



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA  
DE MÉXICO**

---

---

**FACULTAD DE CIENCIAS**

**Transporte Electrónico en Redes Hexagonales**

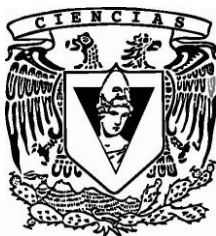
**T E S I S**

**QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:**

**FÍSICO**

**P R E S E N T A:**

**DANIEL IGNACIO SALGADO BLANCO**



**DIRECTOR DE TESIS:  
DRA. VICENTA SÁNCHEZ MORALES  
2009**



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

<p>1. Datos del alumno Salgado Blanco Daniel Ignacio 56 78 52 10 Universidad Nacional Autónoma de México Facultad de Ciencias Física 099608723</p>
<p>2. Datos del tutor Dra. Vicenta Sánchez Morales</p>
<p>3. Datos del sinodal 1 Dra. Susana Orozco Segovia</p>
<p>4. Datos del sinodal 2 Dr. Raúl Esquivel Sirvent</p>
<p>5. Datos del sinodal 3 Dr. Chumin Wang Chen</p>
<p>6. Datos del sinodal 4 Dr. José Manuel Hernández Alcántara</p>
<p>7. Datos del trabajo escrito Transporte electrónico en redes hexagonales 95 p 2009</p>

# Agradecimientos

Primeramente la Dra. Vicenta Sánchez por su asesoría y ayuda en la realización de este trabajo.

A la DGAPA por el apoyo económico brindado a través de los proyectos PAPIIT IN111507 e IN117609.

A la DGSCA por permitir el uso de las supercomputadoras Kan-Balam y Bakliz para el desarrollo de este trabajo.

Al Dr. Chumin Wang por sus valiosas discusiones.

A la maestra Silvia Lizárraga por sus anotaciones para la corrección de estilo.

Finalmente, agradezco a todos los que han creído en mí y me han apoyado a lo largo de mi vida, a los que no, pues no.

*Dedico este trabajo a mis padres, por todo su apoyo, afecto y paciencia. A Silvia, por su cariño, paciencia e increíble devoción. A mis hermanos, los tres de sangre y a los dos por elección, por crecer conmigo y alegrarme la vida.*

# Resumen

El desarrollo de la microelectrónica en las últimas décadas ha tenido una gran influencia en la humanidad, tanto desde el punto de vista cultural como del económico debido al progreso de los transistores, ya que fueron disminuyendo de tamaño y, al unirse en microcircuitos, dieron inicio a microprocesadores con circuitos integrados de toda índole para múltiples aplicaciones. Hoy en día los transistores en microprocesadores tienen una extensión del orden de 45 nanómetros, por lo que se visualiza una tendencia hacia la nanoelectrónica donde los efectos cuánticos son dominantes. En la escala nanométrica el confinamiento cuántico de las funciones de onda da lugar a la aparición de niveles de energía discretos, la cual constituye un elemento fundamental para entender las propiedades macroscópicas de los materiales nanoestructurados. Los cambios de la geometría y del tamaño en un sistema nanométrico, o la alteración de las posiciones de sus átomos, provocan cambios significativos en la distribución y/o en el número de dichos niveles energéticos, lo que da lugar a cambios de las distintas propiedades que caracterizan al sistema, como son la energía de cohesión, absorción luminosa, conductividad eléctrica, etc.

Por otro lado, el transporte electrónico puede modelarse en muy diversos niveles de sofisticación, que van desde las teorías semiclásicas hasta las cuánticas. En los sistemas de escala nanoscópica un modelo de transporte cuántico es adecuado por los efectos que se producen al ir reduciendo la sección transversal de estos sistemas. Una forma de estudiar el transporte es a través de la teoría cuántica de conducción electrónica de Landauer.

En el presente trabajo se hace un estudio detallado, en espacio real, de la densidad de estados y la transmitancia en redes hexagonales periódicas y con defectos; más aún, se presenta el efecto que tienen las condiciones de frontera sobre las propiedades eléctricas, esto es, se trabaja al sistema con saturador y sin saturador.

Para llevar a cabo el estudio de la densidad de estados y la transmitancia en redes hexagonales, en esta tesis se extiende el método de renormalización más convolución, lo cual fue posible al tomar celdas de 4 átomos para lograr la separación del hamiltoniano lo que, a su vez, conlleva la posibilidad de estudiar sistemas de tamaño macroscópico en espacio real y no únicamente en el espacio fase, o espacio  $\vec{k}$ . Una consecuencia inmediata de haber utilizado espacio real y no espacio fase fue la posibilidad que tuvimos de poder investigar el transporte electrónico en redes hexagonales con impurezas.

# Índice General

Introducción	5
I Simetría estructural y propiedades físicas	7
I.1 Introducción	7
I.2 Estructuras periódicas	10
I.2.1 Simetrías	11
I.2.2 Simetría traslacional	12
I.2.3 Simetría rotacional	13
I.3 Tipos de red cristalina	13
I.3.1 Redes bidimensionales	14
I.3.2 Redes tridimensionales	15
I.4 Arreglo periódico de átomos	15
I.4.1 Vectores de traslación	16
I.4.2 Celdas de Wigner-Seitz	16
I.4.3 Sistemas de índices para planos cristalinos	17
I.4.4 Red Recíproca	17
I.5 Estructura de sólidos	19
I.5.1 Átomos sin electrones de valencia	19
I.5.2 Átomos con electrones de valencia s	20
I.5.3 Átomos con electrones de valencia s y p	21
II Modelos de transporte electrónico en sólidos	24
II.1 Introducción	24
II.2 Modelo de Drude	25
II.2.1 Conductividad eléctrica dc para metales	26
II.2.2 Conductividad eléctrica ac para metales	27
II.3 Fórmula de Landauer	27
II.3.1 Transmitancia	29
	Resultados
III Estructura de bandas	32
III.1 Introducción	32
III.2 Grafeno	33
III.3 Cadena unidimensional	37
III.4 Red cuadrada	38
III.5 Red hexagonal	40
III.6 Nanotubos de carbón	46
IV Densidad de estados	52
IV.1 Introducción	52
IV.2 Densidad de estados de una dimensión	52

IV.3 Densidad de estados de dos dimensiones	53
IV.3.1 Densidad de estados de una red cuadrada	53
IV.3.2 Densidad de estados de una red hexagonal	54
IV.4 Densidad de estados de nanotubos	66
V Transmitancia eléctrica	73
V.1 Introducción	73
V.2 Red hexagonal	73
V.3 Nanotubos	77
Conclusiones	80
Apéndice A	81
A.1 Funciones de Bloch	81
A.2 Funciones de Wannier	81
A.3 Modelo de Amarre Fuerte	82
Apéndice B	83
B.1 Función de Green	83
Apéndice C	86
C.1 Densidad de estados universal para nanotubos de carbón	86
Apéndice D	89
D.1 Renormalización para densidad de estados	89
Bibliografía	94



# Introducción

Conforme la tecnología avanza y se incrementa la demanda por la reducción en el tamaño de dispositivos de circuitos integrados, se van generando nuevas e interesantes preguntas que conciernen a la física del estado sólido. Al igual que la ciencia en general, la física del estado sólido cuenta con 3 formas de hacerle frente a dichos cuestionamientos e intentar responderlos, a saber, la experimental, la teórica y su más reciente integrante, la computacional.

Dentro del área experimental tenemos, por ejemplo, la investigación y el desarrollo de nuevos materiales que presenten características benéficas para el transporte electrónico. Tal es el caso de los nanotubos de carbono, los cuales han generado mucha excitación últimamente, debido a su comportamiento tan versátil, pues pueden ser tanto conductores como semiconductores dependiendo de su estructura (diámetro del tubo y ángulo de quiralidad). De hecho, la investigación en los nanotubos de carbón se sigue intensificando en distintos campos de la ciencia e ingeniería con la esperanza de que se conviertan en un material clave para los dispositivos ultrafinos del futuro.

Por otro lado, tenemos la teoría generada para poder explicar el comportamiento de los sólidos. Una de las teorías particularmente exitosa ha sido la de teoría de bandas para sólidos cristalinos, la cual se encuentra cimentada en la formulación del espacio fase, o espacio  $\vec{k}$  y que nos permite estudiar sistemas de tamaño macroscópico al sacar provecho de sus simetrías. Desafortunadamente esta visión no se puede extender para los casos en que no se cuenta con un sistema que tenga simetría traslacional, como es en el caso de los materiales no cristalinos o con defectos. En estos últimos casos es necesario abordar el problema desde el espacio real, el cual tiene el gran inconveniente de restringir la dimensión del sistema.

Finalmente, tenemos el área computacional dentro del estudio de sólidos, la cual se destaca por aprovechar el gran poder de cómputo alcanzado hasta ahora para representar los modelos teóricos de algún sistema en particular. Esta colaboración se antoja casi lógica debido a que, finalmente, las propiedades de un sólido son el reflejo de las interacciones de sus átomos constituyentes, es decir, hablamos de un problema de muchos cuerpos (del orden de  $10^{23}$ ) que sabemos no tiene solución analítica, y recurrir a soluciones numéricas aportadas por computadoras es muy común. Sin embargo, aun teniendo una gran capacidad de cómputo, pensar en resolver sistemas que consideren de forma explícita a todos los átomos constituyentes de un sólido y las interacciones entre ellos resulta todavía impensable. Esto sucede, por

ejemplo, al tratar en espacio real a sólidos cristalinos y no cristalinos, por lo que se suelen tomar sistemas de dimensiones pequeñas y que no necesariamente representan el comportamiento macroscópico del sólido. Una forma más eficiente para estudiar el transporte en espacio real de sólidos es el método de renormalización más convolución [1], con el cual podemos abordar sistemas que pueden ser desde tamaño nanoscópico hasta macroscópico.

En esta tesis estudiamos la densidad de estados y la conductividad eléctrica de redes hexagonales y nanotubos. Para ello se elaboraron 5 capítulos, el primero es una revisión general sobre algunos conceptos básicos de física de estado sólido. En el segundo capítulo hacemos una revisión de conceptos sobre el transporte electrónico, lo cual da paso al tercero, donde se aborda la ecuación de dispersión en el espacio fase y su implicación para la teoría de bandas. Estos temas se aterrizan al mostrar la solución para las redes lineal, cuadrada, hexagonal y finalmente de nanotubos de carbono

En el cuarto capítulo se obtiene la densidad de estados para las mismas redes anteriores, aunque específicamente se utiliza el método de renormalización y convolución en la red hexagonal y nanotubos. En el último capítulo se calcula la transmitancia eléctrica para estos dos sistemas, haciendo un análisis detallado sobre cómo afecta el tamaño del sistema a la conductividad eléctrica. Finalmente, se dan las principales conclusiones sobre el trabajo y algunos apéndices que fueron necesarios para esta investigación.

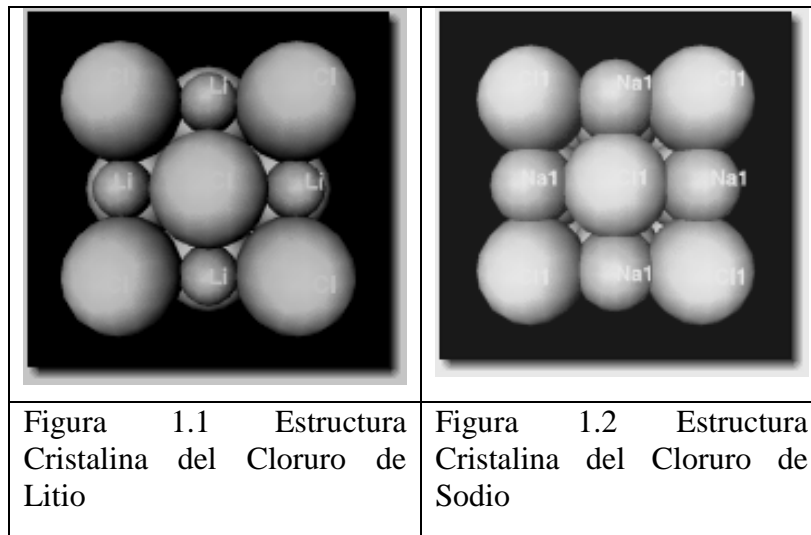
# Capítulo I

## Simetría estructural y propiedades físicas

### I.1 Introducción

El proceso en la búsqueda de materiales con determinadas propiedades mecánicas, térmicas, eléctricas, magnéticas u ópticas por mencionar algunas, ha transitado desde su etapa inicial, donde se hacía uso del material encontrado en su estado natural, hasta la etapa actual de procesamiento y elaboración de estos mediante técnicas muy sofisticadas que sustentan el conocimiento y el estudio sistemático tanto en el plano experimental como en el teórico.

Las propiedades físicas de los materiales dependen del tipo de átomos que los constituyen, de su ordenamiento, sus enlaces, de las condiciones ambientales (presión y temperatura) a las que están sometidas y, por supuesto, de la densidad de cargas eléctricas en el material.



En particular, para el tipo de átomos constituyentes podemos mencionar el ejemplo de las sales de  $NaCl$  y de  $LiCl$ , las cuales a pesar de poseer la misma estructura cristalina  $CCP$  (empaquetamiento cúbico compacto, por sus siglas

en inglés) como se observa en la figura 1.1 y 1.2 respectivamente, presentan propiedades físicas distintas como se muestra en la siguiente tabla.

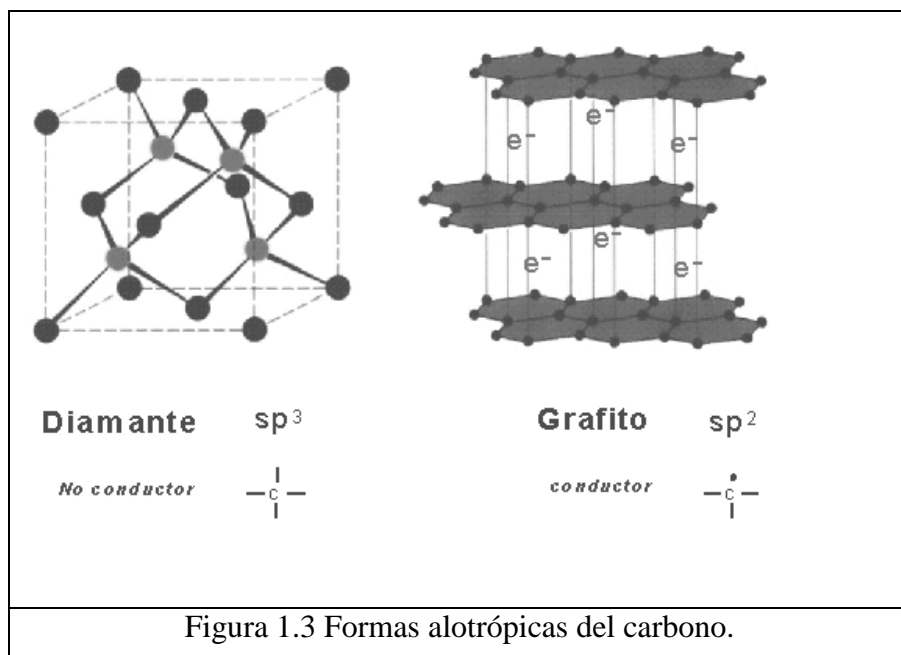
Composición química	Punto de ebullición	Punto de fusión	Resistividad eléctrica	Módulo de Young
<i>NaCl</i>	1413 °C-1465 °C	801 °C	$4.7 \times 10^{-8} \Omega m$	$10 \times 10^9 Pa$
<i>LiCl</i>	1360 °C-1383 °C	610 °C	$9.4 \times 10^{-8} \Omega m$	$4.9 \times 10^9 Pa$

Estas diferencias se deben a la mayor influencia de los átomos de *Na*, los cuales son más grandes que los de *Li*.

Vemos entonces que las propiedades físicas pueden diferir en orden de magnitud dependiendo de los átomos que forman el compuesto. Esto lo podemos confirmar con la conducción de los sólidos, la cual se mide experimentalmente mediante su resistividad eléctrica y en donde podemos citar a algunos sólidos metálicos típicos tales como oro (*Au*), cobre (*Cu*) y el aluminio (*Al*), que tienen resistividades a temperatura ambiente de  $1-5 \mu\Omega \cdot cm$ , mientras que algunas de sus aleaciones tienen resistividades de  $10^2 \mu\Omega \cdot cm$ ; todos estos sólidos son considerados buenos conductores de corriente eléctrica. Algunos sólidos de un sólo elemento (como el Si, C, y el Ge) tienen resistividades a temperatura ambiente entre un rango de  $3.4 \times 10^3 \mu\Omega \cdot cm$  (para el grafito) y  $2.3 \times 10^{11} \mu\Omega \cdot cm$  (para el Si), y están considerados como semimetales o semiconductores. Finalmente, ciertos sólidos comunes como la madera, la cual tiene una estructura y composición química compleja, o el cuarzo que tiene una estructura simple y está compuesto por dos elementos (Si y O), tienen resistividades a temperatura ambiente de entre  $10^{16}-10^{19} \mu\Omega \cdot cm$ , y  $10^{25} \mu\Omega \cdot cm$ , respectivamente; estos sólidos son considerados aislantes.

Por otro lado, para el ordenamiento atómico se puede mencionar el caso del grafito y el diamante los cuales, a pesar de estar formados por los mismos átomos de carbono, tienen propiedades macroscópicas que son enteramente diferentes y se debe a que en el grafito el enlace interplanar es de tipo Van der Waals, mientras que en el diamante todos los enlaces son covalentes, lo cual da origen a su rigidez. El diamante es una de las sustancias más duras y su estructura la observamos en la figura 1.3: cada átomo se vincula a otros cuatro átomos en una estructura tridimensional, es incoloro y no conduce electricidad. El grafito se encuentra muy difundido en la naturaleza y, estructuralmente, consiste en capas planas de átomos organizados hexagonalmente que se unen débilmente unas a otras (figura 1.3). Es un buen

conductor de la corriente eléctrica, resistente a la acción de muchos reactivos químicos y es bastante estable frente al calor.



En general, un sólido es una colección de  $10^{23}$  átomos que interactúan fuertemente, constituyendo un problema de muchos cuerpos que no tiene solución exacta. La mayoría de sus propiedades no puede ser entendida en términos de sus átomos individuales, sino como una consecuencia del comportamiento colectivo de todos los átomos.

En la física del estado sólido se clasifican a los materiales sólidos como cristalinos, cuasicristalinos o amorfos. Los cristalinos se encuentran arreglados en un patrón periódico regular tridimensional y poseen elementos de simetría que dejan invariante al sistema. Los cuasicristales tienen una estructura que no es ni cristalina ni desordenada, sino que constituye por sí misma una nueva clase. Su orden interno es de largo alcance, el cual les permite tener simetrías prohibidas para un cristal, como la de invariancia ante rotaciones de 72 grados correspondientes a la simetría de un pentágono. Finalmente, en los amorfos no existe ordenamiento periódico; ejemplo de ellos puede ser el vidrio, el cual se encuentra compuesto por moléculas individuales de cadena larga (polímeros naturales y plásticos) u ordenaciones intermedias entre estos dos casos límite (cristales líquidos). La estructura amorfa carece de ordenamiento de largo alcance. Un ejemplo de la estructura bidimensional de estos tres tipos de sólidos se presenta en la figura 1.4.

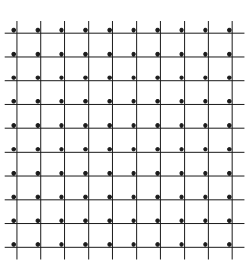
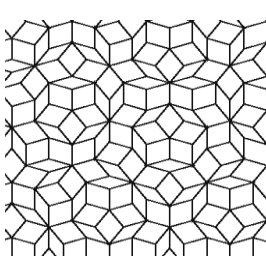
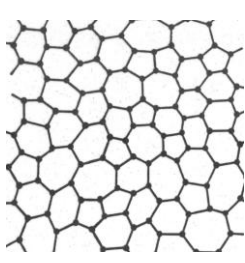
Sistema	Cristal	Cuasicristal	Amorfo
Estructura			
Simetría	Traslacional	Orden de largo alcance	Orden de corto alcance
Función de Onda	Extendida	Crítica	Localizada

Figura 1.4 Estructura de sólidos.

Vemos entonces que la distribución espacial de los átomos que forman los sólidos tiene consecuencia en las propiedades físicas que caracterizan estos materiales, por lo que el estudio y la comprensión de los arreglos que forman estructuras cristalinas proporcionan un camino excelente para entender algunos principios involucrados en la formación de los materiales sólidos.

Nuestro objetivo general es estudiar el transporte electrónico en redes hexagonales, por lo que es necesario introducir los conceptos que den un marco teórico para poder trabajar dentro de este ámbito. Es por ello, que la mayor parte de este capítulo se dedica al manejo de conceptos básicos de la física del estado sólido, como lo son el arreglo de átomos en los distintos tipos de redes cristalinas, las simetrías de estas redes, el espacio recíproco y algunos otros temas relacionados.

## I.2 Estructuras periódicas

El estudio de la física del estado sólido comienza a principios del siglo pasado, después de la formulación de la mecánica cuántica y el descubrimiento de la

difracción de rayos X. La mayoría de los cuerpos sólidos están formados por la ordenación sistemática de sus partículas constituyentes, como son átomos, iones o moléculas que dan origen a un medio periódicamente homogéneo, es decir a un sólido cristalino, y que adoptada por las partículas que forman la materia cristalina hace que aparezcan en ella elementos geométricos de simetría, tales como ejes, planos y centros de simetría.

### **I.2.1 Simetrías**

La simetría interesa en la misma medida tanto al artista como al científico; está íntimamente asociada con una admiración por la forma estructurada que es innata en el ser humano. La simetría está vinculada con muchas de las formas estructuradas más profundas de la naturaleza y hoy en día nos resulta fundamental para comprender científicamente el universo. Los principios de conservación tales como los relativos a la energía y/o al momento cinético, expresan una simetría que posee la totalidad del espacio-tiempo continuo, esto es, las leyes de la física son las mismas en cualquier lugar. Las simetrías de los cristales no sólo sirven para clasificar sus formas sino que determinan muchas de sus propiedades naturales: desde las estrellas de mar hasta las gotas de lluvia, desde los virus hasta las galaxias, poseen llamativas simetrías.

El estudio de la simetría es importante tanto en física clásica como en física cuántica porque muchos aspectos de la conducta observable de los sistemas son deducibles de la existencia de las simetrías. Las simetrías describen la invariancia de las ecuaciones fundamentales ante transformaciones de coordenadas.

Los cuerpos cristalinos forman redes que se ordenan en torno a una serie de elementos de simetría, cuya cantidad y distribución, determina los diferentes sistemas de cristalización:

- *Ejes de simetría*: son líneas imaginarias que cruzan el interior de la estructura cristalina. Al girar  $360/n$  (para  $n$  el grado del eje de rotación) hacen que el motivo geométrico del cristal se repita un número determinado de veces. Los ejes de simetría pueden ser binarios, ternarios, cuaternarios y senarios, según el número de repeticiones que generen.
- *Planos de simetría*: son superficies planas que dividen el cristal en dos mitades exactamente iguales.
- *Centros de simetría*: son puntos imaginarios situados en el interior del cristal. Por ellos pasan los principales ejes y planos de simetría. Estas tres simetrías están representadas en la figura 1.5, con líneas y planos.

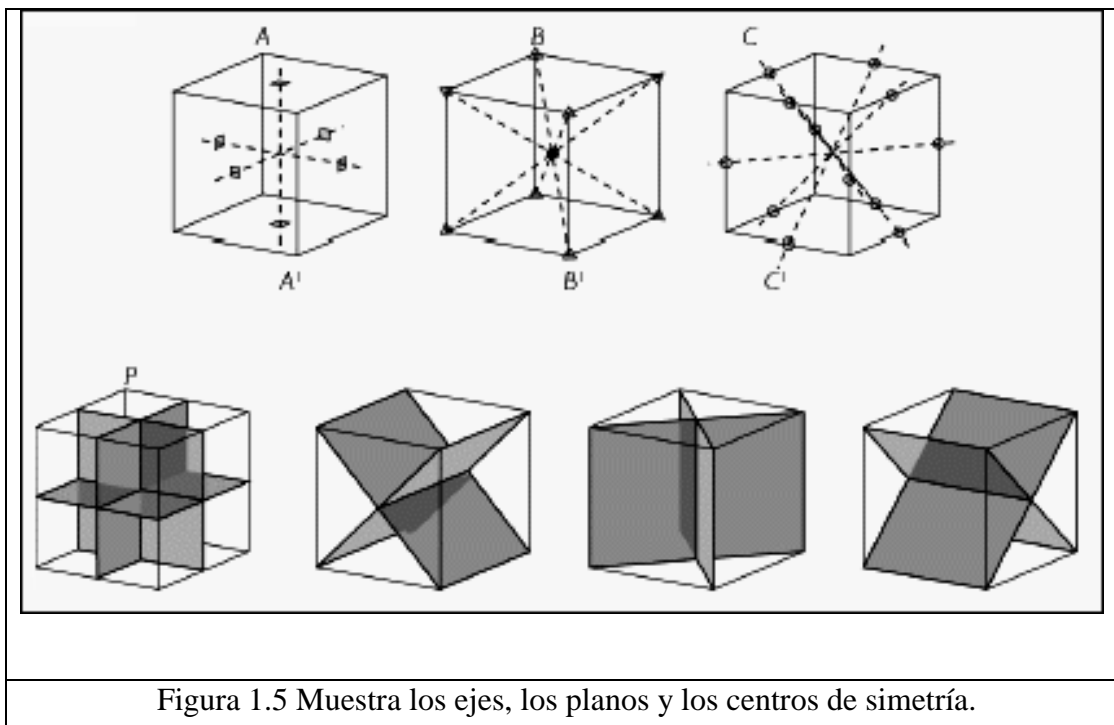


Figura 1.5 Muestra los ejes, los planos y los centros de simetría.

## I.2.2 Simetría traslacional

El elemento de simetría más simple y más importante que poseen los cristales es el de traslación. Además del orden traslacional, los cristales poseen orden orientacional a grandes distancias [2], es decir, las celdas unitarias a lo largo y ancho del cristal están orientadas en la misma dirección, por lo que no presentan rotaciones relativas entre sí. La celda unitaria es el agrupamiento más pequeño de átomos que conserva la geometría de la estructura cristalina y que, al apilarse en unidades repetitivas, forma un cristal con dicha estructura. El problema de  $N$  cuerpos se reduce a proporciones manejables por la existencia de simetría traslacional, esto significa que existen vectores bases,  $\bar{a}_1$ ,  $\bar{a}_2$  y  $\bar{a}_3$  tales que la estructura atómica permanece invariante bajo traslaciones a través de cualquier vector.

En la práctica esto es sólo ideal pues una muestra de laboratorio es necesariamente de tamaño finito, de tal forma que no debemos llevar la estructura a través de la frontera. De hecho, aun considerando que las únicas regiones donde esto importa son las capas de átomos cercanas a la superficie, queda el hecho de que la mayoría de los sólidos cristalinos son estructuralmente imperfectos y presentan defectos, impurezas y dislocaciones que interrumpen la regularidad del arreglo de los átomos, tales imperfecciones dan paso a muchas propiedades físicas [3].



### I.2.3 Simetría rotacional

Los ejes de rotación constituyen otro elemento de simetría presente en los cristales: un cristal posee un eje de rotación de grado  $n$  cuando permanece invariante después de girar ( $360$  grados  $/n$ ) alrededor de algún eje determinado. Los valores de  $n$  están limitados en redes infinitas por las ligaduras de los operadores de traslación a los valores 2, 3, 4 y 6 [4].

Por ejemplo, cuando un triángulo equilátero se rota por un ángulo de  $120$  grados alrededor de su centro, el triángulo se ve igual que antes de aplicar la rotación, entonces el triángulo posee simetría de rotación ternaria o simplemente simetría de rotación 3.

La condición de que los cristales se construyen por una yuxtaposición hasta el infinito de una celda unitaria única que debe cubrir totalmente el espacio sin dejar huecos (condición de periodicidad), genera restricciones sobre la forma que pueden tener las celdas unitarias. En general, estas son poliedros que poseen ejes de rotación con simetría binaria (grado 2), ternaria (grado 3), cuaternaria (grado 4) y senaria (grado 6), quedando excluidas todas las demás simetrías de rotación. En particular, los poliedros con ejes de rotación quiniarios o de orden 5 ( $360/5 = 72$  grados) correspondientes a la simetría del pentágono, están prohibidos. La razón de esto es que, geoméricamente, es imposible colocar pentágonos uno junto a otro sin dejar huecos.

Algunas redes pueden ser invariantes frente a productos de dos elementos de simetría sin serlo frente a cada uno de ellos. Existen otras transformaciones resultantes del producto de dos de las anteriores, o de una de las anteriores con una traslación que no pertenece a la red de Bravais:

- *Eje helicoidal*: la red es invariante frente a una rotación de orden  $n$  seguida de una traslación no perteneciente a la red de Bravais.

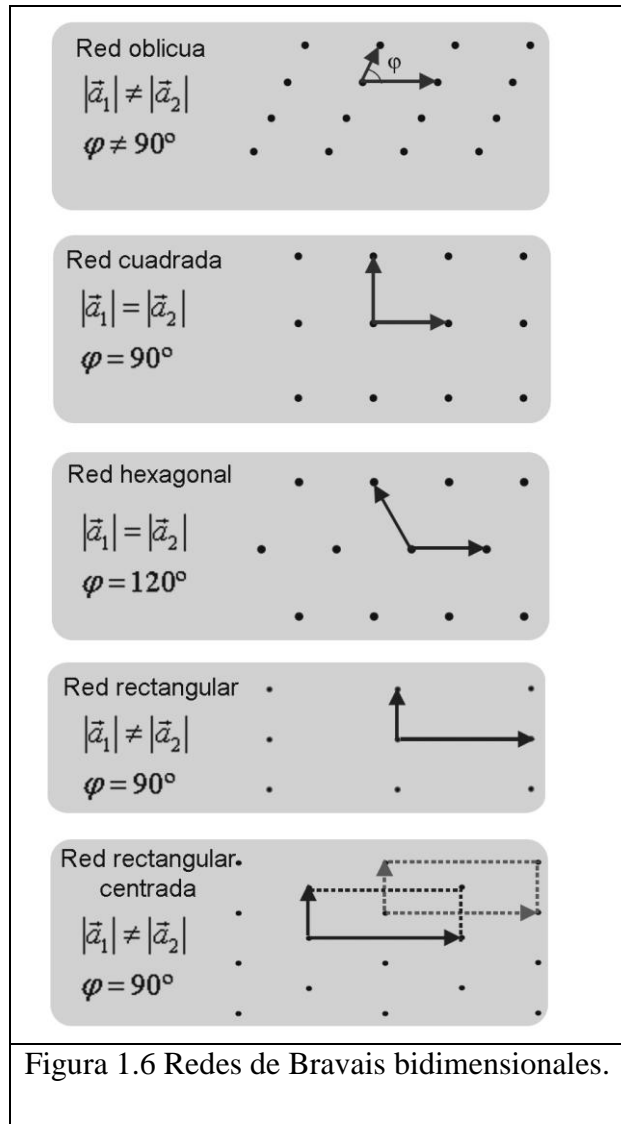
- *Plano de deslizamiento reflejado*: la red es invariante frente a una reflexión respecto a un plano seguida de una traslación no perteneciente a la red de Bravais.

### I.3 Tipos de red cristalina

Cuando se pide que la simetría rotacional sea compatible con la traslacional, el número total de operaciones de simetría se reduce significativamente, como se discute a continuación.

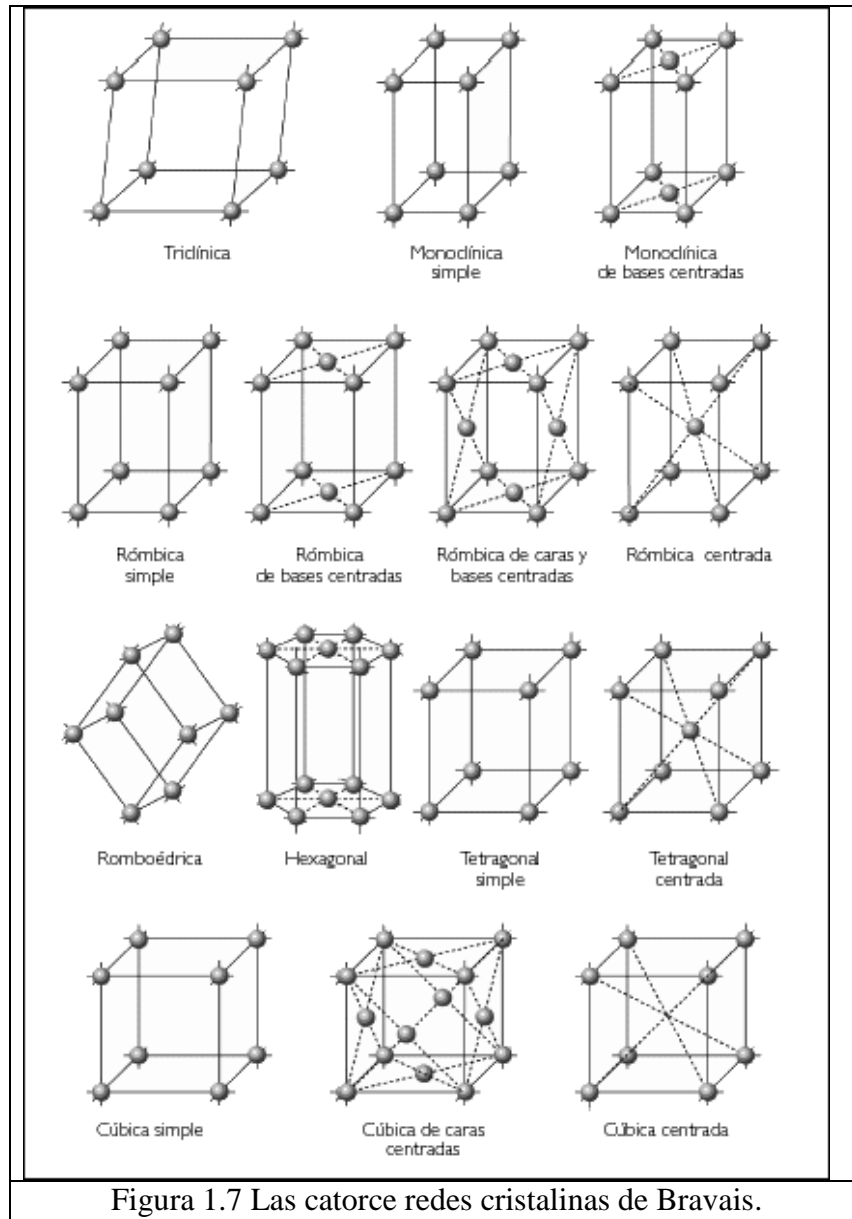
### **I.3.1 Redes bidimensionales**

A las redes en general se les conoce con el nombre de red oblicua y algunas de ellas pueden ser invariantes bajo rotaciones ternarias, cuaternarias, senarias, o bajo una reflexión especular. Entonces, para construir una red que sea invariante bajo una o más de estas operaciones se deben imponer restricciones a los vectores base que generan estas redes ( $\bar{a}_1$  y  $\bar{a}_2$ ). Hay cuatro tipos distintos de restricciones, y cada uno origina lo que se llama un tipo especial de red; por lo que hay cinco tipos distintos de red en dos dimensiones, la red oblicua y las cuatro redes especiales. La red de Bravais es un conjunto discreto y ordenado de un número infinito de puntos, cuyo orden y orientación es el mismo cualquiera sea el punto del conjunto desde donde se mire y los podemos observar en la figura 1.6.



### I.3.2 Redes tridimensionales

En tres dimensiones existen 14 tipos distintos de redes [2]. La red general es triclínica y hay 13 tipos de redes especiales, que están agrupados por conveniencia en sistemas clasificados de acuerdo a siete tipos distintos de celdas, las cuales son la triclínica, la monoclínica, la rómbica, la tetragonal, la trigonal, la cúbica y la hexagonal. La figura 1.7 nos muestra estas redes.



## I.4 Arreglo periódico de átomos

Como hemos visto, en general la estructura de todos los cristales puede ser descrita en términos de una red, con un grupo de átomos colocado en cada uno de los puntos de la red. A este grupo de átomos se le llama base y cuando se repite en el espacio forma la estructura cristalina.

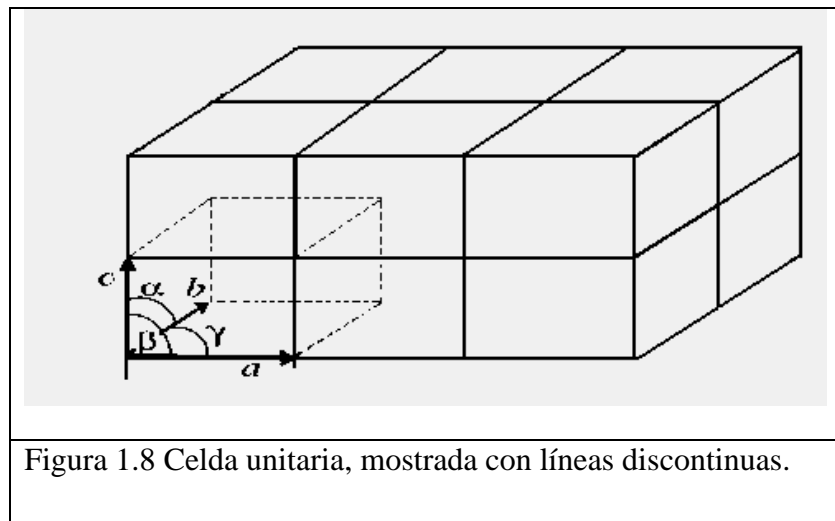
### I.4.1 Vectores de traslación

La red cristalina se puede describir por tres vectores de translación fundamentales  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{a}_2$  y  $\vec{a}_3$ , tales que el arreglo atómico se ve igual en todo sentido desde un punto  $\vec{r}$  o desde  $\vec{R}'$

$$\vec{R}' = \vec{r} + \vec{T} = \vec{r} + u_1\vec{a}_1 + u_2\vec{a}_2 + u_3\vec{a}_3 \quad \text{I.1}$$

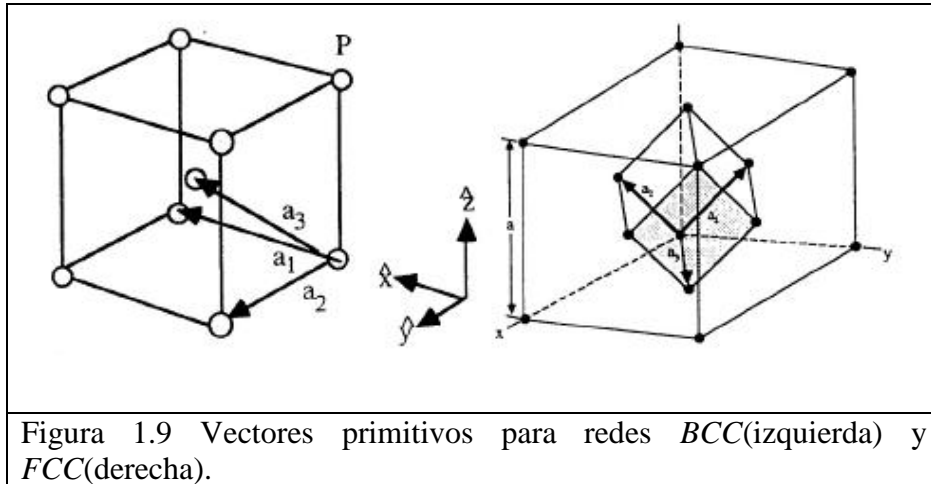
donde  $u_1$ ,  $u_2$  y  $u_3$  son números enteros y el vector  $\vec{T}$  es el vector de translación. El conjunto de los puntos  $\vec{R}'$  definidos generan una red periódica infinita [5], la cual constituye una abstracción matemática del sólido cristalino. Cabe mencionar que la elección de los vectores base no es única.

Llamamos celda unitaria al paralelepípedo construido a partir de los vectores correspondientes a los períodos traslacionales. Una opción posible para la celda unitaria en una red tridimensional, se muestra en la figura 1.8. Como regla, la celda unitaria se toma de tal forma que los vértices coincidan con la base del cristal.



#### I.4.2 Celda de Wigner-Seitz

Como se ha mencionado, el procedimiento para escoger la celda unitaria no es único y, algunas veces, una celda arbitraria no refleja la simetría de la red (ver figura 1.9). Existe un procedimiento muy conveniente para escoger una celda asociada a un punto que sí refleja la simetría de la red. Esta celda se encuentra dibujando líneas que conecten ese punto con el resto en la red, bisectando cada línea con un plano y tomando el poliedro más pequeño que contenga al punto delimitado por estos planos. A ésta región que rodea al punto la definimos como la celda de Wigner-Seitz para un punto de la red [3].



### I.4.3 Sistemas de índices para planos cristalinos

La orientación de un plano cristalino está determinada por tres puntos en el plano no colineales. Si cada punto se encuentra en un eje del cristal distinto, el plano se puede especificar dando las coordenadas de los puntos en términos de las constantes de la red  $\bar{a}_1$ ,  $\bar{a}_2$  y  $\bar{a}_3$ . Resulta más útil para el análisis estructural, el especificar la orientación de un plano por los índices determinados de la forma siguiente [2]:

- Encuentra las intersecciones en los ejes en términos de las constantes de la red  $\bar{a}_1$ ,  $\bar{a}_2$  y  $\bar{a}_3$ .
- Se toman los recíprocos de esos números y reducen a tres enteros que tengan la misma razón, usualmente los tres enteros más pequeños. Al resultado, encerrado en paréntesis  $(hkl)$ , se le llama índice del plano ó de Miller. Los índices de Miller se escriben sin comas y entre paréntesis, utilizando tildes para los valores negativos.

Con el propósito de estudiar la periodicidad del enrejado cristalino, supondremos que el cristal se extiende infinitamente en el espacio, una forma de abordar estos sistemas macroscópicos es a partir del espacio recíproco.

### I.4.4 Red recíproca

La periodicidad del cristal origina muchas consecuencias importantes, en particular implica que todas las propiedades como el potencial electrostático son periódicas [3]

$$\vec{V}(\vec{r}) = \vec{V}(\vec{r} + \vec{R}') \quad \text{I.2}$$

donde  $R' = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3$ , para  $n_i$  enteros. Esto implica el uso de la transformada de Fourier.

Denotando con  $\xi_s$  a coordenadas con período  $a_s$ , se obtiene

$$\vec{V}(\vec{r}) = \sum_{k_1, k_2, k_3 \rightarrow -\infty}^{\infty} \vec{V}_{k_1, k_2, k_3} \exp \left[ 2\pi \sum_s \frac{k_s \xi_s}{a_s} \right] \quad \text{I.3}$$

con lo que se puede regresar a coordenadas cartesianas mediante la transformación

$$\xi = \sum_k a_{s,k} x_k \quad \text{I.4}$$

lo que finalmente se obtiene es

$$\vec{V}(\vec{r}) = \sum_b \vec{V}_b e^{i\vec{b} \cdot \vec{r}} \quad \text{I.5}$$

y utilizando la ecuación 1.2, se tiene

$$\vec{V}(\vec{r} + \vec{R}') = \sum_b \vec{V}_b e^{i\vec{b} \cdot \vec{r}} e^{i\vec{b} \cdot \vec{R}'} \quad \text{I.6}$$

donde se observa que  $e^{i\vec{b} \cdot \vec{R}'}$  debería ser igual a uno, y que puede obtenerse si

$$\vec{b} \cdot \vec{a}_1 = 2\pi g_1, \vec{b} \cdot \vec{a}_2 = 2\pi g_2, \vec{b} \cdot \vec{a}_3 = 2\pi g_3, \quad \text{I.7}$$

con  $g_i$  enteros. Se puede mostrar que

$$\vec{b}_g = \vec{b} = \vec{b}_1 \cdot \vec{g}_1 + \vec{b}_2 \cdot \vec{g}_2 + \vec{b}_3 \cdot \vec{g}_3 \quad \text{I.8}$$

una aplicación inmediata del producto vectorial es el cálculo del volumen de la celda elemental de la red recíproca,  $\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$ , por lo que los vectores de la red recíproca son:

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}, \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}, \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \quad \text{I.9}$$

Los vectores  $\vec{b}_k$  definido por la Ec. I.9 no son coplanares (como no lo son los  $\vec{a}_i$ ) y son ortogonales a los  $\vec{a}_i$ . Luego entonces,  $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$  tienen la propiedad

$$\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi \delta_{i,j} \quad \text{I.10}$$

donde  $\delta_{i,j}$  es una delta de Kronecker.

Los puntos en la red recíproca son mapeados por el conjunto de vectores

$$\vec{G} = \nu_1 \vec{b}_1 + \nu_2 \vec{b}_2 + \nu_3 \vec{b}_3 \quad \text{I.11}$$

donde  $\nu_1, \nu_2, \nu_3$  son enteros. Un vector  $\vec{G}$  de esta forma es un vector de la red recíproca. La red recíproca juega un papel esencial en la teoría de los sólidos por su íntima conexión con el análisis de Fourier, la difracción cristalina y el estudio analítico de las funciones periódicas.

Hemos revisado en este capítulo cómo las propiedades físicas dependen del ordenamiento de sus átomos, pero como veremos en la siguiente sección, también dependen de las interacciones entre sus electrones más externos, lo que viene dado por el tipo de sus átomos constituyentes. Esto debido a que los electrones pueden transferirse de un átomo a otro (enlace iónico), compartirse entre átomos vecinos (enlace covalente) o moverse libremente de átomo en átomo (enlace metálico), por lo cual el conocimiento de la estructura y el comportamiento de la materia a escala atómica explican con gran éxito las propiedades a escala macroscópica.

## **I.5 Estructura de sólidos**

El cálculo de la estructura electrónica de los sólidos ha sido un fértil campo de investigación desde los inicios de la teoría cuántica, no sólo porque la estructura electrónica es un objetivo de primera importancia en sí mismo, sino porque constituye además una información esencial para poder comprender las propiedades ópticas, eléctricas, magnéticas y de transporte de los materiales.

La estructura de cristales puede ser comprendida en cierto grado al mirar detenidamente las propiedades de los átomos de los cuales están compuestos [6]. Podemos identificar distintas categorías dependiendo de la naturaleza de los electrones que participan activamente en la formación del sólido, como en el caso de los electrones en las capas externas del átomo aislado, que son los que interactúan fuertemente con electrones similares de los átomos vecinos; a éstos electrones se les conoce como electrones de valencia. Por otro lado tenemos a los electrones restantes del átomo que se encuentran fuertemente ligados al núcleo, y cuyas funciones de onda (orbitales) no se extienden más allá de la posición del núcleo, por lo que se ven muy poco afectados por los átomos vecinos. Así, en cuanto al sólido concierne, para la mayoría de los propósitos es razonable despreciar la presencia de éstos últimos y sólo considerar cómo se comportan los electrones de valencia.

### **I.5.1 Átomos sin electrones de valencia**



La primera categoría que consideramos consiste en aquellos átomos que no tienen electrones de valencia. Éstos son los átomos que tienen completamente llenas sus capas electrónicas y que en estado gaseoso son químicamente inertes, es decir, los gases nobles. Cuando estos átomos se juntan para formar sólidos, interactúan débilmente y sus electrones exteriores no se ven muy afectados, ésta débil interacción es el resultado de una pequeña polarización de la función de onda electrónica en un átomo debida a la presencia de otros átomos alrededor de él. Afortunadamente la interacción es atractiva, y se le conoce como interacción de Van der Waals o de dipolo fluctuante. Como la interacción es débil, los sólidos no son muy estables y tienen una temperatura de fusión baja. Al formar este tipo de sólidos, los átomos buscan tener el mayor número posible de vecinos para así maximizar la cohesión. La estructura cristalina que cumple esta demanda es una de geometría de empaquetamiento compacto, esto es, arreglos espaciales atómicos que permitan el empaquetamiento más apretado de esferas rígidas (figura 1.1).

Un arreglo compacto, que con la excepción del He, asumen los átomos de elementos nobles en forma sólida, es el *FCC* donde cada átomo tiene 12 primeros vecinos. El otro arreglo compacto es la estructura hexagonal que cuenta con 12 vecinos separados en dos grupos de 6 átomos, donde el primer grupo forma un anillo planar que rodea un átomo al centro, mientras que el segundo grupo consiste en dos triángulos equiláteros, uno por encima y otro por debajo del anillo.

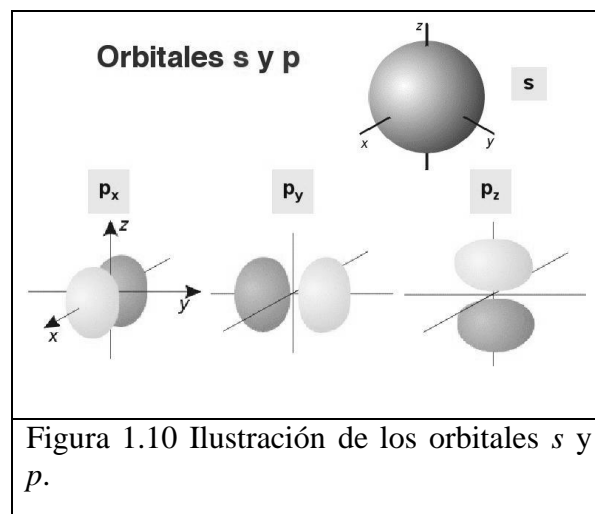
### **I.5.2 Átomos con electrones de valencia *s***

La segunda categoría consiste en átomos que tienen sólo electrones de valencia *s*. Estos son el *Li*, *Na*, *K*, *Rb*, y el *Cs*, con un electrón de valencia, y el *Be*, *Mg*, *Ca*, *Sr*, y *Ba* con dos electrones de valencia. Las funciones de onda de los electrones de valencia de todos estos elementos se extiende lejos del núcleo. En los sólidos, las funciones de onda de los electrones de valencia en un sitio tienen traslape significativo con los de primeros vecinos: como los estados *s* son esféricamente simétricos, las funciones de onda de los electrones de valencia no exhiben ninguna preferencia particular por una orientación de primeros vecinos. Para átomos con electrones de valencia *1s* y *2s*, todos los electrones de valencia están fuertemente traslapados y, por tanto, son compartidos por todos los átomos en el sólido y forman una “nube” de carga negativa, en donde el núcleo y los electrones internos forman iones que se encuentran inmersos dentro de esta nube de electrones de valencia. La estructura cristalina resultante es la que optimiza la repulsión electrostática de los iones de carga positiva con la atracción de la nube de electrones. Estas

estructuras resultan ser *BCC* para los alcalinos y *FCC* o *HCP* para los átomos con electrones de valencia  $2s$ , con la excepción del *Ba* que prefiere la estructura *BCC*.

### I.5.3 Átomos con electrones de valencia $s$ y $p$

El siguiente nivel de complejidad en la estructura cristalina viene con átomos que tienen electrones de valencia  $s$  y  $p$ . Los estados individuales  $s$  son esféricamente simétricos por lo que pueden formar combinaciones lineales con estados  $p$  que tienen carácter direccional, debido a que un sólo estado  $p$  tiene dos lóbulos de signos opuestos que apuntan en direcciones diametralmente opuestas. Los estados  $s$  y  $p$  ilustrados en la figura 1.10 pueden servir, entonces, como una nueva base para representar funciones de onda del electrón, y su traslape con funciones de onda vecinas del mismo tipo pueden derivar en formas interesantes para arreglar los átomos en una red cristalina estable.



La posibilidad de combinar estos orbitales atómicos para formar enlaces covalentes en un cristal se ilustra mediante el siguiente ejemplo bidimensional. Para un átomo etiquetado  $A$  y con estados  $s^A, p_x^A, p_y^A, p_z^A$  ortonormales, se consideran primero las combinaciones lineales que constituyen una nueva base ortonormal de orbitales atómicos:

$\phi_1^A = \frac{1}{\sqrt{3}}s^A + \sqrt{\frac{2}{3}}p_x^A$
$\phi_2^A = \frac{1}{\sqrt{3}}s^A - \frac{1}{\sqrt{6}}p_x^A + \frac{1}{\sqrt{2}}p_y^A$
$\phi_3^A = \frac{1}{\sqrt{3}}s^A - \frac{1}{\sqrt{6}}p_x^A - \frac{1}{\sqrt{2}}p_y^A$
$\phi_4^A = p_z^A$

Los primeros tres orbitales  $\phi_1^A, \phi_2^A, \phi_3^A$  apuntan en tres direcciones del plano  $xy$ , separadas 120 grados entre sí, mientras que la cuarta ( $\phi_4^A$ ) apunta en dirección perpendicular al plano.

Es fácil ver que si los orbitales son ortonormales, y los estados  $s^A, p_i^A$  ( $i = x, y, z$ ), tienen energías  $\varepsilon_s$  y  $\varepsilon_p$ , entonces los estados  $\phi_k$  ( $k = 1, 2, 3$ ) tienen energía  $\frac{\varepsilon_s + 2\varepsilon_p}{3}$ ; éstos estados, como están compuestos de un orbital atómico  $s$  y dos orbitales atómicos  $p$ , son llamados orbitales  $sp^2$ . Tomando ahora un segundo átomo idéntico, que se etiquetará como átomo  $B$  y con las siguientes combinaciones lineales de estados:

$\phi_1^B = \frac{1}{\sqrt{3}}s^B - \sqrt{\frac{2}{3}}p_x^B$
$\phi_2^B = \frac{1}{\sqrt{3}}s^B + \frac{1}{\sqrt{6}}p_x^B - \frac{1}{\sqrt{2}}p_y^B$
$\phi_3^B = \frac{1}{\sqrt{3}}s^B + \frac{1}{\sqrt{6}}p_x^B + \frac{1}{\sqrt{2}}p_y^B$
$\phi_4^B = p_z^B$

Los orbitales  $\phi_1^B, \phi_2^B, \phi_3^B$  también apuntan en tres direcciones del plano  $xy$  separadas por 120 grados, pero en sentido opuesto (rotadas en 180 grados) a aquéllas del átomo  $A$ . Entonces los enlaces se forman por superposición de dos orbitales atómicos. Esta es la esencia de la teoría del enlace de Valencia que se aplica a orbitales atómicos híbridos al igual que a orbitales atómicos puros, describiendo así de qué manera se forma el enlace. Por ejemplo, si en los átomos existen orbitales de tipo  $p$  disponibles, estos pueden solapar originando una banda  $p$  (figura 1.10). Como los orbitales  $p$  poseen mayor energía que los orbitales  $s$  de la misma capa, se observa a menudo la

separación entre la banda  $s$  y la banda  $p$ . Pero si las bandas son anchas y las energías de los orbitales  $s$  y  $p$  de la misma capa no difieren mucho, entonces ambas bandas interfieren (figura 1.11). Esta interferencia es la responsable de que los elementos tengan un comportamiento metálico.

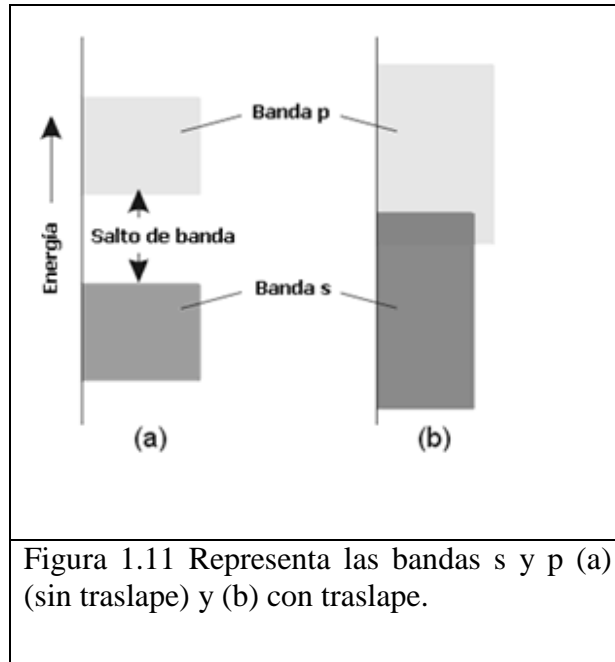


Figura 1.11 Representa las bandas  $s$  y  $p$  (a) (sin traslape) y (b) con traslape.

Uno de los materiales que presentan estos dos orbitales son los nanotubos de carbón, los cuales pueden ser construidos al enrollar una capa bidimensional de grafito, formando un cilindro hueco [7]. En el capítulo III y IV discutiremos algunas de sus propiedades físicas, tales como su relación de dispersión, densidad de estados y su transmitancia. Una de las propiedades físicas que abordaremos en esta tesis para caracterizar a las redes hexagonales es el transporte electrónico, el cual se puede estudiar de diferentes formas, se discutirán en el capítulo II.

# Capítulo II

## Modelos del transporte electrónico en sólidos

### II.1 Introducción

Las medidas del transporte electrónico en sólidos es una herramienta muy valiosa para caracterizar los materiales. Desde inicios del siglo pasado, la teoría de conducción electrónica en sistemas con alto grado de degeneración como lo son los metales, se basan en el modelo de Drude-Sommerfeld, donde el transporte se fundamenta sobre las ecuaciones dinámicas (como las de Newton, en el caso clásico). Sin embargo, estas ecuaciones por sí mismas no son suficientes para describir el transporte (independientemente de que sea clásico o cuántico), debido a que las ecuaciones dinámicas son reversibles, mientras que los procesos de transporte son disipativos e irreversibles. Las teorías de transporte usualmente introducen esta irreversibilidad asumiendo que el sistema de interés está en contacto con un gran reservorio, el cual está siempre en equilibrio termodinámico, y tratando continuamente de restaurar el equilibrio al sistema a través de interacciones aleatorias. Esto es evidente en la teoría de Landauer [8] donde el sistema está conectado a dos reservorios de electrones, como se discutirá en la sección II.4. Por otro lado, la teoría cuántica de conducción electrónica se basa en las funciones de correlación temporal corriente-corriente para obtener el tensor de conductividad, al cual se le conoce como el formalismo de Kubo [5,9]. Este formalismo es una teoría dependiente del tiempo, mientras que el formalismo de Landauer expresa la conductancia en términos de las propiedades estáticas de dispersión. Se ha demostrado que, bajo ciertas circunstancias, los formalismos de Kubo y de Landauer son equivalentes [10].

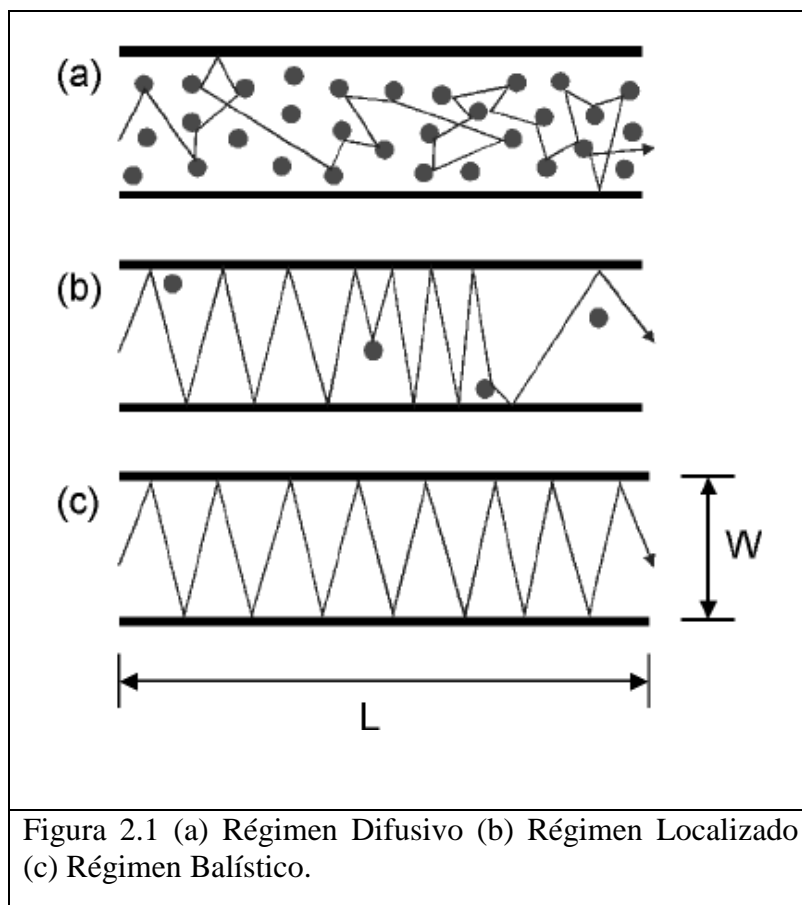
En general, las propiedades de transporte dependen de los procesos de dispersión microscópicos. Es posible hacer una clasificación de 3 diferentes regímenes de transporte (figura 2.1) de acuerdo con escalas de longitud típicas, a saber, difusivo, localizado y balístico.

Se puede definir al régimen difusivo de transporte, para el caso en que  $\lambda_F \ll l \ll L \ll \zeta$ , donde  $\lambda_F = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$  es la longitud de onda de Fermi,  $l$  es el

camino libre medio,  $L$  el tamaño del sistema y  $\zeta$  la longitud de localización. Por lo que en éste régimen, casi todos los estados son extendidos y la conductancia  $g \propto L^{d-2}$ , donde  $d$  es la dimensión del sistema.

Para el régimen localizado, el tamaño del sistema excede la longitud de localización  $\zeta \ll L$ . En este régimen la conductancia  $g \ll 1$  y decae exponencialmente con el tamaño del sistema,  $g \propto \exp\left(\frac{-L}{\zeta}\right)$ , además crece exponencialmente con la temperatura,  $g \propto \exp\left[-\left(\frac{\Delta}{k_B T}\right)^{1/2}\right]$ , es decir, la existencia de una energía de activación  $\Delta$  y la conducción son por saltos.

En el caso del régimen balístico, el tamaño del sistema es más pequeño que el camino libre medio ( $L < l$ ) y, en consecuencia, los efectos de la interferencia cuántica son particularmente importantes.



## II.2 Modelo de Drude

Se tienen distintos modelos para intentar describir el comportamiento de los electrones en sólidos cristalinos. Uno de los primeros fue propuesto por Paul Drude en 1900, quien estudió desde un punto de vista puramente clásico, la causa de la resistencia finita en los metales. Los electrones se toman como esferas cargadas que se desplazan a través de una "sopa" de iones con una probabilidad finita de dispersión. Es esta dispersión la que ocasiona la resistividad.

El modelo de Drude contiene algunas simplificaciones y estimaciones extremas, como la ausencia de mecánica cuántica y el hecho de que no se toma en cuenta la interacción entre los electrones ni la de éstos con los iones positivos.

## II.2 .1 Conductividad eléctrica *dc* para metales

El modelo consiste en considerar a un conjunto de portadores de carga (electrones de carga  $-e$  y masa  $m$ ), que tienen una densidad por unidad de volumen ( $n$ ). Por ejemplo, en un conductor metálico los iones forman enrejados periódicos y tienen una movilidad mucho menor que los electrones. En la presencia de un campo eléctrico  $\vec{E}$  sólo los electrones se pueden mover y lo hacen de acuerdo con las leyes de Newton, es decir, si  $v$  es la velocidad de un electrón, entonces

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = (-e)\vec{E} \quad 2.1$$

Por lo tanto, la velocidad de los electrones es de la forma

$$\vec{v}(t) = \vec{v}_0 - \frac{e}{m}\vec{E}t \quad 2.2$$

En este modelo no interesa el comportamiento de los electrones individuales, sino sólo el promedio sobre un número muy grande de electrones, por lo que la cantidad de interés es el promedio de la velocidad. Se tienen las siguientes hipótesis sobre el movimiento del conjunto de electrones:

1. No se toman en cuenta las interacciones electrón-electrón ni electrón-ión.
2. Las colisiones entre electrones son instantáneas y cambian abruptamente la velocidad de los mismos, es decir, ellos no tienen interacción antes ni después de la colisión.
3. Existe un tiempo de relajación ( $\tau$ ), el cual está relacionado con el tiempo promedio entre dos colisiones consecutivas.

4. Se supone que los electrones alcanzan un equilibrio térmico en sus alrededores a través de las colisiones.

De esta manera, dado que la velocidad promedio  $\bar{v}_0$  es cero, obtenemos la velocidad media de los electrones

$$\bar{v} = -\bar{E} \tau \frac{e}{m} \quad 2.3$$

Ahora, la densidad de corriente ( $J$ ) en un conductor metálico está dada por

$$\bar{J} = ne\bar{v} \quad 2.4$$

por lo que la ley de Ohm dentro de este modelo queda como

$$\bar{J} = \bar{E} \frac{n\tau e^2}{m} = \sigma_0 \bar{E} \quad 2.5$$

donde  $\sigma_0$  es la conductividad eléctrica y está dada por  $\sigma_0 = \frac{n\tau e^2}{m}$ .

## II.2.2 Conductividad eléctrica ac para metales

En la presencia de un campo eléctrico de la forma  $\bar{E}(t) = \text{Re}[\bar{E}(\omega)e^{-i\omega t}]$ , para el momento promedio de un electrón  $\bar{p}(t)$ , considerando las colisiones como una fuente de fricción, se tiene que

$$\frac{d\bar{p}(t)}{dt} = -\frac{\bar{p}(t)}{\tau} - e\bar{E}(t) \quad 2.6$$

Aplicando la transformada de Fourier [11], se obtiene que

$$-i\omega\bar{p}(\omega) = -\frac{\bar{p}(\omega)}{\tau} - e\bar{E}(\omega) \quad 2.7$$

de (2.4) se tiene que  $\bar{J} = -\frac{ne\bar{p}}{m}$ , y en este caso  $\bar{J}(t) = \text{Re}[\bar{J}(\omega)e^{-i\omega t}]$ , por lo que

$$\bar{J}(\omega) = \frac{ne^2}{m} \frac{\bar{E}(\omega)}{\left(\frac{1}{\tau}\right) - i\omega} = \sigma(\omega)\bar{E}(\omega) \quad 2.8$$

donde la conductividad dependiente de la frecuencia o ac  $[\sigma(\omega)]$  está dada por

$$\sigma(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 - i\omega\tau} \quad 2.9$$

En general esta es una forma clásica de ver el transporte, sólo que en los sistemas de escala nanoscópica la conducción electrónica debe ser estudiada



por medio de las teorías cuánticas. En la siguiente sección revisaremos el formalismo Landauer.

### II.3 Fórmula de Landauer

En esta sección introducimos la fórmula de Landauer y el método de matriz de transferencia tomando un modelo de amarre fuerte (tight-binding), el cual es discutido en el apéndice A.

La fórmula de Landauer ha sido usada para calcular la conductancia de sistemas mesoscópicos [8]. La idea esencial es considerar una región molecular conectada a dos saturadores balísticos (cables con conducción balística), con potenciales químicos  $\mu_L$  y  $\mu_R$  representados en la figura 2.2.

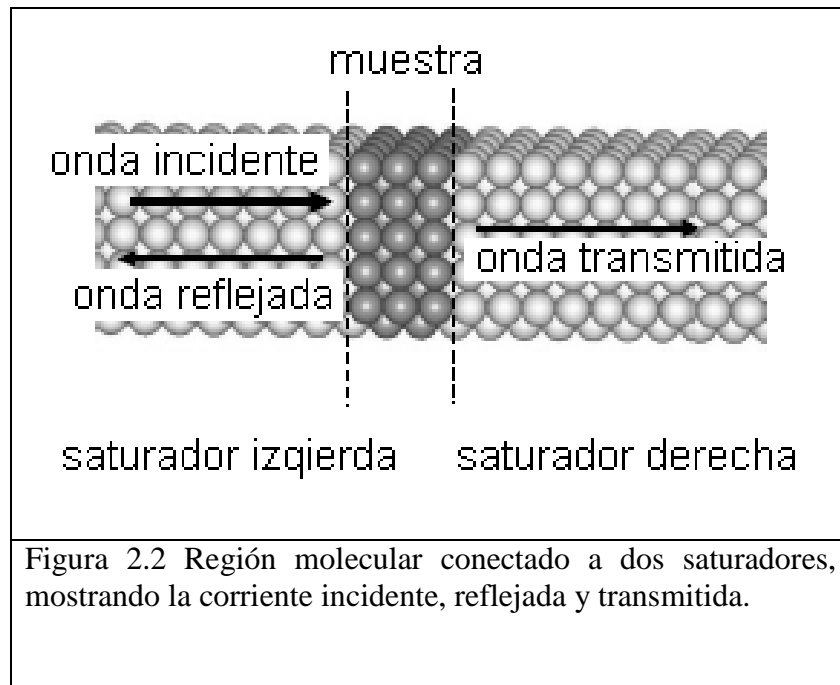


Figura 2.2 Región molecular conectado a dos saturadores, mostrando la corriente incidente, reflejada y transmitida.

El flujo de corriente a través de un conductor es proporcional al coeficiente de transmisión, el cual describe la transmisión de electrones en un conductor. La conductancia de una muestra es proporcional a la conductividad eléctrica ( $\sigma$ ) dada por

$$G = \sigma \frac{W}{L} \quad 2.10$$

Donde  $L$  es la longitud y  $W$  es el área de la sección transversal de la muestra. Tomando en cuenta la idea de Landauer, la conductancia es

$$G = \frac{2e^2}{h} MT \quad 2.11$$

Donde  $M$  es el número de canales transversales y  $T$  es la probabilidad promedio de conducción sobre los canales  $M$ , o su transmitancia. Para un solo canal de conducción la corriente puede calcularse partiendo de

$$I = -\frac{2}{2\pi} \iiint e v f d^3 k = -\frac{e}{\pi} \int \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} dk = -\frac{e(\mu_R - \mu_L)}{\pi \hbar} \quad 2.12$$

donde  $f$  es la función de distribución de Fermi fuera del equilibrio y  $\mu_i$  es el potencial químico de los reservorios conectados al conductor (saturadores). Además sabemos que  $\mu_R - \mu_L = -eV$ , siendo  $V$  la diferencia de voltaje aplicado. Por lo tanto,

$$G = \frac{I}{V} = \frac{2e^2}{h} \quad 2.13$$

Si metemos obstáculos al canal con probabilidad de conducir electrones ( $T$ ), la conductancia es

$$G = \frac{2e^2}{h} T \quad 2.14$$

Si el conductor tiene  $M$  canales transversales la conducción está dada por la Ec. 2.11.

En el formalismo de Landauer la distribución del potencial es una consecuencia del flujo de electrones en el conductor, contrario a lo convencional donde se considera a la corriente como una consecuencia del voltaje aplicado. Ahora, si el potencial se promedia sobre una región suficientemente grande para remover las oscilaciones debido a interferencias, la transmitancia ( $T$ ) en la Ec. 2.11 Se reemplaza por  $T/(1-T)$  [13], esto es

$$G = \frac{2e^2}{h} M \frac{T}{1-T} \quad 2.15$$

La principal diferencia entre las ecuaciones 2.11 y 2.15 radica en el tipo de saturador que se conecta al sistema. Si éstos son fuentes de corriente, entonces se debe de usar la Ec. 2.15. En cambio, si ellos son conductores perfectos, entonces la Ec. 2.11 debe ser utilizada [10]. En resumen, la conductancia eléctrica de Landauer es proporcional a la transmitancia del sistema, la cual discutiremos a continuación.

### II.3.1 Transmitancia

Para poder hablar de la dispersión de un electrón en una cadena finita unidimensional, consideramos el caso de una cadena de  $N$  átomos cuyos extremos se encuentran conectados a dos saturadores periódicos (cadenas periódicas) semi-infinitos. Tomamos a las autoenergías y a las integrales de salto de la red como  $\{\varepsilon_n\}$  y  $\{t_n, t_{n+1}\}$  respectivamente, donde  $n$  corre de 1 a  $N$  (número de átomos) y para las integrales de salto estamos considerando una aproximación a primeros vecinos. Por último, suponemos que el potencial fuera de la red es constante, es decir que  $\varepsilon_n = \varepsilon_0$  si  $n \leq 0$  o  $n > N$ . Si utilizamos el formalismo de amarre fuerte y, tomando en cuenta que estamos en el caso unidimensional, entonces la ecuación de Schrödinger estacionaria puede representarse de la siguiente manera:

$$\mathbf{C}_{n+1} = \mathbf{T}_n \mathbf{C}_n \quad 2.16$$

donde  $\mathbf{T}_n$  es la matriz de transferencia

$$\mathbf{T}_n = \begin{pmatrix} \frac{E - \varepsilon_n}{t_{n,n+1}} & -\frac{t_{n,n-1}}{t_{n,n+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad 2.17$$

y el vector de las amplitudes de la función de onda  $\mathbf{C}_n$

$$\mathbf{C}_n = \begin{pmatrix} C_n \\ C_{n-1} \end{pmatrix} \quad 2.18$$

está representado en la base de Wannier.

Para una cadena no periódica, existe una sucesión de matrices de transferencia que sigue la secuencia de ordenamiento de los átomos y cuyo producto

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}_N \mathbf{T}_{N-1} \dots \mathbf{T}_1 = \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix} \quad 2.19$$

describe la propagación de un electrón a lo largo de dicha cadena. La norma de la matriz  $\mathbf{T}$  se define como [14]

$$\|\mathbf{T}\| = \sqrt{T_{11}^2 + T_{12}^2 + T_{21}^2 + T_{22}^2} \quad 2.20$$

Ahora, cuando un electrón con energía  $E$  incide en uno de los extremos de la red consideramos sólo energías  $E$  dentro de la banda permitida en la cadena, ya que en el caso contrario no hay propagación del electrón. Las ondas planas en los saturadores tienen la siguiente forma

$$\Psi_n(\mathbf{k}) = \begin{cases} Ae^{ikna} + Be^{-ikna}, & \text{si } n \leq 1 \\ Ce^{ikna} + De^{-ikna}, & \text{si } n > N \end{cases} \quad 2.21$$

Si el electrón incide en el extremo izquierdo (caso en que  $n = 1$ ), tenemos que  $k > 0$ ,  $A = 1$ ,  $B = r$ ,  $C = \chi$  y  $D = 0$ , donde  $r$  y  $\chi$  son respectivamente las amplitudes de reflectancia y transmitancia, las cuales satisfacen la relación

$$|\chi|^2 + |r|^2 = 1 \quad 2.22$$

Para poder expresar a  $|\chi|$  y  $|r|$  en términos de  $T_{11}$ ,  $T_{12}$ ,  $T_{21}$ , y  $T_{22}$ , escribimos la ecuación 2.21 de la siguiente forma

$$\begin{pmatrix} \chi e^{ik(N+1)a} \\ \chi e^{ikNa} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ika} + r e^{-ika} \\ 1 + r \end{pmatrix} \quad 2.23$$

por lo que encontramos que [14, 15]

$$\chi = -\frac{2i(\sin ka)e^{-ikNa}}{\tau_{11}e^{-ika} + \tau_{12} - e^{ika}(\tau_{21}e^{-ika} + \tau_{22})} \quad 2.24$$

y

$$r = -\frac{\tau_{11}e^{ika} + \tau_{12} - e^{ika}(\tau_{21}e^{-ika} + \tau_{22})}{\tau_{11}e^{-ika} + \tau_{12} - e^{ika}(\tau_{21}e^{-ika} + \tau_{22})} \quad 2.25$$

donde el vector de onda  $k$  se relaciona con  $E$  y  $\varepsilon_0$  a través de la relación de dispersión de los saturadores, es decir, mediante la relación

$$\cos ka = \frac{E - \varepsilon_0}{2t} \quad 2.26$$

Por lo que finalmente encontramos que la transmitancia ( $T$ ) está dada mediante la ecuación,

$$T(E) = |\chi|^2 = \frac{4 - \left(\frac{E}{t}\right)^2}{\left[\tau_{21} - \tau_{12} + (\tau_{22} - \tau_{11})\frac{E}{2t}\right]^2 + (\tau_{22} + \tau_{11})^2 \left(1 - \frac{E^2}{4t^2}\right)}, \quad 2.27$$

la cual está relacionada con la conductancia del sistema dentro del formalismo de Landauer. En el capítulo IV y V vamos a utilizar estos métodos para calcular la densidad de estados y la conductancia eléctrica en una red hexagonal y en nanotubos.

# Capítulo III

## Estructura de bandas

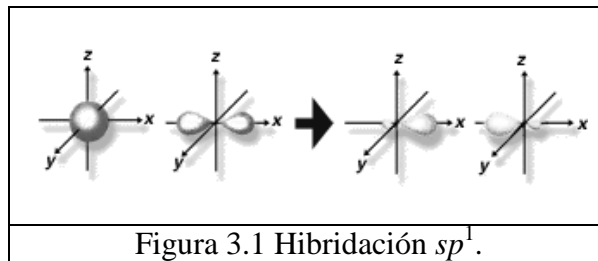
### III.1 Introducción

Un hallazgo importante de la física de la materia condensada es la teoría de bandas de energía en los sólidos. Un [electrón](#) ligado a un átomo aislado sólo puede encontrarse en un conjunto determinado de niveles atómicos de energía, sin embargo, en un sólido cristalino donde hay muchos átomos idénticos con un arreglo espacial regular, estos niveles de energía se convierten en bandas de energías permitidas separadas por bandas de energías prohibidas [4]. Como la estructura de bandas es una propiedad general del cristal, cada átomo puede aportar un electrón exterior (de valencia) para llenar las bandas permitidas. Según el [principio de exclusión](#) de [Pauli](#), los electrones llenan cada nivel de energía de dos en dos; uno de los electrones tiene [espín](#) hacia arriba y el otro hacia abajo. En el [cero absoluto](#), todos los niveles de energía inferiores del cristal están llenos. El nivel de energía conocido como nivel de Fermi —que constituye la línea divisoria a partir de la cual los niveles de energía tienden a estar vacíos, y por debajo de la cual tienden a estar llenos— ayuda a definir las propiedades de los materiales en ya sea como conductores ó aislantes. Es decir, si el nivel de Fermi se encuentra dentro de una banda permitida, el sólido es un conductor. Así ocurre, por ejemplo, en los metales como la [plata](#) o el [cobre](#), en donde incluso una energía pequeña puede hacer que los electrones del nivel ocupado más alto pasen al nivel no ocupado más bajo. Esta movilidad de los electrones es el origen de las cualidades que definen un conductor, como su capacidad de conducir la [electricidad](#) y el [calor](#). Si el nivel de Fermi se encuentra en la parte superior de una banda permitida, y hay una distancia relativamente grande hasta la siguiente banda permitida, el sólido es un aislante, como el [diamante](#) o el [cuarzo](#). Como son necesarias energías muy altas para excitar sus electrones, los aislantes conducen mal el calor y/o la electricidad y no absorben luz. Por último, si el nivel de Fermi está cerca de la parte superior de una banda permitida pero la zona de energías prohibidas que hay por encima es estrecha, el sólido es un semiconductor, como un ejemplo podemos citar al [silicio](#).

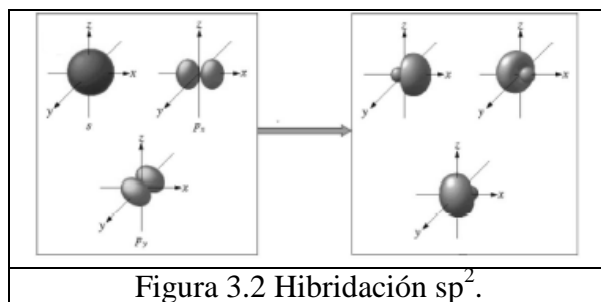
El propósito de este capítulo es calcular la estructura de bandas de una red de grafeno y la de los diferentes nanotubos de carbón. La estructura de bandas de estas redes han sido calculadas desde décadas atrás por varios investigadores, por ejemplo el grafeno por P. Wallace (1947) y los nanotubos de carbón por R. Saito *et al.* (1992) y E. Minot (2004). Nuestro objetivo es reproducir sus resultados y extenderlos considerando diferentes energías de salto entre los átomos de carbón.

### III.2 Grafeno

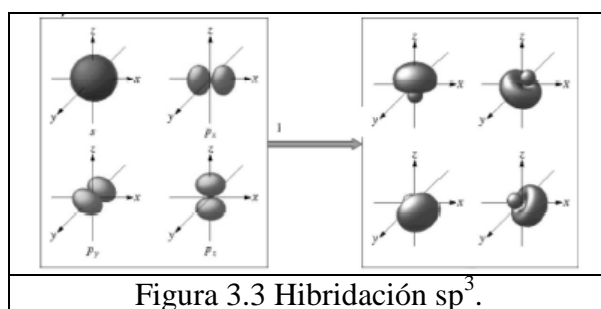
El átomo de carbono tiene una estructura electrónica  $1s^2 2s^2 2p^2$ . La cual le da al carbono la capacidad de conectarse entre sí de múltiples formas, teniendo como consecuencia una gran variedad de sólidos, tanto moleculares como cristalinos por medio del proceso de hibridación. Los principales tipos de hibridación del carbono dan lugar a diferentes materiales, por ejemplo, si en la hibridación participa un electrón en el orbital  $2s$  y un electrón en el orbital  $2p$ , la hibridación es de tipo  $sp^1$  (figura 3.1), generando estructuras moleculares, por ejemplo, el acetileno ( $C^2H^2$ ).



La siguiente estructura posible para el carbono procede del tipo de hibridación  $sp^2$  (Figura 3.2). En este tipo de hibridación, el orbital atómico  $2s$  se mezcla con dos orbitales  $2p$  para generar tres orbitales moleculares ( $\sigma$ ), dispuestos en forma trigonal. La estructura generada es una red de tipo hexagonal conocida como grafeno. El orbital  $\pi$  restante es perpendicular a los orbitales  $\sigma$ , y el electrón que se encuentra en dicho orbital está débilmente ligado y puede saltar de orbital a orbital, y será el responsable de las propiedades electrónicas de baja energía de este sistema.



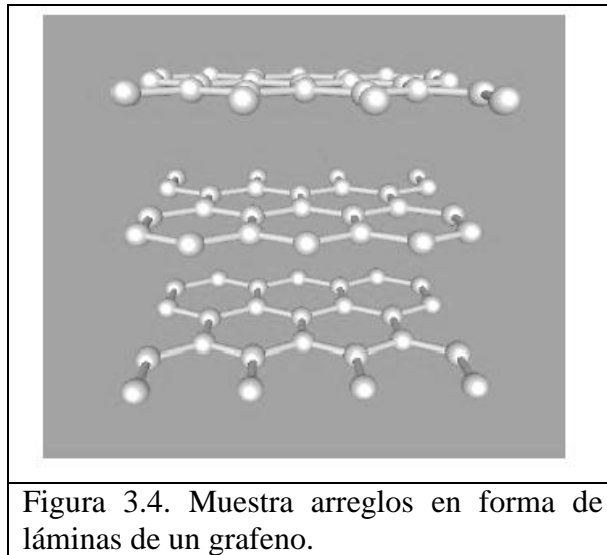
Por último, la estructura restante procede de la hibridación del orbital  $2s$  con los tres orbitales  $2p$  (hibridación de tipo  $sp^3$ ). Se generan cuatro orbitales  $\sigma$  dispuestos en estructura con forma de tetraedro (Figura 3.3). El sólido basado en el carbono con esta estructura es el diamante.



Al contrario que las cadenas unidimensionales de tipo acetileno y la estructura bidimensional del grafeno, el diamante posee una estructura tridimensional, y puesto que no existen orbitales  $\pi$  deslocalizados el diamante es un material aislante. El grafeno, a su vez, es la estructura generatriz de otros compuestos, como del fullereno o  $C_{60}$ , producido experimentalmente en 1985 por R. Curl, H. Kroto y R. Smalley, o los nanotubos, descubiertos en 1952 por Radushkevich y Lukyanovich y, más tarde en 1991, redescubiertos por S. Iijima. Un nanotubo no es más que una lámina de grafeno enrollada sobre sí misma formando un cilindro. La libertad a la hora de enrollar la lámina de grafeno hace que exista toda una plétora de estas estructuras, sin embargo, debido a la peculiar estructura de baja energía del grafeno que veremos más adelante y a las simetrías de la red hexagonal, los nanotubos pueden pertenecer tanto al grupo de los nanotubos metálicos como al de semiconductores. Ambos van a ser discutidos en detalle en este capítulo, pero empezaremos por el tema más general de las redes de grafeno.

Como hemos mencionado antes, la hibridación  $sp^2$  en los átomos de carbono genera una estructura bidimensional hexagonal, tal y como se ve en la figura 3.4, la estructura cristalina hexagonal puede entenderse como una superposición de dos subredes triangulares interconectadas, lo que hace que la

red hexagonal no sea una auténtica red de Bravais, y que la celda unidad en el espacio real esté constituida por dos átomos pertenecientes a distintas subredes.



En espacio real los vectores unitarios de la red hexagonal (figura 3.5) están dados por:

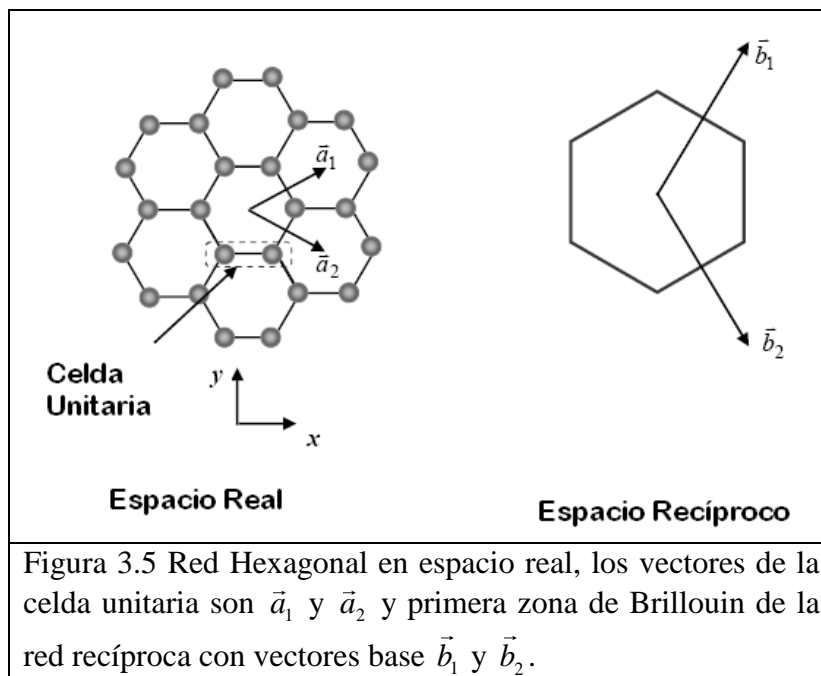
$$\vec{a}_1 = \left( \frac{\sqrt{3}}{2} a, \frac{a}{2} \right) \text{ y } \vec{a}_2 = \left( \frac{\sqrt{3}}{2} a, -\frac{a}{2} \right) \quad 3.1$$

donde  $a=2.46 \text{ \AA}$  es la constante de red y los correspondientes vectores de la red recíproca son :

$$\vec{b}_1 = \left( \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{a} \right) \text{ y } \vec{b}_2 = \left( \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, -\frac{2\pi}{a} \right) \quad 3.2$$

la celda unitaria contiene dos átomos de carbón. Como veremos más adelante, la primera zona de Brillouin tiene forma de hexágono, cada átomo de carbono tiene tres enlaces y su configuración es  $sp^2$ .





Una forma de caracterizar a los materiales es por medio de la estructura de bandas [16]. La estructura de bandas introduce conceptos característicos del lenguaje del sólido, como energía de Fermi ( $E_F$ ), bandas de valencia y conducción, espaciado interbanda (banda prohibida o bandgap) y ancho de banda. La energía de Fermi aparece al ocupar con electrones los autovalores, o valores propios, a partir del valor mínimo y cumpliendo el Principio de Pauli, representando la frontera entre los estados ocupados y los no ocupados. Las bandas de valencia son bandas con energía menor que la energía de Fermi, predominantemente ocupadas, mientras que las bandas de conducción aparecen a energías superiores y están predominantemente vacías. En materiales semiconductores y aislantes surgen rangos de energía entre la banda de valencia más alta y la vacía más baja que no contienen bandas en ningún punto de la primera zona de Brillouin (PZB). Este vacío de bandas es el gap [17], o banda prohibida, concepto de gran importancia en el estudio de las transiciones ópticas y la conducción eléctrica.

La anchura de una banda es la diferencia de energía entre el valor más bajo y el más alto de su estructura.

El diagrama de las bandas se construye seleccionando puntos especiales que son importantes por sus propiedades de simetría. El centro de la PZB se llama punto  $\Gamma$  y es el origen de coordenadas o punto  $(0, 0, 0)$ . Las coordenadas de la PZB son longitudes recíprocas de las dimensiones del vector de ondas. Tomando como ejemplo el sistema cúbico, que se caracteriza por una única constante de celda  $a$ , las coordenadas suelen darse en unidades de  $\pi/a$ . El

punto  $\Gamma$  tiene toda la simetría del cristal. Otros puntos tienen simetría igual o menor. Así, en la red cúbica centrada en las caras (FCC), la PZB es un poliedro con caras cuadradas y caras hexagonales [11]. Las primeras son normales a las direcciones (100) (con los ejes ortogonales cartesianos como base) y las segundas son normales a las direcciones (111). El centro de la cara cuadrada se llama punto  $X$  y sus coordenadas son (1,0,0). El centro de la cara hexagonal se llama  $L$  y es el punto (1/2, 1/2, 1/2). Así se definen otros puntos especiales en la PZB para cada estructura del espacio euclídeo. El diagrama de bandas contiene trazos verticales asociados a los puntos especiales elegidos. Entre dos líneas verticales tenemos, así, una dirección de la PZB a lo largo de la cual se diagonaliza el hamiltoniano en una colección de puntos. La unión de las energías correspondientes a estos puntos forma la estructura de las bandas. De esta forma el diagrama recorre las direcciones más relevantes de la PZB informando sobre la evolución de la energía con el vector de ondas.

Por lo que hemos descrito hasta ahora es claro que la estructura de banda depende mucho de la forma de la red.

### III.3 Cadena Unidimensional

Vamos a dar ejemplos de cómo se calcula la estructura de bandas para diferentes geometrías del sistema.

Sabemos de la mecánica cuántica, que la ecuación de Schrödinger en el formalismo de Dirac [18] está dada por

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad 3.3$$

proyectando en coordenadas espaciales ( $\langle \mathbf{R} |$ )

$$\langle \mathbf{R} | H | \Psi \rangle = E \langle \mathbf{R} | \Psi \rangle \quad 3.4$$

Para describir la función de onda (parte espacial)  $|\Psi\rangle$  consideraremos sólo orbitales  $s$ , omitiendo los índices de espín debido a que el Hamiltoniano de amarre fuerte no depende de éste, y tomando la aproximación de orbitales atómicos [19] podemos escribir a  $|\Psi\rangle$  como

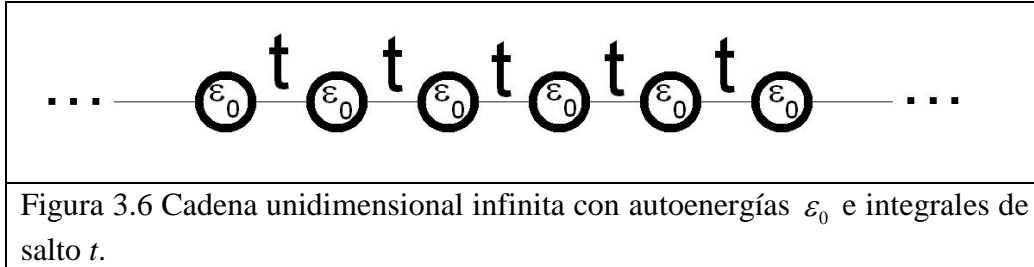
$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1} c_i |i\rangle \quad 3.5$$

para sistemas periódicos, los coeficientes de expansión ( $c_i$ ) tienen la forma [11],

$$c_i = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} \quad 3.6$$

donde  $\mathbf{k}$  representa el vector de la red recíproca, y  $N$  el número de átomos. En el caso de una cadena periódica monoatómica (figura 3.6), la función de onda está dada por

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} |i\rangle \quad 3.7$$



Utilizando el hamiltoniano de amarre fuerte dentro de la aproximación a primeros vecinos [11] para la cadena periódica monoatómica tiene la forma

$$H = \varepsilon_0 \sum_j |j\rangle\langle j| + t \sum_{\langle i,j \rangle} |j\rangle\langle i| \quad 3.8$$

donde denotamos a los primeros vecinos con  $\langle i,j \rangle$ ,  $\varepsilon_0$  es la auto-energía del sitio y  $t$  es la integral de salto entre sitios vecinos como la muestra la figura 3.6. Para obtener la relación de dispersión proyectamos la Ec. 3.8 en la Ec. 3.7, obteniendo

$$E(k) = \varepsilon_0 + t(e^{ika} + e^{-ika}) \quad 3.9$$

que al reducir nos lleva a que

$$E(k) = \varepsilon_0 + 2t \cos ka \quad 3.10$$

Esta ecuación es la relación de dispersión ( $E(k)$ ) para la cadena monoatómica. En la Figura 3.7 graficamos la relación de dispersión versus el vector de la red recíproca ( $k$ ) para una cadena periódica infinita con autoenergía nula ( $\varepsilon_0=0$ ) dentro de la primera zona de Brillouin, esta zona va desde  $-\pi/a$  a  $\pi/a$ . Como se puede apreciar la función de la energía tiene un mínimo absoluto para  $k = 0$  ( $E(k) = -2|t|$ ) y tiene 2 máximos cuando  $k = \pm \pi/a$  ( $E(K) = 2|t|$ ). El ancho de banda es claramente  $4|t|$ .

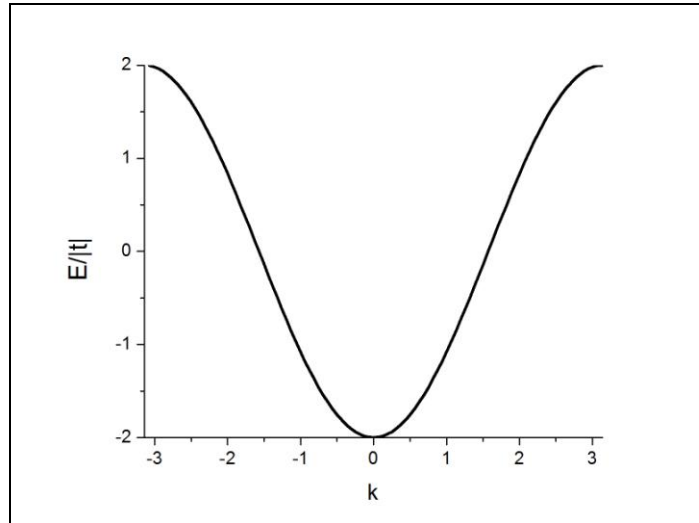


Figura 3.7 Relación de dispersión de una cadena unidimensional infinita, con auto-energía nula ( $\varepsilon_0=0$ ) y parámetro de salto  $t$  dentro de la primera zona de Brillouin ( $-\pi/a, \pi/a$ )

Ahora vamos a calcular la relación de dispersión de una cadena cuadrada y de una red hexagonal, haciendo una comparación entre ellas.

### III.4 Red cuadrada

Consideremos ahora una red cuadrada periódica como la que se muestra en la figura 3.8, la cual tiene auto-energías  $\varepsilon_0$  e integrales de salto  $t$ .

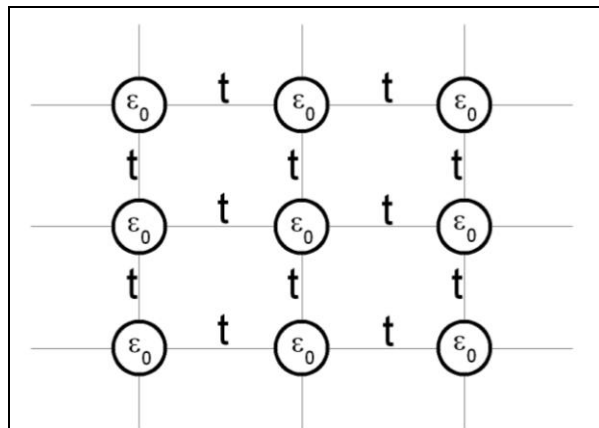


Figura 3.8 Red cuadrada periódica

El hamiltoniano de una red cuadrada dentro de la aproximación de amarre fuerte y a primeros vecinos lo podemos escribir como:

$$H = \varepsilon_0 \sum_{l,j} |l,j\rangle \langle l,j| + t \sum_{l,j} [|l,j\rangle \langle l+1,j| + |l,j\rangle \langle l-1,j| + |l,j\rangle \langle l,j+1| + |l,j\rangle \langle l,j-1|] \quad 3.11$$

Si proyectamos la Ec. 3.11 en la Ec. 3.7 obtenemos la relación de dispersión de este sistema, es decir, tomando de nuevo la ecuación de Schrödinger

$$H |\Psi_{\mathbf{k}}\rangle = E(\mathbf{k}) |\Psi_{\mathbf{k}}\rangle, \quad 3.12$$

lo que implica

$$\sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \langle \mathbf{R}_0 | H | \mathbf{R} \rangle = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} E(\mathbf{k}) \langle \mathbf{R}_0 | \mathbf{R} \rangle, \quad 3.13$$

donde  $\mathbf{R}_0$  corresponde a un punto arbitrario de la red. Tomando en cuenta los estados ortonormales, una aproximación para primeros vecinos, y si denotamos  $\langle \mathbf{R}_i | H | \mathbf{R}_i \rangle = \varepsilon_0$ ,  $\langle \mathbf{R}_j | H | \mathbf{R}_i \rangle = t$ , entonces la suma sobre  $R$  para el término  $e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}-\mathbf{R}_0)}$  resulta en sólo 4 términos

$$E(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 + 2t(e^{ik_x a} + e^{-ik_x a} + e^{ik_y a} + e^{-ik_y a}) \quad 3.14$$

reduciendo

$$E(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 + 4t [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] \quad 3.15$$

La figura 3.9 nos muestra la relación de dispersión de una red cuadrada periódica infinita contra los vectores recíprocos ( $K_x, K_y$ ), tomando las autoenergías nulas y las integrales de salto iguales a  $t$ . Considerando sólo la primera zona Brillouin que va desde  $-\pi/a$  a  $\pi/a$  en las dos direcciones de los vectores recíprocos. La relación de dispersión tiene un máximo cuando los dos vectores recíprocos son cero. Más aún, la zona de Brillouin tiene una forma cuadrada, lo cual puede ser comprobado a partir de los vectores de la red recíproca.

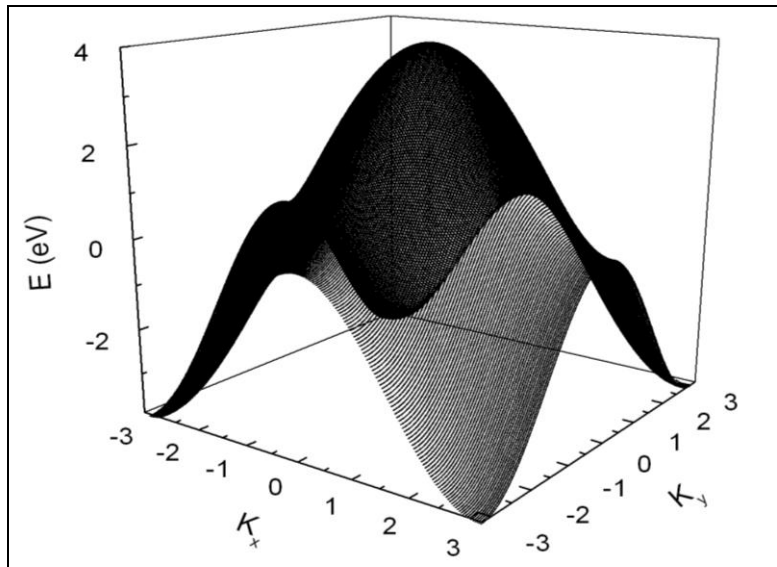


Figura 3.9 Relación de dispersión de una red cuadrada periódica con  $\varepsilon_0=0$  e integral de salto  $t$ .

Continuaremos con el cálculo de la relación de dispersión de una red hexagonal.

### III.5 Red hexagonal

Vamos a calcular la estructura de bandas para los orbitales en la aproximación de amarre fuerte [4] a primeros vecinos para una lámina de grafeno perfecta e infinita. En tal aproximación, un electrón situado en una celda unidad viene descrito por la siguiente función de onda, en virtud del teorema de Bloch:

$$|\Psi\rangle = \sum_{j,i} e^{ik \cdot \mathbf{R}} \left( e^{\frac{ik_x a}{2}} C_A |i, j, A\rangle + e^{\frac{ik_y a}{2}} C_B |i, j, B\rangle \right) \quad 3.16$$

donde utilizamos una celda con dos átomos A y B, tomando como referencia a la figura 3.10.

En dicha figura se muestra cómo para determinar a la posición de cada celda se utilizan 2 índices,  $i$  y  $j$ , mientras que para determinar cada uno de los 2 átomos A y B dentro de la celda se utiliza el índice  $k$ .

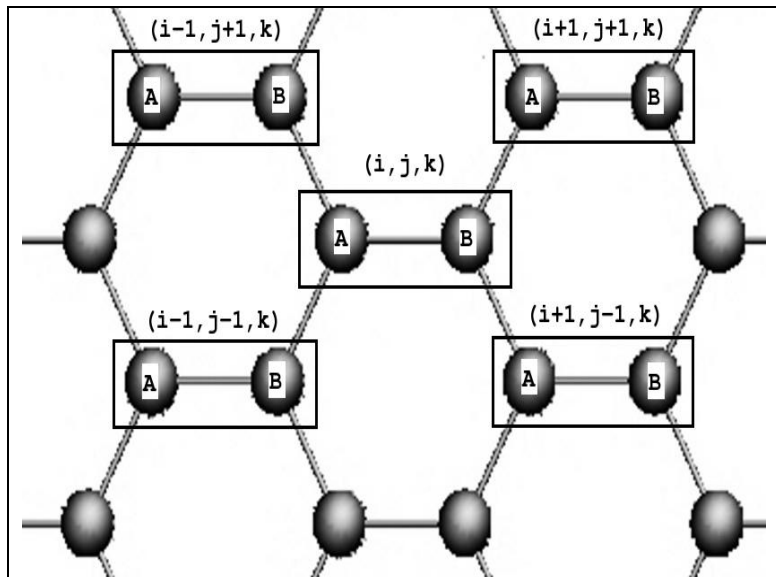


Figura 3.10 Representación de la selección de una celda unitaria en la red hexagonal, la cual está determinada por 3 índices,  $i$  y  $j$  para determinar la posición y  $k$  para determinar el átomo (A o B).

El hamiltoniano de este sistema lo podemos escribir como

$$H = \sum_{j,i} \varepsilon_0 [ |i, j, A\rangle \langle i, j, A| + |i, j, B\rangle \langle i, j, B| ] + \sum_{j,l} t [ |i, j, A\rangle \langle j, l, B| + |i, j, A\rangle \langle i-1, j-1, B| + |i, j, A\rangle \langle i-1, j+1, B| + |i, j, B\rangle \langle i+1, j-1, A| + |i, j, B\rangle \langle i+1, j+1, A| ] \quad 3.17$$

Utilizando la ecuación 3.3 y proyectando sobre el átomo A, obtenemos

$$EC_A e^{\frac{ik_x a}{2}} = \langle 1, A | H | \Psi \rangle = \varepsilon_0 C_A e^{\frac{ik_x a}{2}} + t C_B e^{\frac{ik_x a}{2}} \left( 1 + e^{\frac{i3k_x a}{2} + \frac{i\sqrt{3}k_y a}{2}} + e^{\frac{i3k_x a}{2} - \frac{i\sqrt{3}k_y a}{2}} \right) \quad 3.18$$

$$EC_A = \varepsilon_0 C_A + t C_B e^{ik_x a} \left( 1 + e^{\frac{i3k_x a}{2} + \frac{i\sqrt{3}k_y a}{2}} + e^{\frac{i3k_x a}{2} - \frac{i\sqrt{3}k_y a}{2}} \right) \quad 3.19$$

$$C_A (\varepsilon_0 - E) + t C_B \left( e^{ik_x a} + e^{\frac{ik_x a}{2} + \frac{i\sqrt{3}k_y a}{2}} + e^{\frac{ik_x a}{2} - \frac{i\sqrt{3}k_y a}{2}} \right) = 0 \quad 3.20$$

De la misma forma se obtiene que para el átomo B

$$EC_B e^{\frac{ik_x a}{2}} = \langle 1, B | H | \Psi \rangle = \varepsilon_0 C_B e^{\frac{ik_x a}{2}} + t C_A e^{\frac{ik_x a}{2}} \left( 1 + e^{\frac{i3k_x a}{2} + \frac{i\sqrt{3}k_y a}{2}} + e^{\frac{i3k_x a}{2} - \frac{i\sqrt{3}k_y a}{2}} \right) \quad 3.21$$

reduciendo

$$C_B (\varepsilon_0 - E) + t C_A \left( e^{-ik_x a} + e^{\frac{ik_x a}{2} + \frac{i\sqrt{3}k_y a}{2}} + e^{\frac{ik_x a}{2} - \frac{i\sqrt{3}k_y a}{2}} \right) = 0 \quad 3.22$$

Ahora, si se tiene una solución distinta de la trivial para  $C_A$  y  $C_B$ , entonces de las ecuaciones 3.20 y 3.22

$$\begin{pmatrix} (\varepsilon_0 - E) & t \left( e^{ik_x a} + e^{\frac{ik_x a}{2} + \frac{i\sqrt{3}k_y a}{2}} + e^{\frac{ik_x a}{2} - \frac{i\sqrt{3}k_y a}{2}} \right) \\ t \left( e^{-ik_x a} + e^{\frac{ik_x a}{2} + \frac{i\sqrt{3}k_y a}{2}} + e^{\frac{ik_x a}{2} - \frac{i\sqrt{3}k_y a}{2}} \right) & (\varepsilon_0 - E) \end{pmatrix} = 0 \quad 3.23$$

$$(\varepsilon_0 - E)^2 = t^2 \left( e^{ik_x a} + e^{-\frac{ik_x a}{2} + \frac{i\sqrt{3}k_y a}{2}} + e^{-\frac{ik_x a}{2} - \frac{i\sqrt{3}k_y a}{2}} \right) \left( e^{-ik_x a} + e^{\frac{ik_x a}{2} + \frac{i\sqrt{3}k_y a}{2}} + e^{\frac{ik_x a}{2} - \frac{i\sqrt{3}k_y a}{2}} \right) \quad 3.24$$

$$(\varepsilon_0 - E) = \mp |t| \left[ 1 + 2e^{\frac{i3k_x a}{2}} \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right) + 2e^{\frac{i3k_x a}{2}} \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right) + 4\cos^2\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right) \right]^{\frac{1}{2}} \quad 3.25$$

De donde se obtiene finalmente que

$$E(k_x, k_y) = \varepsilon_0 \mp |t| \left[ 1 + 4\cos\left(\frac{3k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right) + 4\cos^2\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right) \right]^{\frac{1}{2}} \quad 3.26$$

En la figura 3.10 se muestra la estructura de bandas. El parámetro  $\varepsilon_0$  puede eliminarse redefiniendo el origen de energía en la ecuación 3.26. La zona de Brillouin en el grafeno resulta tener forma hexagonal, hecho que se puede ver conociendo los vectores que definen la red recíproca (Ec. 3.2). En la figura 3.10 encontramos las bandas de valencia y de conducción, representadas por las soluciones  $E(K) < 0$  y  $E(k) > 0$ , respectivamente, se tocan en seis puntos donde las dos bandas se juntan, correspondientes a las esquinas de la zona de Brillouin. Tenemos entonces que la red recíproca de la red hexagonal está definida por un hexágono. Un análisis rápido de la relación de dispersión nos puede confirmar la aseveración anterior.

Consideremos primero tanto a la auto energía  $\varepsilon_0$  como a la energía  $E(k_x, k_y)$  iguales a 0. Ahora, si tomamos  $k_x = 0$  tenemos que

$$|t| \left[ 1 + 2\cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right) \right] = 0, \text{ lo que nos lleva al primer par de coordenadas que son}$$

$$\left(0, \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}\right) \text{ y } \left(0, -\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}\right). \text{ Para encontrar las otras 2 coordenadas tomamos } k_x = \frac{\pi}{a}$$

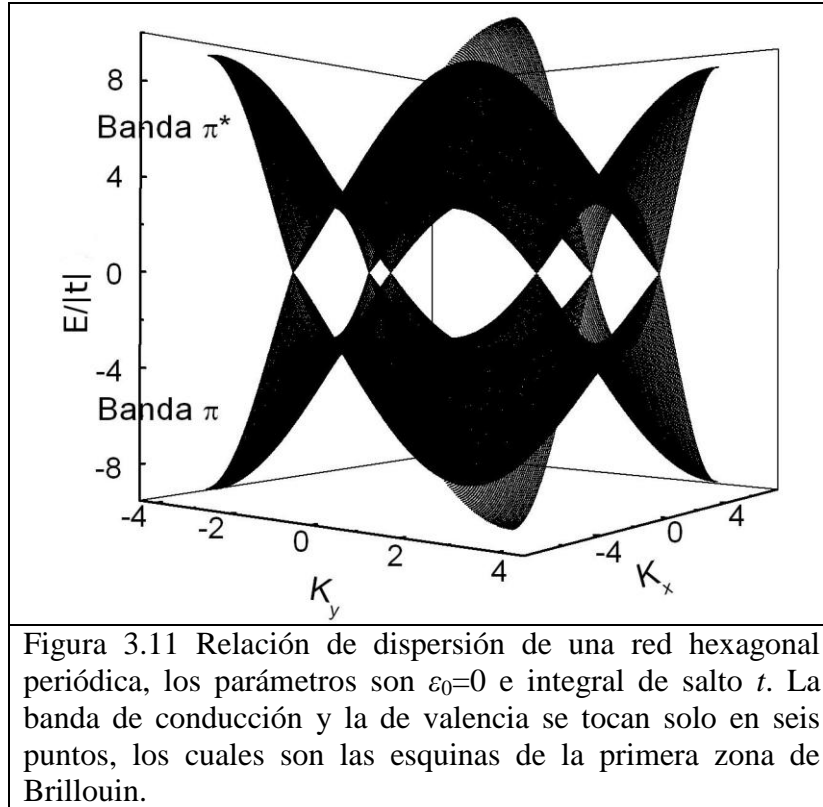
$$, \text{ lo que nos lleva a } |t| \left[ 1 - 2\cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right) \right] = 0 \text{ y a encontrar que otro par de}$$

$$\text{coordenadas que satisfacen } E(k_x, k_y) = 0 \text{ son } \left(\frac{\pi}{a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right) \text{ y } \left(\frac{\pi}{a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right). \text{ Es claro}$$

$$\text{que también cumplen esta condición las coordenadas } \left(-\frac{\pi}{a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right) \text{ y}$$



$(-\frac{\pi}{a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a})$ . Son estas 6 parejas ordenadas las que determinan al hexágono dentro de la red recíproca, o la primera zona de Brillouin.



En la figura 3.12 incluimos unas curvas de nivel de la relación de dispersión para la red hexagonal. En dicha figura podemos ver que efectivamente, definiendo la primera zona de Brillouin, tenemos un hexágono en el espacio recíproco.

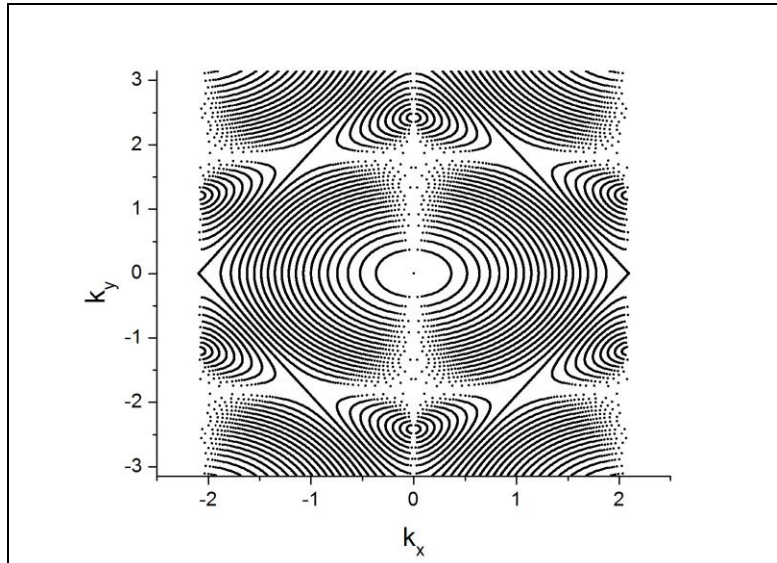


Figura 3.12 Curvas de nivel para la relación de dispersión de una red hexagonal periódica, los parámetros son  $\varepsilon_0=0$  e integral de salto  $t$ .

También incluimos un corte de la figura 3.11 (figura 3.13) que corresponde a la relación de dispersión de la red hexagonal, en donde sólo dibujamos con respecto a  $K_x$  la relación de dispersión para distintas  $K_y$

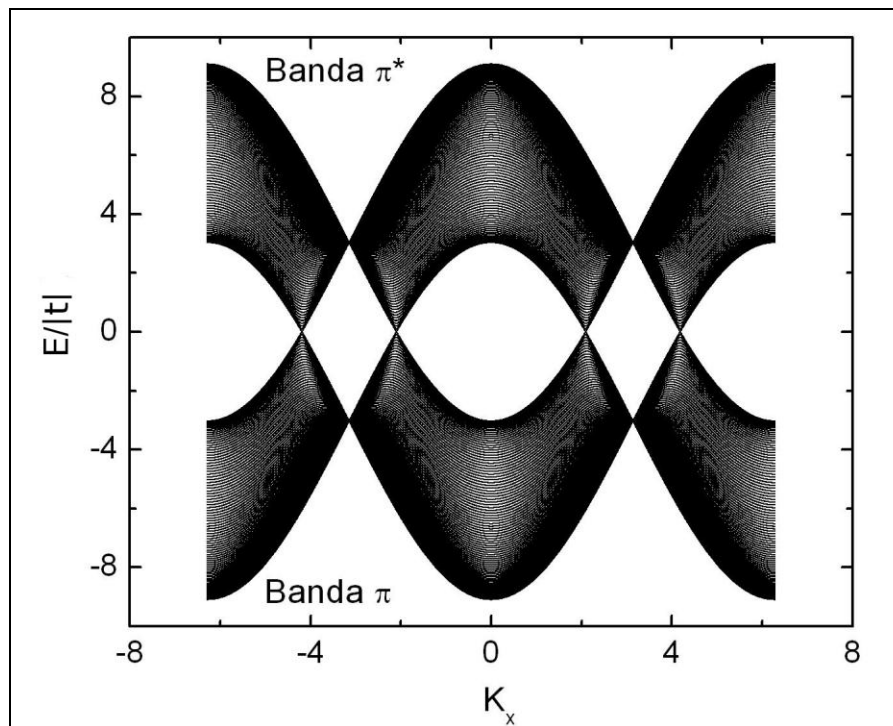


Figura 3.13 Relación de dispersión de la red Hexagonal variando  $K_x$ . La banda de menor energía  $\pi^*$  es la positiva y la  $\pi$  es la de energía negativa.

Ahora consideramos que no tienen la misma energía de salto entre vecinos como se muestra en la figura 3.14, el nuevo hamiltoniano para esta red está dado por:

$$H = \sum_{r_m} [-t_a (a_{r_m}^\dagger b_{r_m} + h.c.) - t_b (a_{r_m}^\dagger b_{r_m+v_1} + h.c.) - t_c (a_{r_m}^\dagger b_{r_m+v_2} + h.c.)] \quad 3.27$$

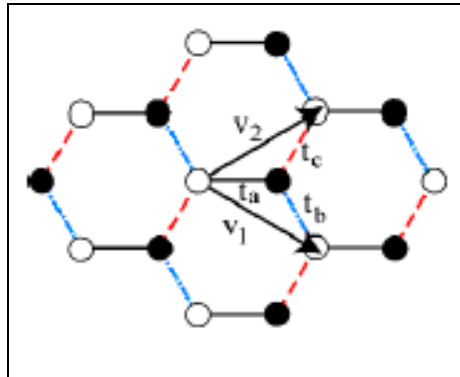


Figura 3.14 Red hexagonal con diferentes energías de salto, las cuales son  $t_a$ ,  $t_b$  y  $t_c$ .

donde  $v_1$  y  $v_2$  son los vectores de la red y están dados por:

$$v_1 = \left( \frac{3a}{2}, -\frac{\sqrt{3}a}{2} \right) \text{ y } v_2 = \left( \frac{3a}{2}, \frac{\sqrt{3}a}{2} \right) \quad 3.28$$

Usando la transformada de Fourier para los vectores de creación y aniquilación obtenemos

$$a_{r_m} = \sum_k e^{-ik \cdot r_m} a_k \text{ y } b = \sum_k e^{-ik \cdot (r_m+x)} b_k \quad 3.29$$

Sustituyendo estas expresiones en la ecuación 3.27, el hamiltoniano puede ser reescrito por:

$$H = \sum_k \left[ \left( -t_a \exp(-ik_x) - t_b \exp \left[ i \left( \frac{k_x}{2} - \frac{\sqrt{3}k_y}{2} \right) \right] - t_c \exp \left[ i \left( \frac{k_x}{2} + \frac{\sqrt{3}k_y}{2} \right) \right] \right) a_k^\dagger b_k + h.c. \right] \quad 3.30$$

Aplicando la función de onda, la energía de dispersión está dada por:

$$E_k^2 = t_a^2 + t_b^2 + t_c^2 + 2t_a t_b \cos \left( \frac{3k_x}{2} - \frac{\sqrt{3}k_y}{2} \right) + 2t_a t_c \cos \left( \frac{3k_x}{2} + \frac{\sqrt{3}k_y}{2} \right) + 2t_b t_c \cos \left( \sqrt{3}k_y \right) \quad 3.31$$

Vamos a analizar los efectos en la densidad de estados y la transmitancia al ir variando las diferentes energías de salto en los capítulos IV y V.

### III.6 Nanotubos de Carbón

Un nanotubo de carbón (CNT, por sus siglas en inglés) se forma enrollando una lámina de grafito alrededor de un eje y uniendo los bordes por medio de ligaduras químicas entre los átomos de carbono. Como se aprecia de la figura 3.15, hay varias formas de enrollar la lámina de carbono, esto provoca que el nanotubo tenga propiedades muy diferentes. Ellos se pueden caracterizar conociendo su diámetro y su helicidad, definida por el ángulo con el que se enrolló. Además de este tipo de nanotubos, llamados de pared simple (SWCNT, por sus siglas en inglés), existen nanotubos formados por varios tubos concéntricos, los llamados de paredes múltiples y que se ilustran en la figura 3.16. Los nanotubos pueden ser metálicos (conductores) o comportarse como semiconductores según su helicidad (ver la figura 3.15). Esta importante propiedad permitiría fabricar, por ejemplo, un nanodiodo ‘rectificador’ uniendo una parte metálica con una semiconductor. Otra propiedad muy importante proviene de la mecánica cuántica, ya que el diámetro de estos nanotubos es muy pequeño y los niveles de energía son discretos, como en un átomo. Tenemos entonces que el transporte eléctrico en los nanotubos está cuantizado [20].

Para explicar mejor la estructura atómica de CNTs, uno puede imaginarse una hoja de grafito como lo muestra la figura 1. Los vectores base que generan esta estructura son  $a_1 = a(\sqrt{3}, 0)$  y  $a_2 = a(\sqrt{3}/2, 3/2)$ , donde  $a = 0.142$

$nm$  [3] es la longitud del enlace del carbón-carbón. A y B son los dos átomos en la celda unitaria del grafito, como se mostró en la figura 3.10.

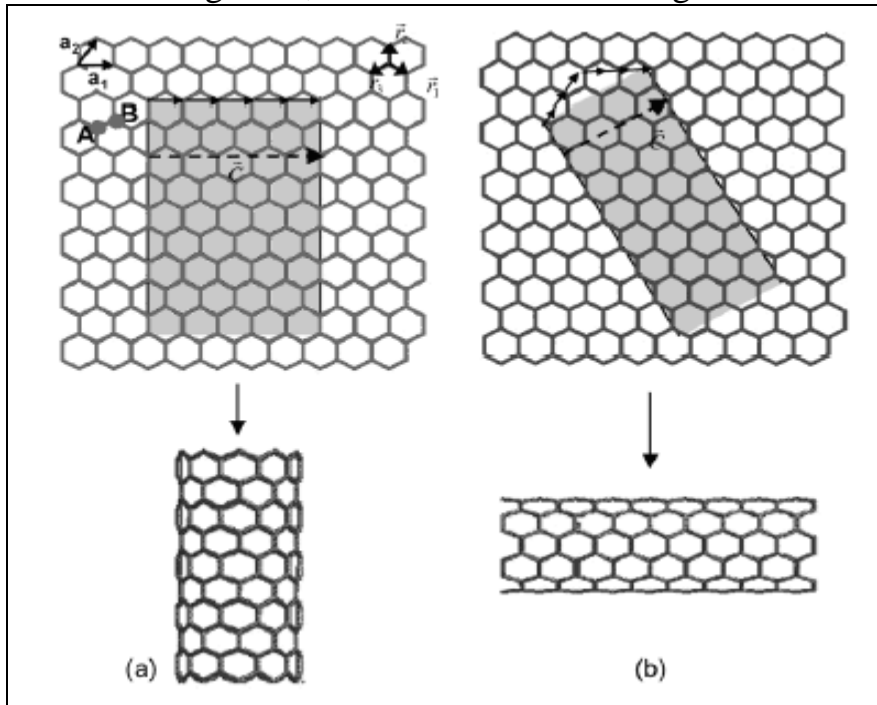


Figura 3.15 (a)  $a_1$  y  $a_2$  son los vectores del enrejado del grafito y la norma de ellos es  $|a_1| = |a_2| = \sqrt{3} a$ , donde  $a$  es la longitud del enlace entre los átomos de carbón. Tenemos dos átomos por celda unitaria mostrados por A y B. El cuadro gris oscuro nos muestra cómo se corta la lámina de grafito para formar el nanotubo, donde C es diámetro de la lámina. En la literatura el tubo de la fig. (a) es de tipo zigzag y puede ser metálico o semiconductor dependiendo de su diámetro. El de la fig. (b) es del tipo sillón (armchair, en inglés) y siempre son metálicos.

El diámetro de la lámina está definido como  $C = na_1 + ma_2$ , donde  $n$  y  $m$  son números enteros que indican las componentes del vector de “quiralidad”  $(n,m)$ .

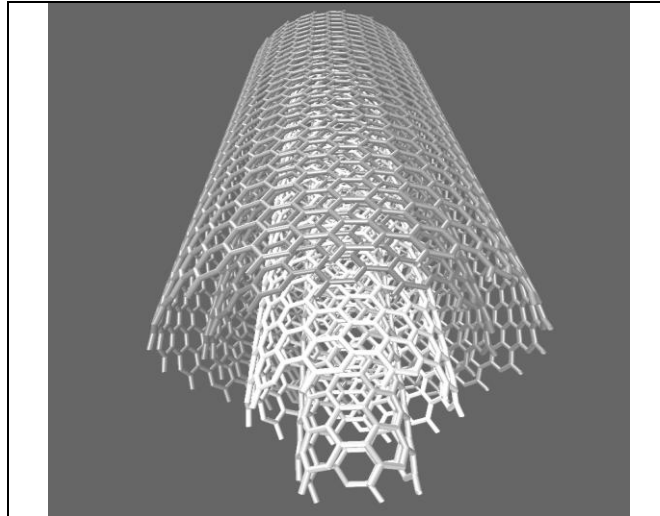


Figura 3.16 Ilustración de múltiples nanotubos de carbón.

El “enrollar” la red hexagonal en un cilindro da lugar a condiciones periódicas sobre la función de onda electrónica alrededor de la circunferencia. Esto tiene efecto en la cuantización del vector de onda  $k$  en la dirección perpendicular al eje del nanotubo, es decir,  $k \cdot C = 2\pi q$ , donde  $q$  es un número entero ( $q=1,2,..N$ ,  $N$  es el número de hexágonos en el tubo). Vamos a obtener que un nanotubo es metálico si cumple la condición que  $n-m=3q$  y semiconductor en cualquier otro caso.

Para obtener la estructura electrónica de los nanotubos de carbón, nosotros tomamos la relación de dispersión del grafito (red hexagonal) y la relación de cuantización de los nanotubos.

Vamos a definir un vector perpendicular al eje del nanotubo ( $K_{\perp}$ ):

$$K_{\perp} = \frac{2\pi q}{|C|} = \frac{2\pi q}{a\sqrt{n^2 + m^2 + nm}} \quad 3.32$$

después aplicamos las condiciones de frontera a la relación de dispersión de la red hexagonal, por lo que necesitamos una conversión de los vectores  $K_x$  y  $K_y$ , a  $K_{\parallel}$  y  $K_{\perp}$  (ver figura 3.14), y es realizado por medio de una transformada de rotación

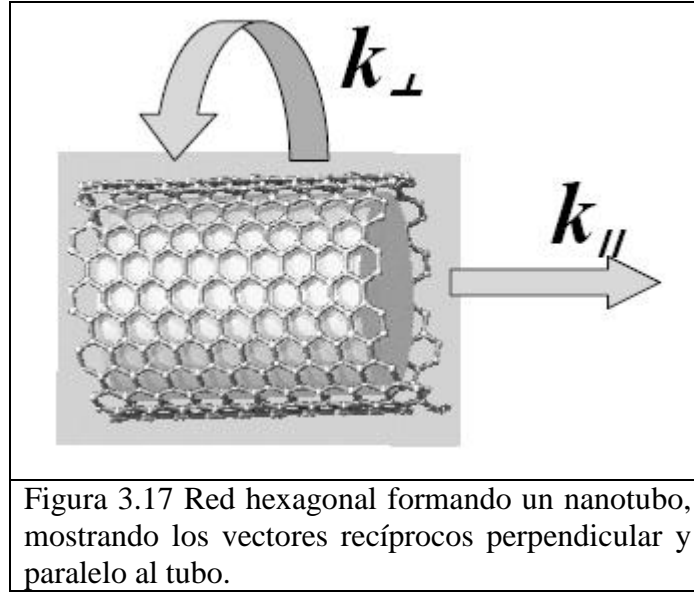
$$K_x = K_{\perp} \cos \alpha - K_{\parallel} \text{sen} \alpha, \quad K_y = K_{\perp} \text{sen} \alpha - K_{\parallel} \cos \alpha \quad 3.33$$

Con

$$\cos \alpha = \frac{C \cdot x}{|C| |x|} = \frac{\sqrt{3}(n+m)}{2\sqrt{n^2 + m^2 + nm}},$$

$$\text{sen}\alpha = \frac{(n-m)}{2\sqrt{n^2+m^2+nm}} \quad 3.34$$

Sustituyendo las condiciones de frontera con valores discretos de  $K_{\perp}$  en la Ec. 3.26, tenemos  $2N$  sub-bandas de energía como función de  $K_{\parallel}=K$ , describiendo el movimiento del electrón paralelo al eje del CNT. Usamos este método y calculamos las relaciones de dispersión para nanotubos de (10,10) y (10,0) como son mostrados en las figuras 3.17 y 3.18, respectivamente.



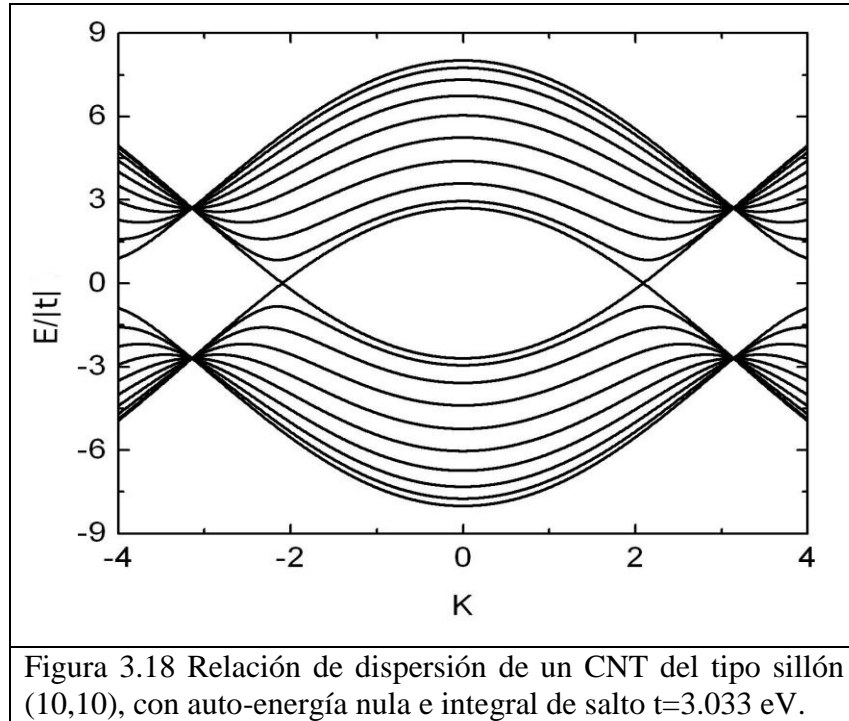
Hay dos casos especiales, uno es cuando el ángulo de transformación es cero y  $K_{\perp}$  está en la dirección de  $K_x$ , en este caso lo que tenemos es un nanotubo tipo sillón. Aplicando la condición de frontera correspondiente a este caso, tenemos

$$K_x = K_{\perp} = \frac{2\pi q}{\sqrt{3}an}, \quad 3.35$$

sustituyendo en la Ec. 3.26 obtenemos la relación de dispersión del CNT de sillón (n,n),

$$E_q(K) = \pm t \sqrt{1 \pm 4 \cos\left(\frac{q\pi}{n}\right) \cos\left(\frac{Ka}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{Ka}{2}\right)}, \quad 3.36$$

la cual se encuentra representada en la figura 3.18, donde sus parámetros son auto-energía cero y su integral de salto es  $t=3.033\text{eV}$  [25]. Suponemos que no existe traslape en las funciones de onda de cada átomo, por lo que tenemos un espectro simétrico en donde la banda de valencia y la banda de conducción se cruzan en el nivel de Fermi, así que es un material metálico.



El otro caso especial es el de un CNT del tipo zigzag, que es cuando el ángulo de rotación es de  $90^\circ$ , por lo que  $K_\perp$  está en la dirección de  $K_y$ . Aplicando entonces las condiciones de frontera correspondientes, tenemos

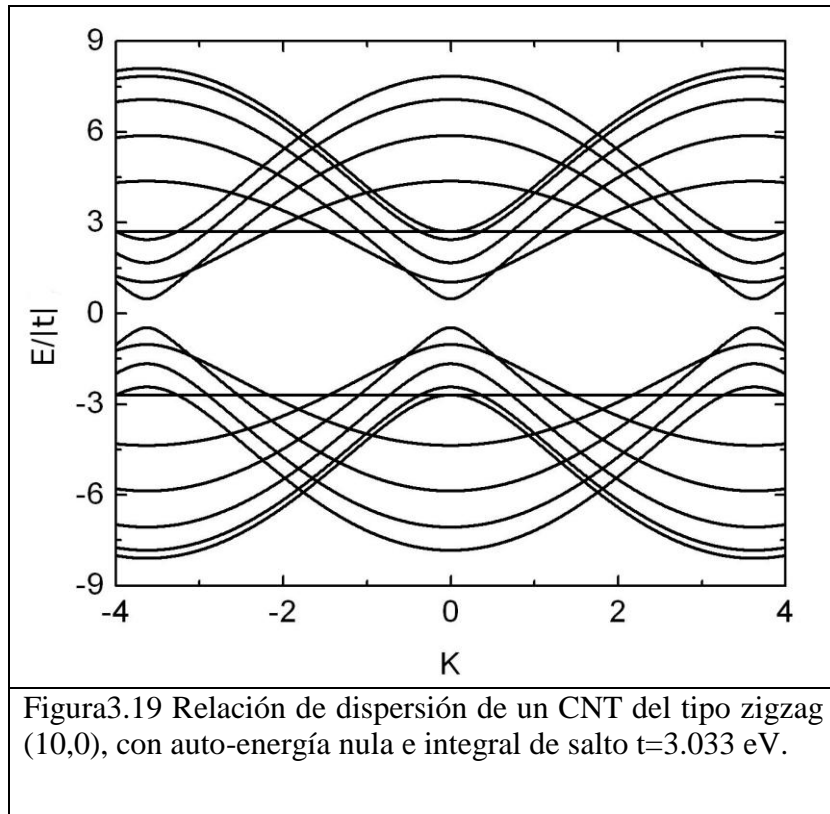
$$K_y = K_\perp = \frac{2\pi q}{an} \quad 3.37$$

Si sustituimos de nuevo en la Ec. 3.26, encontramos que la energía de dispersión para este caso es

$$E_q(K) = \pm t \sqrt{1 \pm 4 \cos\left(\frac{q\pi}{n}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}Ka}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{q\pi}{n}\right)} \quad 3.38$$

Esta relación se encuentra representada en la figura 3.19 para un CNT (10,0); si utilizamos los mismos parámetros que los utilizados para la gráfica de la figura 3.18, aquí también encontramos un espectro simétrico en la primera zona de Brillouin, debido a la suposición de que no se traslapan las funciones de onda de cada átomo. El comportamiento que exhibe este tipo de CNT es de semiconductor.





En estas secciones hemos analizado la estructura de bandas de diferentes sistemas, a saber, el de la cadena unidimensional periódica, la red cuadrada periódica, la red hexagonal y los nanotubos de carbón tipo sillón y tipo zigzag. Esto se realizó utilizando el hamiltoniano de amarre fuerte.

Un punto importante y útil que queremos resaltar es la dependencia de las características electrónicas del CNT en torno a su quiralidad. Según lo mencionado en la revisión de la estructura electrónica de la red hexagonal, es semi-metálica debido a la degeneración de las bandas de la energía en la esquina de la primera zona de Brillouin (puntos de  $K$ ), como lo muestra la figura 3.10. Tiene un comportamiento metálico si enrollamos esta red hexagonal en forma de nanotubo de sillón  $(n,n)$  y es semiconductor si su forma es un nanotubo zigzag  $(n,0)$ . La relación de dispersión para ambos tipos de nanotubos están representadas en figuras, en la 3.18 encontramos la del tipo sillón y la 3.19 para el caso del tipo sillón. Una cantidad física interesante de estos sistemas es la densidad de estados, la cual vamos a estudiar en el siguiente capítulo.

# Capítulo IV

## Densidad de estados

### IV.1 Introducción

Hasta hace algunos años, la ciencia de materiales consistía básicamente en utilizar los elementos que la naturaleza provee (hierro, silicio, etc.) para desarrollar nuevos compuestos a partir de algunas mezclas de ellos. Desde entonces los científicos han hecho estructuras artificiales en las que los átomos se depositan capa por capa y luego se estructuran lateralmente siguiendo arquitecturas prediseñadas, además de manipular moléculas individualmente. Esto permite fabricar, con libertad e imaginación, sistemas con propiedades novedosas muy diferentes a las de sus componentes. Gracias a estos avances tecnológicos es posible fabricar sistemas nanométricos artificiales, en donde se pueden observar los efectos del confinamiento cuántico en dos dimensiones espaciales, tales como cintas, alambres y tubos. Estos sólidos poseen características únicas que los hacen fuertes candidatos a usarse en la tecnología, por lo que es esencial desarrollar una comprensión fundamental de la física básica que gobierna su comportamiento en estos sistemas. En este capítulo desarrollaremos las relaciones de dispersión de una red hexagonal, así como su densidad de estados. En el siguiente capítulo desarrollaremos la transmitancia de estas redes a partir de la matriz de transferencia.

### IV.2 Densidad de estados de una dimensión

Utilizando el formalismo de la función de Green, la densidad de estados (DOS) se puede estudiar mediante la relación (ver apéndice B)

$$DOS(E) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im} \left[ \sum_{j=1}^N G_{j,j}(E) \right] \quad 4.1$$

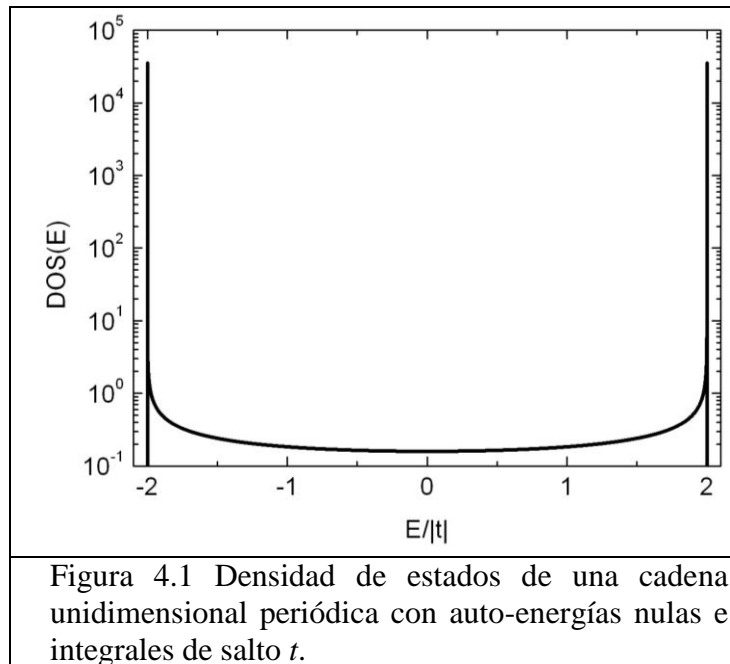
donde  $N$  es el número de átomos del sistema y  $G$  es la función de Green. Para una dimensión, la DOS de una cadena periódica se puede calcular por medio de [26]

$$DOS(E) = \frac{1}{\pi} \frac{\theta(2|t| - |E|)}{\sqrt{(2t)^2 - E^2}} \quad 4.2$$

siendo  $\theta$  la función escalón.

La Figura 4.1 muestra una gráfica de la DOS contra la energía para el caso de una cadena unidimensional semi-infinita con auto-energías nulas e integrales de salto  $t$ ; como podemos ver, las singularidades de van Hove se encuentran en los bordes de las bandas.

Para obtener esta gráfica hemos utilizado la ecuación 4.2, mostrada anteriormente.

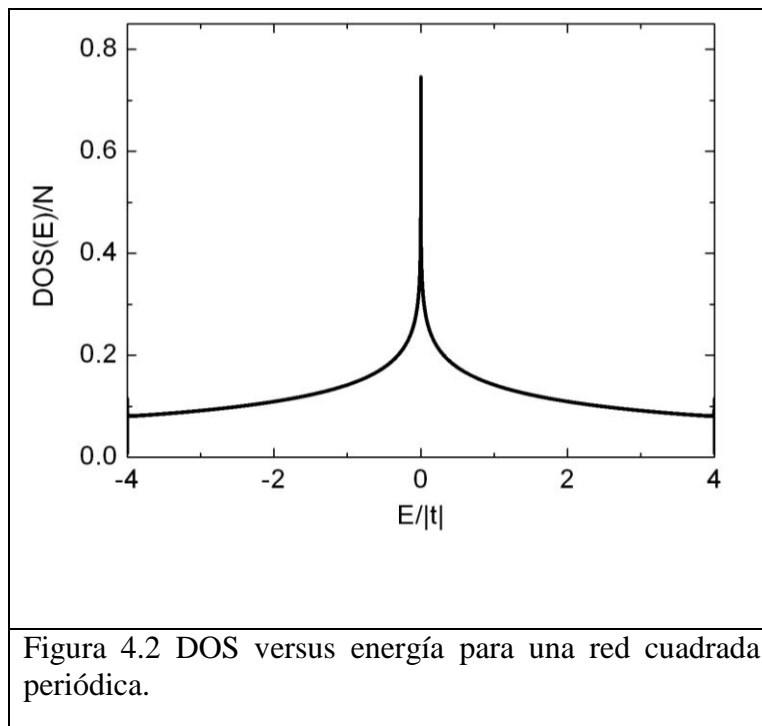


## IV.3 Densidad de estados de dos dimensiones

### IV.3.1 DOS de una red cuadrada

Para una red cuadrada no se tiene solución analítica para la DOS, ya que al ocupar el espacio recíproco nos encontramos con integrales elípticas [26]. Otra forma de calcularla es por el método de renormalización más convolución desarrollado en la referencia [1]. Utilizando este método se obtiene la Figura 4.2, en la que se grafica la DOS versus la energía para una red cuadrada periódica semi-infinita con auto-energía nula e integral de salto  $t$ . Vale la pena resaltar el hecho de que sólo tiene una singularidad de van Hove, la cual está en el centro de la banda, en comparación con las dos

singularidades que se tienen para la cadena unidimensional, mostrada en la figura 4.1. Esto coincide con lo que se encuentra reportado en la literatura.



### IV.3.2 DOS de una red hexagonal

Existen muchas formas en que podemos estudiar la DOS de una red hexagonal periódica, dos de ellas son el espacio real y el espacio recíproco. La primera consiste en invertir directamente el hamiltoniano para obtener la función de Green y aplicarla a la Ec. 3.35. Con este método sólo podemos calcular la DOS para muy pocos átomos debido al elevado tiempo de cómputo que se requiere para invertir el hamiltoniano. En el espacio recíproco nos encontramos con el problema de que sólo se pueden investigar redes periódicas de tamaño infinito.

Tomando en cuenta los problemas anteriores, uno de los objetivos principales planteados para esta tesis fue desarrollar un método en espacio real capaz de estudiar la DOS y transmitancia eléctrica para redes hexagonales, desde tamaño finito hasta de tamaño macroscópico sin tener que invertir la matriz. Los detalles del método son presentados a continuación.

Consideremos una celda de 4 átomos por sitio como es mostrado en la figura 4.3, vale la pena resaltar que al hacer esta consideración la red se convierte en

una red cuadrada (figura 4.3 a). Para la parte longitudinal, la cual se refiere al desplazamiento entre celdas de forma lateral (figura 4.3 a), la interacción a primeros vecinos es con una integral de salto cada sitio, mientras que para la transversal, la cual se refiere al desplazamiento vertical entre celdas, es por medio de dos energías de salto  $t_4$  (figura 4.3 b).

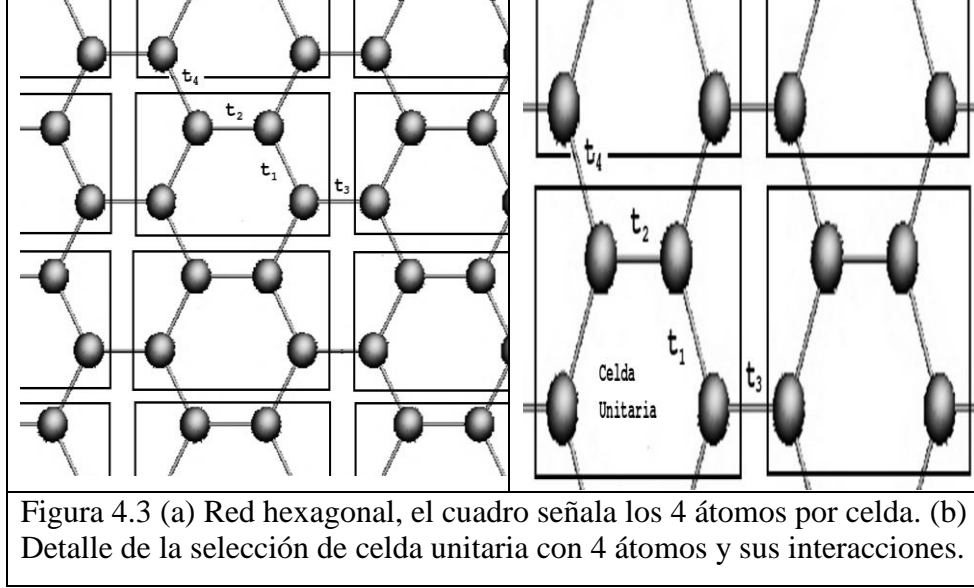


Figura 4.3 (a) Red hexagonal, el cuadro señala los 4 átomos por celda. (b) Detalle de la selección de celda unitaria con 4 átomos y sus interacciones.

Reescribiendo el hamiltoniano para esta nueva red, tenemos

$$\hat{H} = \sum_{j,k=1}^N \left[ \hat{\varepsilon}_j |j,k\rangle \langle j,k| + \hat{t}_{j+1,j} |j,k\rangle \langle j+1,k| + \hat{t}_{k,k+1} |j,k\rangle \langle j,k+1| + hc. \right] \quad 4.3$$

donde

$$\varepsilon_{j,k} = \begin{pmatrix} 0 & t_1 & 0 & 0 \\ t_1 & 0 & t_2 & 0 \\ 0 & t_2 & 0 & t_1 \\ 0 & 0 & t_1 & 0 \end{pmatrix}, \quad t_{j+1,j} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ t_{i,i+1} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad t_{k,k+1} = \begin{pmatrix} 0 & t_{k,k+1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_{k,k+1} & 0 \end{pmatrix}.$$

En esta nueva forma el hamiltoniano es separable ( $\hat{H} = \hat{H}_{\parallel} \otimes I_{\perp} + I_{\parallel} + \hat{H}_{\perp}$ ), por lo que aplicamos el método de renormalización más convolución [1] para investigar la densidad de estados y la transmitancia en redes hexagonales. La extensión del método de renormalización para la parte longitudinal ( $j$ ), la llevamos acabo de la forma que explicamos a continuación. De la ecuación de Schrödinger tenemos que

$$\begin{pmatrix} E & -t_1' & 0 & 0 \\ -t_1' & E & t_2 & 0 \\ 0 & t_2 & E & -t_1' \\ 0 & 0 & -t_1' & E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{i,i}^{(1)} \\ \Psi_{i,i}^{(2)} \\ \Psi_{i,i}^{(3)} \\ \Psi_{i,i}^{(4)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -t_{i,i-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{i,i-1}^{(1)} \\ \Psi_{i,i-1}^{(2)} \\ \Psi_{i,i-1}^{(3)} \\ \Psi_{i,i-1}^{(4)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -t_{i,i+1} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{i,i+1}^{(1)} \\ \Psi_{i,i+1}^{(2)} \\ \Psi_{i,i+1}^{(3)} \\ \Psi_{i,i+1}^{(4)} \end{pmatrix} = 0 \quad 4.4$$

siendo  $t_1' = t_1 / 2$ , desarrollando la forma matricial obtenemos 4 ecuaciones:

$$E\Psi_{i,i}^{(1)} - t_1'\Psi_{i,i}^{(2)} - t_{i,i-1}'\Psi_{i,i-1}^{(1)} = 0 \quad 4.5$$

$$E\Psi_{i,i}^{(2)} - t_1'\Psi_{i,i}^{(1)} - t_i'\Psi_{i,i}^{(3)} = 0 \quad 4.6$$

$$E\Psi_{i,i}^{(3)} - t_2'\Psi_{i,i}^{(2)} - t_1'\Psi_{i,i}^{(4)} = 0 \quad 4.7$$

$$E\Psi_{i,i}^{(4)} - t_1'\Psi_{i,i}^{(3)} - t_{i,i+1}'\Psi_{i,i+1}^{(1)} = 0 \quad 4.8$$

Sustituyendo la ec. 4.6 en 4.7 y viceversa, obtenemos

$$\left( E - \frac{t_2'^2}{E} \right) \Psi_{i,i}^{(2)} - t_1'\Psi_{i,i}^{(1)} - \frac{t_2't_1'}{E} \Psi_{i,i}^{(4)} = 0 \quad 4.9$$

$$\left( E - \frac{t_2'^2}{E} \right) \Psi_{i,i}^{(3)} - t_1'\Psi_{i,i}^{(4)} - \frac{t_2't_1'}{E} \Psi_{i,i}^{(1)} = 0 \quad 4.10$$

después sustituimos las ec. 4.9 en 4.5 y 4.10 en 4.8 podemos escribir:

$$\left( E - \frac{t_1'^2 E}{E^2 - t_2'^2} \right) \Psi_{i,i}^{(1)} - \frac{t_1'^2 t_2'}{E^2 - t_2'^2} \Psi_{i,i}^{(4)} - t_{i,i-1}' \Psi_{i,i-1}^{(1)} = 0 \quad 4.11$$

$$\left( E - \frac{t_1'^2 E}{E^2 - t_2'^2} \right) \Psi_{i,i}^{(4)} - \frac{t_1'^2 t_2'}{E^2 - t_2'^2} \Psi_{i,i}^{(1)} - t_{i,i+1}' \Psi_{i,i+1}^{(1)} = 0 \quad 4.12$$

Volvemos a sustituir 4.12 en 4.11 y viceversa para obtener:

$$\left( E - \frac{t_1'^2 t_2'}{E^2 - t_2'^2} - \frac{t_1'^4 t_2'}{E(E^2 - t_2'^2)(E^2 - t_1'^2 - t_2'^2)} - \frac{t_{i,i-1}' t_{i,i+1}' (E^2 - t_2'^2)}{E(E^2 - t_1'^2 - t_2'^2)} \right) \Psi_{i,i}^{(1)} = \quad 4.13$$

$$= \frac{t_{i,i+1}' t_1'^2 t_2'}{E(E^2 - t_1'^2 - t_2'^2)} \Psi_{i,i+1}^{(1)} + \frac{t_{i,i-1}' t_1'^2 t_2'}{E(E^2 - t_1'^2 - t_2'^2)} \Psi_{i,i-1}^{(1)}$$

$$\left( E - \frac{t_1'^2 t_2'}{E^2 - t_2'^2} - \frac{t_1'^4 t_2'}{E(E^2 - t_2'^2)(E^2 - t_1'^2 - t_2'^2)} - \frac{t_{i,i-1}' t_{i,i+1}' (E^2 - t_2'^2)}{E(E^2 - t_1'^2 - t_2'^2)} \right) \Psi_{i,i}^{(4)} = \quad 4.14$$

$$= \frac{t_{i,i+1}' t_1'^2 t_2'}{E(E^2 - t_1'^2 - t_2'^2)} \Psi_{i,i+1}^{(4)} + \frac{t_{i,i-1}' t_1'^2 t_2'}{E(E^2 - t_1'^2 - t_2'^2)} \Psi_{i,i-1}^{(4)}$$

Por otro lado, de forma análoga para  $\Psi_{i,i}^{(2)}$  y  $\Psi_{i,i}^{(3)}$ :

$$\left( E - \frac{t_1^2 E}{E^2 - t_{i,i-1} t_{i,i+1}} - \frac{t_1^4 t_{i,i-1} t_{i,i+1}}{E(E^2 - t_{i,i-1} t_{i,i+1})(E^2 - t_1^2 - t_{i,i-1} t_{i,i+1})} - \frac{t_2^2 (E^2 - t_{i,i-1} t_{i,i+1})}{E(E^2 - t_1^2 - t_{i,i-1} t_{i,i+1})} \right) \Psi_{i,i}^{(2)} = \quad 4.15$$

$$= \frac{t_{i,i+1} t_1^2 t_2}{E(E^2 - t_1^2 - t_{i,i-1} t_{i,i+1})} \Psi_{i,i+1}^{(2)} + \frac{t_{i,i-1} t_1^2 t_2}{E(E^2 - t_1^2 - t_{i,i-1} t_{i,i+1})} \Psi_{i,i-1}^{(2)}$$

$$\left( E - \frac{t_1^2 E}{E^2 - t_{i,i-1} t_{i,i+1}} - \frac{t_1^4 t_{i,i-1} t_{i,i+1}}{E(E^2 - t_{i,i-1} t_{i,i+1})(E^2 - t_1^2 - t_{i,i-1} t_{i,i+1})} - \frac{t_2^2 (E^2 - t_{i,i-1} t_{i,i+1})}{E(E^2 - t_1^2 - t_{i,i-1} t_{i,i+1})} \right) \Psi_{i,i}^{(3)} = \quad 4.16$$

$$= \frac{t_{i,i+1} t_1^2 t_2}{E(E^2 - t_1^2 - t_{i,i-1} t_{i,i+1})} \Psi_{i,i+1}^{(3)} + \frac{t_{i,i-1} t_1^2 t_2}{E(E^2 - t_1^2 - t_{i,i-1} t_{i,i+1})} \Psi_{i,i-1}^{(3)}$$

Las cuatro ecuaciones tienen la forma:

$$(E - \varepsilon_0) \Psi = t_1^* \Psi_{i,i+1} + t_1^* \Psi_{i,i-1} \quad 4.17$$

Si tomamos  $t_{i+1} = t_{i-1}$ ,  $\varepsilon_0 = \frac{t_1^2 t_2}{E^2 - t_2^2} + \frac{t_1^4 t_2^2}{E(E^2 - t_2^2)(E^2 - t_1^2 - t_2^2)} + \frac{t_{i,i-1} t_{i,i+1} (E^2 - t_2^2)}{E(E^2 - t_1^2 - t_2^2)}$  y

$t_1^* = \frac{t_{i,i+1} t_1^2 t_2}{E(E^2 - t_1^2 - t_2^2)}$ , entonces la ecuación de Schrödinger la podemos ver como

un caso unidimensional, ya que cada uno sólo interacciona con su sitio vecino por una integral de salto efectivo.

Para estudiar la DOS, extendemos el método de renormalización (ver apéndice D) obteniendo los siguientes coeficientes:

$$DOS(E, n) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} [A(n)G_{11} + B(n)G_{nn} + C(n)G_{ln} + D(n)] =$$

$$-\frac{1}{\pi} \text{Im} [A(n-1)G_{11} + B(n-1)G_{n(N-1)n(N-1)} + C(n-1)G_{ln(N-1)} + D(n-1) \quad 4.18$$

$$+ A(n-2)G_{n(N-1)+1,n(N-1)+1} + B(n-2)G_{n(N)n(N)} + C(n-2)G_{n(N-1)+1,n(N)} + D(n-2)]$$

$$A(n) = A(n-1) + B(n-1) \left[ \frac{t(n-1)(E - E_L(n-1))}{D^*} \right]^2 + C(n-1) \left[ \frac{t(n-1)(E - E_L(n-1))}{D^*} \right] +$$

$$+ A(n-2) \left( \frac{t(n-1)t_1}{D^*} \right)^2$$

$$B(n) = B(n-2) + A(n-2) \left[ \frac{t(n-2)(E - E_R(n-2))}{D^*} \right]^2 + C(n-2) \left[ \frac{t(n-2)(E - E_R(n-2))}{D^*} \right] +$$

$$+ B(n-1) \left( \frac{t(n-2)t_1}{D^*} \right)^2$$

$$C(n) = B(n-1) \left[ 2 \frac{t(n-1)t(n-2)t_1(E - E_L(n-1))}{D^{*2}} \right] + C(n-1) \left( \frac{t(n-2)t_1}{D^*} \right) +$$

$$+ A(n-2) \left[ 2 \frac{t(n-1)t_1t(n-2)(E - E_R(n-2))}{D^{*2}} \right] + C(n-1) \left( \frac{t(n-1)t_1}{D^*} \right)$$

$$D(n) = B(n-1) \frac{E - E_L(n-1)}{D^*} + A(n-2) \frac{E - E_R(n-2)}{D^*} + D(n-1) + D(n-2)$$

Donde  $D^* = (E - E_R(n-2))(E - E_L(n-1)) - t_1^2$ , tanto las condiciones iniciales como el desarrollo de este método se pueden ver en el apéndice D.

Por otro lado, para obtener los eigenvalores de la parte transversal volvemos a utilizar la ecuación de Schrödinger,

$$\begin{pmatrix} E & -t_1' & 0 & 0 \\ -t_1' & E & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E & -t_1' \\ 0 & 0 & -t_1' & E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{i,i}^{(1)} \\ \Psi_{i,i}^{(2)} \\ \Psi_{i,i}^{(3)} \\ \Psi_{i,i}^{(4)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ -t_{i,i-1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -t_{i,i-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{i,i-1}^{(1)} \\ \Psi_{i,i-1}^{(2)} \\ \Psi_{i,i-1}^{(3)} \\ \Psi_{i,i-1}^{(4)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -t_{i,i+1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -t_{i,i+1} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{i,i+1}^{(1)} \\ \Psi_{i,i+1}^{(2)} \\ \Psi_{i,i+1}^{(3)} \\ \Psi_{i,i+1}^{(4)} \end{pmatrix} = 0$$

donde  $t_1' = \frac{t_1}{2}$ . Desarrollando obtenemos que

$$E\Psi_{i,i}^{(1)} - t_1'\Psi_{i,i}^{(2)} - t_{i,i+1}\Psi_{i,i+1}^{(2)} = 0$$

$$E\Psi_{i,i}^{(2)} - t_1'\Psi_{i,i}^{(1)} - t_{i,i-1}\Psi_{i,i-1}^{(1)} = 0$$

$$E\Psi_{i,i}^{(3)} - t_1'\Psi_{i,i}^{(4)} - t_{i,i-1}\Psi_{i,i-1}^{(4)} = 0$$

$$E\Psi_{i,i}^{(4)} - t_1'\Psi_{i,i}^{(3)} - t_{i,i+1}\Psi_{i,i+1}^{(3)} = 0$$

Haciendo un poco de álgebra llegamos a que

$$\left( E - \frac{t_1'^2}{E} - \frac{t_{i,i-1}t_{i,i+1}}{E} \right) \Psi_{i,i}^{(3)} - \frac{t_1't_{i,i+1}}{E} \Psi_{i,i+1}^{(3)} - \frac{t_{i,i-1}t_i}{E} \Psi_{i,i-1}^{(3)} = 0$$

y

$$\left( E - \frac{t_1'^2}{E} - \frac{t_{i,i-1}t_{i,i+1}}{E} \right) \Psi_{i,i}^{(2)} - \frac{t_1't_{i,i+1}}{E} \Psi_{i,i+1}^{(2)} - \frac{t_{i,i-1}t_i}{E} \Psi_{i,i-1}^{(2)} = 0$$



Las ecuaciones tienen la forma de  $(E - \varepsilon_\beta)\Psi = t^*\Psi_{i,i+1} + t^*\Psi_{i,i-1}$ , donde

$$\varepsilon_\beta = \frac{t_1^2}{E} + \frac{t_{i,i-1}t_{i,i+1}}{E} \text{ y } t^* = \frac{t_1 t_{i,i+1}}{E}, \text{ y donde hemos vuelto a suponer que } t_{i,i+1} = t_{i,i-1}.$$

Combinando el método de renormalización más convolución, la densidad de estados la podemos investigar por medio de [1]:

$$DOS^{2D}(E) = \sum_{E_\alpha} DOS^{1D}(E - E_\alpha),$$

donde  $E_\alpha$  son los eigenvalores de la parte transversal de la nueva cadena, los cuales se obtuvieron invirtiendo la matriz de esta cadena. De esta forma podemos estudiar la densidad de estados en cintas hexagonales dentro de la aproximación de amarre fuerte, a primeros vecinos y a temperatura cero.

A continuación mostramos algunas gráficas obtenidas con la ayuda de esta última ecuación, variando el número de átomos que componen al sistema, tanto en su componente longitudinal como en la transversal.

La Figura 4.4 representa la DOS contra la energía para una red hexagonal finita de  $N_{||}=52$  átomos en la parte longitudinal y varía la parte transversal (a)  $n_{\perp}=2$ , (b)  $n_{\perp}=6$  y (c)  $n_{\perp}=12$  átomos. Tomando todas las autoenergías nulas, las integrales de salto  $t_1=t_2=t_3=t_4=t$  y la parte imaginaria de la energía fue de  $\eta=10^{-3}|t|$ , es decir, una red periódica. En esta figura podemos apreciar el cambio en la forma de la DOS, pasando de la cadena unidimensional a una red hexagonal con pocos átomos. También podemos ver cómo empiezan a aparecer las degeneraciones en la DOS cuando el sistema se convierte en una red bidimensional.

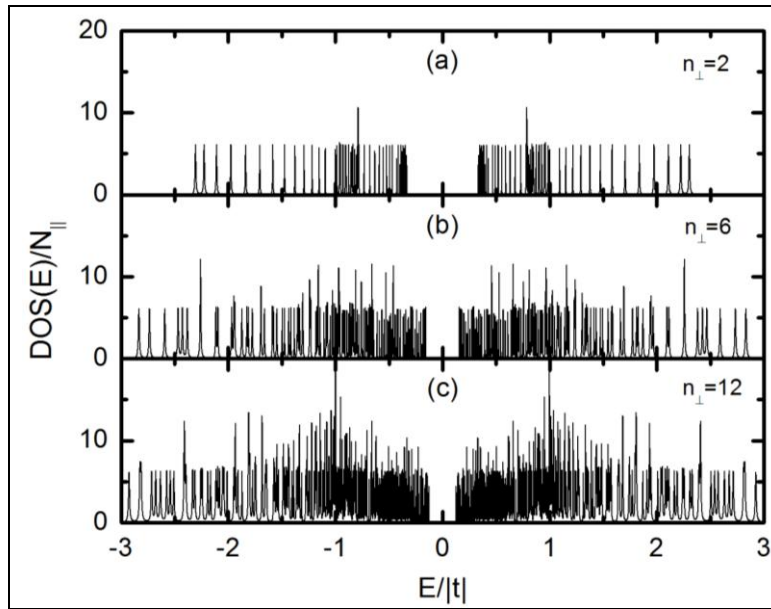
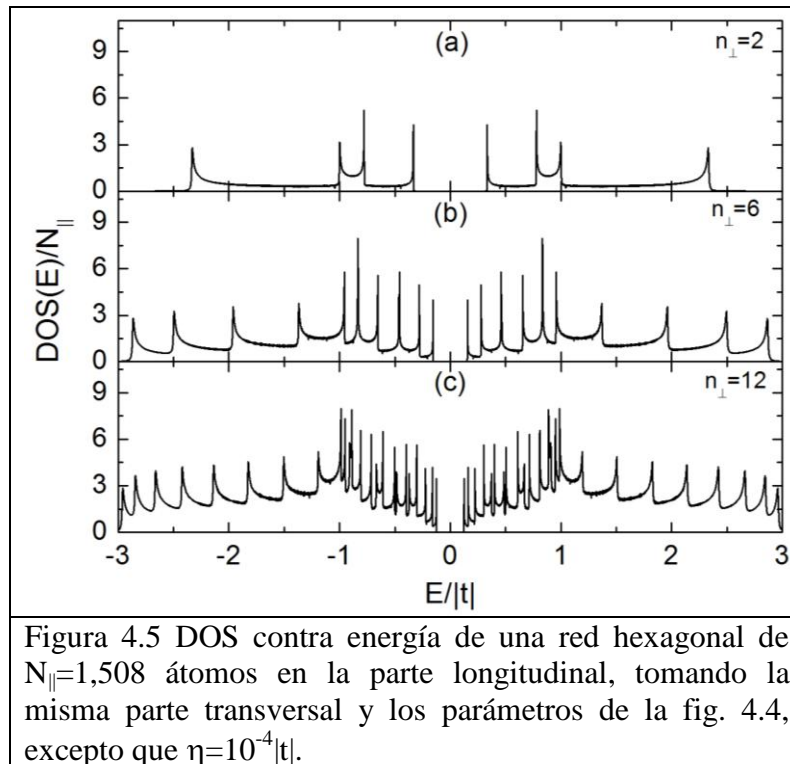


Figura 4.4 DOS versus la energía para una red hexagonal de  $N_{||}=52$  átomos en la parte longitudinal y la parte transversal (a)  $n_{\perp}=2$ , (b)  $n_{\perp}=6$  y (c)  $n_{\perp}=12$  átomos. Las autoenergías nulas, las integrales de salto  $t_1=t_2=t_3=t_4=t$  y  $\eta=10^{-3}|t|$ .

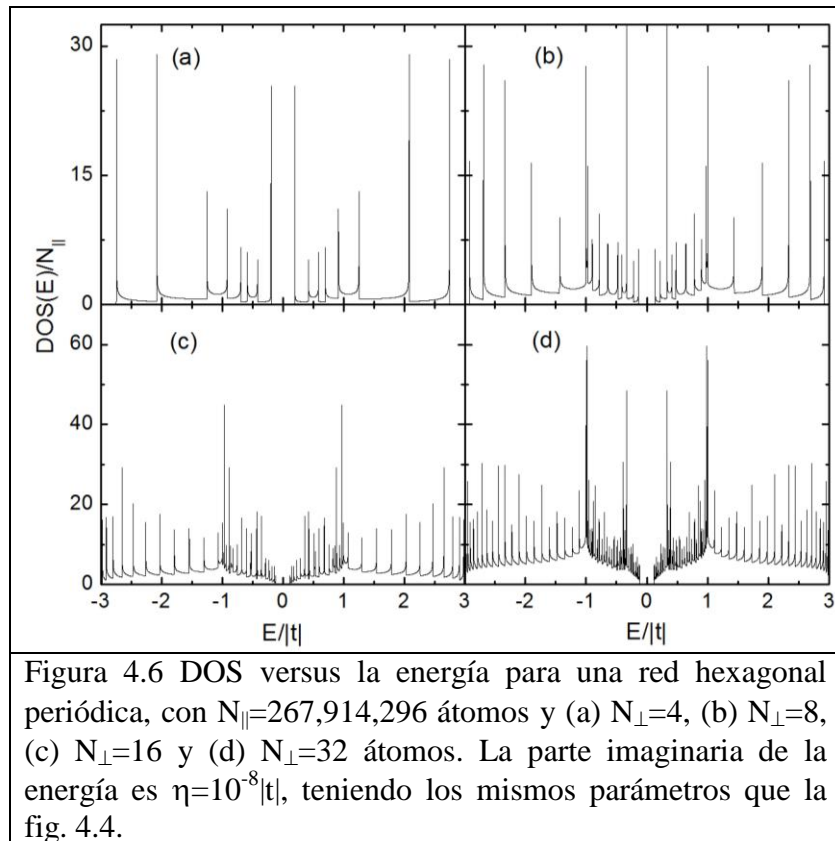
En la figura 4.5 mostramos la DOS versus la energía para una red hexagonal de  $N_{||}=1,508$  átomos en la parte longitudinal, tomando la misma parte transversal que en el caso anterior y los parámetros utilizados para las gráficas de la figura 4.4, excepto que la parte imaginaria en la energía ahora es  $\eta=10^{-4}|t|$ . Observemos que para este caso ya es más clara la forma que toma la densidad de estados de la red hexagonal al tener un mayor número de átomos. Además, como se concentran un mayor número de estados alrededor de los

valores en la energía  $1|t|$  y  $-1|t|$ , también podemos apreciar la suavidad del espectro de la DOS debido a que la parte imaginaria de la energía es más grande que el inverso del número de átomos del sistema. Tanto la figura 4.4 como la 4.5 se calcularon sin saturador para ver la transición de una a dos dimensiones.



La figura 4.6 representa la DOS versus la energía para una red hexagonal periódica con autoenergías nulas e integrales de salto  $t_1=t_2=t_3=t_4=t$ , con  $N_{||}=267,914,296$  átomos en la parte longitudinal y variando ahora la parte transversal para (a)  $N_{\perp}=4$ , (b)  $N_{\perp}=8$ , (c)  $N_{\perp}=16$  y (d)  $N_{\perp}=32$  átomos. La parte

imaginaria de la energía es  $\eta=10^{-8}|t|$ , esta red se encuentra conectada a dos saturadores semi-infinitos. Nótese que al estar conectada a los saturadores el espectro se suaviza, ya que la parte imaginaria de la energía es mayor que el inverso del número de átomos del sistema. También se observa mejor la transición entre los sistemas de una y dos dimensiones, obteniendo mejor la forma de la densidad de estados para una red hexagonal, en comparación con las gráficas mostradas en la figura 4.5.



La figura 4.7 muestra la densidad de estados versus la energía para una red hexagonal periódica con los mismos parámetros que la fig 4.6, la parte longitudinal es  $N_{\parallel}=267,914,296$  átomos y en la parte transversal (a)  $N_{\perp}=64$ , (b)  $N_{\perp}=280$  y (c)  $N_{\perp}=600$  átomos. También está conectada a dos saturadores semi-infinitos periódicos. Son de resaltar las dos singularidades de van Hove en los valores  $1|t|$  y  $-1|t|$  de la energía, conforme los átomos en la parte transversal se incrementen el espectro se suaviza. Más aún, alrededor de la energía igual a cero no hay densidad de estados tal como lo reportan en la literatura.

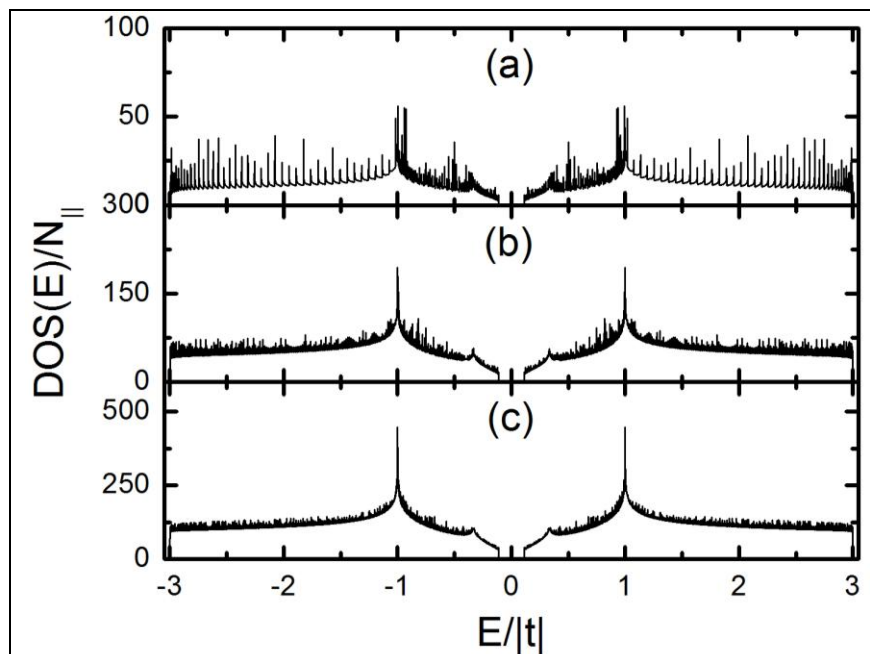


Figura 4.7 DOS contra energía para una red hexagonal periódica conectada a dos saturadores periódicos semi-infinitos. La parte longitudinal tiene  $N_{\parallel}=267,914,296$  átomos y en la parte transversal (a)  $N_{\perp}=64$ , (b)  $N_{\perp}=280$  y (c)  $N_{\perp}=600$  átomos. Los parámetros son los mismos que la figura 4.6.

Por otro lado, nos dimos a la tarea de investigar cómo se ve afectada la densidad de estados al ir variando las integrales de salto. La figura 4.8 muestra el efecto que tienen estas variaciones en la DOS para una red hexagonal de 267,914,296 átomos que componen su parte longitudinal y 8 átomos en la parte transversal, y que está conectada a dos saturadores semi-infinitos. Se manejan los mismos parámetros que los utilizado para generar las gráficas de la figura 4.6, con las excepciones de que (a)  $t_4=0.8t$ , (b)  $t_1=0.8t$ , (c)  $t_2=t_3=0.8t$  y (d)  $t_2=0.8t$ . La variación en  $t_4$  únicamente afecta a la parte transversal, por lo que hay una reducción en el ancho de banda y los picos en el espectro disminuyen de tamaño en comparación la figura 4.6 (b). Al variar  $t_1$  también se afecta al ancho de banda, ya que esta integral de salto se encuentra tanto en la parte longitudinal como en la parte transversal, además se ven reducidos los picos en el espectro. Cuando se varían  $t_2$  y  $t_3$  el ancho de banda no se ve afectado, sólo la altura de los picos en el espectro debido a que las integrales de salto sólo se encuentran en la parte longitudinal de la red.

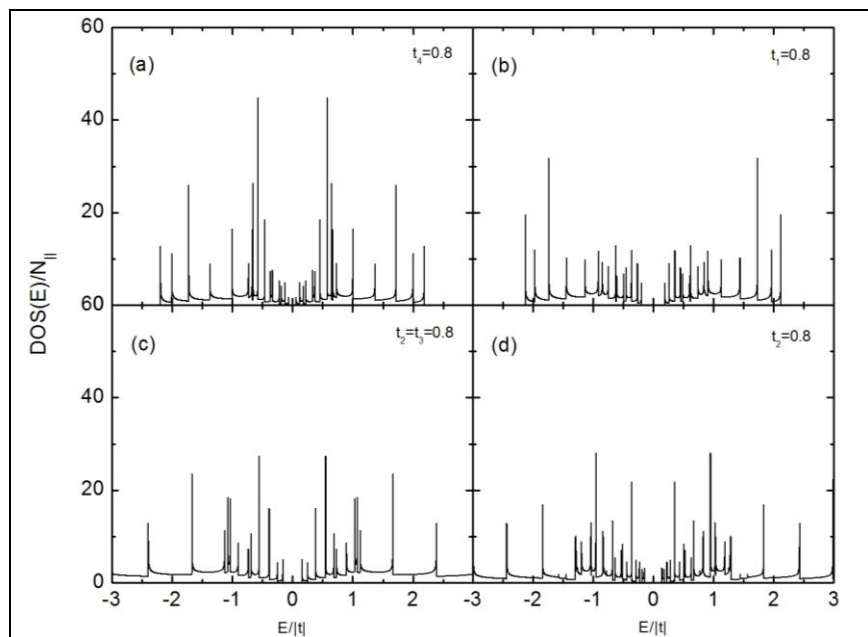


Figura 4.8 DOS versus energía para una red hexagonal de  $N_{||}=267,914,296$  y para  $N_{\perp}=8$  átomos. Tiene los mismos parámetros que la figura 4.6 excepto que (a)  $t_4=0.8t$ , (b)  $t_1=0.8t$ , (c)  $t_2=t_3=0.8t$  y (d)  $t_2=0.8t$ .

En la figura 4.9 se representa la DOS versus la energía para un sistema parecido al utilizado para generar las gráficas mostradas en la figura 4.7, excepto que ahora se varían las integrales de salto para (a)  $t_4=0.8t$ , (b)  $t_1=0.8t$ , (c)  $t_2=t_3=0.8t$  y (d)  $t_2=0.8t$ . Obsérvese la reducción que tiene el ancho de banda cuando varían  $t_4$  y  $t_1$ , lo que se debe a que estos se encuentran en la parte transversal del sistema. Se sigue presentando la singularidad de van Hove en energías cercanas a  $1|t|$  y  $-1|t|$ , ahora cuando varían  $t_2$  y  $t_3$  la energía donde se presenta la singularidad se recorre y el ancho de banda no se ve modificado.

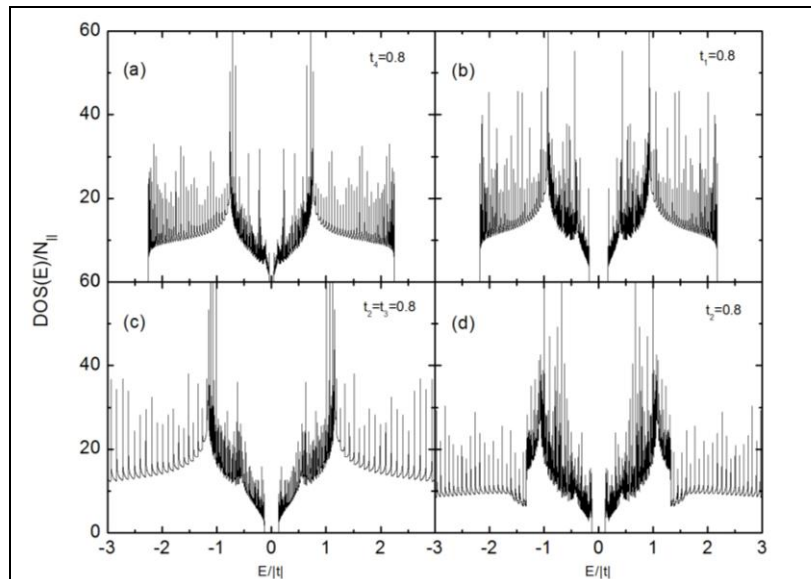


Figura 4.9 DOS versus la energía para una red hexagonal de 267,914,296 átomos en forma longitudinal y 64 en forma transversal, con los mismos parámetros que la fig. 4.7 (a) excepto que varían las integrales de salto (a)  $t_4=0.8t$ , (b)  $t_1=0.8t$ , (c)  $t_2=t_3=0.8t$  y (d)  $t_2=0.8t$ .

En la figura 4.10 se observa mejor el efecto de la reducción del ancho de banda y cómo se mueve la energía de la singularidad cuando varían  $t_1$  y  $t_4$ . Además, cuando varían  $t_2$  y  $t_4$  el espectro se afecta sólo en el corrimiento de la energía donde se presenta la singularidad. Estos resultados son para una red hexagonal con 267,914,296 átomos en la parte longitudinal y 600 átomos en la parte transversal, utilizando los mismos parámetros que la figura 4.7 (c) excepto para (a)  $t_4=0.8t$ , (b)  $t_1=0.8t$  y (c)  $t_2=t_3=0.8t$ .

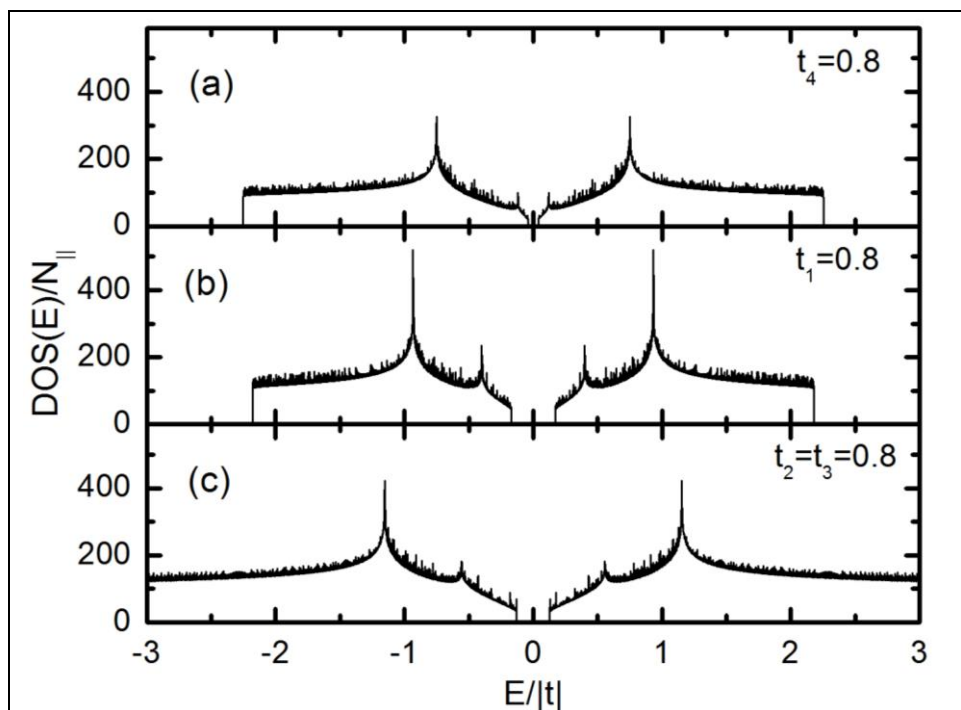


Figura 4.10 DOS versus energía para una red hexagonal de  $N_{||}=267,914,296$  y  $N_{\perp}=600$  átomos con los mismos parámetros que la figura 4.7 (c) excepto para (a)  $t_4=0.8t$ , (b)  $t_1=0.8t$  y (c)  $t_2=t_3=0.8t$

En la siguiente sección presentamos un análisis de la densidad de estados para una red hexagonal en forma de tubo, lo cual se logra al tomar eigenvalores cíclicos para la parte transversal de la red hexagonal. Vale la pena remarcar



que esto nos lleva a manejar nanotubos de tipo zigzag y, claro, de una sola capa.

#### IV.4 Densidad de estados de los Nanotubos

La Figura 4.11 representa la DOS contra la energía para un nanotubo hexagonal finito de  $N_{\parallel}=52$  átomos en la parte longitudinal y varía la parte transversal (a)  $n_{\perp}=3$ , (b)  $n_{\perp}=6$  y (c)  $n_{\perp}=12$  átomos. Tomando todas las autoenergías nulas, las integrales de salto  $t_1=t_2=t_3=t_4=t$  y la parte imaginaria de la energía fue de  $\eta=10^{-3}|t|$ , es decir, periódico. En esta figura podemos ver una mayor degeneración en los picos de la DOS en comparación con la fig. 4.4 y todavía no se aprecia bien la transición de un tubo casi unidimensional de pocos átomos a uno de un mayor número de átomos.

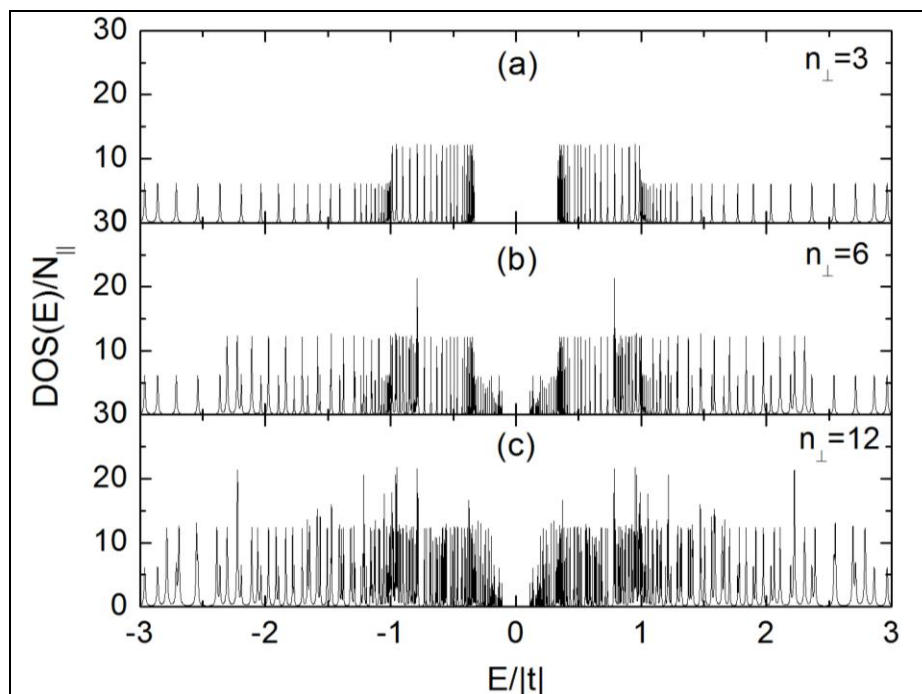


Figura 4.11 DOS versus la energía para un naotubo hexagonal de  $N_{\parallel}=52$  átomos en la parte longitudinal y la parte transversal (a)  $n_{\perp}=3$ ,

(b)  $n_{\perp}=6$  y (c)  $n_{\perp}=12$  átomos. Las autoenergías son cero, las integrales de salto son  $t_1=t_2=t_3=t_4=t$  y  $\eta=10^{-3}|t|$ .

La figura 4.12 nos muestra la gráfica de la DOS versus la energía para un nanotubo hexagonal con  $N_{\parallel}=1,508$  átomos en la parte longitudinal, mientras que la parte transversal varía en (a)  $n_{\perp}=3$ , (b)  $n_{\perp}=6$  y (c)  $n_{\perp}=12$  átomos, los parámetros son los mismos que los utilizados para obtener la fig. 4.11, excepto que la parte imaginaria en la energía ahora es de  $\eta=10^{-4}|t|$ . Observemos que para este caso es más clara ya la forma que toma la densidad de estados del nanotubo hexagonal al tener un mayor número de átomos. También, podemos apreciar la suavidad del espectro de DOS debido a que la parte imaginaria de la energía es más grande que el inverso del número de átomos del sistema. Tanto la figura 4.11, como la 4.12 se calcularon sin saturador para ver la transición de una a dos dimensiones, sólo que todavía no se aprecia la forma de la densidad de estados como se muestra en la literatura por el número reducido de átomos.

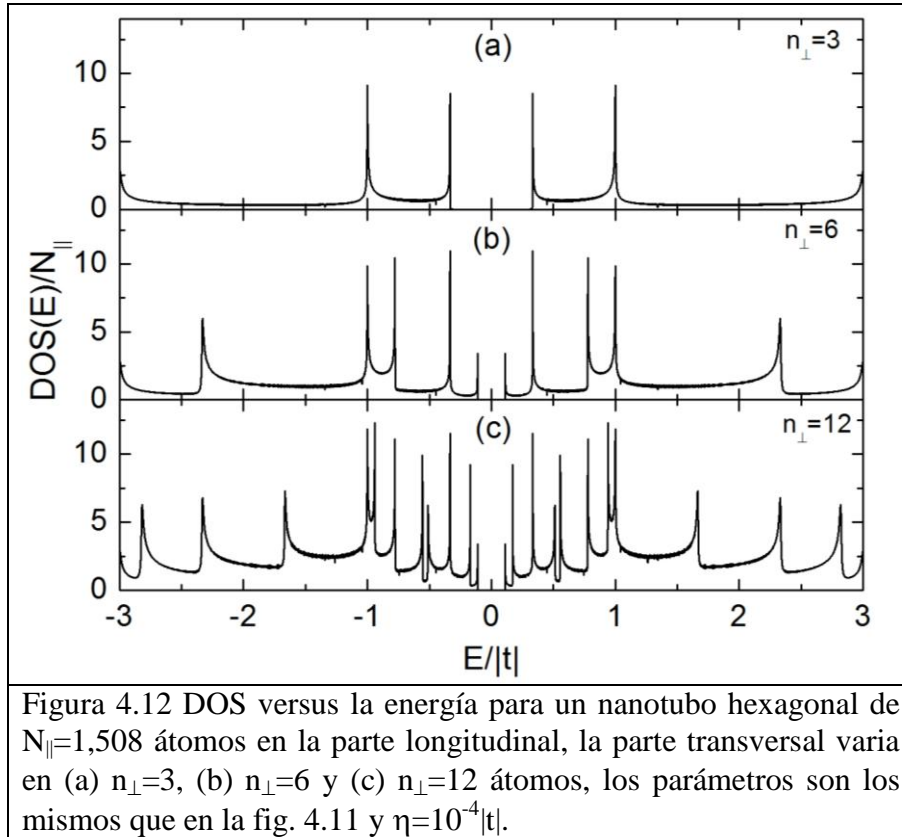


Figura 4.12 DOS versus la energía para un nanotubo hexagonal de  $N_{||}=1,508$  átomos en la parte longitudinal, la parte transversal varía en (a)  $n_{\perp}=3$ , (b)  $n_{\perp}=6$  y (c)  $n_{\perp}=12$  átomos, los parámetros son los mismos que en la fig. 4.11 y  $\eta=10^{-4}|t|$ .

Estas dos figuras anteriores fueron calculadas sin saturador, para las siguientes figuras todos los sistemas van a estar conectados a dos saturadores semi-infinitos periódicos, es decir, cables representados mediante cadenas lineales con integrales de salto igual a  $t$  y autoenergías nulas.

Las gráficas de la figura 4.13 representan la DOS versus la energía para un nanotubo hexagonal periódico tipo zigzag con autoenergías cero e integrales de salto  $t_1=t_2=t_3=t_4=t$ , con  $N_{||}=267,914,296$  átomos en la parte longitudinal y en donde hemos variado la parte transversal en (a)  $N_{\perp}=4$ , (b)  $N_{\perp}=8$ , (c)  $N_{\perp}=16$  y (d)  $N_{\perp}=32$  átomos. La parte imaginaria de la energía es  $\eta=10^{-8}|t|$ . Nótese que al estar conectada a los saturadores el espectro se suaviza, ya que la parte imaginaria de la energía es mayor que el inverso del número de átomos del sistema. También se observa mejor la forma de la densidad de estados para el nanotubo hexagonal en comparación con la figura 4.12.

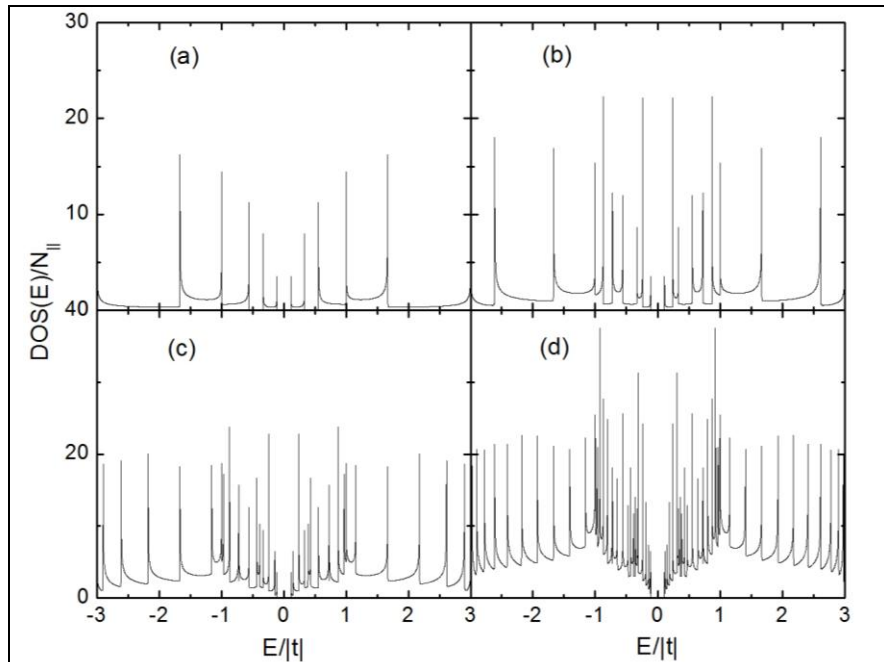
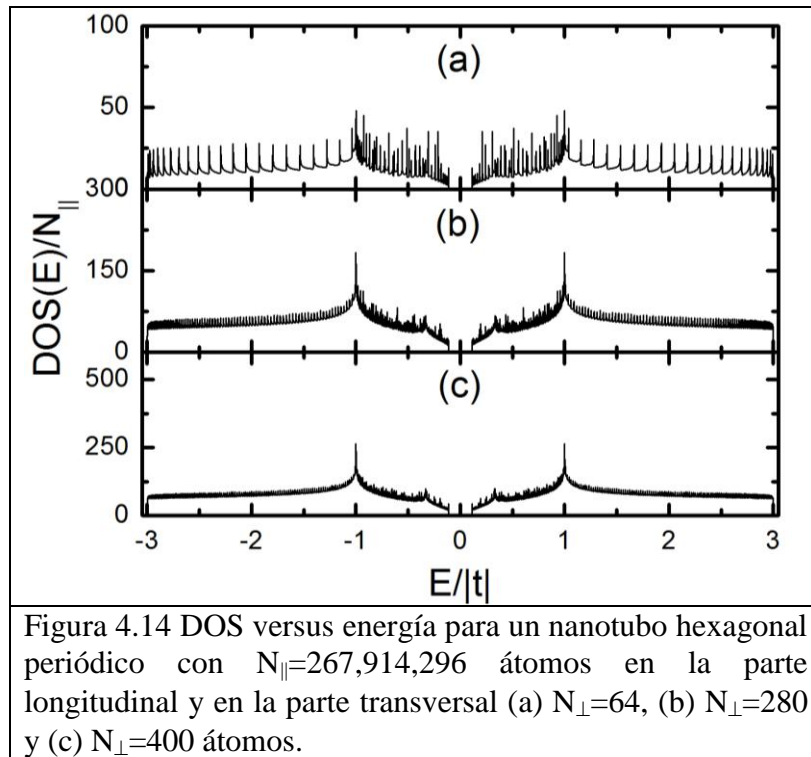


Figura 4.13 DOS versus la energía para un nanotubo hexagonal periódico con integrales de salto  $t_1=t_2=t_3=t_4=t$ ,  $N_{||}=267,914,296$  átomos en la parte longitudinal y variamos la parte transversal (a)  $N_{\perp}=4$ , (b)  $N_{\perp}=8$ , (c)  $N_{\perp}=16$  y (d)  $N_{\perp}=32$  átomos. La parte imaginaria de la energía es  $\eta=10^{-8}|t|$ .

La figura 4.14 muestra 3 gráficas obtenidas de la DOS versus la energía para un nanotubo hexagonal periódico con  $N_{||}=267,914,296$  átomos en la parte longitudinal y variando la parte transversal en (a)  $N_{\perp}=64$ , (b)  $N_{\perp}=280$  y (c)  $N_{\perp}=400$  átomos. Para las gráficas se manejaron los mismos parámetros que los utilizados para la figura 4.13. Obsérvense las dos singularidades de van Hove en  $1|t|$  y  $-1|t|$  de la energía, que conforme los átomos en la parte transversal se incrementan, el espectro se suaviza. Además podemos ver que alrededor de la

energía igual a cero no hay densidad de estados, tal como es reportado en la literatura.



Para el caso en que se introducen defectos, lo que equivale a ir variando las integrales de salto  $t$  en los nanotubos, tenemos lo siguiente.

La figura 4.15 muestra la DOS para un nanotubo hexagonal de 267,914,296 átomos que constituyen su parte longitudinal, y 8 que componen su parte transversal. Se utilizan los mismos parámetros que los utilizados para las gráficas de la figura 4.12, excepto que ahora las integrales de salto las tomamos como (a)  $t_4=0.8t$ , (b)  $t_1=0.8t$ , (c)  $t_2=t_3=0.8t$  y (d)  $t_2=0.8t$ . Podemos ver que la variación en  $t_4$  y  $t_1$  afecta a la parte transversal, por lo que hay una reducción en el ancho de banda y los picos en el espectro disminuyen de tamaño en comparación la figura 4.13 (b). Cuando se varían  $t_2$  y  $t_3$  el ancho de banda no se ve afectado, sólo la altura de los picos en el espectro, debido a que las integrales de salto sólo se encuentran en la parte longitudinal de la red. La parte más afectada en este caso son los picos en el espectro después de las energías  $1|t|$  y  $-1|t|$ .

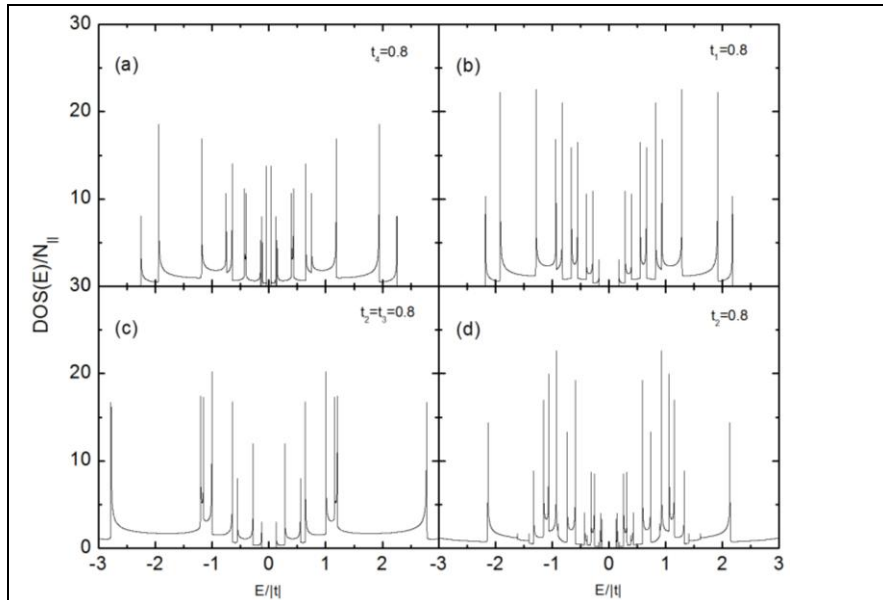


Figura 4.15 DOS versus energía para un nanotubo hexagonal de  $N_{||}=267,914,296$  y  $N_{\perp}=8$ . Se utilizan los mismos parámetros que los utilizados para la figura 4.12, excepto que (a)  $t_4=0.8t$ , (b)  $t_1=0.8t$ , (c)  $t_2=t_3=0.8t$  y (d)  $t_2=0.8t$ .

En la figura 4.16 se presentan 4 gráficas de la DOS versus la energía para el mismo sistema que el representado en la figura 4.14 (a), excepto que aquí se varían las integrales de salto en (a)  $t_4=0.8t$ , (b)  $t_1=0.8t$ , (c)  $t_2=t_3=0.8t$  y (d)  $t_2=0.8t$ . Obsérvese la reducción que tiene el ancho de banda cuando varían  $t_4$  y  $t_1$ , ya que estos se encuentran en la parte transversal del sistema. Pero sigue presentando una singularidad de van Hove en energías cercanas a  $|t|$  y  $-|t|$ . Más aún, cuando varía  $t_2$  y  $t_3$ , recorre la energía donde se presenta la singularidad y el ancho de banda no se ve modificado, aquí sí se puede apreciar mejor que los picos del espectro después de las energías  $|t|$  y  $-|t|$  reducen el tamaño y tiene un menor número de estados (fig. 4.16 (c) y (d)).

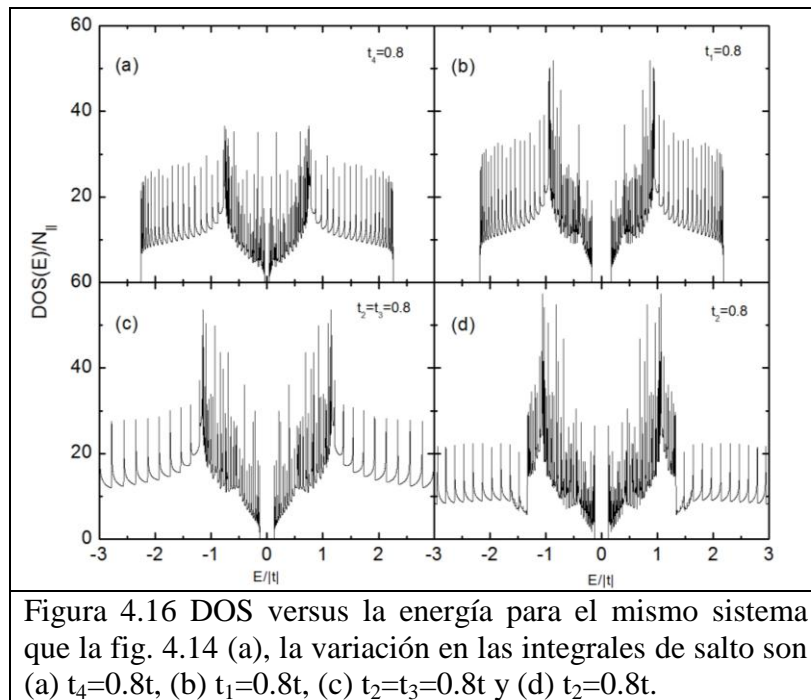


Figura 4.16 DOS versus la energía para el mismo sistema que la fig. 4.14 (a), la variación en las integrales de salto son (a)  $t_4=0.8t$ , (b)  $t_1=0.8t$ , (c)  $t_2=t_3=0.8t$  y (d)  $t_2=0.8t$ .

Finalmente, la figura 4.17 nos muestra la densidad de estados para el mismo sistema que la figura 4.14 (b), teniendo como defectos las integrales de salto (a)  $t_4=0.8t$ , (b)  $t_1=0.8t$  y (c)  $t_2=t_3=0.8t$ . Aquí se observa mejor el efecto de la reducción del ancho de banda y cómo se mueve la energía de la singularidad cuando varían  $t_1$  y  $t_4$ . Además, cuando varían  $t_2$  y  $t_3$  el espectro se ve afectado en el corrimiento de la energía donde se presenta la singularidad y también en el tamaño de los picos después de la energía  $E=1.33|t|$ .

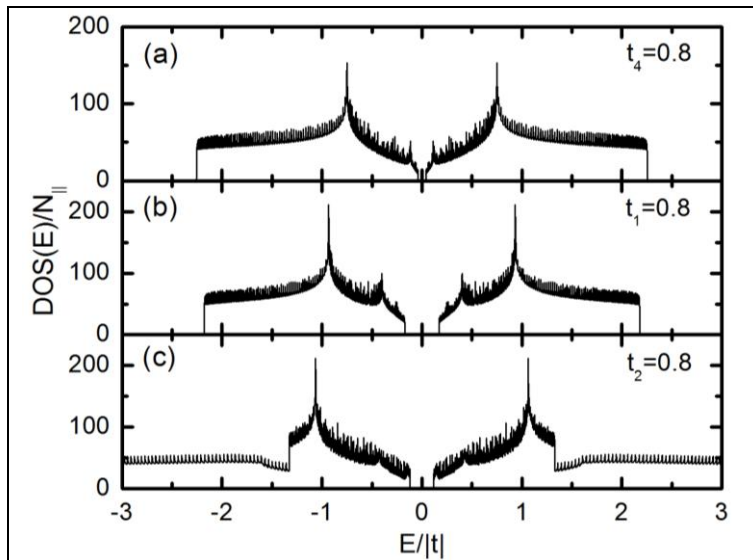


Figura 4.17 DOS contra energía para un tubo hexagonal de  $N_{||}=267,914,296$  y  $N_{\perp}=280$  átomos al ir variando las integrales de salto (a)  $t_4=0.8t$ , (b)  $t_1=0.8t$  y (c)  $t_2=t_3=0.8t$ .

En el siguiente capítulo se desarrolla la transmitancia para una red hexagonal y un nanotubo periódico y con defectos de salto.



# Capítulo V

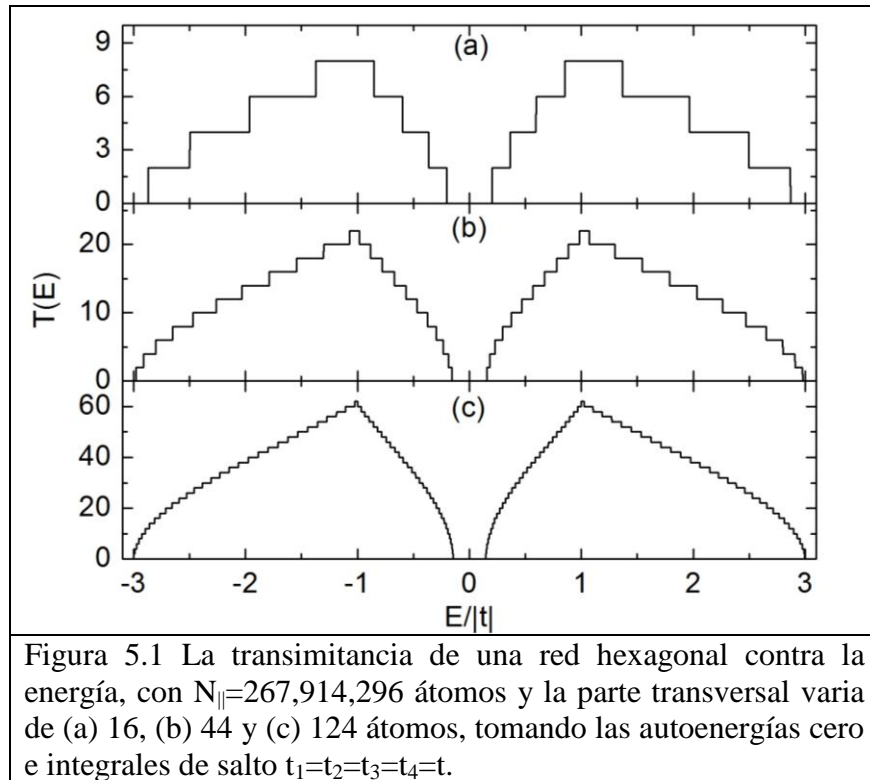
## Transmitancia Eléctrica

### V.1 Introducción

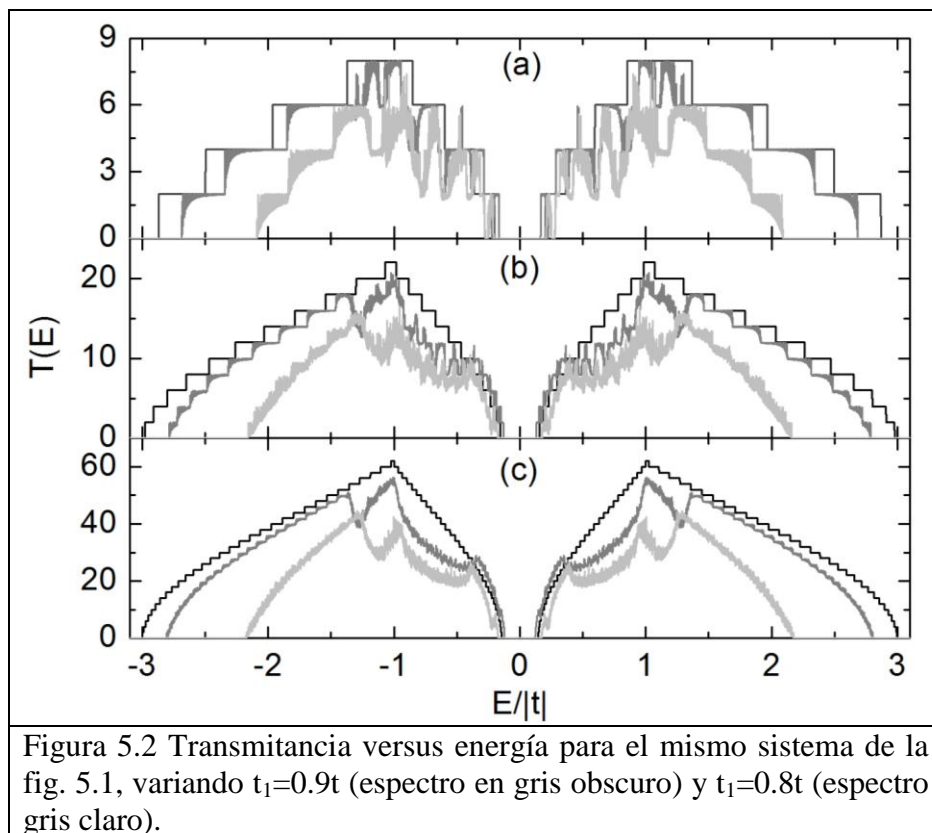
La conducción electrónica en sólidos con defectos es un problema abierto en la física de materia condensada, ya que se combinan dos problemas difíciles de por sí: los fenómenos fuera de equilibrio y el desorden estructural. Los procesos de transporte son disipativos e irreversibles y las teorías de conducción usualmente introducen esta irreversibilidad asumiendo que el sistema de interés está en contacto con un gran reservorio que está siempre en equilibrio termodinámico y continuamente trata de restaurar el equilibrio al sistema a través de interacciones aleatorias. Esto está particularmente claro en la teoría de Landauer (capítulo II sección 4). Por otro lado, las características electrónicas de las redes hexagonales de carbón y los nanotubos son influenciados fuertemente por sus geometrías. Cualquier nueva información y comprensión relacionadas con las hojas del grafeno tendrán un impacto en la investigación básica y usos de las materias primas del carbón.

### V.2 Red Hexagonal

La transmitancia de una red hexagonal contra la energía se muestra en la figura 5.1, la parte longitudinal contiene  $N_{||}=267914296$  átomos y la parte transversal varía en (a) 16, (b) 44 y (c) 124 átomos, tomando las autoenergías cero e integrales de salto  $t_1=t_2=t_3=t_4=t$ . Observe que el espectro de transmitancia se presenta como una de escalera, de altura de escalón igual a  $2T_0$ , donde  $T_0$  es el coeficiente de transmisión para una cadena unidimensional periódica. Esto es llamado la cuantización de la conductividad eléctrica. Además, el espectro presenta un gap alrededor de la energía igual a cero. Más aún, el espectro de transmitancia va ir creciendo conforme se incrementa la parte transversal.



Se hizo un estudio sobre cómo le afectan los defectos de las integrales de salto a la transmitancia. La figura 5.2 nos muestra este efecto al variar  $t_1=0.9t$  (espectro en gris oscuro) y  $t_1=0.8t$  (espectro gris claro), para el mismo sistema que la figura 5.1. Nótese cómo destruye la cuantización del espectro, siendo más afectada la parte interna, es decir, energías menores que  $1|t|$ . Esta destrucción es más evidente conforme crece el sistema.



La figura 5.3 presenta el espectro de transmitancia contra energía para una red hexagonal periódica de  $N_{\parallel}=267,914,296$  átomos en la parte longitudinal y (a) 128 y (b) 800 átomos en la parte transversal. Observe cómo la cuantización de la conductividad no se observa debido al tamaño del sistema, pero si se amplificara una región se verían escalones. El espectro de transmitancia toma esa forma cuando la parte transversales es mayor que la presentada en la fig 5.3 (b), Lo único que varía es la altura, que se relaciona con la mitad del numero de átomos de la parte transversal.

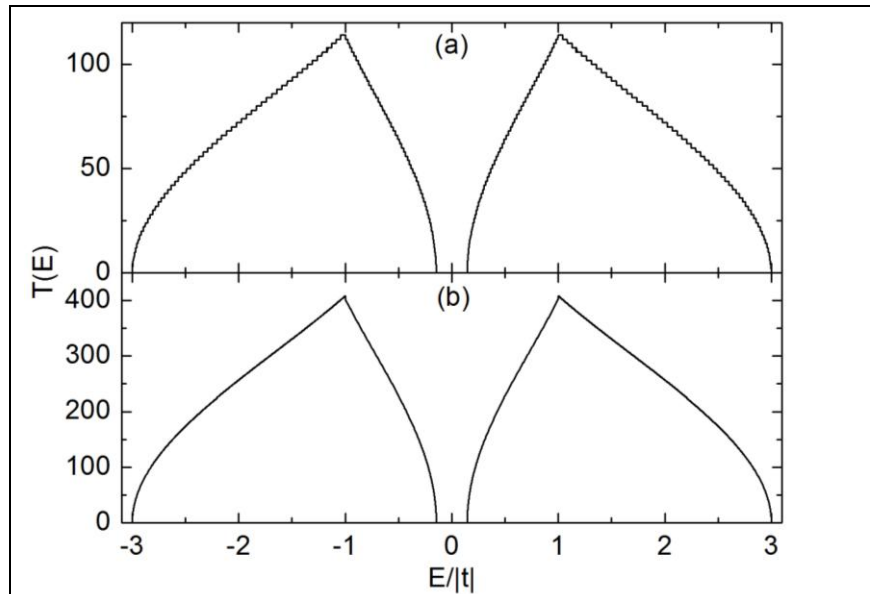


Figura 5.3 Transmitancia contra energía para una red hexagonal periódica de  $N_{\parallel}=267,914,296$  átomos en la parte longitudinal y (a) 128 y (b) 800 átomos en la parte transversal.

En la figura 5.4 podemos observar cómo decae el espectro de la transmitancia cuando un defecto en la energía de salto  $t_1$  es incorporado. El sistema es el mismo que en la fig. 5.3 sólo que se suman los espectros de  $t_1=0.9t$  (espectro en gris oscuro) y  $t_1=0.8t$  (espectro gris claro). Más aún, podemos ver cómo el ancho de banda decrece conforme disminuye  $t_1$ , similar a lo que pasa en el espectro de densidad de estados.

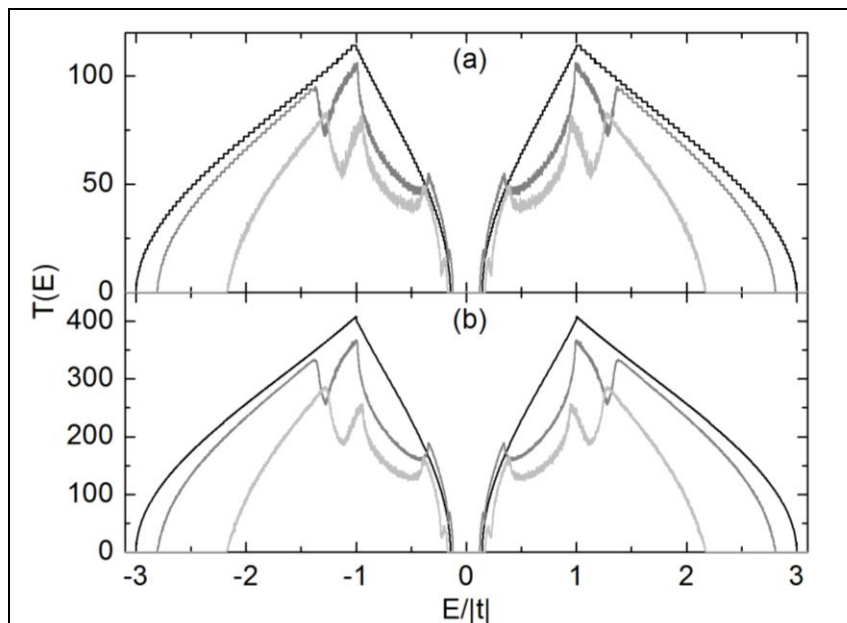


Figura 5.4 Transmitancia contra energía para una red hexagonal

periódica de  $N_{\parallel}=267,914,296$  átomos en la parte longitudinal y (a) 128 y (b) 800 átomos en la parte transversal. Los espectros corresponden a  $t_1=0.9t$  (espectro en gris oscuro) y  $t_1=0.8t$  (espectro gris claro).

Ahora vamos a ver cómo se modifica la transmitancia si en vez de ser una red hexagonal se trata de un nanotubo hexagonal de una sola pared (SWN).

### V.3 Nanotubos

La figura 5.5 muestra la transmitancia de tres nanotubos hexagonales contra la energía, la parte longitudinal contiene  $N_{\parallel}=267,914,296$  átomos y la parte transversal varía de (a) 18, (b) 42 y (c) 124 átomos, tomando las autoenergías cero e integrales de salto  $t_1=t_2=t_3=t_4=t$ . Observe que el espectro de transmitancia también se presenta en forma de una escalera, de altura de escalón igual a  $2T_0$ , pero se observa una asimetría de los escalones alrededor del punto más alto en el espectro. Además, el espectro presenta un gap alrededor de la energía igual a cero. Más aún, el espectro de transmitancia va ir creciendo conforme se incrementa la parte transversal.

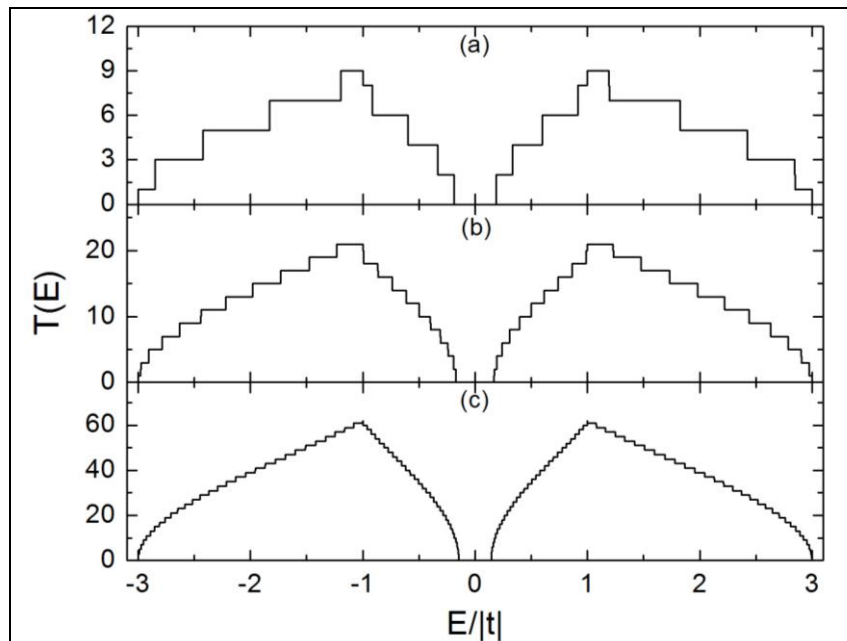


Figura 5.5 Transmitancia versus energía de un nanotubo hexagonal, la parte longitudinal contiene  $N_{\parallel}=267,914,296$  átomos y la parte transversal varía de (a) 18, (b) 42 y (c) 124 átomos, tomando las autoenergías cero e integrales de salto  $t_1=t_2=t_3=t_4=t$ .

La figura 5.6 presenta el espectro de transmitancia cuando se le incluyen defectos en la integral de salto  $t_1$ , para el mismo sistema que la fig. 5.5. Las integrales de salto son  $t_1=0.9 t$  (espectro en gris oscuro) y  $t_1=0.8 t$  (espectro gris claro).

Vale la pena remarcar cómo si la integral de salto es  $0.9 t$ , no se destruye completamente la cuantización del espectro para energías mayores en valor absoluto a  $E=1.2|t|$ , y sí se destruye la cuantización cuando la energía es menor que este valor. Esta destrucción es más evidente si se disminuye la energía del defecto.

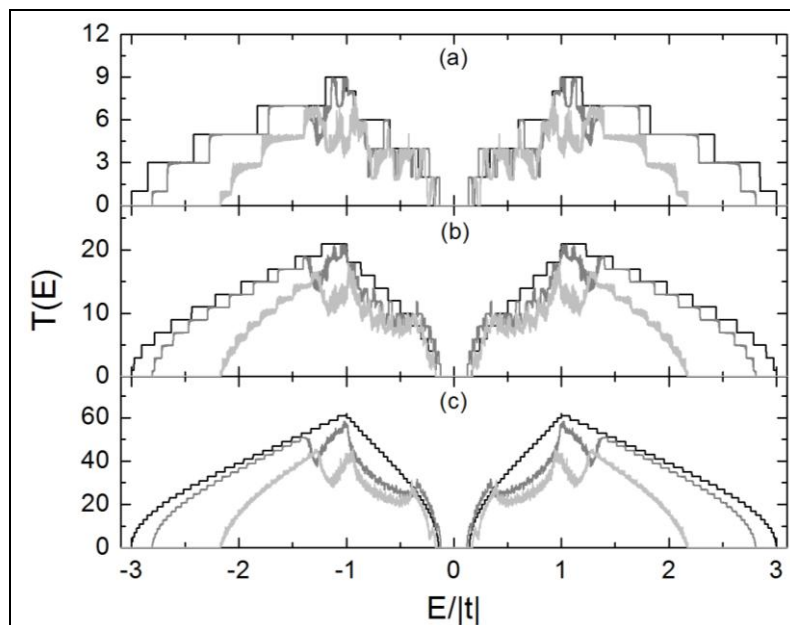
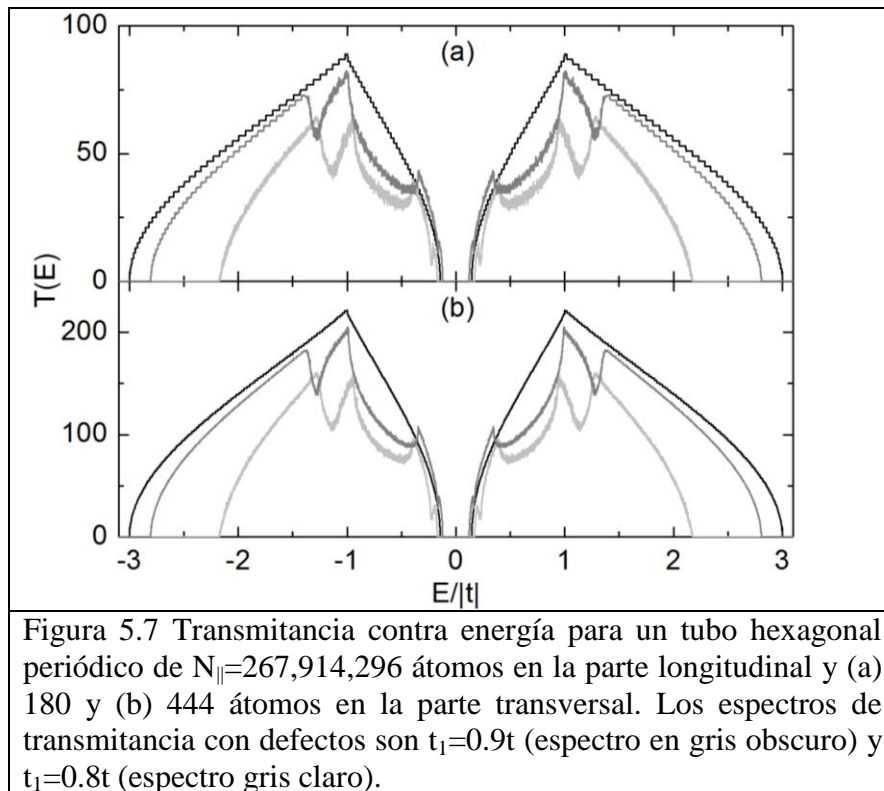


Figura 5.6 Transmitancia versus energía de un nanotubo hexagonal, la parte longitudinal contiene  $N_{||}=267,914,296$  átomos y la parte transversal varía de (a) 18, (b) 42 y (c) 124 átomos. Los espectros corresponden a  $t_1=0.9t$  (espectro en gris oscuro) y  $t_1=0.8t$  (espectro gris claro).

La figura 5.7 presenta el espectro de transmitancia contra energía para un nanotubo hexagonal periódico de  $N_{||}=267,914,296$  átomos en la parte longitudinal y (a) 180 y (b) 444 átomos en la parte transversal. Notamos ahora cómo la cuantización de la conductividad no se observa, lo que se debe al tamaño del sistema, pero si se amplificara una región se verían escalones. Más aún, si la parte transversal del sistema crece, la forma del espectro ya no varía y sólo se incrementa el valor de la transmitancia en proporción a la mitad del número de átomos de la parte transversal.

En la figura 5.7 podemos observar cómo decae el espectro de la transmitancia cuando un defecto en la energía de salto  $t_1$  es incorporado para los espectros

de  $t_1=0.9t$  (espectro en gris oscuro) y  $t_1=0.8t$  (espectro gris claro). Incluso podemos ver cómo el ancho de banda decrece conforme disminuye  $t_1$ , similar a lo que pasa en el espectro de densidad de estados para este caso.



Finalmente, después de estudiar la DOS y la transmitancia de redes y nanotubos hexagonales, vemos que resultan ser una herramienta muy eficiente los métodos de renormalización y convolución, ya que nos ahorran mucho tiempo de cómputo y de esta forma podemos analizar los espectros para sistemas periódicos y con defectos, que van desde unos cuantos átomos hasta sistemas de orden macroscópico

# Conclusiones

El presente trabajo estuvo orientado principalmente en desarrollar un método de renormalización más convolución para estudiar las propiedades físicas de redes y nanotubos hexagonales periódico y con impurezas. A continuación se detallan algunas conclusiones importantes:

- 1.- Se obtuvo la relación de dispersión de una red hexagonal con y sin impurezas, las cuales están representadas por integrales de salto. Los espectros coinciden con los reportados en la literatura.
- 2.- En el caso de los nanotubos de tipo sillón y zigzag se obtuvo la relación de dispersión y sus espectros.
- 3.- Se propuso una forma gráfica de separar el hamiltoniano de la red hexagonal, la cual permite utilizar los métodos de renormalización y convolución.
- 4.- Se hizo la extensión del método de renormalización para estudiar la DOS y la transmitancia de la parte longitudinal del sistema. Se obtuvieron los eigenvalores de la parte transversal de la red. De esa forma se desarrolló el nuevo método de renormalización y convolución para redes hexagonales.
- 5.- Los espectros de la densidad de estados y la transmitancia de la red hexagonal periódica obtenida mediante nuestro método coinciden con los reportados por otros autores.
- 6.- Se observó que la transmitancia de dicho sistema es extremadamente sensible a la presencia de defectos.

Finalmente, hacemos énfasis de la importancia en general del método de renormalización y convolución para el estudio de propiedades físicas en el espacio real, puesto que permite abordar sistemas con y sin impurezas desde escala nanoscópica hasta macroscópica. Así, haber realizado por primera vez la extensión de dicho método para redes hexagonales y nanotubos, consideramos que es una aportación importante para el estudio de estos sistemas.



# Apéndice A

## A.1 Funciones de Bloch

Los electrones dentro de un sólido representan un problema de muchos cuerpos, pues el Hamiltoniano del sólido no solo contiene los potenciales de un electrón que describe sus interacciones con el núcleo, sino también los potenciales que describen su interacción con los demás electrones. Una forma de solucionar el problema es tomando un potencial efectivo ( $U(r)$ ), pero no importa la forma que se tenga del potencial efectivo de un electrón, si el cristal es perfectamente periódico debe satisfacer la relación

$$U(r+R) = U(r) \quad \text{A.1}$$

A los electrones independientes que obedecen la ecuación de Schrödinger para un electrón dentro de un potencial periódico, se les conoce como electrones Bloch.

Una función de Bloch es la función de onda de una partícula sometida a un potencial periódico. Consiste en el producto de una onda plana y una función periódica  $u_{nk}(r)$ , el cual tiene la misma periodicidad que el potencial

$$\Psi_{nk}(r) = e^{ik \cdot r} u_{nk}(r) \quad \text{A.2}$$

De forma más general, la descripción con funciones de Bloch se aplica a cualquier fenómeno ondulatorio dentro de un medio periódico. Por ejemplo, un dieléctrico periódico en electromagnetismo lleva a cristales fotónicos, y un medio acústico periódico lleva a cristales fonónicos.

El vector de onda  $k$ , se corresponde de forma única a un vector de la red recíproca, así que solo se necesita considerar los vectores de onda dentro de la primera zona de Brillouin.

## A.2 Funciones de Wannier

Los estados electrónicos, base de un sistema periódico, se describen usualmente en términos de los orbitales de Bloch extendidos, eigenestados simultáneos del Hamiltoniano periódico y de las traslaciones de la red directa. Una representación alternativa en términos de orbitales localizados la introdujo Gregory Wannier en 1937.

Las funciones de Wannier para distintos sitios de red en un cristal son ortonormales, permitiendo una base conveniente para la expansión de estados electrónicos. Las funciones de Wannier son ampliamente utilizadas por

ejemplo, en el análisis de fuerzas de amarre que actúan en los electrones y se ha probado que, en general, son localizadas, al menos para aislantes [21].

La conexión entre la representación de Bloch y la representación de Wannier se realiza mediante familias de transformaciones en un espacio continuo de matrices unitarias. Las funciones de Wannier son las transformadas de Fourier de las funciones de Bloch: al sumar sobre las funciones de Bloch extendidas se obtiene un conjunto de funciones de Wannier localizadas.

La representación de Wannier, que es esencialmente una imagen del espacio real de orbitales localizados asigna como número cuántico a los vectores de la red  $\mathbf{R}$  de la celda donde el orbital es localizado junto con un índice  $n$ .

### A.3 Modelo de amarre fuerte

Este modelo se basa en funciones de Wannier, la cuales son transformadas de Fourier de las funciones de Bloch. Para este modelo se hacen una serie de suposiciones que se especifican a continuación:

- Se conocen los eigenvalores y las eigenfunciones de la energía para un electrón en un átomo aislado.
- Cuando se juntan átomos para formar un sólido, éstos permanecen lo suficientemente separados como para que cada electrón sea asignado a un sitio atómico particular. Esta suposición no es válida para electrones de valencia en metales.
- El potencial periódico es aproximado por una superposición de potenciales atómicos.
- La diferencia entre el potencial actual y el potencial atómico se puede tratar por medio de teoría de perturbaciones.

El hamiltoniano de amarre fuerte tiene la forma:

$$H = \sum_l \alpha_l |l\rangle\langle l| + \sum_l \sum_{k \neq l} t_{kl} |l\rangle\langle l| \quad \text{A.3}$$

donde la autoenergía  $\alpha_l = \langle l|H|l\rangle$  es la energía necesaria para colocar un electrón en el sitio  $l$  y la energía de salto  $t_{kl} = \langle k|H|l\rangle$  es la amplitud de probabilidad de transición entre los estados  $k$  y  $l$ .

# Apéndice B

## B.1 Función de Green

Las funciones de Green se pueden definir como soluciones para ecuaciones diferenciales no homogéneas del tipo:

$$[z - L(\mathbf{r})]G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad \text{B.1}$$

asumimos que  $z$  es un complejo con  $\lambda = \text{Re}(z)$ ,  $s = \text{Im}(z)$ ; y  $L(\mathbf{r})$  es un operador hermitiano, independiente del tiempo, lineal y que posee un conjunto de eigenfunciones  $\Phi_n(\mathbf{r})$  completo, es decir,

$$L(\mathbf{r})\Phi_n(\mathbf{r}) = \lambda_n \Phi_n(\mathbf{r}), \quad \text{B.2}$$

donde  $\Phi_n(\mathbf{r})$  satisface las mismas condiciones de frontera que  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z)$ . El conjunto  $\Phi_n(\mathbf{r})$  puede ser considerado sin pérdida de generalidad como ortonormal

$$\int_{\Omega} \Phi_n^*(\mathbf{r})\Phi_m(\mathbf{r})d\mathbf{r} = \delta_{nm} \quad \text{B.3}$$

La completez del conjunto  $\Phi_n(\mathbf{r})$  significa que

$$\sum_n \Phi_n(\mathbf{r})\Phi_n^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad \text{B.4}$$

Nótese que  $n$  puede correr sobre un conjunto discreto de valores y/o uno continuo. Ahora, si utilizamos notación de Dirac para la Ec. A.1, obtenemos

$$zG(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) - \langle \mathbf{r} | LG(z) | \mathbf{r}' \rangle = \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle. \quad \text{B.5}$$

Utilizar notación de bras y kets presenta ciertas ventajas, por ejemplo, se facilitan las manipulaciones algebraicas intermedias, y uno se restringe a la representación en el espacio real ( $\mathbf{r}$ ). Si todos los eigenvalores de  $z - L$  son distintos de cero, entonces podemos obtener con un poco de álgebra que

$$G(z) = \frac{1}{z - L}, \quad \text{B.6}$$

pues  $z \neq \lambda_n$ . Tomando en cuenta que para cualquier función  $F$  se tiene que  $F(L)|\Phi_n\rangle = F(\lambda_n)|\Phi_n\rangle$ , entonces

$$G(z) = \sum_n \frac{|\Phi_n\rangle\langle\Phi_n|}{z - \lambda_n} = \sum_n \frac{|\Phi_n\rangle\langle\Phi_n|}{z - \lambda_n} + \int \frac{|\Phi_n\rangle\langle\Phi_n|}{z - \lambda_n} dn, \quad \text{B.7}$$

y utilizando la representación en el espacio real llegamos a que

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) = \sum_n \frac{\Phi_n(\mathbf{r})\Phi_n^*(\mathbf{r}')}{z - \lambda_n} + \int \frac{\Phi_n(\mathbf{r})\Phi_n^*(\mathbf{r}')}{z - \lambda_n} dn \quad \text{B.8}$$

Ahora, dado que  $L$  es un operador Hermitiano, todos sus eigenvalores ( $\lambda_n$ ) son reales. Entonces, si  $\text{Im}(z) \neq 0$ ,  $z \neq \lambda_n$  lo que significa que  $G(z)$  es una función analítica en el plano complejo, excepto en aquellos puntos o intervalos del eje real que correspondan a los eigenvalores de  $L$ .

Podemos intentar definir  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \lambda)$  por medio de límites. Usualmente, donde los eigenestados asociados con el espectro continuo son extendidos (es decir, no decaen conforme  $\mathbf{r}$  tiende a infinito), los límites por ambos lados de  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \lambda \pm is)$  cuando  $s \rightarrow 0^+$  existen, pero son distintos entre sí. Por tanto, este tipo de espectro continuo que consiste de eigenestados extendidos, podemos definir dos funciones de Green como sigue

$$G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \lambda) = \lim_{s \rightarrow 0^+} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \lambda + is) \quad \text{B.9}$$

$$G^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \lambda) = \lim_{s \rightarrow 0^+} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \lambda - is) \quad \text{B.10}$$

con definiciones similares para los operadores  $G^+(\lambda)$  y  $G^-(\lambda)$ , se puede ver fácilmente de la Ec. B.8 que

$$G^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) = G(\mathbf{r}', \mathbf{r}; z^*) \quad \text{B.11}$$

Si  $z$  es real,  $z = \lambda$  y  $\lambda \neq \{\lambda_n\}$ , por lo que se sigue de la Ec. B.11 que  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \lambda)$  es Hermitiano; en particular,  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \lambda)$  es real. Por otro lado, para  $\lambda$  dentro del espectro continuo, tenemos de la Ec. B.11

$$G^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \lambda) = [G^+(\mathbf{r}', \mathbf{r}; \lambda)]^* \quad \text{B.12}$$

lo cual muestra que

$$\text{Re}[G^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \lambda)] = \text{Re}[G^+(\mathbf{r}', \mathbf{r}; \lambda)]^* \quad \text{B.13}$$

$$\text{Im}[G^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \lambda)] = -\text{Im}[G^+(\mathbf{r}', \mathbf{r}; \lambda)]^* \quad \text{B.14}$$

Entonces, utilizando la identidad

$$\lim_{y \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm iy} = P \left[ \frac{1}{x} \right] \mp i\pi\delta(x) \quad \text{B.15}$$

y con la Ec. B.8, obtenemos para el elemento de matriz diagonal

$$G^{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \lambda) = P \left[ \sum_n \frac{\Phi_n(\mathbf{r}) \Phi_n^*(\mathbf{r}')}{z - \lambda_n} \right] \mp i\pi \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n) \Phi_n(\mathbf{r}) \Phi_n^*(\mathbf{r}') \quad \text{B.16}$$

e integrando sobre  $\mathbf{r}$  obtenemos

$$\text{Tr}G^{\pm}(\lambda) = P \left[ \sum_n \frac{1}{\lambda - \lambda_n} \right] \mp i\pi \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n) \quad \text{B.17}$$

La cantidad  $\sum_n \delta(\lambda - \lambda_n)$  es la densidad de estados (DOS) en  $\lambda$ ,  $N(\lambda)$ ;  $N(\lambda)d\lambda$  es el número de estados en el intervalo  $[\lambda, \lambda + d\lambda]$ . La cantidad

$$\rho(\mathbf{r}; \lambda) = \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n) \Phi_n(\mathbf{r}) \Phi_n^*(\mathbf{r}) = \sum_n' \delta(\lambda - \lambda_n) \Phi_n(\mathbf{r}) \Phi_n^*(\mathbf{r}') + \int \delta(\lambda - \lambda_n) \Phi_n(\mathbf{r}) \Phi_n^*(\mathbf{r}') dn \quad \text{B.18}$$

es la densidad de estados por unidad de volumen. Es claro que,

$$N(\lambda) = \int \rho(\mathbf{r}; \lambda) d\mathbf{r} \quad \text{B.19}$$

y como

$$\rho(\mathbf{r}; \lambda) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im} \{ G^{\pm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \lambda) \}, \quad \text{B.20}$$

se tiene que

$$N(\lambda) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im} \{ \text{Tr}G^{\pm}(\lambda) \} \quad \text{B.21}$$

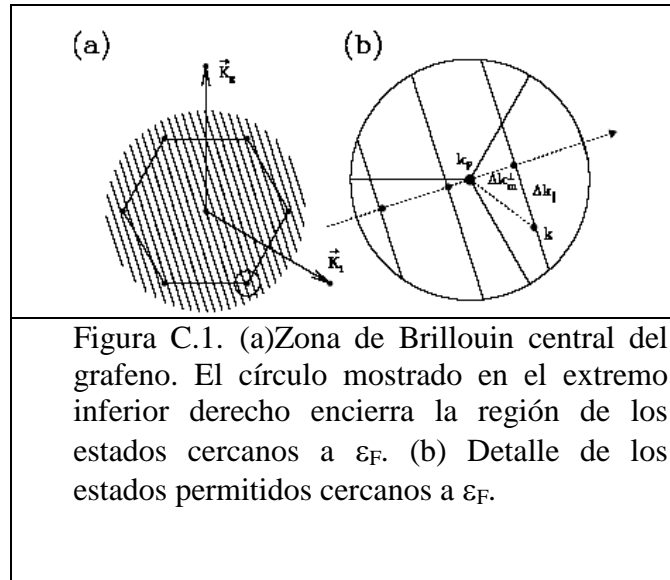
# Apéndice C

## C.1 Densidad de estados universal para nanotubos de carbón

En general, la densidad de estados  $n(E) = \partial N(E) / \partial E$  en una dimensión, puede ser expresada como

$$n(E) = \frac{2}{l} \sum_i \int \delta(k - k_i) \left| \frac{dE}{dk} \right|^{-1} dk, \quad \text{C.1}$$

donde  $k_i$  son las raíces de la ecuación  $E - \varepsilon(k_i) = 0$ ,  $l$  es la longitud de la zona de Brillouin y  $N(E)$  es el número total de estados electrónicos por celda unitaria por debajo de una energía  $E$  dada. Debido a que la zona de Brillouin hexagonal mostrada en la figura C.1 cubre completamente el plano, el área total de zona central de la zona de Brillouin debe ser igual al producto de la longitud total de las líneas de estado permitidos en la zona de Brillouin por el espacio entre ellas. Para los estados de los nanotubos definidos por el modelo de hoja de grafeno, esta longitud total  $l$  será igual al área total de la zona de Brillouin,  $\Omega_{zB} = 8\pi^2/a^2\sqrt{3}$ , donde  $a$  es la distancia entre celdas unitarias dividida por la distancia entre líneas  $2\pi/|\mathbf{R}|$ , o  $l = (4\pi/\sqrt{3})(|\mathbf{R}|/a^2)$ . Esto corresponde a normalizar la celda unitaria de la hoja de grafeno, o la densidad de estados por cada 2 átomos de carbono.



La densidad de estados cerca del nivel de Fermi está directamente relacionada con los niveles de energía de los estados cercanos a las esquinas de la zona de Brillouin. Cerca de  $\varepsilon_F$ , una buena aproximación (para  $\varepsilon(k)/V_{pp\pi} \ll 1$ ) para la relación de dispersión en dos dimensiones de los estados  $\pi$  ocupados y desocupados tomando una interacción a primeros vecinos  $V_{pp\pi}$  está dada por [22]

$$|\varepsilon(\mathbf{k})| \approx \left( \frac{\sqrt{3}}{2} a |V_{pp\pi}| |\mathbf{k} - \mathbf{k}_F| \right), \quad \text{C.2}$$

y son radialmente simétricos alrededor del punto  $\mathbf{k}_F$ . Usando esta aproximación, se puede construir la densidad de estados del nanotubo de carbón en la vecindad de  $\varepsilon_F$ . Sobre la región donde la ecuación C.2 es válida, el punto más cercano a  $\mathbf{k}_F$  en cualquier línea cercana a  $\mathbf{k}_F$  (sin pasar por él) representará un máximo local en la estructura de bandas, llevando a una singularidad de van Hove y una divergencia en la DOS ocupados (desocupados) cerca de  $\varepsilon_F$  [23]. La longitud del vector  $\mathbf{k} - \mathbf{k}_F$ , entre  $\mathbf{k}_F$  y uno de los estados permitidos en  $\mathbf{k}$  que satisfaga la relación  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{R} = 2\pi\mu$ , estará dado por  $|\mathbf{k} - \mathbf{k}_F|^2 = \Delta k_m^2 + \Delta k_{\parallel}^2$ , donde  $\Delta k_m^2$  y  $\Delta k_{\parallel}^2$  denotan las componentes perpendicular y paralela, respectivamente, de  $\mathbf{k} - \mathbf{k}_F$  como se muestra en la figura C.1(a). La componente perpendicular  $\Delta k_m^{\perp}$  está cuantizada y dada por

$$\Delta k_m^{\perp} = \left| (\mathbf{k} - \mathbf{k}_F) \frac{\mathbf{R}}{|\mathbf{R}|} \right| = \frac{2\pi}{3|\mathbf{R}|} |3m - n_1 + n_2| \quad \text{C.3}$$

Utilizando la ecuación C.1, se obtiene la siguiente contribución del estado en  $\mathbf{k}$  a la DOS (a energía  $\varepsilon(\mathbf{k})$  en la zona de Brillouin)

$$\left| \frac{\partial E}{\partial k_{\parallel}} \right|^{-1} = \frac{2}{\sqrt{3} |V_{pp\pi}| a} \frac{|\varepsilon|}{\sqrt{\varepsilon^2 - \varepsilon_m^2}}, \quad \text{C.4}$$

y utilizando las ecuaciones C2 y C3 se obtiene

$$|\varepsilon_m| = \frac{\sqrt{3}}{2} |V_{pp\pi}| a \Delta k_m^{\perp} = \frac{|3m - n_1 + n_2|}{2} |V_{pp\pi}| \frac{d}{r} \quad \text{C.5}$$

Con  $d$  la distancia de amarre carbón-carbón ( $a = d\sqrt{3}$ ) y  $r$  el radio del nanotubo ( $|\mathbf{R}| = 2\pi r$ ).

Ahora, cada línea en la vecindad de  $\mathbf{k}_F$  en  $\mathbf{k}_F$  tendrá dos puntos a cualquier energía dada  $\varepsilon(\mathbf{k})$ , y otros dos puntos equivalentes en la vecindad del punto localizado en  $-\mathbf{k}_F$  que contribuye a la DOS para esta energía. Así, podemos escribir la DOS por átomos de carbón,  $\rho(\varepsilon) = n(\varepsilon)/2$ , como

$$\rho(E) = \frac{4}{l} \sum_{-\infty}^{\infty} \frac{2}{\sqrt{3} |V_{pp\pi}| a} g(E, \varepsilon_m)$$

$$= \frac{\sqrt{3}}{\pi^2} \frac{1}{|V_{pp\pi}|} \frac{d}{r} \sum_{-\infty}^{\infty} g(E, \varepsilon_m) \quad \text{C.6}$$

donde

$$g(E, \varepsilon_m) = \begin{cases} \frac{|E|}{\sqrt{E^2 - \varepsilon^2}}, & |E| > |\varepsilon_m| \\ 0, & |E| < |\varepsilon_m| \end{cases} \quad \text{C.7}$$

Hay que notar que  $g(E, \varepsilon_m)$  exhibe una singularidad de van Hove para  $|E| = |\varepsilon_m|$  y  $|\varepsilon_m| \neq 0$ , y que  $g(E, 0) = 1$ .

La DOS en la vecindad del nivel de Fermi de todos los nanotubos de carbono, puede ser expresada en términos de una función universal  $U(E')$ :

$$\rho(E) = \frac{1}{\Lambda |V_{pp\pi}|} U\left(\frac{\Lambda E}{|V_{pp\pi}|}\right) \quad \text{C.8}$$

donde  $\Lambda$  es el cociente adimensional del diámetro del nanotubo entre la distancia de enlace carbón-carbón,  $\Lambda = 2r/d = \sqrt{3(n_1^2 + n_2^2 + n_1 n_2)}/2\pi$ , y  $U(E')$  dado por

$$U(E') = \frac{2\sqrt{3}}{\pi^2} \sum_{m'=-\infty}^{\infty} g(E', |\varepsilon'_m|^2) \quad \text{C.9}$$

con  $|\varepsilon'_m|^2 = (3m' + 1)^2$  para tubos semiconductores ( $n_1 - n_2 \neq 3q$ ) y  $|\varepsilon'_m|^2 = (3m')^2$  para tubos metálicos ( $n_1 - n_2 = 3q$ ), con  $q$  un entero.



# Apéndice D

## D.1 Renormalización para densidad de estados

Para una red de dos sitios la DOS se puede escribir como:

$$DOS(E,1) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[G_{11} + G_{22}] \quad \text{D.1}$$

Para una red de tres sitios

$$DOS(E,2) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[G_{11} + G_{22} + G_{33}] \quad \text{D.2}$$

Pero sólo queremos quedarnos con los sitios de las esquinas, entonces hay que renormalizar  $G_{22}$  y para ello hacemos uso de la ecuación de Dyson:

$$\begin{pmatrix} E - \varepsilon_0 & -t_1^* & 0 \\ -t_1^* & E - \varepsilon_0 & -t_1^* \\ 0 & -t_1^* & E - \varepsilon_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & G_{13} \\ G_{21} & G_{22} & G_{23} \\ G_{31} & G_{32} & G_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{D.3}$$

de donde se obtiene que

$$(E - \varepsilon_0)G_{2i} = \delta_{2i} + t_1^*G_{1i} + t_1^*G_{3i} \quad \text{D.4}$$

Despejando  $G_{21}$  y  $G_{23}$ , y sustituyéndolo en  $G_{22}$  tenemos

$$(E - \varepsilon_0)G_{22} = 1 + \frac{t_1^*G_{11}}{E - \varepsilon_0} + \frac{2t_1^{*2}G_{13}}{E - \varepsilon_0} + \frac{t_1^{*2}G_{33}}{E - \varepsilon_0} \quad \text{D.5}$$

Por lo que la densidad de estados la podemos escribir como

$$DOS(E,2) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[ \frac{1}{E - \varepsilon_0} + \left( 1 + \frac{t_1^{*2}}{(E - \varepsilon_0)^2} \right) G_{11} + \left( 1 + \frac{t_1^{*2}}{(E - \varepsilon_0)^2} \right) G_{33} + \frac{2t_1^{*2}}{(E - \varepsilon_0)^2} G_{13} \right] \quad \text{D.6}$$

En forma general, la densidad de estados la podemos calcular por medio de las dos generaciones anteriores,

$$\begin{aligned} DOS(E,n) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} [A(n)G_{11} + B(n)G_{nn} + C(n)G_{1n} + D(n)] = \\ &-\frac{1}{\pi} \text{Im} [A(n-1)G_{11} + B(n)G_{n(N-1)n(N-1)} + C(n-1)G_{1n(N-1)} + D(n-1) \\ &+ A(n-2)G_{n(N-1)+1,n(N-1)+1} + B(n-2)G_{n(N)n(N)} + C(n-2)G_{n(N-1)+1,n(N)} + D(n-2)] \end{aligned} \quad \text{D.7}$$

Los coeficientes A,B,C y D se obtienen utilizando la ecuación de Dyson

$$\begin{pmatrix} E-E_L(n-1) & -t(n-1) & 0 & 0 \\ -t(n-1) & E-E_R(n-1) & -t_1 & 0 \\ 0 & -t_1 & E-E_L(n-2) & -t(n-2) \\ 0 & 0 & -t(n-2) & E-E_R(n-2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & G_{13} & G_{14} \\ G_{21} & G_{22} & G_{23} & G_{24} \\ G_{31} & G_{32} & G_{33} & G_{34} \\ G_{41} & G_{42} & G_{43} & G_{44} \end{pmatrix} = I D 8$$

Y la densidad de estados

$$(E-E_R(n-1))G_{2i} = \delta_{2i} + t(n-1)G_{1i} + t_1G_{3i} \quad D.9$$

y

$$(E-E_L(n-2))G_{3i} = \delta_{3i} + t(n-2)G_{1i} + t_1G_{2i} \quad D.10$$

por lo que para  $i=1$ , tenemos

$$\begin{aligned} (E-E_R(2))G_{21} &= t(n-1)G_{11} + t_1G_{31} \\ (E-E_L(2))G_{31} &= t_1G_{21} + t(n-2)G_{41} \end{aligned} \quad D.11$$

Que al sustituir y despejar nos lleva a

$$\begin{aligned} (E-E_R(n-1) - \frac{t_1^2}{E-E_L(n-2)})G_{21} &= t(n-1)G_{11} + \frac{t_2t(n-2)}{E-E_L(n-2)}G_{41} \\ (E-E_L(n-2) - \frac{t_1^2}{E-E_R(n-1)})G_{31} &= t(n-2)G_{41} + \frac{t_1t(n-1)}{E-E_R(n-1)}G_{11} \end{aligned} \quad D.12$$

De forma análoga, al utilizar  $i=4$  obtenemos

$$\begin{aligned} (E-E_R(2) - \frac{t_1^2}{E-E_L(1)})G_{24} &= t(n-1)G_{14} + \frac{t_2t(n-2)}{E-E_L(1)}G_{44} \\ (E-E_L(1) - \frac{t_1^2}{E-E_R(1)})G_{34} &= t(n-2)G_{44} + \frac{t_1t(n-1)}{E-E_R(1)}G_{14} \end{aligned} \quad D.13$$

Y para  $i=2,3$  tenemos

$$\begin{aligned} (E-E_R(n-1) - \frac{t_1^2}{E-E_L(n-2)})G_{22} &= 1 + t(n-1)G_{12} + \frac{t_2t(n-2)}{E-E_L(n-2)}G_{42} \\ (E-E_L(n-2) - \frac{t_1^2}{E-E_R(n-1)})G_{33} &= 1 + t(n-2)G_{43} + \frac{t_1t(n-1)}{E-E_R(n-1)}G_{13} \end{aligned} \quad D.14$$

Lo que nos lleva a

$$G_{21} = \frac{t(n-1)(E-E_L(n-2))}{D^*}G_{11} + \frac{t_2t(n-2)}{D^*}G_{41} \quad D.15$$

donde  $D^* = (E - E_R(n-1))(E - E_L(n-2)) - t_1^2$ ,

$$G_{34} = \frac{t(n-2)(E - E_R(n-1))}{D^*} G_{44} + \frac{t_1 t(n-1)}{D^*} G_{14} \quad \text{D.16}$$

$$G_{22} = \left( \frac{t(n-1)(E - E_L(n-2))}{D^*} \right)^2 G_{11} + 2 \frac{t_1 t(n-2)t(n-1)(E - E_L(n-2))}{D^{*2}} G_{14} + \frac{(E - E_L(n-2))}{D^*} + \left( \frac{t_1 t(n-2)}{D^*} \right)^2 G_{44} \quad \text{D.17}$$

$$G_{33} = \left( \frac{t(n-2)(E - E_R(n-1))}{D^*} \right)^2 G_{44} + 2 \frac{t_1 t(n-2)t(n-1)(E - E_R(n-1))}{D^{*2}} G_{41} + \frac{(E - E_R(n-1))}{D^*} + \left( \frac{t_1 t(n-1)}{D^*} \right)^2 G_{11} \quad \text{D.18}$$

Sustituyendo y utilizando las expresiones anteriores para densidad de estados, tenemos que

$$A(n) = A(n-1) + B(n-1) \left[ \frac{t(n-1)(E - E_L(n-2))}{D^*} \right]^2 + C(n-1) \left[ \frac{t(n-1)(E - E_L(n-2))}{D^*} \right] + A(n-2) \left( \frac{t(n-1)t_1}{D^*} \right)^2 \quad \text{D.19}$$

$$B(n) = B(n-2) + A(n-2) \left[ \frac{t(n-2)(E - E_R(n-1))}{D^*} \right]^2 + C(n-2) \left[ \frac{t(n-2)(E - E_R(n-1))}{D^*} \right] + B(n-1) \left( \frac{t(n-2)t_1}{D^*} \right)^2 \quad \text{D.20}$$

$$C(n) = B(n-1) \left[ 2 \frac{t(n-1)t(n-2)t_1(E - E_L(n-2))}{D^{*2}} \right] + C(n-1) \left( \frac{t(n-2)t_1}{D^*} \right) + A(n-2) \left[ 2 \frac{t(n-1)t_1 t(n-2)(E - E_R(n-1))}{D^{*2}} \right] + C(n-1) \left( \frac{t(n-1)t_1}{D^*} \right) \quad \text{D.21}$$

$$D(n) = B(n-1) \frac{E - E_L(n-2)}{D^*} + A(n-2) \frac{E - E_R(n-1)}{D^*} + D(n-1) + D(n-2) \quad \text{D.22}$$

$$E_R(n) = E_R(n-2) + \frac{t^2(n-2)(E - E_R(n-1))}{D^*} \quad \text{D.23}$$

$$E_L(n) = E_L(n-2) + \frac{t^2(n-1)(E - E_L(n-1))}{D^*} \quad \text{D.24}$$

y

$$t(n) = \frac{t(n-1)t(n-2)t_1}{D^*} \quad \text{D.25}$$

$$\begin{pmatrix} E - E_L(n) & -t(n) \\ -t(n) & E - E_R(n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{D.26}$$

Que después de un poco de álgebra nos lleva a las siguientes relaciones en las funciones de Green para poder obtener la densidad de estados sin saturador

$$G_{11} = \frac{E - E_R(n)}{(E - E_L(n))(E - E_R(n)) - t^2(n)} \quad \text{D.27}$$

$$G_{22} = \frac{E - E_L(n)}{(E - E_L(n))(E - E_R(n)) - t^2(n)} \quad \text{D.28}$$

$$G_{21} = \frac{t(n)}{(E - E_R(n))} G_{11} \quad \text{D.29}$$

Para poder meterle saturadores conectamos al sistema con dos cadenas periódicas semi-infinitas, la ecuación de Dyson se modifica como:

$$\begin{pmatrix} E - E_{L2} & -T_P & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -T_P & E - E_{R2} & -t_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -t_1 & E - E_{L1} & -T & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -T & E - E_{R1} & -t_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -t_1 & E - E_{L2} & -T_P \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -T_P & E - E_{R2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & G_{13} & G_{14} & G_{15} & G_{16} \\ G_{21} & G_{22} & G_{23} & G_{24} & G_{25} & G_{26} \\ G_{31} & G_{32} & G_{33} & G_{34} & G_{35} & G_{36} \\ G_{41} & G_{42} & G_{43} & G_{44} & G_{45} & G_{46} \\ G_{51} & G_{52} & G_{53} & G_{54} & G_{55} & G_{56} \\ G_{61} & G_{62} & G_{63} & G_{64} & G_{65} & G_{66} \end{pmatrix} = I \quad \text{D.30}$$

por lo que tenemos que

$$(E - E_{L1})G_{33} = 1 + t_1 G_{23} + T G_{43} \quad \text{D.31}$$

$$(E - E_{R2})G_{23} = T_P G_{13} + t_1 G_{33} \quad \text{D.32}$$

$$(E - E_{L2})G_{13} = T_P G_{23} \quad \text{D.33}$$

Con lo que al sustituir llegamos a que

$$\left( \begin{array}{c} E - E_{L1} - \frac{t_1^2}{E - E_{R2} - \frac{T_P^2}{E - E_{L2}}} \end{array} \right) G_{33} = 1 + TG_{43} \quad \text{D.34}$$

Por otro lado, también tenemos que

$$(E - E_{R1})G_{43} = TG_{33} + t_1G_{53} \quad \text{D.35}$$

$$(E - E_{L2})G_{53} = T_P G_{63} + t_1G_{43} \quad \text{D.36}$$

$$(E - E_{R2})G_{63} = T_P G_{53} \quad \text{D.37}$$

Que sustituyendo nos lleva a que

$$\left( \begin{array}{c} E - E_{R1} - \frac{t_1^2}{E - E_{L2} - \frac{T_P^2}{E - E_{R2}}} \end{array} \right) G_{43} = TG_{33} \quad \text{D.38}$$

Para obtener finalmente que las funciones de Green con saturador son:

$$G_{33} = \left[ \begin{array}{c} E - E_{L1} - \frac{t_1^2}{E - E_{L2} - \frac{T_P^2}{E - E_{L2}}} - \frac{T^2}{E - E_{R1} - \frac{t_1^2}{E - E_{L2} - \frac{T_P^2}{E - E_{R2}}}} \end{array} \right]^{-1} \quad \text{D.39}$$

De forma análoga, obtenemos que

$$G_{44} = \left[ \begin{array}{c} E - E_{R1} - \frac{t_1^2}{E - E_{L2} - \frac{T_P^2}{E - E_{R2}}} - \frac{T^2}{E - E_{L1} - \frac{t_1^2}{E - E_{R2} - \frac{T_P^2}{E - E_{L2}}}} \end{array} \right]^{-1} \quad \text{D.40}$$

Con estas relaciones se puede investigar la densidad de estados de cadenas periódicas y con impurezas.

# Bibliografía

- [1] V. Sánchez, C. Wang, *Phys. Rev. B*, **70**, 144207 (2004).
- [2] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, John Wiley and sons (1996).
- [3] D. Askeland, *The Science and Engineering of materials*. 5ta ed. ,PWS-Kent Publishing Company (2006).
- [4] N. Ashcroft, D. Mermin, *Solid State Physics*, Harcourt (1976).
- [5] J. Rogan, G. Gutiérrez, E. Menéndez, *Introducción a la Física de Sólidos*, Universidad de Chile (2004).
- [6] D. Pettifor, *Bonding and Structure of Molecules and Solids*, Clarendon Press, Oxford (1995).
- [7] S. Ciraci, S. Dag, T. Yildirim, O. Gülseren y R. Senger, *Journal of Physics: Condensed Matter*. **16** (2004).
- [8] R. Landauer, *IBM. J. Res. Develop*, **1**, 223 (1957).
- [9] J. Callaway, *Quantum Theory of the Solid State*, Academic Press, New York (1974)
- [10] E. N. Economou y C. M. Soukolis, *Phys. Rev. Lett.* **16**, 529 (1981)
- [11] A. P. Sutton, *Electronic Structure of Materials*, Clarendon Press. Oxford (1993).
- [12] S. Iijima,. *Nature* **354**, 56-58 (1991).
- [13] Y. Imry y R. Landauer, *Rev. Mod. Phys.* **71**, S306 (1999).
- [14] A. Süto, in *Beyond Quasicrystals*, Les editions de Physique, Francia (1994).
- [15] G. Jin y Z. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 5298 (1997).
- [16] M. Dresselhaus, *Solid State Physics, tomo I, Transport properties of solids* (2001).
- [17] M. S. Dresselhaus, *Solid State Physics, parte I, Transport properties of solids* (2001).
- [18] J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley Publishing Company, (1994).
- [19] Lennard-Jones, J.E. *Trans. Faraday Soc.*, **25**, 668 (1929).
- [20] H. Kroto, J. Heath, S. O'Brien R. Curl, R. Smalley, *Nature*, **318**, 162 (1985).
- [21] K. Brouder, G. Panati, M. Calandra, C. Mourugane, N. Marzari, *Phys. Rev. Lett.* **98** (2007).
- [22] J. Mintwire, D. Robertson, C. White, *J. of Phys. and Chem. of Solids*, **54**, 1835 (1993).

- [23] C. White y J. Mintwire, *Nature* **394**, 29 (1998).
- [24] A. Greenwood, *Proc. Phys. Soc.*, **71**, 585 (1958).
- [25] R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, *Physical Properties of Carbon Nanotubes*, Imperial College Press (2001).
- [26] E. Economou, *Green's function in Quantum Physics*, Springer Series in Solid State Sciences, Vol. 7 (1983).
- [27] N. Hamada, S. Sawada y A. Oshiyama, *Phys. Rev. Lett*, **68**, 1579 (1992).
- [28] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge University Press (1995).
- [29] R. Elliot, J. Krumhansl, P. Leath, *Rev. Mod. Phys.* **46**, 465 (1974).
- [30] P. Wallace, *Phys. Rev.*, **71**, 622 (1947).
- [31] H. Kroto, J. Heath, R. Curl, R. Smalley, *Nature*, **318**, 162 (1985).
- [32] R. Saito, M. Fujita, G. Dresselhaus, M. Dresselhaus, *Phys. Rev. B*, **46**, 1804 (1992).
- [33] C. Minot, *Phys. Rev. B*, **70**, 161309 (2004).
- [34] R. Chang, *Química*, Mc Graw Hill (1992).
- [35] R. Kubo, *J. Phys. Soc. Japan*, **12**, 570 (1957).
- [36] R. Kubo, *Can. J. Phys*, **34**, 1274 (1956).