.1. Formalismo de Landauer-Büttiker

El método generalmente utilizado para estudiar el transporte electrónico en dispositivos o estructuras con dimensiones menores que la longitud de coherencia de fase es el formalismo de Landauer-Büttiker<sup>48,49</sup>. En la figura 9, se muestra la configuración utilizada, donde contactos semi-infinitos están conectados a la bicapa de borofeno, que actúa como una región de dispersión para los electrones. Esto lleva a expresar la conductancia de la muestra como

$$G(E) = \frac{2e^2}{h} T(E), \quad (6)$$

donde  $E$  es la energía y  $T$  es la transmisión, que está relacionada con la probabilidad de transmisión del electrón a través del dispositivo.

---

<sup>47</sup> Groth et al., ver n. 1.

<sup>48</sup> Rolf Landauer. "Conductance from transmission: common sense points". en. En: *Physica Scripta* 1992.T42 (ene. de 1992), pág. 110. DOI: 10.1088/0031-8949/1992/T42/020.

<sup>49</sup> M. Büttiker. "Four-Terminal Phase-Coherent Conductance". En: *Physical Review Letters* 57.14 (oct. de 1986). Publisher: American Physical Society, págs. 1761-1764. DOI: 10.1103/PhysRevLett.57.1761.

Para definir los flujos de ondas transmitidas y reflejadas es importante que haya coherencia de fase, razón por la cual los contactos semi-infinitos tienen que ser invariantes en la dirección del flujo de electrones. En este caso, y sin pérdida de generalidad, consideramos los contactos como bicapas de borofeno semi-infinitas, descritas bajo el mismo hamiltoniano tight-binding.

En la aproximación de Landauer-Büttiker, el transporte electrónico en sistemas mesoscópicos se simplifica al cálculo de la transmisión del dispositivo. Para este pro-

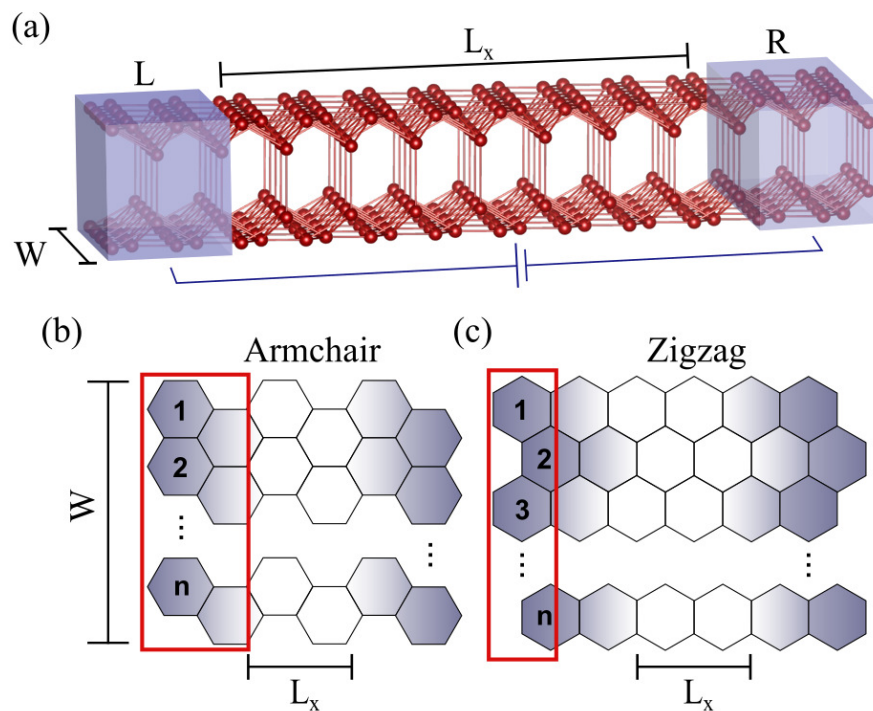


Figura 9. Figura esquemática de la configuración del sistema para estudio de las propiedades de transporte en sistemas finitos. Esquema de nanocintas con bordes armchair (b) y zigzag (c) donde el recuadro rojo enmarca la celda expandida del sistema finito.  $L_x$  es constante mientras que  $W$  es el ancho variable medido en número de celdas primitivas,  $n$ .

pósito, se puede emplear la ecuación de Caroli<sup>50</sup>:

$$T_{LR} = \text{Tr}[\Gamma_L G_{LR}^r \Gamma_R G_{LR}^a], \quad (7)$$

donde  $\text{Tr}$  representa la traza de una matriz,  $G_{LR(RL)}^{r(a)}$  es la función de Green retardada (avanzada) entre los contactos  $L(R)$  y  $R(L)$ , y  $\Gamma_{L(R)} = i[\Sigma_{L(R)} - \Sigma_{L(R)}^\dagger]$ , siendo  $\Sigma_{L(R)}$  la autoenergía del contacto  $L(R)$ . Para sistemas con simetría de inversión temporal, se cumple que  $G_{RL}^a = [G_{LR}^r]^\dagger$ .

## 2.2. Funciones de Green en la bicapa de borofeno

El operador de función de Green,  $G^r$ , se define a través de la ecuación<sup>51</sup>:

$$[E - H]G^r = 1, \quad (8)$$

cuya solución formal es  $G^r = [E - H]^{-1}$ , definida para todos los valores de energía  $E$ , excepto para las autoenergías del Hamiltoniano  $H$ . Para superar esta limitación, se define el operador de función de Green mediante el límite:

$$G^\pm = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left[ \frac{1}{E - H \pm i\eta} \right], \quad (9)$$

donde  $\eta$  es un número infinitesimal positivo. Los signos positivo y negativo representan diferentes maneras de evitar los polos de la ecuación  $G = [E - H]^{-1}$ , dando lugar a soluciones de causalidades distintas.  $G^+ = G^r$  es la solución retardada, co-

---

<sup>50</sup> C. Caroli et al. "Direct calculation of the tunneling current". en. En: *Journal of Physics C: Solid State Physics* 4.8 (jun. de 1971), pág. 916. DOI: 10.1088/0022-3719/4/8/018.

<sup>51</sup> Büttiker, ver n. 49.

respondiente a la solución causal, mientras que  $G^- = G^a$  es la solución avanzada, correspondiente a la solución anticausal.

En nuestro caso, el Hamiltoniano  $H$  representa la bicapa de borofeno (región de dispersión) acoplado a dos contactos semi-infinitos, como se muestra en la figura 9. Este Hamiltoniano se representa en el formalismo de tight binding con interacción entre primeros vecinos, utilizando cuatro orbitales por átomo, de la forma:

$$H = \sum_l \sum_\mu E_{l,\mu} |l, \mu\rangle \langle l, \mu| - \sum_{m,n} \sum_{l,l'} \sum_{\mu,\nu} t_{m,n;l,l';\mu,\nu} |0, 0; l, \mu\rangle \langle m, n; l', \nu|, \quad (10)$$

donde  $\mu$  y  $\nu$  corresponden a los orbitales sobre los átomos de boro  $l$  y  $l'$ , respectivamente.  $l$  se encuentra en la celda unitaria  $(0, 0)$  y  $l'$  en la celda  $(m, n)$ , en términos de los vectores de red,  $m$  en la dirección longitudinal y  $n$  en la dirección transversal. El contacto izquierdo se define para  $-\infty \leq m \leq 0$ , el dispositivo se encuentra entre  $1 \leq m \leq L_x$ , y el contacto derecho para  $m \geq L_x + 1$ . El número de celdas en la dirección transversal es  $n$ . Por simplicidad, utilizamos el mismo valor para los contactos y el dispositivo. Definimos  $\langle m, n | G | m', n' \rangle = \langle m | G(n, n') | m' \rangle = G_{mm'}$  como la función de Green entre la columna  $m$  y la columna  $m'$ .

### 2.3. Conductancia en una bicapa de borofeno con bordes (nanocinta)

En el estudio basado en el transporte coherente, se establece que la conductancia está intrínsecamente ligada a los estados disponibles. Específicamente, la cantidad de canales en la dispersión electrónica en cada nivel energético determina el valor de la conductancia. Esta relación es consecuencia de no introducir pérdidas de energía causadas por imperfecciones en los contactos o por interacciones entre los electrones y la estructura de la nanocinta.

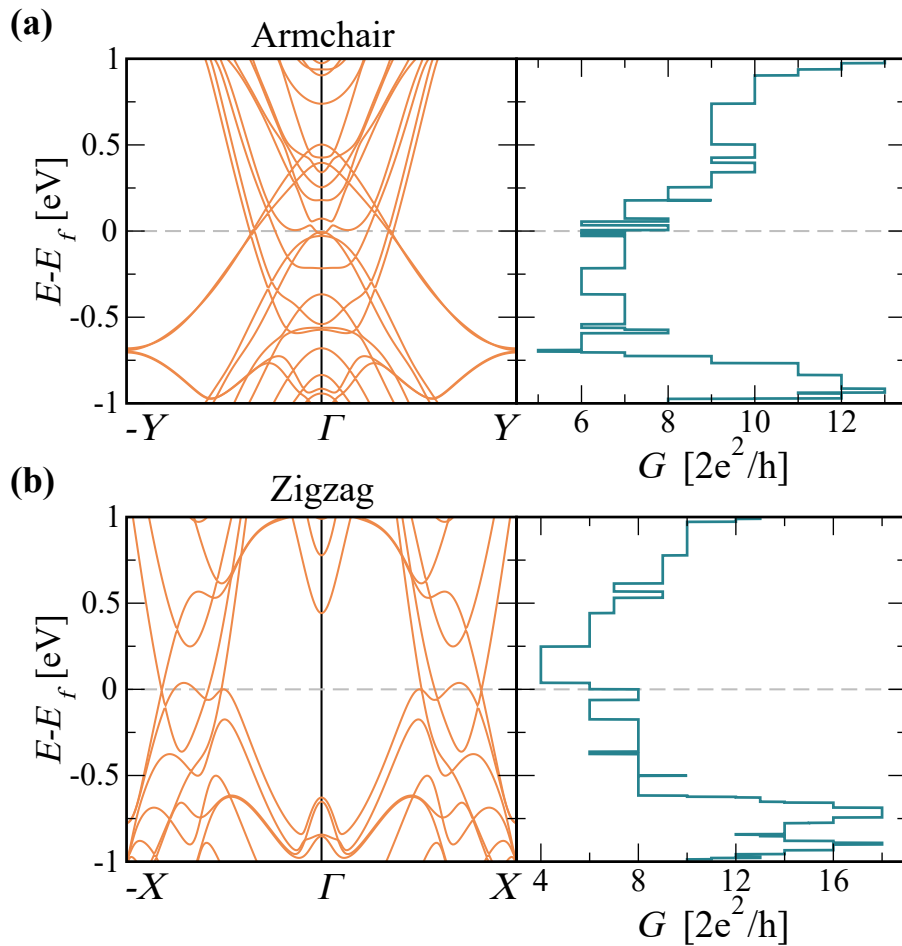


Figura 10. Estructura de bandas y conductancia en función de la energía para nanocintas armchair (a) y zigzag (b) con 6 celdas de ancho. La orientación de las gráficas permite trazar una línea horizontal para cada energía donde se cumple que el valor en conductancia es igual al número de bandas con pendientes del mismo signo.

En la figura 10, se muestra la estructura de bandas y la conductancia en función de la energía para nanocintas de tipo armchair y zigzag con seis celdas de ancho. A través de esta representación, es posible establecer la conexión entre la conductancia y la estructura de bandas. Tanto en sistemas armchair como zigzag, se observa que el valor de la conductancia normalizado a  $\frac{2e^2}{h}$  es igual al número de bandas con ve-

locidad positiva,  $N$ , en concordancia con la expresión para conductancia balística<sup>52</sup>  $G_B = \frac{q^2}{h}M$ , donde  $q$  es la carga del electrón y  $M$  es el número de canales disponibles, que al considerar que cada banda aporta dos canales degenerados puesto que no se consideran los efectos del spin, resulta en  $G_B = \frac{2e^2}{h}N$ . Se observa una reducción en la conductancia cercana al nivel de Fermi; a medida que aumenta el ancho de la nanocinta, esta diferencia en la conductancia se acentúa, en relación con el aumento de bandas en puntos de la zona de Brillouin fuera de los conos de Dirac que no aportan cerca al nivel de Fermi, (capítulo 1.5).

La cantidad de canales disponibles influye directamente en la conductancia para cada nivel energético, como se confirma al examinar la figura 10. Esta observación lleva a concluir que hay una reducción en la conductancia para energías cercanas al nivel de Fermi, debido a la ausencia de estados en la mayoría de la zona de Brillouin, exceptuando aquellos cercanos al punto  $K$ . Esta particularidad se manifiesta al analizar la estructura de bandas del sistema periódico, representada a través de los puntos de alta simetría  $\Gamma$ ,  $M$  y  $K$ , ilustrados en la figura 6, donde a nivel de Fermi únicamente se encuentran los conos de Dirac centrados en  $K$ , mientras que alrededor de  $\Gamma$  y  $M$  se mantiene un band gap de por lo menos 0.754 eV.

#### **2.4. Efectos del tamaño y bordes sobre la conductancia en el punto de neutralidad de carga**

Los semimetales de Dirac, como el grafeno, exhiben una conductancia constante sobre el nivel de Fermi ante variaciones en el tamaño de las nanocintas debido a que

---

<sup>52</sup> Supriyo Datta. *Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport—Part A: Basic Concepts*. World Scientific, 2017.

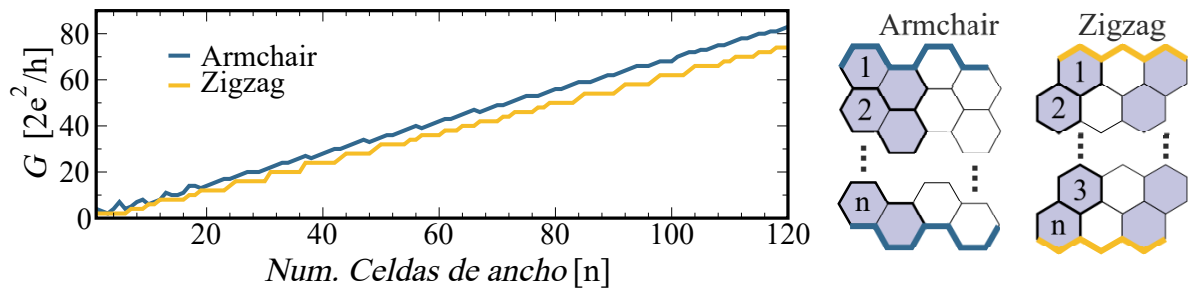


Figura 11. Conductancia en función del número de celdas de ancho para nanocintas armchair y zigzag. A la derecha se muestra un esquema de cada tipo de nanocinta, donde el borde delineado en azul corresponde a armchair y en amarillo a zigzag. También se ejemplifica el conteo de celdas,  $n$ , para cada sistema.

las bandas de valencia y conducción poseen un único punto de contacto, los conos de Dirac<sup>53</sup>. Sin embargo, la bicapa de borofeno, catalogada como DNLS, presenta un cruce no hibridado de los conos de Dirac, es decir, el contacto entre bandas de valencia y conducción pasa a ser una línea no discreta. Ante el aumento del tamaño de la nanocinta y por ende, disminución del tamaño de la celda unitaria en el espacio recíproco, los efectos de folding generan una tendencia a incrementar la conductancia con el aumento del ancho de la nanocinta, incluso en la energía de fermi o punto de neutralidad de carga.

En la figura 11, se visualiza la conductancia para la energía de Fermi en función del ancho del sistema. Las nanocintas con más de 20 celdas de ancho manifiestan un incremento estable en la conductancia, relacionado con la aparición de nuevos canales a causa de una celda unitaria más grande y por ende, con mayor aporte electrónico; con diferencias notables entre los bordes armchair y zigzag. Específicamente, las nanocintas armchair exhiben aumentos de  $1G_0$  con disminuciones

<sup>53</sup> D. A. Bahamon, A. L. C. Pereira y P. A. Schulz. "Third edge for a graphene nanoribbon: A tight-binding model calculation". En: *Physical Review B* 83.15 (abr. de 2011). arXiv:1008.1211 [cond-mat], pág. 155436. DOI: 10.1103/PhysRevB.83.155436.

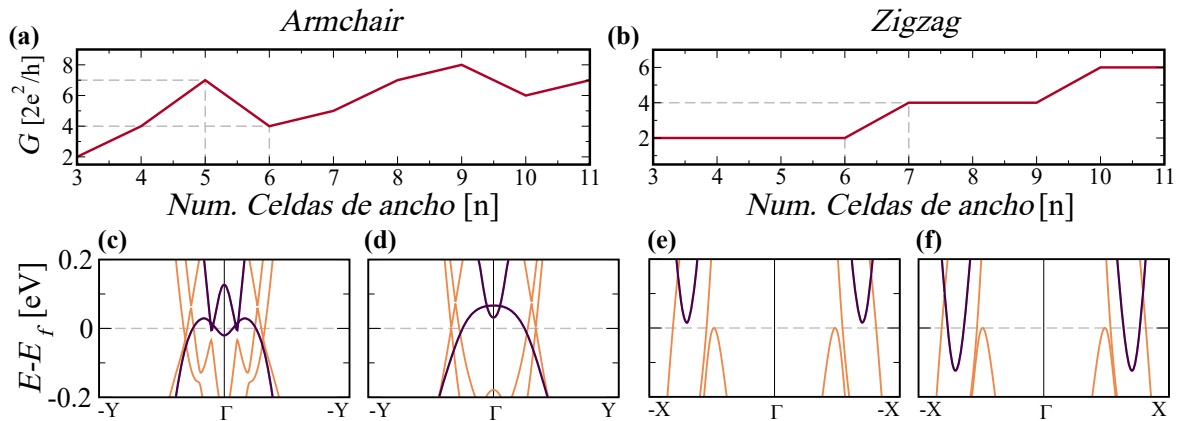


Figura 12. Conductancia en función del número de celdas unitarias para nanocintas armchair (a) y zigzag (b). Para los tamaños señalados con líneas punteadas se muestran las estructuras de bandas del sistema asociado: nanocinta armchair de 5(c) y 6(d) celdas; nanocinta zigzag de 6(e) y 7(f) celdas.

ocasionales de la misma magnitud, mientras que las nanocintas zigzag muestran aumentos ocasionales de  $2$  o  $4G_0$ . Para anchos menores a 20 celdas, las nanocintas zigzag mantienen este comportamiento, mientras que las nanocintas armchair pierden estabilidad, presentando oscilaciones de hasta  $\pm 3G_0$ .

La figura 12 permite la comprensión de los cambios en la conductancia en función del tamaño a través de la relación entre conductancia y estructura de bandas, resaltando en un color oscuro aquellas bandas vinculadas al cambio de conductancia. En nanocintas zigzag, al expandir el tamaño del sistema, bandas parabólicas con energías mayores o menores, se aproximan al nivel de Fermi, como en la figura 12f, lo que ocasiona aumentos en conductancia en pasos de  $2G_0$  o incluso  $4G_0$ , cuando ocurre desde ambos extremos. Para las nanocintas armchair, las figuras 12c y 12d, muestran la pérdida de canales al nivel de Fermi debido a los cambios en la dispersión electrónica entre dos tamaños consecutivos, donde una banda aumenta su energía mínima, lo que hace que ya no aporte a nivel de Fermi, mientras que la otra pierde oscilaciones que añadían canales al sistema, obteniendo una disminución en

conductancia de  $3G_0$ .

El método de las funciones de Green no solo permite calcular la transmisión  $T(E)$ , sino también la densidad local de estados y la densidad de corriente local<sup>54</sup>. Ambas magnitudes proporcionan información esencial sobre la dinámica de los portadores de carga y la interacción entre las capas del material.

## 2.5. Densidad local de estados

La densidad local de estados (LDOS) se puede evaluar a través de la función de Green exacta en un sitio dado:

$$\rho(n, j; E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} [G'_{n,n}(j, j; E)]. \quad (11)$$

La LDOS permite la evaluación de la densidad de carga local, que se puede calcular a través de la expresión

$$n_c(n, j; E_F) = \frac{1}{A} \int_{\mu(n,j)}^{E_F} dE \rho(n, j; E),$$

donde  $A$  es el área de la capa y  $\mu(n, j)$  denota el potencial químico local. Nótese que en las regiones tipo n,  $E_F > \mu$  y por lo tanto, la integral es sobre energías positivas (“electrones”), mientras que en regiones tipo p,  $E_F < \mu$  y con ello, la integral es sobre energías negativas (“huecos”).

---

<sup>54</sup> Efthimios Kaxiras y John D. Joannopoulos. *Quantum Theory of Materials*. en. ISBN: 9781139030809 Publisher: Cambridge University Press. Abr. de 2019. DOI: 10.1017/9781139030809; Supriyo Datta. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge Studies in Semiconductor Physics and Microelectronic Engineering. Cambridge: Cambridge University Press, 1995. DOI: 10.1017/CB09780511805776.

## 2.6. Densidad de corriente local

La densidad corriente entre dos sitios vecinos de coordenadas  $(n, j)$  y  $(n', j')$  se obtiene utilizando el método de ecuaciones de movimiento para funciones de Green fuera de equilibrio:

$$I_{(n,j) \rightarrow (n',j')} = -\frac{2e}{h} \int dE [U_{n,n'}(j, j') G_{n',n}^{<}(j', j) - U_{n',n}(j', j) G_{n,n'}^{<}(j, j')], \quad (12)$$

donde  $G^{<}$  es la función de Green lesser del sistema. Para el modelo tight-Binding de la bicapa de borofeno, hay dos situaciones a considerar: la corriente intra-capa (en la misma capa) y la corriente inter-capa. Para calcular el campo de densidad de corriente, se definió la corriente vectorial local, en el sitio, saliente como:

$$\mathbf{I}_{n,j} = \sum_{\pi', j'} \mathbf{a}_{(n,j) \rightarrow (n',j')} I_{(n,j) \rightarrow (n',j')}, \quad (13)$$

donde la suma es sobre los sitios  $(n', j')$  que son vecinos más cercanos al sitio  $(n, j)$  y  $\mathbf{a}_{k \rightarrow k'}$  es el vector entre los sitios  $k$  y  $k'$ . Nótese que esta corriente vectorial local no necesariamente se alinea con ninguno de los enlaces que salen del sitio  $(n, j)$ .

En la figura 13 se muestra, la estructura de bandas, la densidad de corriente y LDoS para nanocintas armchair y zigzag con 6 celdas unitarias de ancho, evidenciando sus características a la energía de Fermi ( $E=0$  eV). Todas las propagaciones de estas magnitudes se dan de izquierda a derecha, como resultado de la orientación en este sistema mesoscópico de la zona de dispersión y contactos, figura 9a. En la figura 13, se usan dos escalas de colores, donde el naranja representa la densidad de corriente y el azul la LDoS, proporcionando una interpretación visual clara de las

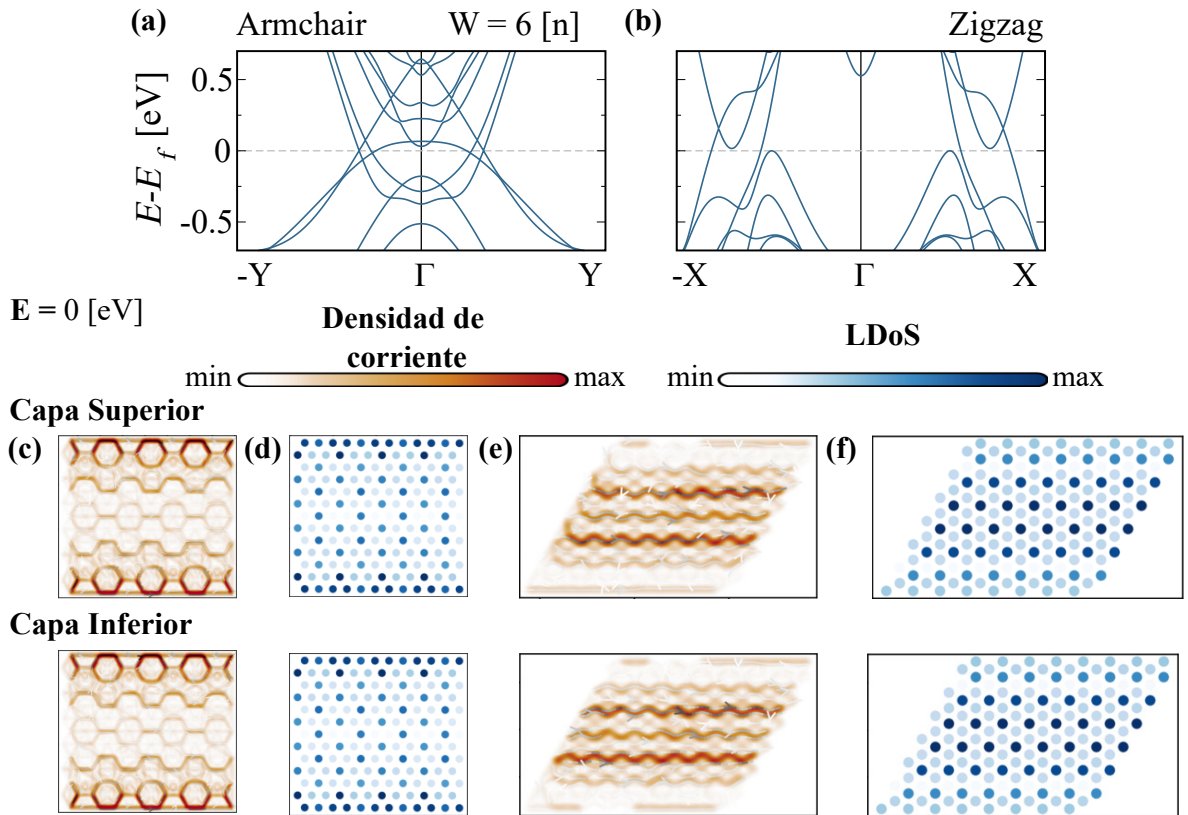


Figura 13. Estructura de bandas (*a, b*), densidad de corriente (*c, e*) y LDoS (*d, f*) para nanocintas armchair y zigzag de 6 celdas unitarias de ancho a energía de Fermi, respectivamente. La escala de colores para densidad de corriente (naranja) y LDoS (azul) hace referencia a diferentes intensidades.

intensidades y distribuciones de estas magnitudes.

El origen de los materiales topológicos yace en la presencia de simetrías específicas, como la simetría traslacional, especular o de inversión temporal. Cuando se introduce un borde se rompe la simetría traslacional, lo que puede generar estados de borde o superficie. En la bicapa de borofeno, la estructura de bandas muestra características únicas en función de la dirección considerada.

En la dirección armchair, figura 13a, los estados electrónicos se concentran alre-

dedor del punto de alta simetría  $\Gamma$ . Como resultado, se tiene una distribución de corriente sobre las capas para la cual se identifican estados de borde que son el producto de la cuantización de los niveles de energía y de la localización de la función de onda. En contraste, en la dirección zigzag, figura 13b, los niveles de energía se desplazan asimétricamente respecto al nivel de Fermi, de manera que se pierde el cruce de los Conos de Dirac, probablemente debido a la ruptura de simetría traslacional causada por los bordes. En esta orientación, los estados son más deslocalizados, extendiéndose hacia el interior de la nanocinta.

La densidad de corriente y la LDoS en la figura 13 muestran el rompimiento de simetría traslacional por tener bordes. En cuanto a la localización de los estados, es evidente que en la dirección armchair, estos estados están principalmente en los bordes, un fenómeno importante en materiales topológicos como la bicapa de borofeno. Por otro lado, en la dirección zigzag, se observa una mayor deslocalización de los estados, manifestándose más hacia el interior de la nanocinta, un resultado más típico en sistemas mesoscópicos. La comparativa entre la densidad de corriente y el LDoS, para el mismo tipo de borde, revela una distribución notablemente similar, lo que sugiere que la densidad de corriente puede servir como un buen proxy para el LDoS. Esta correspondencia se evidencia claramente en la figura 13, y debido a esto, en futuras discusiones nos referiremos exclusivamente a la densidad de corriente, sin pérdida de generalidad. Al analizar la distribución por capas en la bicapa de borofeno, encontramos que ambas capas, superior e inferior, exhiben comportamientos idénticos. Así, al describir las propiedades de este material, es suficiente concentrarse en la capa superior, como se ilustra en la figura 13. Estas localizaciones tienen implicaciones directas en el transporte electrónico del material, importantes al momento de diseñar sistemas que contengan bicapa de borofeno.

## 2.7. Modos normales de propagación en nanocintas de bicapa de borofeno

La estructura de bandas para la bicapa de borofeno en dirección armchair y zigzag es esencial para comprender su comportamiento electrónico. En este análisis, se destaca la densidad de corriente en las nanocintas armchair y zigzag a diferentes energías. La densidad de corriente, en sistemas mesoscópicos, ofrece una percepción directa de la movilidad y distribución electrónica.

En la figura 14, la representación superior central muestra la estructura de bandas para una bicapa de borofeno orientada en la dirección armchair. Dos líneas punteadas identifican las energías  $E = 0$  eV y  $E = 0.1$  eV. La sección inferior izquierda ilustra la densidad de corriente en una escala de colores para los cuatro modos normales de propagación presentes en la nanocinta armchair a  $E = 0$  eV. Se observa que el modo 0 presenta una densidad de corriente reducida, distribuida por todo el sistema, mientras que el modo 1 se localiza en el centro de la nanocinta. Los modos 2 y 3 muestran una fuerte localización en los bordes de la nanocinta. En el último panel de esta sección, se revela que la corriente total se localiza principalmente en los bordes de la nanocinta. Al analizar la energía  $E = 0.1$  eV, la distribución de corriente en los cuatro modos permanece constante, pero con una intensidad amplificada para los modos 0, 1 y 3, de manera que la distribución total tiene mayor aporte en centro de la nanocinta.

A una energía  $E = 0$  eV, la densidad de corriente de la nanocinta zigzag ilustrada en la figura 15, revela dos modos de propagación distintivos. El modo 0, de densidad de corriente reducida, presenta una localización en cuatro máximos a través del ancho  $W$ , en orientación transversal, mientras que el modo 1 evidencia una localización central, distante de los bordes. Estos hallazgos son vitales para el entendimiento del comportamiento de transporte electrónico en estructuras bidimensionales, donde bordes e imperfecciones son determinantes.

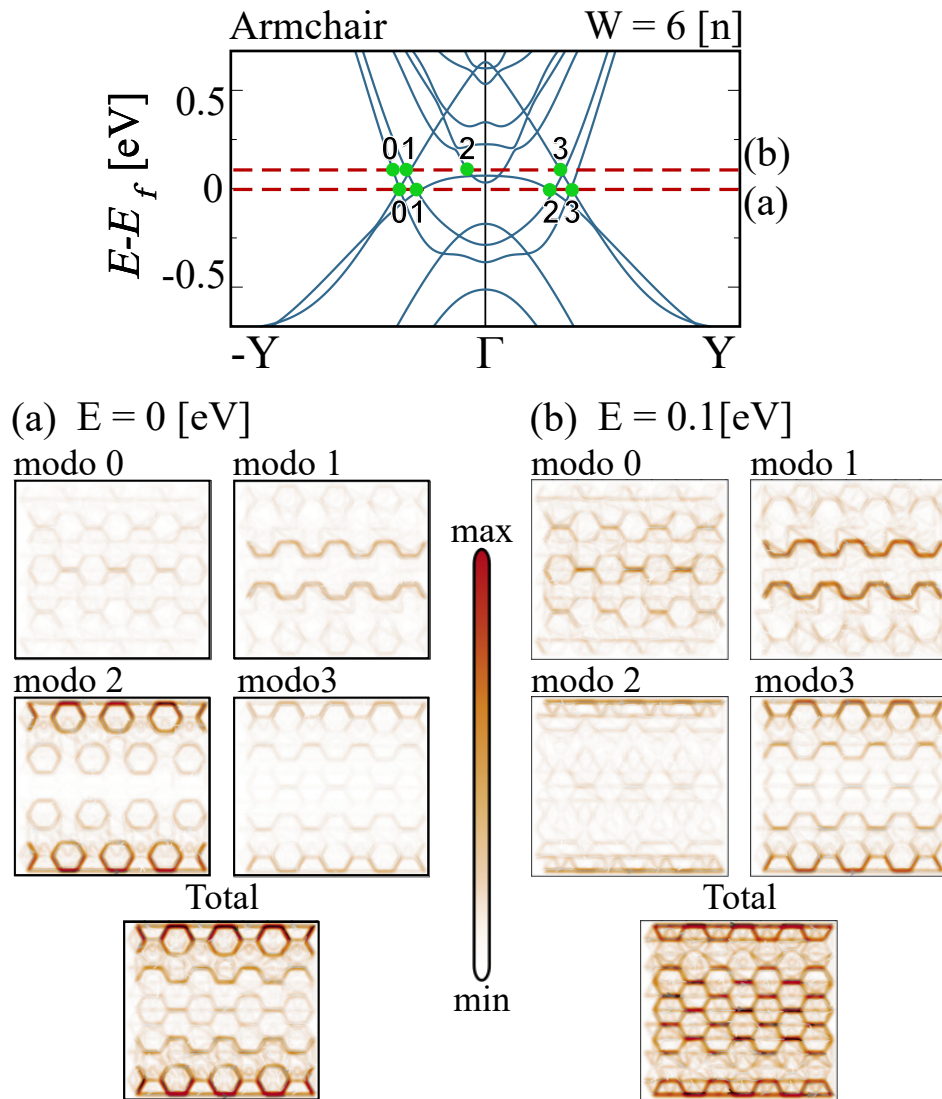


Figura 14. Estructura de bandas y densidad de corriente por modos para nanocinta armchair de 6 celdas de ancho a  $E = 0$  (a) y  $E = 0.1$  eV (b). Se resalta con dos líneas punteadas rojas en la estructura de bandas los niveles energéticos a estudiar y con puntos verdes se identifica cada modo disponible.

A  $E = 0.1$  eV, se manifiesta un cambio significativo en la distribución de corriente. Los modos 0, 1 y 3 presentan una localización predominante en el centro de la nanocinta, mientras que el modo 2 exhibe una distribución fuertemente localizada en

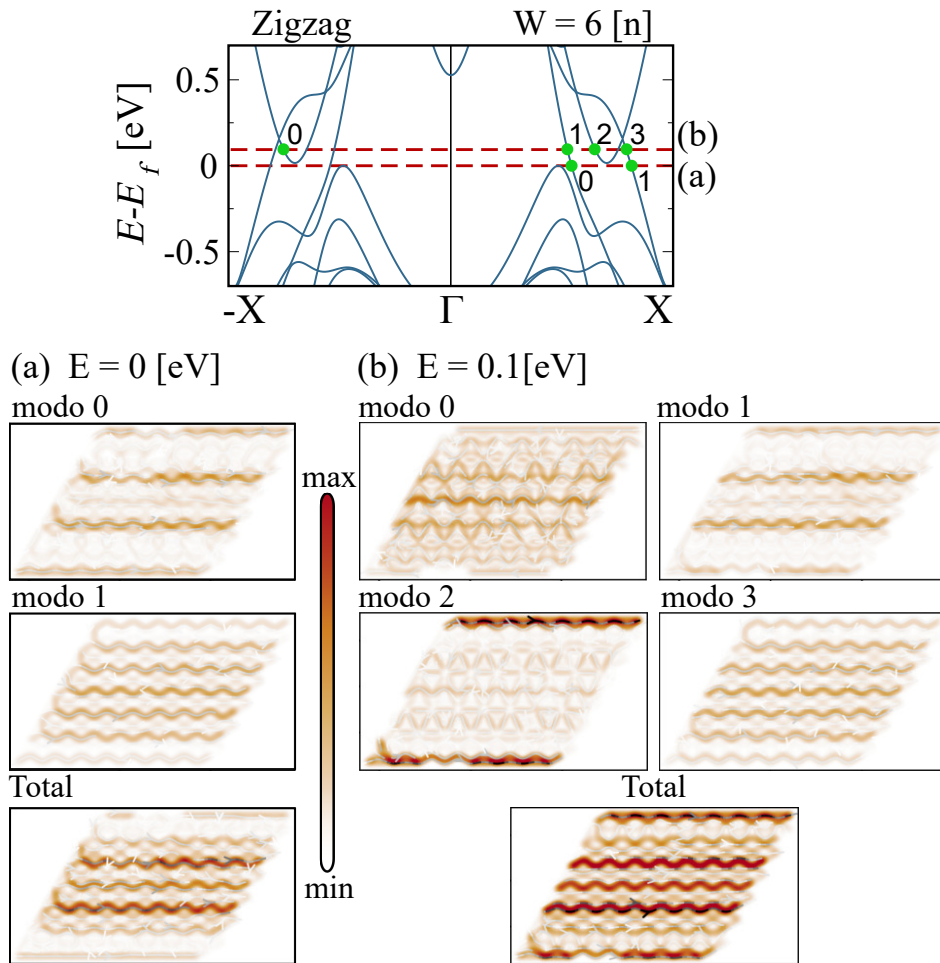


Figura 15. Estructura de bandas y densidad de corriente por modos para nanocinta zigzag de 6 celdas de ancho a  $E = 0$  (a) y  $E = 0.1$  eV (b). Se resalta con dos líneas punteadas rojas en la estructura de bandas los niveles energéticos a estudiar y con puntos verdes se identifica cada modo disponible.

los bordes, siguiendo la dirección zigzag. Estas observaciones demuestran cómo mínimas variaciones energéticas pueden inducir transiciones en el comportamiento de transporte y en la localización de los estados electrónicos.

En comparación con la energía de Fermi, la nanocinta zigzag a  $E = 0.1$  eV presenta dos modos adicionales, donde resalta el modo 2 localizado en los bordes. No obstante, un leve ajuste en la energía a  $E = 0$  eV suprime estos modos, resultando

en la desaparición del estado intensamente localizado en el borde. Este fenómeno subraya la fragilidad y sensibilidad de los estados en los bordes de estas estructuras y cómo pueden ser alterados mediante ajustes energéticos.

Las nanocintas zigzag manifiestan características distintas a las nanocintas armchair, vinculadas a una estructura de bandas más intrincada. A la energía de Fermi, no exhiben una localización considerable en el borde. Sin embargo, al modificar la energía, es factible encontrar estados localizados en el borde, principalmente asociados a los conos de Dirac. Los conos de Dirac en las bandas indican que la bicapa de borofeno posee características de semimetal topológico, que junto a intersecciones entre las bandas de valencia y conducción, son causantes de las notables propiedades electrónicas y de transporte. Sin embargo, en la bicapa de borofeno, pueden verse afectados por bordes, defectos y perturbaciones.

Por consiguiente, se deduce que la bicapa de borofeno, en configuraciones de nanocinta, posee una física profunda con aplicabilidad práctica. La habilidad de alterar el carácter de transporte con sutiles variaciones energéticas sugiere el diseño de dispositivos electrónicos versátiles basados en la bicapa de borofeno. Al analizar el material como semimetal topológico, se concluye que los estados borde son vulnerables a perturbaciones y a la presencia de otros estados electrónicos, enfatizando la necesidad de una meticulosa caracterización y diseño de dispositivos basados en borofeno y otros semimetales topológicos.

En la figura 16, se muestra la densidad de corriente para nanocintas armchair y zigzag en dos energías distintas al nivel de Fermi. La escala de colores clarifica las diferentes intensidades de la densidad de corriente. Para la nanocinta armchair, en la energía de Fermi, se observa que la corriente fluye principalmente en los bordes.

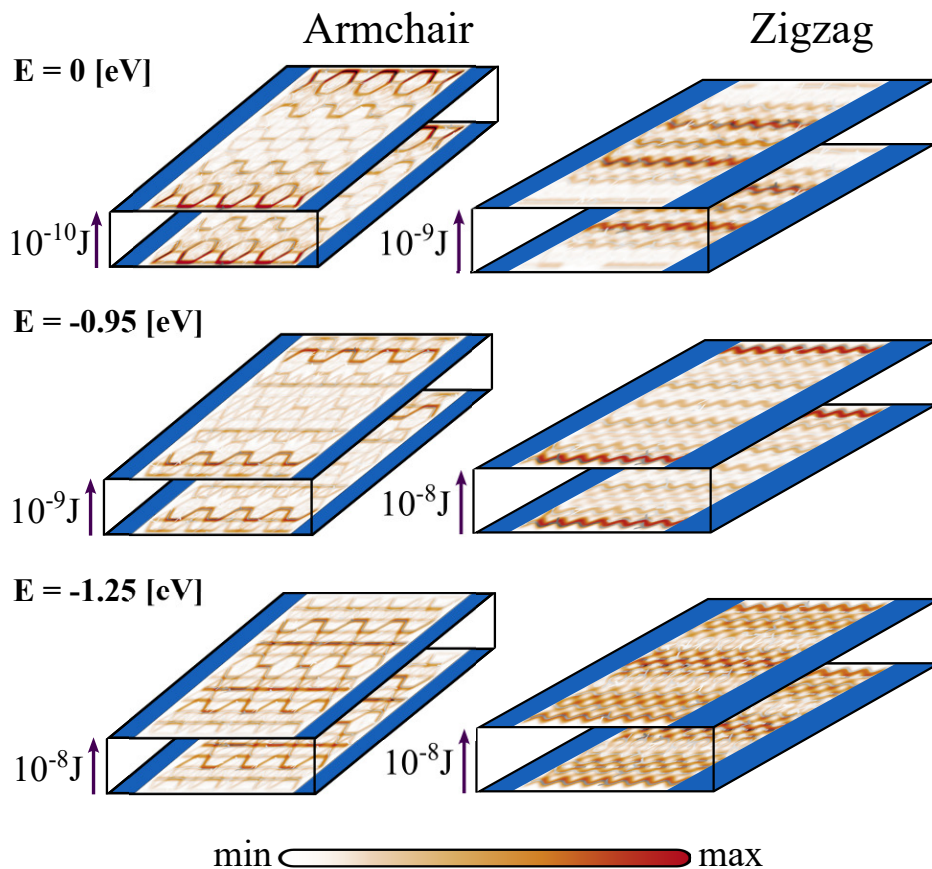


Figura 16. Densidad de corriente para nanocintas armchair y zigzag con 6 celdas de ancho para 3 energías distintas.

Esta localización de corriente en los bordes se asocia a estados de borde que permiten el flujo electrónico, evitando posibles defectos o imperfecciones en el interior de la nanocinta. Al variar en energía, se identifica una transición a distribuciones más centralizadas hasta que se pierden los estados de borde. En contraste, para la nanocinta zigzag, la corriente se concentra en la región central a energía de Fermi, para luego transicionar a un mayor aporte de estados de borde como se ve para energías  $-0.95\text{eV}$ , aunque nuevamente se pierdan a energías aún mayores, como se ve para  $-1.25\text{eV}$ . Esta diferenciación en las propiedades de transporte para las configuraciones armchair y zigzag tiene importantes implicaciones en el diseño y

funcionamiento de dispositivos basados en borofeno.

El transporte inter-capa en la bicapa de borofeno es despreciable, siendo aproximadamente menor por un factor de  $(10^{-8})$  en comparación con el transporte intra-capa. Este limitado transporte entre las capas se debe a los fuertes enlaces covalentes que existen entre ellas. Los enlaces introducen efectos de dispersión significativos que actúan como barreras, impidiendo la libre transmisión de electrones de una capa a la otra. Este fenómeno, evidenciado en la figura 16, está en concordancia con los hallazgos reportados en estudios previos, como el realizado por Hai-Tao y Ai-Min en 2022<sup>55</sup>. La comprensión detallada de estos efectos es esencial para la modulación de propiedades y la implementación efectiva del borofeno en aplicaciones tecnológicas.

## **2.8. Efectos del tamaño sobre la densidad de corriente.**

La bicapa de borofeno, identificada como un semimetal de línea nodal, ha suscitado interés en la física de la materia condensada a causa de sus propiedades topológicas singulares. En sistemas topológicos, tal como se plantea en el artículo de Burkov<sup>56</sup>, la emergencia de estados de borde juega un papel crucial, determinando intrínsecamente las propiedades de transporte del sistema. La inexistencia de otros estados en la energía de Fermi, especialmente en sistemas periódicos, asegura que únicamente los conos de Dirac intervengan en el transporte electrónico, como se ilustra en la figura 6.

---

<sup>55</sup> Hu Hai-Tao y Guo Ai-Min. "Quantum transport properties of bilayer borophene nanoribbons". *zh*. En: 71.22 (nov. de 2022). Publisher: págs. 227301-8. DOI: 10.7498/aps.71.20221304.

<sup>56</sup> Burkov, ver n. 2.

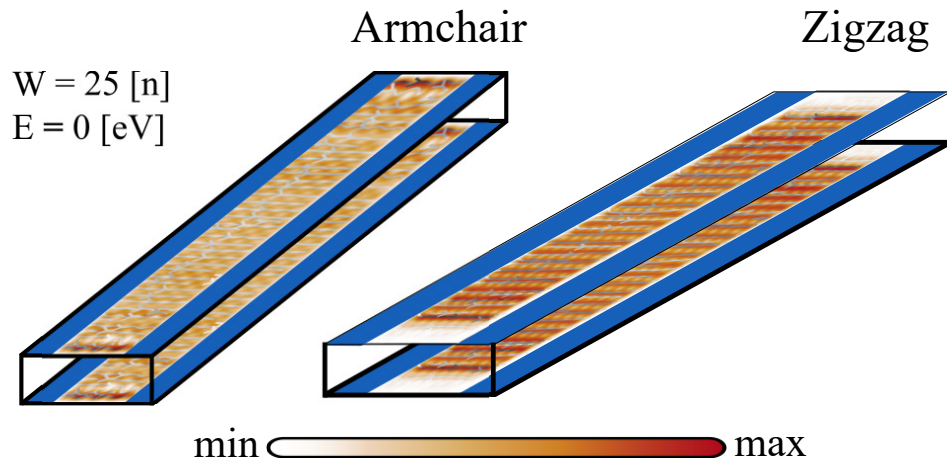


Figura 17. Densidad de corriente para nanocintas armchair y zigzag con 25 celdas de ancho a energía de Fermi.

En la figura 13, las nanocintas armchair exhiben una marcada presencia de estados de borde para anchos inferiores a 20 celdas. Dichos estados están ligados a los modos topológicos del borofeno y poseen intrínsecamente una naturaleza unidimensional. Estos estados se visualizan como una superposición de orbitales atómicos puros dispuestos a lo largo del contorno de la nanocinta. A medida que se incrementa el ancho de dicha nanocinta, se detecta un incremento de estados en la zona central sin perder aquellos con mayor localización en el borde, tal como se aprecia en la figura 17.

Por otra parte, las nanocintas zigzag muestran un patrón contrastante. Incluso en anchuras estrechas, los estados centrales son notorios, lo que podría asociarse con la distorsión inherente de los conos de Dirac en esta configuración de borofeno. Estos estados centrales, deducidos mediante el formalismo de Green y procedimientos recursivos, determinan las características de transporte. Como se puede apreciar en la figura 8, al aumentar el número de celdas, se manifiesta una estructura de bandas más compleja con modos vinculados a los conos de Dirac. No obstante, la

relevancia de estos modos no logra ser equiparable a otros estados centrales que finalmente rigen las propiedades de transporte, tal como se evidencia en la figura 17.

En síntesis, tanto las nanocintas armchair como las zigzag de bicapas de borofeno despliegan una diversidad de propiedades de transporte que se ven significativamente influenciadas por su ancho. La dinámica entre estados de borde y centrales, y cómo compiten en su contribución al transporte, es esencial para comprender las aplicaciones potenciales del borofeno en dispositivos electrónicos nanométricos. Se subraya la importancia de tener en cuenta estas particularidades al proyectar y elaborar dispositivos que utilicen borofeno con el fin de alcanzar un desempeño de transporte idóneo.

### 3. CONCLUSIONES

El presente estudio, se exploraron las propiedades de transporte electrónico en nanocintas de borofeno bicapa, considerando variaciones en elementos estructurales como su tamaño y tipo de bordes. Mediante el enfoque de Slater y Koster, se establecieron los coeficientes de enlace y las energías de sitio para construir un modelo hamiltoniano usando el método Tight Binding que describe adecuadamente el sistema estudiado. Esta formulación permitió el cálculo de la conductancia, densidad de corriente y Densidad Local de Estados (LDoS), empleando el método recursivo de las funciones de Green, para nanocintas con dimensiones desde 3 Å hasta 60 nm, teniendo en cuenta bordes tipo armchair y zigzag.

Se observó que, al analizar las propiedades según el tamaño de la nanocinta, se presenta una notable transición en los comportamientos cerca a las 20 celdas unitarias. Las nanocintas zigzag de menores dimensiones exhiben una dispersión electrónica que no mantiene las características propias de la línea nodal y los conos de Dirac. Esta característica conlleva a una ausencia significativa de estados de borde, resultando en una densidad de corriente y LDoS principalmente centradas. Por otro lado, las nanocintas armchair de dimensiones semejantes muestran una dispersión electrónica lineal, evidenciando una notable presencia de estados de borde. Al sobrepasar el límite crítico de transición, las nanocintas de ambos bordes presentan estructuras de bandas electrónicas similares a las de un sistema periódico ideal.

Desde la perspectiva del transporte coherente, la conductancia se relaciona directamente con la cantidad de canales disponibles en la estructura de bandas. Al analizar la conductancia en función de la energía, se aprecia una disminución hacia el nivel de Fermi, tendencia que se intensifica en nanocintas más grandes. Esta reducción se atribuye principalmente a la ausencia de estados en la mayoría del espacio recíproco, exceptuando la presencia de los conos de Dirac.

Se identifica un comportamiento distintivo en la bicapa borofeno en contraposición con el grafeno. En el punto de neutralidad de carga, la conductancia en borofeno bicapa muestra una tendencia creciente con la ampliación del tamaño, a diferencia del grafeno, donde la conductancia se mantiene constante. Este comportamiento resalta las diferencias en propiedades electrónicas entre ambos materiales, abriendo nuevas oportunidades para aplicaciones en nanoelectrónica.

Por otro lado, en sistemas armchair menores a 5nm con estados de borde cercanos al nivel de Fermi, se detecta una localización creciente de estados en el centro al variar la energía. En contraste, los sistemas zigzag no presentan una localización considerable en los bordes para estas energías, debido a alteraciones en los conos de Dirac. Frente a pequeñas variaciones energéticas cerca del nivel de Fermi, se observan cambios significativos en la densidad de corriente y distribución de carga, asociados a estados altamente localizados en los bordes de la nanocinta. Comprender estas dinámicas de transporte, junto con la sensibilidad del sistema a factores como tipo de borde y tamaño, es esencial para el desarrollo de dispositivos electrónicos basados en borofeno bicapa.

#### 4. PUBLICACIONES Y EVENTOS

Como resultado de esta investigación se expusieron los resultados en la modalidad de presentación oral en el evento internacional:

- *31st International Materials Research Congress (IMRC 2023)* (Cancún, México - 2023)

Y el evento nacional:

- *XXIX congreso nacional de física* (Armenia, Colombia-2022)

Así mismo, en modalidad de poster para el evento internacional:

- *I congreso internacional de ciencias básicas aplicadas (CICBA 2022)* (Bucaramanga, Colombia - 2022)

Adicionalmente, los resultados están siendo sintetizados en un artículo para posteriormente ser publicados en una revista internacional indexada por parte del autor de este trabajo.

## BIBLIOGRAFÍA

- Albuhairan, Hassan Y., H. M. Abdullah y U. Schwingenschlögl. "Transport and confinement in bilayer chiral borophene". en. En: *2D Materials* 9.2 (abr. de 2022). Publisher: IOP Publishing, pág. 025031. DOI: 10.1088/2053-1583/ac5f6c (vid. págs. 16, 18, 29, 34).
- Bahamon, D. A., A. L. C. Pereira y P. A. Schulz. "Third edge for a graphene nanoribbon: A tight-binding model calculation". En: *Physical Review B* 83.15 (abr. de 2011). arXiv:1008.1211 [cond-mat], pág. 155436. DOI: 10.1103/PhysRevB.83.155436 (vid. pág. 41).
- Boker, Steven et al. "OpenMx: An Open Source Extended Structural Equation Modeling Framework". en. En: *Psychometrika* 76.2 (abr. de 2011), págs. 306-317. DOI: 10.1007/s11336-010-9200-6 (vid. pág. 27).
- Boustani, Ihsan. "New quasi-planar surfaces of bare boron". en. En: *Surface Science* 370.2 (ene. de 1997), págs. 355-363. DOI: 10.1016/S0039-6028(96)00969-7 (vid. pág. 16).
- Burkov, A. A. "Topological semimetals". en. En: *Nature Materials* 15.11 (nov. de 2016). Number: 11 Publisher: Nature Publishing Group, págs. 1145-1148. DOI: 10.1038/nmat4788 (vid. págs. 14, 30, 52).
- Büttiker, M. "Four-Terminal Phase-Coherent Conductance". En: *Physical Review Letters* 57.14 (oct. de 1986). Publisher: American Physical Society, págs. 1761-1764. DOI: 10.1103/PhysRevLett.57.1761 (vid. págs. 35, 37).

Caroli, C. et al. "Direct calculation of the tunneling current". en. En: *Journal of Physics C: Solid State Physics* 4.8 (jun. de 1971), pág. 916. DOI: 10.1088/0022-3719/4/8/018 (vid. pág. 37).

Chand, Hushan, Ashish Kumar y Venkata Krishnan. "Borophene and Boron-Based Nanosheets: Recent Advances in Synthesis Strategies and Applications in the Field of Environment and Energy". en. En: *Advanced Materials Interfaces* 8.15 (2021). \_eprint: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/admi.202100045>, pág. 2100045. DOI: 10.1002/admi.202100045 (vid. pág. 17).

Chen, Caiyun et al. "Synthesis of bilayer borophene". en. En: *Nature Chemistry* 14.1 (ene. de 2022). Number: 1 Publisher: Nature Publishing Group, págs. 25-31. DOI: 10.1038/s41557-021-00813-z (vid. pág. 17).

Datta, Supriyo. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge Studies in Semiconductor Physics and Microelectronic Engineering. Cambridge: Cambridge University Press, 1995. DOI: 10.1017/CB09780511805776 (vid. pág. 43).

— *Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport—Part A: Basic Concepts*. World Scientific, 2017 (vid. pág. 40).

Fang, Chen et al. "Topological nodal line semimetals". En: *Chinese Physics B* 25.11 (nov. de 2016). arXiv:1609.05414 [cond-mat], pág. 117106. DOI: 10.1088/1674-1056/25/11/117106 (vid. págs. 14, 15).

Fu, B.-B. et al. "Dirac nodal surfaces and nodal lines in ZrSiS". En: *Science Advances* 5.5 (mayo de 2019). Publisher: American Association for the Advancement of Science, eaau6459. DOI: 10.1126/sciadv.aau6459 (vid. pág. 15).

- Groth, Christoph W. et al. "Kwant: a software package for quantum transport". en. En: *New Journal of Physics* 16.6 (jun. de 2014). Publisher: IOP Publishing, pág. 063065. DOI: 10.1088/1367-2630/16/6/063065 (vid. págs. 12, 13, 35).
- Hai-Tao, Hu y Guo Ai-Min. "Quantum transport properties of bilayer borophene nanoribbons". zh. En: 71.22 (nov. de 2022). Publisher: págs. 227301-8. DOI: 10.7498/aps.71.20221304 (vid. pág. 52).
- Jia, Shuang, Su-Yang Xu y M. Zahid Hasan. "Weyl semimetals, Fermi arcs and chiral anomalies". en. En: *Nature Materials* 15.11 (nov. de 2016). Number: 11 Publisher: Nature Publishing Group, págs. 1140-1144. DOI: 10.1038/nmat4787 (vid. pág. 14).
- Kaxiras, Efthimios y John D. Joannopoulos. *Quantum Theory of Materials*. en. ISBN: 9781139030809 Publisher: Cambridge University Press. Abr. de 2019. DOI: 10.1017/9781139030809 (vid. pág. 43).
- Kwiatkowski, T., S. Olszewski y A. Wierzbicki. "Cubic harmonics in Cartesian coordinates". de. En: *International Journal of Quantum Chemistry* 11.1 (1977). \_eprint: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/qua.560110104>, págs. 21-47. DOI: 10.1002/qua.560110104 (vid. pág. 22).
- Landauer, Rolf. "Conductance from transmission: common sense points". en. En: *Physica Scripta* 1992.T42 (ene. de 1992), pág. 110. DOI: 10.1088/0031-8949/1992/T42/020 (vid. pág. 35).
- Li, Jiaheng et al. "Topological semimetals from the perspective of first-principles calculations". En: *Journal of Applied Physics* 128.19 (nov. de 2020), pág. 191101. DOI: 10.1063/5.0025396 (vid. pág. 14).

Li, Shichao et al. "Evidence for a Dirac nodal-line semimetal in SrAs<sub>3</sub>". En: *Science Bulletin* 63.9 (mayo de 2018), págs. 535-541. DOI: 10.1016/j.scib.2018.04.011 (vid. pág. 15).

Lian, Chao et al. "Integrated Plasmonics: Broadband Dirac Plasmons in Borophene". En: *Physical Review Letters* 125.11 (sep. de 2020). Publisher: American Physical Society, pág. 116802. DOI: 10.1103/PhysRevLett.125.116802 (vid. pág. 17).

Liang, Qi-Feng et al. "Node-surface and node-line fermions from nonsymmorphic lattice symmetries". En: *Physical Review B* 93.8 (feb. de 2016). Publisher: American Physical Society, pág. 085427. DOI: 10.1103/PhysRevB.93.085427 (vid. pág. 14).

Löwdin, Per-Olov. "On the Non-Orthogonality Problem Connected with the Use of Atomic Wave Functions in the Theory of Molecules and Crystals". En: *The Journal of Chemical Physics* 18.3 (dic. de 2004), págs. 365-375. DOI: 10.1063/1.1747632 (vid. pág. 22).

Ma, Fengxian et al. "Graphene-like Two-Dimensional Ionic Boron with Double Dirac Cones at Ambient Condition". En: *Nano Letters* 16.5 (mayo de 2016). Publisher: American Chemical Society, págs. 3022-3028. DOI: 10.1021/acs.nanolett.5b05292 (vid. pág. 16).

Mannix, Andrew J. et al. "Synthesis of borophenes: Anisotropic, two-dimensional boron polymorphs". En: *Science* 350.6267 (dic. de 2015). Publisher: American Association for the Advancement of Science, págs. 1513-1516. DOI: 10.1126/science.aad1080 (vid. pág. 17).

Mozvashi, Shobair Mohammadi, Mojde Rezaee Givi y Meysam Bagheri Tagani. "The effects of substrate and stacking in bilayer borophene". en. En: *Scientific Reports*

- 12.1 (ago. de 2022). Number: 1 Publisher: Nature Publishing Group, pág. 13661. DOI: 10.1038/s41598-022-18076-0 (vid. pág. 16).
- Nakhaee, M., S. A. Ketabi y F. M. Peeters. “Dirac nodal line in bilayer borophene: Tight-binding model and low-energy effective Hamiltonian”. En: *Physical Review B* 98.11 (sep. de 2018). Publisher: American Physical Society, pág. 115413. DOI: 10.1103/PhysRevB.98.115413 (vid. págs. 16, 22, 26, 34).
- Nakhaee, Mohammad, S. Ahmad Ketabi y Francois M. Peeters. “Tight-Binding Studio: A technical software package to find the parameters of tight-binding Hamiltonian”. en. En: *Computer Physics Communications* 254 (sep. de 2020), pág. 107379. DOI: 10.1016/j.cpc.2020.107379 (vid. pág. 19).
- Pang, Zhenqian et al. “Super-stretchable borophene”. en. En: *EPL (Europhysics Letters)* 116.3 (nov. de 2016), pág. 36001. DOI: 10.1209/0295-5075/116/36001 (vid. págs. 16, 21).
- Slater, J. C. y G. F. Koster. “Simplified LCAO Method for the Periodic Potential Problem”. En: *Physical Review* 94.6 (jun. de 1954). Publisher: American Physical Society, págs. 1498-1524. DOI: 10.1103/PhysRev.94.1498 (vid. págs. 19, 20, 22, 23).
- Sutter, Peter y Eli Sutter. “Large-Scale Layer-by-Layer Synthesis of Borophene on Ru(0001)”. En: *Chemistry of Materials* 33.22 (nov. de 2021). Publisher: American Chemical Society, págs. 8838-8843. DOI: 10.1021/acs.chemmater.1c03061 (vid. pág. 17).
- Wang, Jian. “Superconductivity in topological semimetals”. En: *National Science Review* 6.2 (mar. de 2019), págs. 199-202. DOI: 10.1093/nsr/nwy155 (vid. pág. 14).

- Wang, Zhi-Qiang et al. "Review of borophene and its potential applications". en. En: *Frontiers of Physics* 14.3 (abr. de 2019), pág. 33403. DOI: 10.1007/s11467-019-0884-5 (vid. pág. 17).
- Wannier, Gregory H. "The Structure of Electronic Excitation Levels in Insulating Crystals". en. En: *Physical Review* 52.3 (ago. de 1937), págs. 191-197. DOI: 10.1103/PhysRev.52.191 (vid. pág. 20).
- Xu, Gang et al. "Chern Semimetal and the Quantized Anomalous Hall Effect in  $\text{HgCr}_2\text{Se}_4$ ". En: *Physical Review Letters* 107.18 (oct. de 2011). Publisher: American Physical Society, pág. 186806. DOI: 10.1103/PhysRevLett.107.186806 (vid. pág. 14).
- Xu, Shao-Gang et al. "Ideal Nodal Line Semimetal in a Two-Dimensional Boron Bilayer". En: *The Journal of Physical Chemistry C* 123.8 (feb. de 2019). Publisher: American Chemical Society, págs. 4977-4983. DOI: 10.1021/acs.jpcc.8b12385 (vid. pág. 34).
- Yan, Luo et al. "Prediction of superconductivity in bilayer borophenes". en. En: *RSC Advances* 11.63 (2021). Publisher: Royal Society of Chemistry, págs. 40220-40227. DOI: 10.1039/D1RA08014H (vid. págs. 18, 21).
- Yan, Zhongbo, Peng-Wei Huang y Zhong Wang. "Collective modes in nodal line semimetals". En: *Physical Review B* 93.8 (feb. de 2016). Publisher: American Physical Society, pág. 085138. DOI: 10.1103/PhysRevB.93.085138 (vid. pág. 15).
- Yu, Peter Y. y Manuel Cardona. *Fundamentals of Semiconductors: Physics and Materials Properties*. en. Graduate Texts in Physics. Berlin, Heidelberg: Springer, 2010. DOI: 10.1007/978-3-642-00710-1 (vid. pág. 22).

Yu, Rui et al. "Topological nodal line semimetals predicted from first-principles calculations". en. En: *Frontiers of Physics* 12.3 (jun. de 2017), pág. 127202. DOI: 10.1007/s11467-016-0630-1 (vid. pág. 15).

Zhong, Hongxia et al. "Electronic and mechanical properties of few-layer borophene". En: *Physical Review B* 98.5 (ago. de 2018). Publisher: American Physical Society, pág. 054104. DOI: 10.1103/PhysRevB.98.054104 (vid. pág. 17).

## ANEXOS

### Anexo A. Matrices de enlace y energías de sitio para la bicapa de borofeno.

Parámetros de la forma  $t_{(m,n)l,l'(\gamma)}$ , correspondiente al enlace entre el átomo  $l$  de la celda  $(0, 0)$  y el átomo  $l'$  de la celda  $(m, n)$ , expresada en términos de los vectores de red. Así mismo, se cumple:

$$t_{(0,0)l,l'(\gamma)}^\dagger = t_{(0,0)l',l(\gamma)}$$

$$t_{(m,n)l,l'(\gamma=-1)} = t_{(m,n)l+3,l'+3}$$

Para  $m, n = 0, l = l'$  se tienen las energías de sitio de los átomos de boro.

$$t_{(0,0)i,i} = \begin{pmatrix} S & P_y & P_z & P_x \\ -4.127 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2.535 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4.550 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2.361 \end{pmatrix} \begin{matrix} S \\ P_y \\ P_z \\ P_x \end{matrix}$$

$$t_{(0,0)1,2} = \begin{pmatrix} S & P_y & P_z & P_x \\ -34.198 & -7.863 & 0 & 0.002 \\ 7.863 & 3.472 & 0 & -0.002 \\ 0 & 0 & -2.447 & 0 \\ -0.002 & -0.002 & 0 & -2.447 \end{pmatrix} \begin{matrix} S \\ P_y \\ P_z \\ P_x \end{matrix}$$

$$t_{(0,0)1,3(\gamma)} = \begin{array}{cccc} & S & P_y & P_z & P_x \\ \left( \begin{array}{cccc} 1.342 & -0.849 & \gamma 0.944 & -1.472 \\ 0.849 & -0.351 & -\gamma 0.714 & 1.114 \\ -\gamma 0.944 & -\gamma 0.714 & -0.199 & -\gamma 1.239 \\ 1.472 & 1.114 & -\gamma 1.239 & 0.938 \end{array} \right) & S & P_y & P_z & P_x \end{array}$$

$$t_{(0,0)2,3(\gamma)} = \begin{array}{cccc} & S & P_y & P_z & P_x \\ \left( \begin{array}{cccc} 1.342 & 0.851 & \gamma 0.944 & -1.472 \\ -0.851 & -0.349 & \gamma 0.715 & -1.116 \\ -\gamma 0.944 & \gamma 0.715 & -0.200 & -\gamma 1.237 \\ 1.472 & -1.116 & -\gamma 1.237 & 0.937 \end{array} \right) & S & P_y & P_z & P_x \end{array}$$

$$t_{(0,0)3,6} = \begin{array}{cccc} & S & P_y & P_z & P_x \\ \left( \begin{array}{cccc} 8.677 & 0 & -0.141 & 0 \\ 0 & 1.455 & 0 & 0 \\ 0.141 & 0 & 1.484 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1.455 \end{array} \right) & S & P_y & P_z & P_x \end{array}$$

$$t_{(0,1)i,i} = \begin{array}{cccc} & S & P_y & P_z & P_x \\ \left( \begin{array}{cccc} 16.855 & 2.085 & 0 & -1.200 \\ -2.085 & -0.332 & 0 & 0.140 \\ 0 & 0 & -0.088 & 0 \\ 1.200 & 0.140 & 0 & -0.169 \end{array} \right) & S & P_y & P_z & P_x \end{array}, \quad i = 1, 2, 4, 5$$

$$t_{(0,1)2,1} = \begin{pmatrix} S & P_y & P_z & P_x \\ -34.198 & -3.921 & 0.000 & 6.815 \\ 3.921 & -0.975 & 0.000 & -2.559 \\ 0.000 & 0.000 & -2.447 & 0.000 \\ -6.815 & -2.559 & 0.000 & 2.000 \end{pmatrix} \begin{matrix} S \\ P_y \\ P_z \\ P_x \end{matrix}, \quad t_{(0,1)2,1} = t_{(0,1)5,4}$$

$$t_{(0,1)2,3(\gamma)} = \begin{pmatrix} S & P_y & P_z & P_x \\ 1.342 & -1.697 & \gamma 0.948 & -0.010 \\ 1.697 & 1.574 & -\gamma 1.434 & 0.015 \\ -\gamma 0.948 & -\gamma 1.434 & -0.192 & -\gamma 0.008 \\ 0.010 & 0.015 & -\gamma 0.008 & -0.993 \end{pmatrix} \begin{matrix} S \\ P_y \\ P_z \\ P_x \end{matrix}$$

$$t_{(1,0)i,i} = \begin{pmatrix} S & P_y & P_z & P_x \\ 16.855 & -2.085 & 0.000 & -1.200 \\ 2.085 & -0.332 & 0.000 & -0.140 \\ 0.000 & 0.000 & -0.088 & 0.000 \\ 1.200 & -0.140 & 0.000 & -0.169 \end{pmatrix} \begin{matrix} S \\ P_y \\ P_z \\ P_x \end{matrix}, \quad i = 1, 2, 4, 5$$

$$t_{(1,0)1,2} = \begin{pmatrix} S & P_y & P_z & P_x \\ -34.198 & 3.919 & 0.000 & 6.816 \\ -3.919 & -0.976 & 0.000 & 2.558 \\ 0.000 & 0.000 & -2.447 & 0.000 \\ -6.816 & 2.558 & 0.000 & 2.001 \end{pmatrix} \begin{matrix} S \\ P_y \\ P_z \\ P_x \end{matrix}, \quad t_{(1,0)1,2} = t_{(1,0)4,5}$$

$$t_{(1,0)1,3(\gamma)} = \begin{pmatrix} S & P_y & P_z & P_x \\ 1.342 & 1.698 & \gamma 0.947 & -0.010 \\ -1.698 & 1.575 & \gamma 1.433 & -0.014 \\ -\gamma 0.947 & \gamma 1.433 & -0.194 & -\gamma 0.008 \\ 0.010 & -0.014 & -\gamma 0.008 & -0.993 \end{pmatrix} \begin{matrix} S \\ P_y \\ P_z \\ P_x \end{matrix}$$

$$t_{(1,1)i,i} = \begin{pmatrix} S & P_y & P_z & P_x \\ 16.855 & 0.000 & 0.000 & -2.405 \\ 0.000 & -0.088 & 0.000 & 0.000 \\ 0.000 & 0.000 & -0.088 & 0.000 \\ 2.405 & 0.000 & 0.000 & -0.412 \end{pmatrix} \begin{matrix} S \\ P_y \\ P_z \\ P_x \end{matrix}, \quad i = 1, 2, 4, 5$$

$$t_{(1,1)1,3(\gamma)} = \begin{pmatrix} S & P_y & P_z & P_x \\ 1.342 & -0.855 & \gamma 0.951 & 1.464 \\ 0.855 & -0.342 & -\gamma 0.725 & -1.116 \\ -\gamma 0.951 & -\gamma 0.725 & -0.187 & \gamma 1.241 \\ -1.464 & -1.116 & \gamma 1.241 & 0.917 \end{pmatrix} \begin{matrix} S \\ P_y \\ P_z \\ P_x \end{matrix}$$

$$t_{(1,1)2,3(\gamma)} = \begin{pmatrix} S & P_y & P_z & P_x \\ 1.342 & 0.857 & \gamma 0.951 & 1.463 \\ -0.857 & -0.339 & \gamma 0.726 & 1.118 \\ -\gamma 0.951 & \gamma 0.726 & -0.188 & \gamma 1.240 \\ -1.463 & 1.118 & \gamma 1.240 & 0.914 \end{pmatrix} \begin{matrix} S \\ P_y \\ P_z \\ P_x \end{matrix}$$