



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

FACULTAD DE CIENCIAS

CONDUCTANCIA ELÉCTRICA EN NANOALAMBRES
UNIDIMENSIONALES SEGMENTADOS CON IMPUREZAS

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

**F Í S I C O
P R E S E N T A:**

LUIS ANTONIO GALEOTE GUEVARA



**DIRECTOR DE TESIS:
DRA. VICENTA SÁNCHEZ MORALES
Cd. Mx., 2017**



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.

1. Datos del alumno
Apellido paterno
Apellido materno
Nombre(s)
Teléfono
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ciencias
Carrera
Número de cuenta

2. Datos del tutor
Grado
Nombre(s)
Apellido paterno
Apellido materno

3. Datos del sinodal 1
Grado
Nombre(s)
Apellido paterno
Apellido materno

4. Datos del sinodal 2
Grado
Nombre(s)
Apellido paterno
Apellido materno

5. Datos del sinodal 3
Grado
Nombre(s)
Apellido paterno
Apellido materno

6. Datos del sinodal 4
Grado
Nombre(s)
Apellido paterno
Apellido materno

7. Datos del trabajo escrito.
Título

Número de páginas
Año

1. Datos del alumno
Galeote
Guevara
Luis Antonio
5532523642
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ciencias
Física
413011259

2. Datos del tutor
Doctora
Vicenta
Sánchez
Morales

3. Datos del sinodal 1
Doctor
Raúl Patricio
Esquivel
Sirvent

4. Datos del sinodal 2
Doctora
Renela María
Valladares
Mc Nelis

5. Datos del sinodal 3
Doctora
Lucía
Medina
Gómez

6. Datos del sinodal 4
Doctor
Yuri
Bonder
Grimberg

7. Datos del trabajo escrito.
Conductancia Eléctrica en Nanoalambres Unidimensionales Segmentados con Impurezas
70 pp
2017

Para mis padres. Este logro es suyo.

Agradecimientos

A mis padres, Norberto Galeote y Gabriela Guevara, me hicieron quien soy, lo han dado todo por mí y por ellos he llegado hasta aquí, esto es por y para ustedes. A mis hermanos, Diego y Carlos Galeote, mis personas favoritas.

A Sara Madrid, por estar junto a mí todo este tiempo, desde antes de comenzar este viaje.

A Alejandro Amador y Juan Antonio Rivera, mis primeros amigos en la facultad, por seguir aquí tras estos años.

A la Doctora Vicenta Sánchez Morales por guiarme desde el servicio social hasta ahora, apoyarme e impulsarme, sin ella, no habría terminado nunca.

A Fernando Sánchez y Guillermo Munguía, amigos y compañeros, por su compañía y humor.

Le agradezco a la *Universidad Nacional Autónoma de México*, que me dio todo a cambio de nada.

Agradezco a la Dra. Lucía Medina, al Dr. Yuri Bonder, al Dr. Raúl Esquivel y a la Dra. Renela Valladares por los valiosos comentarios que enriquecieron el contenido de esta tesis.

Finalmente agradezco a la DGAPA por el apoyo recibido a través del proyecto PAPIIT IN114916 y a la DGTIC por permitirme utilizar la supercomputadora “Miztli”, donde se obtuvieron los resultados numéricos aquí presentados.

Resumen

En este trabajo se estudia la conductividad eléctrica por medio del formalismo de Landauer para nanoalambres segmentados unidimensionales de tamaño macroscópico. Se consideró un orden periódico y cuasiperiódico (tipo Fibonacci) de los átomos en los nanoalambres. Para ello se desarrollaron métodos de renormalización en espacio real de la matriz de transferencia obtenida a través de la ecuación de Schrödinger y para la función de Green por medio de la ecuación de Dyson, ambos dentro del formalismo de amarre fuerte.

El análisis de los resultados de esta tesis nos conduce a notar que el tamaño de los segmentos en las cadenas periódicas diatómicas tiene efecto en los espectros de conducción eléctrica, el cual se ve reflejado en el aumento del número de gaps conforme crece el número de átomos en los segmentos. Además, los espectros de conducción tienen un incremento en el número de picos con conductividad casi balística (cerca de uno) cuando crece el número de átomos en los segmentos de las cadenas cuasiperiódicas. Más aún, obtuvimos expresiones analíticas para los estados transparentes (conducción balística) cuando el potencial químico es cero ($\mu = 0$) de las cadenas segmentadas con ordenamiento atómico tipo Fibonacci de enlaces y Fibonacci de enlaces con simetría de espejo. Encontrando que estos estados transparentes para cadenas cuasiperiódicas segmentadas (enlaces) dependen del número de átomos que conforman al segmento, para un número par de átomos tanto en un tipo de segmento (llamado A) como en el otro (B) se tiene estados de conducción balística cada seis generaciones. En cambio, si ambos segmentos tienen un número impar de átomos, el estado transparente se presenta en todas las generaciones. Finalmente, se presenta un análisis del promedio espectral de conductividad eléctrica de estas cadenas, obteniendo que este promedio decae en función del logaritmo del número de átomos de la cadena.

Introducción

Actualmente, los materiales pueden ser fabricados tan pequeños como sean requeridos, tal es el caso de la industria de los procesadores, donde los transistores llegan a tener una dimensión de aproximadamente cien átomos [Ferry, 2008]. Además, los nanoalambres han tomado un papel importante en la fabricación de electrónicos, optoelectrónicos [H. Kind, 2002] y catalizadores [Yang Sun, 2014]. También, los nanoalambres segmentados, que se pueden considerar como una mejora a los nanoalambres, están formados por partes de distintos materiales que permiten aprovechar las propiedades de ambos o nuevas características que provienen de la unión [Jin Zhang, 2016].

Otro tipo de materiales de especial relevancia en la actualidad son los cuasicristales, que son sistemas no-periódicos con un patrón de difracción puntual, inconsistente con los predichos por la cristalografía clásica [Aragón, 1994], los cuales no poseen simetría de translación, pero poseen un orden de largo alcance. Una forma más aceptada en la literatura de modelar un cuasicristal unidimensional es la cadena de Fibonacci.

Por otro lado, en un material periódico todos los estados electrónicos son extendidos, en cambio, en los sólidos aleatoriamente desordenados arriba del umbral crítico, todos sus estados son localizados. La localización está estrechamente ligada al transporte electrónico y es un concepto fundamental para entender la existencia de materiales metálicos y aislantes. Algunas formas de estudiar el transporte electrónico pueden ser clásicas del tipo Drude, semiclásicas como Boltzmann o cuánticas como la conductancia de Landauer. Además de la dificultad inherente al problema de transporte, al aplicarlo a sistemas macroscópicos no periódicos nos enfrentamos a un aumento exponencial en el tiempo de cómputo. Por lo que una alternativa exacta y eficiente para abordar el transporte electrónico en este tipo de sistemas es el método de renormalización en espacio real.

El objetivo de esta tesis es cuantificar el efecto de la cuasiperiodicidad en el transporte electrónico para nanoalambres segmentados de tamaño macroscópico. Por lo cual desarrollamos métodos de renormalización en espacio real para la fórmula de Landauer y la densidad de estados, permitiéndonos analizar el transporte eléctrico en sistemas que van desde cientos de átomos hasta 10^8 átomos. A continuación, se describe cada uno de los capítulos de esta tesis:

Capítulo I, teoría del transporte electrónico. En este apartado describimos tres formas de abordar el estudio de la conductividad eléctrica que va desde un punto de vista clásico a uno cuántico, presentando los siguientes modelos: el de Drude, la ecuación de Boltzmann y el formalismo de Landauer. Además, abordamos la función de Green para obtener la densidad de estados. Capítulo II, conceptos de estado sólido. En esta sección se hace un resumen de las propiedades que caracterizan a los sistemas periódicos y cuasiperiódicos. Capítulo III, método de renormalización. En esta parte se desarrollan los métodos de renormalización en espacio real para la matriz de transferencia y la densidad de estados en nanoalambres segmentados unidimensionales con ordenamiento cuasiperiódico. Capítulo IV, análisis de resultados. En este capítulo presentamos un estudio exhaustivo de los efectos de la cuasiperiodicidad en el transporte electrónico para nanoalambres segmentados de tamaño macroscópico, utilizando los métodos desarrollados en el capítulo III. Adicionalmente, se desarrollaron expresiones analíticas para los estados de conducción balística. Finalmente se presentan las conclusiones de este trabajo.

Contenido

CAPÍTULO I: Transporte electrónico.....	1
1.1 Modelo de Drude.....	1
1.2 Ecuación de Boltzmann	5
1.3 Conductancia de Landauer	6
1.4 Función de Green	7
1.5 Hamiltoniano de enlace fuerte.....	8
1.6 Transmitancia	9
CAPÍTULO II: Sistemas periódicos y aperiódicos	12
2.1 Celda unitaria	12
2.2 Redes de Bravais	13
2.3 Difracción Bragg por rayos X.....	16
2.4 Cuasicristales.....	17
2.6 Cuasiperiodicidad.....	19
CAPÍTULO III: Método de renormalización.....	24
3.1 Método de renormalización (periódico).....	24

3.2	Método de renormalización (Fibonacci)	30
3.3	Nanoalambres segmentados	37
CAPÍTULO IV: Conductividad eléctrica		40
4.1	Sistemas segmentados periódicos y aperiódicos	40
4.2	Sistemas segmentados con espejo periódicos y aperiódicos	42
4.3	Sistemas segmentados con espejo e impureza central	44
4.4	Estados transparentes	46
4.5	Promedios espectrales de transmitancia eléctrica	50
Conclusiones		56
Bibliografía.....		58

CAPÍTULO I: Transporte electrónico

La corriente eléctrica es el flujo de carga eléctrica por unidad de tiempo que recorre un material. Así la conductividad eléctrica es la medida de aptitud de un material o sustancia para dejar circular libremente la corriente eléctrica y depende de la estructura atómica o molecular del material. En este capítulo se modelan distintas formas de calcular la conductividad eléctrica y se plantea la teoría utilizada posteriormente para obtener resultados.

1.1 Modelo de Drude

Paul Drude desarrolló un modelo para la conducción eléctrica pocos años después del descubrimiento del electrón por J.J. Thomson. Para este modelo, aplicó la teoría cinética de los gases en un metal considerándolo como un gas de electrones.

Antes de pasar al modelo, es importante saber con cuántos electrones vamos a tratar, para ello, asumiremos que los electrones de valencia son los que forman el *gas* de electrones, mientras que el resto de los electrones (centrales o *core electrons*) están fuertemente unidos a su respectivo núcleo, por lo que no pueden moverse libremente y, por lo tanto, no aportan a la conducción.

Asumiendo esto, el número de electrones disponibles por átomo de metal disminuye de Z_a (número total de electrones) a Z (número de electrones de conducción), esto se puede ver esquemáticamente en la Figura 1.1.

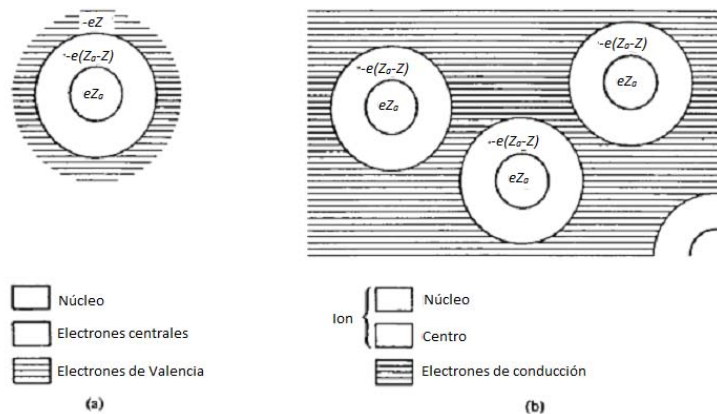


Figura 1.1 (a) Esquema de un átomo aislado. (b) El ion se considera inmóvil, mientras que los electrones de valencia dejan el átomo para formar el *gas de electrones* [Neil W. & N. David, 1976].

Dentro del modelo de Drude se tomaron en cuenta las siguientes suposiciones [Neil W. & N. David, 1976]:

- a) Los electrones se mueven libremente entre colisiones, es decir, se desprecia la interacción electrón-electrón y la ion-electrón.
- b) Las colisiones con los iones son eventos instantáneos y las colisiones con otros electrones se desprecian pues se consideran infrecuentes.
- c) Un electrón tiene una colisión con un ion, cuya probabilidad por unidad de tiempo es $1/\tau$. Esto significa que la probabilidad de que un electrón sufra una colisión en un intervalo infinitesimal de tiempo dt es dt/τ .
- d) Los electrones sólo alcanzan el equilibrio con sus alrededores a través de colisiones.

Por otro lado, la Ley de Ohm establece que

$$V = RI, \quad (1.1)$$

donde V es la diferencia de potencial, I es la corriente y R es la resistencia, la cual depende de la geometría del conductor, pero es independiente de la corriente. Para eliminar esta dependencia geométrica, se introduce la resistividad (ρ), que es una característica propia del metal y es la constante de proporcionalidad entre el campo eléctrico (E) y la densidad de corriente (J) que éste induce:

$$|\vec{E}| = \rho |\vec{J}|. \quad (1.2)$$

Entonces, si una corriente uniforme I fluye por un alambre de longitud L y área transversal A , la densidad de corriente es

$$|\vec{J}| = I/A. \quad (1.3)$$

Además, sustituyendo (1.2) y (1.3) en $V=EL$, obtenemos

$$V = I\rho L/A, \quad (1.4)$$

comparando la ecuación (1.1) con la (1.4), encontramos que la resistencia es $R=\rho L/A$.

Si consideramos que la densidad de electrones es $n=N/\Omega$, siendo N el número electrones y Ω el volumen, cuyos electrones se mueven a una velocidad v , la densidad de corriente es paralela a v y está dada por

$$|\vec{J}| = -nev. \quad (1.5)$$

Al tomar la velocidad promedio electrónica en cualquier instante de tiempo t , $v=p(t)/m$, donde $p(t)$ es el momento por electrón y m su masa, la ecuación (1.5) se convierte en

$$|\vec{j}| = -ne \frac{p(t)}{m}, \quad (1.6)$$

entonces es necesario calcular $p(t)$. Primero se considera que, si los electrones chocan, su momento promedio es cero

$$p_c(t + dt) = 0 \quad (1.7)$$

y la probabilidad de que haya un choque es $P(C) = dt/\tau$, por lo que la probabilidad de que no haya colisión es de $P(NC)=1-dt/\tau$, debido a

$$P(NC) = 1 - P(C). \quad (1.8)$$

Adicionalmente, si no hay colisión, los electrones continúan su movimiento y su momento se vuelve:

$$p_{NC}(t + dt) = p(t) + F(t)dt, \quad (1.9)$$

donde $F(t)$ depende de los campos externos aplicados al sistema que cambian la velocidad del electrón entre colisiones. En consecuencia, el momento $p(t+dt)$ es

$$\begin{aligned} p(t + dt) &= P(C) p_c(t + dt) + P(NC) p_{NC}(t + dt) \\ &= (1 - dt/\tau)(p(t) + F(t)dt) \\ &= p(t) + F(t)dt - p(t)dt/\tau \end{aligned} \quad (1.10)$$

en (1.10) suponemos que dt^2 es lo suficientemente pequeña para ser despreciada, lo que nos lleva a

$$\lim_{dt \rightarrow 0} \frac{p(t+dt)-p(t)}{dt} = \frac{dp(t)}{dt} = -\frac{p(t)}{\tau} + F(t). \quad (1.11)$$

En particular si no hay ningún campo externo aplicado, $F(t)=0$ y la solución de la ecuación (1.11) es

$$p(t) = p(0)e^{-\frac{t}{\tau}}. \quad (1.12)$$

De acuerdo con los resultados de la física estadística clásica, la distribución de velocidades de partículas en equilibrio térmico a partir de las colisiones está descrita por la distribución de Maxwell-Boltzmann. La probabilidad de que la velocidad de un electrón de masa m_e esté entre v y $v+dv$ es

$$f(v)dv = \left(\frac{m_e}{2\pi k_B T}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{-m_e v^2}{2k_B T}\right) 4\pi v^2 dv = f_0(v)4\pi v^2 dv \quad (1.13)$$

donde k_B es la constante de Boltzmann y T es la temperatura del sistema [Fitzpatrick, 2005]. Asimismo, el promedio de la velocidad al cuadrado es

$$\langle v^2 \rangle = \int_0^\infty v^2 f_0(v) 4\pi v^2 dv = 3 \frac{k_B T}{m_e} \quad (1.14)$$

y la energía cinética satisface el teorema de equipartición

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{1}{2} m_e \langle v^2 \rangle = \frac{3}{2} k_B T. \quad (1.15)$$

Por lo que la velocidad promedio se puede escribir como

$$v = \left(\frac{3k_B T}{m_e} \right)^{1/2}. \quad (1.16)$$

Así, el camino libre medio que recorre un electrón antes de colisionar con otro es

$$l = v\tau = \left(\frac{3k_B T}{m_e} \right)^{1/2} \tau. \quad (1.17)$$

Cuando un metal se coloca en un campo eléctrico, los electrones, además de moverse por las colisiones, adquieren una velocidad de deriva v_{de} , debido a la fuerza electrostática $F = -eE$ que cambia la velocidad de cada electrón en

$$v_{de}(t) = \frac{-eEt}{m_e}, \quad (1.18)$$

pero ya que el tiempo promedio entre colisiones es τ , entonces la velocidad promedio adquirida es

$$v_{de} = \frac{-eE\tau}{m_e} \quad (1.19)$$

que sustituyendo en (1.5) nos dice que

$$J = \frac{ne^2\tau}{m_e} E. \quad (1.20)$$

Además, reescribiendo la ley de Ohm en función de la conductividad ($\sigma = l/\rho$) como

$$J = \sigma E, \quad (1.21)$$

encontramos que según el modelo de Drude, en un metal, la conductividad es

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m_e} \quad (1.22)$$

El modelo de Drude se basa en dos parámetros fundamentales; la densidad de electrones n y el tiempo de relajación τ , pero ambos deben ser determinados de forma experimental.

Por otro lado, no mucho puede ser dicho sobre el tiempo de relajación a menos que se conozcan los detalles del mecanismo de dispersión. Además, cuando la

conductividad depende de la temperatura, el tiempo de relajación también está dado en función de la misma. Se ha verificado que la resistividad ($1/\sigma$) depende linealmente de T a temperatura ambiente y es independiente a temperaturas bajas, mientras que en puntos intermedios se tiene incluso una dependencia de T^5 [Sólyom, 2002]. Por lo que el modelo de Drude ofrece sólo una aproximación clásica al problema de conductividad, además de aplicarse sólo a sistemas macroscópicos.

1.2 Ecuación de Boltzmann

El análisis de la conductividad en sistemas fuera del equilibrio térmico se realiza a través de las funciones de distribución que obedecen la ecuación de Boltzmann:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{tra} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{col} \quad (1.23)$$

donde $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{tra}$ es la evolución por las traslaciones en el espacio fase y $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{col}$ por las colisiones. Estos elementos se pueden expresar como

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{tra} = -\dot{\mathbf{r}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f - \dot{\mathbf{p}} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f = -\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + e(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H}) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f \quad (1.24)$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{col} = -\frac{f-f_0}{\tau} \quad (1.25)$$

donde f_0 es la función de distribución del sistema en equilibrio.

Para el caso estacionario, con $df/dt=0$, y además suponiendo que f no tiene dependencia explícita de t ($\delta f/\delta t=0$), la ecuación (1.23) en conjunto con (1.24) y (1.25) se reduce a

$$\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f - e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H} \right) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f + \frac{f-f_0}{\tau} = 0. \quad (1.26)$$

En el análisis para la conductividad eléctrica es útil tender a cero tanto el gradiente de f ($\nabla_{\mathbf{r}} f = 0$) como el campo magnético ($\mathbf{H} = 0$), obteniendo

$$f = f_0 + e\tau \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f \cong f_0 + e\tau \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f_0. \quad (1.27)$$

Por otro lado, la densidad de corriente es

$$\mathbf{J} = -\frac{2}{(2\pi)^3} \int e \mathbf{v} f d^3 k, \quad (1.28)$$

al sustituir (1.27) se reescribe como

$$\mathbf{J} = -\frac{e^2}{4\pi^3} \int \tau \mathbf{v} \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} E \frac{\partial f_0}{\partial E} d^3 k = \frac{e^2}{4\pi^3} \int_{S_F} \tau \mathbf{v} \mathbf{E} \cdot \mathbf{v} \frac{ds}{|\nabla_{\mathbf{k}} E|}, \quad (1.29)$$

la integral de f_0 no contribuye a la conductividad y $(\partial f_0)/\partial E \approx -\delta(E - E_F)$. S_F es la superficie de Fermi del sistema.

En particular, para un material isotrópico y al cual se le aplica un campo eléctrico en la dirección x ($\mathbf{E} = \varepsilon_x \hat{x}$), se tiene

$$J_x = \frac{e^2}{4\pi^3} \iint_{S_F} \tau v_x^2 \frac{ds}{|\nabla_{\mathbf{k}} E|} \varepsilon_x \quad (1.30)$$

que comparando con (1.21) la conductividad es

$$\sigma = \frac{e^2}{4\pi^3} \iint_{S_F} \tau v_x^2 \frac{ds}{|\nabla_{\mathbf{k}} E|}. \quad (1.31)$$

Este nuevo resultado de la conductividad nos permite comprender el comportamiento de sistemas fuera del equilibrio térmico de manera semiclásica ya que no ocupa la estructura de los materiales.

1.3 Conductancia de Landauer

La conductancia de una muestra entre dos reservorios es [Landauer, 1992]

$$G = TN \frac{e^2}{\pi \hbar}, \quad (1.32)$$

donde N es el número de canales transversales que conectan a la muestra con los reservorios y T es la probabilidad promedio de que un electrón se transmita de un reservorio al otro sobre los N canales.

De (1.1) y (1.4) se obtuvo que $R = \rho L/A$, si tomamos en cuenta que la conductancia (G) se puede escribir como $G = 1/R$ y la resistividad es $\rho = 1/\sigma$, la relación entre la conductancia y la conductividad es

$$G = \frac{1}{R} = \frac{A}{\rho L} = \sigma \frac{A}{L}. \quad (1.33)$$

En particular, para un solo canal de conducción y considerando que sea un conductor ideal ($\tau \rightarrow \infty$), la corriente se puede calcular partiendo de la ecuación (1.28)

$$I = -\frac{1}{\pi} \int e v f dk = -\frac{e}{\pi} \int \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} dk = -\frac{e}{\pi \hbar} \int_{\mu_1}^{\mu_2} dE = -\frac{e(\mu_2 - \mu_1)}{\pi \hbar}, \quad (1.34)$$

donde los potenciales químicos (μ_1 y μ_2) cumplen que $\mu_2 - \mu_1 = -eV$, además V es la diferencia de voltaje. Uniendo lo anterior a la ley de Ohm y la ecuación (1.33), la conductancia es

$$G = \frac{I}{V} = \frac{2e^2}{h} = g_0, \quad (1.35)$$

siendo g_0 el llamado cuanto de conductancia. Si el conductor transmite electrones con una probabilidad T en N canales, se llega a la ecuación (1.32) que es el resultado de Landauer.

Otra cantidad física que nos permite cuantificar los efectos de la cuasiperiodicidad en los nanoalambres es la densidad de estados, que se puede obtener a través de la función de Green.

1.4 Función de Green

La función de Green es la solución de una ecuación diferencial no homogénea del siguiente tipo

$$[z - L(r)]G(r, r'; z) = \delta(r - r') \quad (1.36)$$

sujeta a condiciones de frontera (BCs, por sus siglas en inglés) para r y r' , $z = \lambda + is$ $\in \mathbb{C}$, $\lambda \equiv \text{Re}(z)$, $s \equiv \text{Im}(z)$. Además, $L(r)$ es un operador lineal, independiente del tiempo y Hermitiano, cuyas eigenfunciones están dadas por $\varphi_n(r)$, es decir, $L(r)\varphi_n(r) = \lambda_n\varphi_n(r)$, donde $\varphi_n(r)$ satisface las mismas BC que $G(r, r'; z)$, por otra parte, $\{\varphi_n(r)\}$ es un conjunto ortonormal de funciones, que cumplen

$$\int \varphi_n^* \varphi_m dr = \delta_{nm}. \quad (1.37)$$

Usando la notación de Dirac, (1.36) y (1.37) se simplifican, lo mismo para la ecuación de eigenvalores

$$(z - L)G(z) = 1 \quad (1.38)$$

$$\langle \varphi_n | \varphi_m \rangle = \delta_{nm} \quad (1.39)$$

$$L|\varphi_n\rangle = \lambda_n|\varphi_n\rangle \quad (1.40)$$

Así, de (1.36) y utilizando la completez del conjunto $\{\varphi_n\}$ se llega a encontrar la función de Green

$$G(r, r'; z) = \sum_n \frac{\varphi_n(r)\varphi_n^*(r')}{z - \lambda_n} \quad (1.41)$$

En (1.41) el símbolo de suma implica una adición discreta, la cual será una integral en el espectro continuo.

Con esto, $G(z)$ es una función analítica en el plano complejo, excepto para algunos segmentos o puntos del eje real, definidos por λ_n .

1.5 Hamiltoniano de enlace fuerte

Los hamiltonianos de enlace fuerte (Tight-Binding Hamiltonians, TBH) se utilizan para modelar estados electrónicos en cristales, pues mantienen la simetría del sistema [Baquero, 2008] y tienen la siguiente forma

$$H = \sum_l |l\rangle \varepsilon_l \langle l| + \sum_{lm} |l\rangle t_{l,m} \langle m| \quad (1.42)$$

donde $|l\rangle$ son funciones de Wannier del átomo l , con ε_l la energía de sitio, que es la energía necesaria para colocar un electrón en el sitio l y $t_{l,m}$ la energía de salto, que representa la amplitud de probabilidad de transición entre l y m [Economou, 2005], con lo que, conociendo el hamiltoniano, podemos plantear la ecuación de Green de manera análoga a (1.36):

$$[E - H(r)]G(r, r'; E) = \delta(r - r') \quad (1.43)$$

$$E = E + is \quad (1.44)$$

cuya solución es $G(r, r', E)$ de la ecuación (1.41) pero en lugar de $z = \lambda + is$, tenemos $E = E + is$, como se ve en (1.44). Entonces, para este caso, la función de Green asociada al hamiltoniano (1.42) está dada de forma esquemática por:

$$\mathbf{G} = (\mathbf{E} - \mathbf{H})^{-1} \quad (1.45)$$

Adicionalmente, de $G(r, r', E + is)$ se definen las siguientes dos funciones:

$$G^+(r, r', E) \equiv \lim_{s \rightarrow 0^+} G^+(r, r', E + is) \quad (1.46)$$

$$G^-(r, r', E) \equiv \lim_{s \rightarrow 0^+} G^+(r, r', E - is), \quad (1.47)$$

que satisfacen las siguientes relaciones

$$G^-(r, r', E) = [G^+(r, r', E)]^*, \quad (1.48)$$

$$\text{Re}\{G^+(r, r', E)\} = \text{Re}\{G^-(r, r', E)\}, \quad (1.49)$$

$$\text{Im}\{G^+(r, r', E)\} = -\text{Im}\{G^-(r, r', E)\}. \quad (1.50)$$

Por consiguiente, usando la identidad:

$$\lim_{y \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm iy} = P \frac{1}{x} \mp i\pi \delta(x) \quad (1.51)$$

y definiendo la discontinuidad de la función de Green como

$$\tilde{\mathbf{G}}(E) \equiv \mathbf{G}^+(E) - \mathbf{G}^-(E), \quad (1.52)$$

se obtiene:

$$\tilde{G}(r, r', E) = -2\pi i \sum_n \delta(E - E_n) \varphi_n(r) \varphi_n^*(r'). \quad (1.53)$$

Para los elementos de la diagonal, es decir, con $r=r'$ se tiene que

$$G^\pm(r, r, E) = P \sum_n \frac{\varphi_n(r) \varphi_n^*(r)}{E - E_n} \mp i\pi \sum_n \delta(E - E_n) \varphi_n(r) \varphi_n^*(r) \quad (1.54)$$

la cual, al integrarse sobre toda r nos da la traza de la matriz

$$Tr\{\mathbf{G}^\pm(E)\} = P \sum_n \frac{1}{E - E_n} \mp i\pi \sum_n \delta(E - E_n) \quad (1.55)$$

siendo $\sum_n \delta(E - E_n)$ la densidad de estados (DOS por sus siglas en inglés) en E , $DOS(E)$. Similarmente definimos

$$\beta(r; E) \equiv \sum_n \delta(E - E_n) \varphi_n(r) \varphi_n^*(r') \quad (1.56)$$

como la densidad de estados por unidad de volumen. Por lo que

$$DOS(E) = \int \beta(r; E) dr. \quad (1.57)$$

Utilizando (1.54) - (1.57) encontramos que

$$DOS(E) = -\frac{1}{\pi} Im\{Tr[\mathbf{G}(E)]\}, \quad (1.58)$$

este resultado será utilizado posteriormente para ponderar promedios sobre transmitancia.

1.6 Transmitancia

En esta sección, se considerará una cadena finita de N átomos que en sus extremos tiene conectados dos saturadores (cadenas periódicas que tienen autoenergía cero e integral de salto t). En dicha cadena, las energías de sitio serán $\{\varepsilon_l\}$ y las de salto $\{t_{l,l+1}\}$ de acuerdo con el formalismo referente al hamiltoniano de enlace fuerte y a primeros vecinos, mientras que los saturadores tienen ε_0 y t como sus parámetros [Sánchez Morales, 2004]. La función de onda a lo largo de toda la cadena es

$$|\varphi\rangle = \sum_{l=1}^N C_l |l\rangle \quad (1.59)$$

y la sustituimos, junto al hamiltoniano de enlace fuerte (1.42) en

$$H|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle, \quad (1.60)$$

se obtiene

$$(\varepsilon_l - E)C_l + \sum_{l=1}^N t_{l,l+1}C_{l+1} = 0. \quad (1.61)$$

La ecuación (1.61) en forma matricial es

$$\mathbf{C}_{l+1} = \mathbf{T}_l \mathbf{C}_l \quad (1.62)$$

donde \mathbf{T}_l es la matriz de transferencia dada por

$$\mathbf{T}_l = \begin{pmatrix} \frac{E-\varepsilon_l}{t_{l,l+1}} & -\frac{t_{l,l-1}}{t_{l,l+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.63)$$

y \mathbf{C}_l es el vector de las amplitudes de la función de onda

$$\mathbf{C}_l = \begin{pmatrix} C_l \\ C_{l-1} \end{pmatrix}, \quad (1.64)$$

la sucesión de \mathbf{T}_l sigue el mismo ordenamiento de los átomos y su producto es

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbf{T}_N \mathbf{T}_{N-1} \cdots \mathbf{T}_1 = \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix}, \quad (1.65)$$

esta matriz $\boldsymbol{\tau}$ describe la propagación de un electrón a lo largo de toda la cadena y si usamos una energía E (en la banda de conducción), las ondas planas en los saturadores son de la forma

$$\varphi_l(k) = \begin{cases} Ae^{ikna} + Be^{-ikna}, & n \leq 1 \\ Ce^{ikna} + De^{-ikna}, & n \geq N \end{cases} \quad (1.66)$$

y para el caso en que el electrón incide por $n=1$ (el extremo izquierdo de la cadena), se tiene $k>0$, $A=1$, $B=0$, $C=\kappa$ y $D=0$, con r y κ las amplitudes de reflectancia y transmitancia respectivamente que satisfacen

$$|\kappa|^2 + |r|^2 = 1 \quad (1.67)$$

Teniendo lo anterior, podemos utilizar (1.62) - (1.65) para obtener el siguiente resultado

$$\begin{pmatrix} \kappa e^{ik(N+1)a} \\ \kappa e^{ikNa} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ika} + r e^{-ika} \\ 1 + r \end{pmatrix} \quad (1.68)$$

de donde se tiene [Süto, 1994]:

$$\kappa = \frac{-2i(\sin ka)e^{ikNa}}{\tau_{11}e^{-ika} + \tau_{12} - e^{ika}(\tau_{21}e^{-ika} + \tau_{22})} \quad (1.69)$$

Si en la ecuación (1.69) utilizamos que $\cos ka = \frac{E - \varepsilon_0}{2t}$ la transmitancia en función de la energía queda dada como:

$$T(E) \equiv |\mathcal{T}|^2 = \frac{4 - \left(\frac{E}{t}\right)^2}{\left[\tau_{21} - \tau_{12} + (\tau_{22} - \tau_{11})\frac{E}{2t}\right]^2 + (\tau_{22} + \tau_{11})^2 \left(1 - \frac{E^2}{4t^2}\right)}. \quad (1.70)$$

Con este formalismo vamos a analizar los efectos cuánticos del transporte electrónico en cadenas segmentadas ordenadas de forma cuasiperiódica.

CAPÍTULO II: Sistemas periódicos y aperiódicos

Un cristal periódico es un sólido de partículas ordenadas de forma regular en el espacio, su nombre proviene del griego *krystallos*, que a su vez viene de *kruos* que significa frío o congelado, pues los griegos pensaban que el cuarzo (un tipo de cristal) era en realidad hielo que no se derretía a temperatura ambiente. La cristalografía clásica caracterizó los arreglos atómicos, mostrando que sólo existía cierta cantidad limitada de formas de acomodar los átomos de manera simétrica, de esta forma, los materiales que presentan estos ordenamientos son los denominados cristales, mientras que al resto se les llamó simplemente amorfos [Eldredge, 2006].

2.1 Celda unitaria

A partir de los patrones de difracción de rayos X, se sabe que el orden regular con que se forman los cristales es la repetición de una unidad, llamada celda unitaria. La estructura formada por el arreglo periódico de centros de gravedad de las partículas es la red cristalina [Fan, 2001]. Las propiedades físicas en cada parte del cristal son las mismas.

Debido a la periodicidad del cristal, cada punto de la red puede ser escrito de la forma

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + l\mathbf{r}_1 + m\mathbf{r}_2 + n\mathbf{r}_3 \quad (2.1)$$

donde l , m y n son enteros arbitrarios, \mathbf{r}_0 es un punto cualquiera de la red, mientras que \mathbf{r}_1 , \mathbf{r}_2 y \mathbf{r}_3 son los vectores base traslacional que describen el arreglo de partículas en un cristal completo.

Las celdas de la estructura cristalina se pueden describir por paralelepípedos de seis caras, con longitudes de sus aristas a , b y c y ángulos α , β y γ entre las aristas. Partiendo de las longitudes y los ángulos, se observan siete formas distintas de celda, dadas en la Tabla 2.1.

Sistema Cristalino	Aristas	Ángulos
Triclínico	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$
Monoclínico	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
Ortorrómbico	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Tetragonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Romboédrico	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
Hexagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
Cúbico	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

Tabla 2.1 Cristales y la relación aristas/ángulos

2.2 Redes de Bravais

Auguste Bravais, físico francés, encontró que adicionalmente a los tipos de celda mostrados en la Tabla 2.1, las celdas de los cristales tridimensionales pueden ser clasificados de la siguiente forma:

- Primitiva (P): tiene puntos de la red sólo en los vértices del hexaedro
- Centrada en las caras (FCC por sus siglas en inglés): además de tener puntos en los vértices, tiene también en el centro de las caras, que puede ser en todas las caras o en algunas.
- Centrada en el cuerpo (BCC por sus siglas en inglés): tiene un punto en el centro de la celda, además de los vértices.

Al combinar los sistemas cristalinos con estas nuevas configuraciones, se obtienen las catorce estructuras, llamadas redes de Bravais y mostradas en la Tabla 2.2.

Para el caso bidimensional, se usan sólo dos vectores base y un ángulo entre ellos, a partir de los cuales se obtienen cinco configuraciones que son las redes de Bravais bidimensionales, mostradas en la Figura 2.1.

Tanto las celdas de la tabla 2.2, como las de la figura 2.1 pueden llenar su respectivo espacio sin dejar lugares vacíos, ya sea bidimensional o tridimensional.

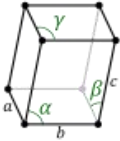
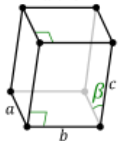
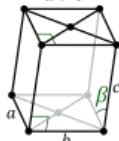
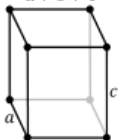
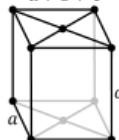
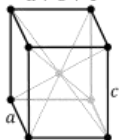
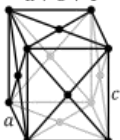
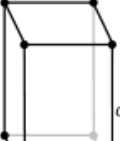

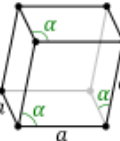

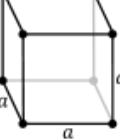
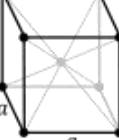

Sistema cristalino	Redes de Bravais			
Triclínico	(P) 			
Monoclínico	(P) $\beta \neq 90^\circ$ $a \neq c$ 	(FCC) $\beta \neq 90^\circ$ $a \neq c$ 		
Ortorrómbico	(P) $a \neq b \neq c$ 	(FCC) $a \neq b \neq c$ 	(BCC) $a \neq b \neq c$ 	(FCC) $a \neq b \neq c$ 
Tetragonal	(P) $a \neq c$ 	(BCC) $a \neq c$ 		
Romboédrico	(P) $\alpha \neq 90^\circ$ 			
Hexagonal	(P) 			
Cúbico	(P) 	(BCC) 	(FCC) 	

Tabla 2.2 Redes de Bravais [Fan, 2001]

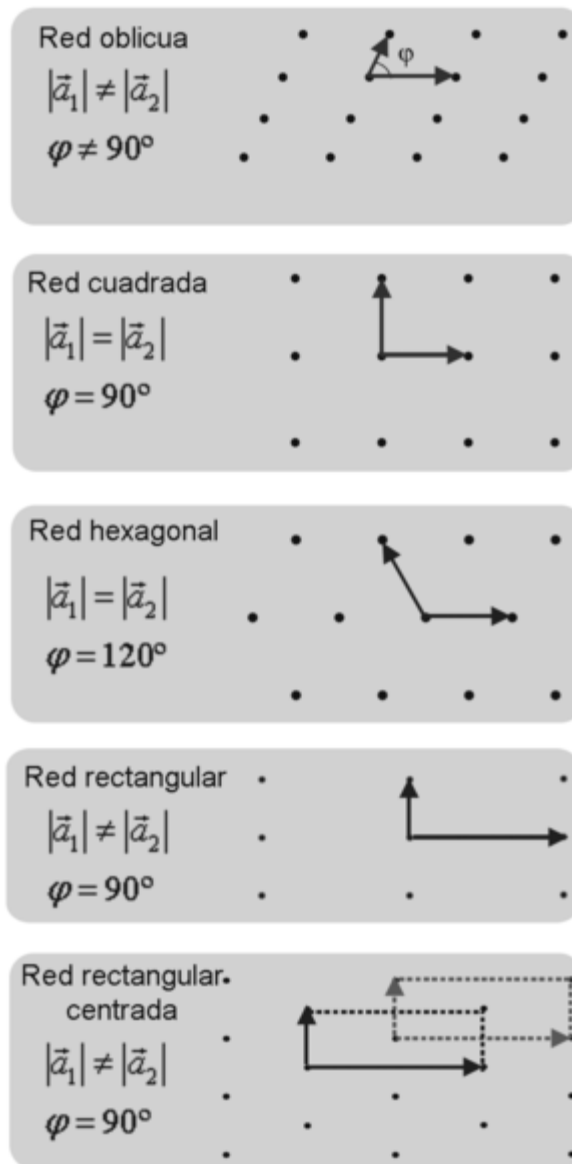


Figura 2.1 Redes de Bravais para el caso bidimensional [Kittel, 1996].

2.3 Difracción Bragg por rayos X

Los rayos X son radiación electromagnética con longitud de onda de aproximadamente 1Å ($10^{-10}m$), lo cual es del orden de magnitud de un átomo. Por esta razón, los rayos X permiten estudiar estructuras cristalinas a nivel atómico a través de su difracción, es decir, conocer las distancias y ángulos interatómicos [Dyson, 2005].

En 1912 Max Von Laue sugirió un experimento para verificar la naturaleza ondulatoria de los rayos X. Von Laue señaló que, si los rayos X tienen longitudes de onda λ que son aproximadamente iguales al espaciado d entre los planos de los átomos en cristales, entonces las ondas de rayos X que inciden en cristales mostrarán efectos de interferencia. Recordemos que, en un arreglo regular de ranuras, si hacemos incidir luz, ésta mostrará interferencia constructiva en unos cuantos ángulos particulares, y una completa cancelación en otros ángulos. Para observar estos efectos de interferencia, el espaciado entre las ranuras debe ser casi tan pequeño como la longitud de onda de la luz. Similarmente, un sólido cristalino consiste en un arreglo regular de átomos. Cuando un haz de rayos X incide en un cristal, se pueden observar efectos de fuerte interferencia constructiva si la longitud de onda λ es más pequeña que el espaciado interplanar d en el cristal [Dyson, 2005].

Dos haces de rayos X (idéntica longitud de onda y fase) inciden con un ángulo θ en un cristal y forman un frente de ondas. Son dispersados por dos átomos paralelos en los planos, separados por la distancia interatómica d , pero el haz de abajo recorre una longitud extra de $2d\sin(\theta)$ (Figura 2.2).

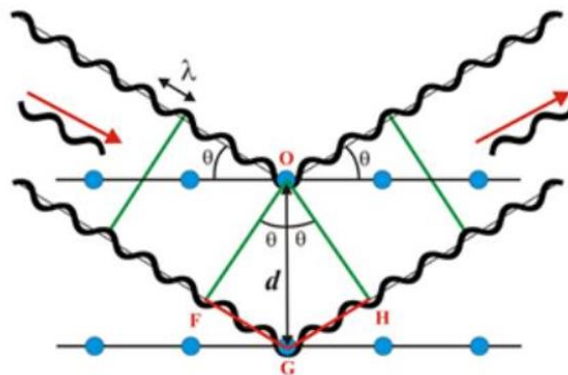


Figura 2.2 Rayos X incidiendo sobre una red cristalina [Cullity, 1956]

La interferencia constructiva ocurre cuando esta longitud es igual a un múltiplo entero de la longitud de onda de la radiación. De acuerdo con la Figura 2.2, tenemos:

$$FG + GH = n\lambda \quad (2.2)$$

también se puede ver de la Figura 2.2 que $FG = GH$, por lo que

$$FG = GH = d \sin \theta, \quad (2.3)$$

al combinar con (2.2) nos da la ley de Bragg

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad (2.4)$$

utilizada para encontrar la distancia interplanar de los cristales.

Por sus propiedades magnéticas, eléctricas y ópticas, los sólidos cristalinos tienen gran relevancia en la tecnología actual, basados en estas características se fabrican muchos dispositivos que se utilizan en la vida diaria, como láseres, LED, fotómetros, celdas solares, transistores, chips, sensores de temperatura, etcétera. Las propiedades que hacen tan importantes a los cristales provienen de su estructura y la distribución de los electrones en ellos [Bilmes, 2007].

Además, los rasgos de estos sistemas se pueden alterar al colocar impurezas o defectos en el cristal. Con esto, la conducción puede manipularse a conveniencia, así como otras peculiaridades eléctricas, magnéticas, térmicas o mecánicas.

2.4 Cuasicristales

Al estudiar cristales y sus características físicas, los resultados se basan en su periodicidad, es decir, la forma en que llenan todo el espacio al repetir la celda unitaria mencionada anteriormente. Sin embargo, se han encontrado figuras que no pueden llenar todo el espacio.

Hasta hace algunos años, se tenía la certeza de que sólo podían existir cristales cuyas estructuras fueran invariantes ante rotaciones de 30° , 60° , 90° , 180° y múltiplos enteros de estos ángulos. También se sabía que no podían existir simetrías invariantes ante rotaciones de 72° (de orden cinco porque corresponden a $360^\circ/5$), $360^\circ/7$, $360^\circ/8$, etcétera. Esto es, porque resulta imposible llenar un plano con pentágonos, heptágonos, octágonos, sin dejar zonas sin cubrir.

Dicho de otra forma, el orden de la estructura periódica sólo es compatible con simetrías de orden dos, tres, cuatro y seis. Partiendo de esto, la cristalografía clásica predice claramente que no pueden existir cristales con simetrías distintas a las anteriores y tampoco patrones de difracción que posean dicha simetría.

En 1984 fue encontrado un sólido metálico que difractó electrones como un cristal, pero tenía simetría icosaedral, que significa estar formado por sólidos regulares

cuyas caras son pentágonos [D. Shechtman, 1984], lo cual no coincidía con lo que hasta ese momento se sabía de redes cristalinas. Este sólido es una aleación de aluminio con manganeso. Quienes encontraron este patrón de difracción (Figura 2.3) inicialmente pensaron que se trataba de una especie de macla, que es cuando cristales idénticos se agrupan y crecen compenetrados entre sí, un ejemplo de ello es la Figura 2.4, que consiste en una macla de pirita.

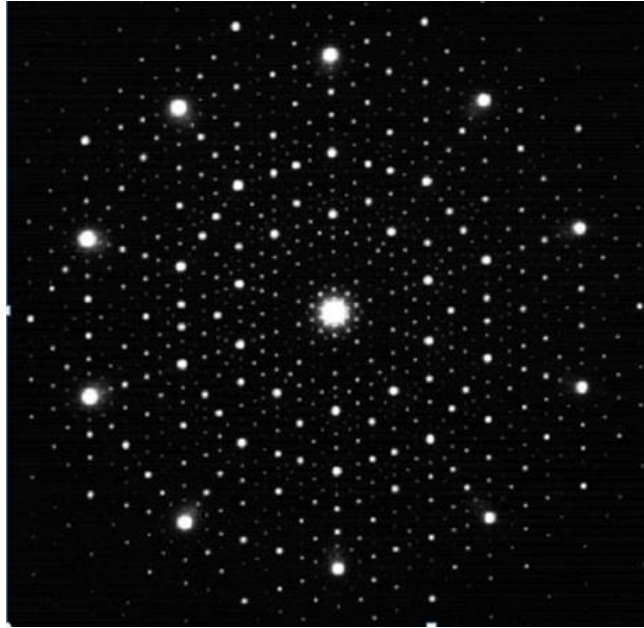


Figura 2.3 Patrón de difracción para una fase icosaedral [D. Shechtman, 1984]



Figura 2.4 Macla de pirita [Wikimedia Commons, 2015]

La aleación de aluminio con manganeso, además de mostrar simetría rotacional de orden cinco, no mostró simetría traslacional, una razón más para no considerarle como un cristal. Esto es un cuasicristal [Steinhardt, 1984], una estructura ordenada que no tiene periodicidad y además forma patrones que llenan todo el espacio (aún sin la simetría traslacional). La existencia de un número grande de elementos en un espaciado regular es lo que da lugar a los patrones de difracción, es por ello que la presencia de estos últimos mostró la existencia de este nuevo sistema ordenado. Estos cuasicristales, son sistemas cuya estructura es cuasiperiódica, ya sea una construcción unidimensional como las cadenas de Fibonacci [Shahtahmasebi, 2005] o una bidimensional [Lifshitz, 2002], como el teselado de Penrose [Bruijn, 1980].

2.6 Cuasiperiodicidad

Cuando un sistema carece de orden, se dice que es desordenado; en el caso de los cristales, todo el sistema se puede describir a partir de una pequeña parte; la celda unitaria, pero, si la construcción del material es impredecible, sin patrones repetitivos o una forma clara de construirlo, tenemos desorden. Similarmente, es posible tener arreglos no periódicos que tengan orden, es decir, aunque no posean una celda unitaria que se repita al infinito, se puede construir toda la red con una serie de reglas.

En el año de 1202, Leonardo de Pisa, también conocido como Fibonacci, publicó el texto más influyente de matemáticas de la época, *Liber Abaci*, igualmente obtuvo la sucesión que lleva su nombre [T.C. Scott, 2014].

Los números que forman la sucesión aparecieron como solución al siguiente problema: “Si un hombre coloca una pareja de conejos en un corral ¿Cuántas parejas de conejos habrá en un año? Esto considerando que cada mes una pareja tiene otra pareja y ese nuevo par es productivo en el segundo mes”.

La secuencia resultante es

$$1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 55, 89, 144 \dots \quad (2.5)$$

con lo que se obtiene la siguiente recurrencia para obtener cada número

$$\begin{aligned} Fib(0) &= 1 \\ Fib(1) &= 1 \\ Fib(2) &= 2 \end{aligned} \quad (2.6)$$

$$Fib(n) = Fib(n - 1) + Fib(n - 2)$$

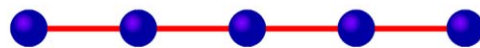
A pesar de que el problema de los conejos nos lleva a la sucesión de Fibonacci, dicha cuestión no es realista, sin embargo, la sucesión describe a la perfección la

cantidad de ancestros que tiene una abeja zángano; en una colmena sólo la reina produce huevos, los cuales, si son fecundados, producen abejas hembra (obreras), mientras que las abejas macho (zánganos) provienen de huevos sin fertilizar [Yanega, 1996], por lo que:

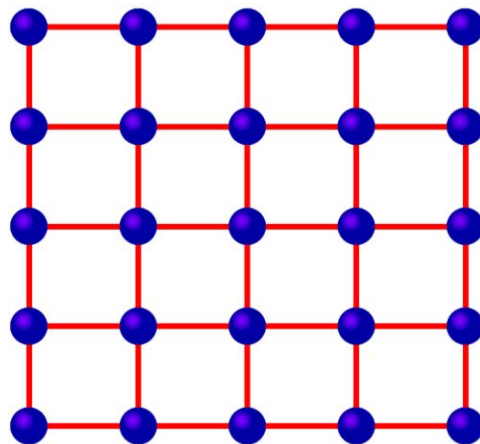
- i. Un zángano tiene un padre (la reina)
- ii. Ese mismo zángano tiene dos abuelos (padres de la reina)
- iii. También tiene tres bisabuelos
- iv. Al mismo tiempo tiene cinco tatarabuelos
- v. La generación anterior consta de ocho miembros y así sucesivamente

Así, al ir hacia atrás en los ancestros de un zángano, la cantidad de miembros en las generaciones sigue la sucesión de Fibonacci. A partir de este tipo de construcción se buscará formar cadenas unidimensionales que se describan recursivamente a partir de la unión de las dos anteriores.

Los problemas unidimensionales, generalmente tienen un análogo bidimensional o tridimensional. En el caso de una cadena periódica, como en la Figura 2.5(a), el análogo más simple es un arreglo de cuadrados [Figura 2.5(b)]



(a)



(b)

Figura 2.5 (a) Arreglo unidimensional periódico formado por un solo tipo de celda (segmento de línea), (b) arreglo bidimensional formado por un solo tipo de celda (cuadro)

El arreglo de la Figura 2.5(b) puede extenderse hasta llenar todo el espacio (2D) añadiendo cuadros, los cuales se colocan como traslaciones enteras de los cuadros originales, por lo que es posible crear una red repitiendo infinitamente una celda.

Si ahora queremos formar un arreglo cuasiperiódico en una dimensión, es claro que necesitamos más de un tipo de celda, aunque la cantidad necesaria no es tan obvia. La forma en que llegaremos a un arreglo cuasiperiódico será a través de un método llamado corte y proyección, cuyos principios básicos se describen a continuación.

Primero, tomaremos una red cuadrada como la mostrada en 2.5(b), y se le añade una línea que corte la red como en la Figura 2.6, que tiene paralelamente otra línea (punteada) que genera una banda en la cual están contenidos los puntos más cercanos a la recta, los cuales se proyectan perpendicularmente sobre la línea original, de esta forma en la línea se forman segmentos largos (L) y cortos (s). La forma en que se ordenan estos segmentos cortos y largos está dada por el ángulo de corte (θ) entre la horizontal y la línea. Este ángulo, en la figura 2.6, es tal que cumple $\tan(\theta) = 1/2$. Es importante notar que, en este caso, la tangente del ángulo es un número racional, generando un arreglo periódico en una dimensión menor y dicha tangente representa la cantidad de segmentos largos entre segmentos totales de cada celda unitaria, que es Ls en este caso [Dunlap, 1997].

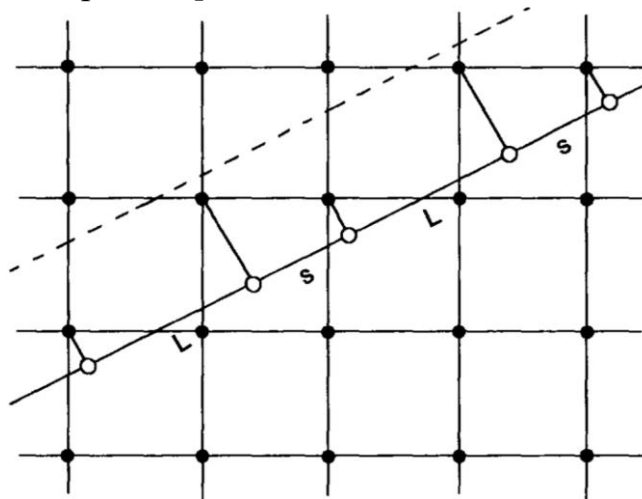


Figura 2.6 Corte y proyección de dos dimensiones con una tangente racional ($1/2$).

Por otro lado, si la tangente es un número irracional, el cociente entre segmentos largos y totales sería también un número irracional. Es claro que en este caso la secuencia no puede ser periódica, pues dicho cociente sólo puede ser visto en una secuencia infinita [Dunlap, 1997].

Ahora, si se utilizan los números de Fibonacci, tomando la tangente como

$$\tan \theta = \frac{Fib(n-1)}{Fib(n)} \tag{2.7}$$

se obtienen distintas formas para acomodar los segmentos L y s , donde la relación entre segmentos L y el total de segmentos será nuevamente, $Fib(n-1)$ el número de segmentos L y $Fib(n)$ el total de segmentos, donde la celda básica en cada construcción periódica será formada por las dos anteriores, como se puede ver en la tabla 2.3.

n	$\tan \theta$	Celda básica	Segmentos totales
1	1/1	L	1
2	1/2	Ls	2
3	2/3	LsL	3
4	3/5	$LsLLs$	5
5	5/8	$LsLLsLsL$	8
6	8/13	$LsLLsLsLLsLLs$	13
7	13/21	$LsLLsLsLLsLLsLsLLsLsL$	21
8	21/34	$LsLLsLsLLsLLsLsLLsLsLLsLLsLsLLsLLs$	34

Tabla 2.3 Secuencia de segmentos largos y cortos producidos por el método de corte y proyección para ángulos cuya tangente es el cociente de dos números de Fibonacci sucesivos.

Si en la ecuación (2.7) hacemos n tender a infinito, llegaremos a una expresión dada por la razón dorada, es decir

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{Fib(n-1)}{Fib(n)} = \frac{2}{1 + \sqrt{5}} \approx 0.6180339887... \tag{2.8}$$

Cuando n tiende a infinito, el cociente es un número irracional y la celda unitaria es la secuencia infinita cuasiperiódica de Fibonacci [Dunlap, 1997].

En los setentas, Roger Penrose mostró un conjunto de teselados aperiódicos (de Penrose), entre los cuales se muestra el de la Figura 2.7, el cual es no periódico, tiene simetría de orden cinco [Penrose, 1974], es autosimilar, es decir, cualquier región finita del patrón aparece un número infinito de veces en la teselación (mosaico) y más importante, al implementarse como una estructura física, ésta muestra a través de la difracción de Bragg, la simetría de orden cinco [Naumis, 2007]. El cristalógrafo Alan Mackay fue el primero en notar la importancia física del mosaico de Penrose,

él tuvo la idea de marcar los vértices de dicho mosaico sobre una transparencia. Después le atravesó con un rayo láser para obtener la imagen en el espacio recíproco del mosaico, al hacerlo, el patrón de difracción consistía en puntos luminosos discretos con simetría diez [Naumis, 2007].

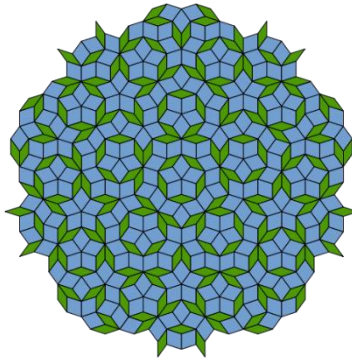


Figura 2.7 Teselado de Penrose con simetría de orden cinco [Bruijn, 1980]

A pesar de que este teselado es irregular, cubre todo el espacio de forma ordenada, aunque no periódica. Al igual que las secuencias de Fibonacci, el teselado de Penrose se puede obtener a través del método de corte y proyección, partiendo de un sistema de celdas en un espacio de cinco dimensiones.

CAPÍTULO III: Método de renormalización

Uno de los objetivos es analizar los efectos de la cuasiperiodicidad en los espectros de la densidad de estados electrónica y la transmitancia, los cuales se compararán con los obtenidos para sistemas periódicos. Para ello es necesario estudiar sistemas de tamaño macroscópico, donde el teorema de Bloch no es aplicable y la inversión directa del hamiltoniano requiere demasiado tiempo de cómputo cuando se trata de una gran cantidad de sitios, las operaciones requeridas para obtener la densidad de estados de N átomos crecen como N^3 , por lo que no es viable resolver de esta forma. Una alternativa sin introducir aproximaciones es por medio de los métodos de renormalización en espacio real.

3.1 Método de renormalización (periódico)

Las cadenas que estudiamos son: el problema de sitios, en donde solo varían de forma periódica o cuasiperiódica las autoenergías de los átomos y las integrales de salto son constantes; el problema mixto donde la variación es en las autoenergías y las integrales de salto dependen de los átomos vecinos y el problema de enlaces donde sólo varían las integrales de salto de forma periódica y cuasiperiódica.

En la Figura 3.1 se muestra cómo se genera una cadena periódica cuya celda unitaria consiste en dos sitios de energía ε_A y ε_B unidos por su respectivo enlace (t_{AB}), generaciones posteriores están formadas por la repetición de la generación anterior. Por lo que la cadena $F(N)$ tiene 2^{N-1} sitios.

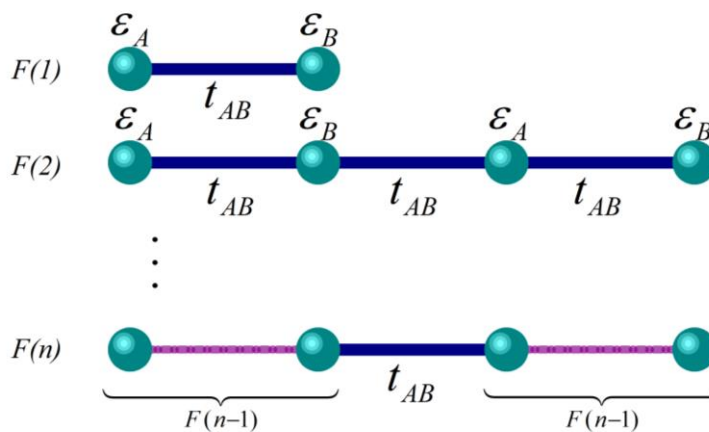


Figura 3.1 Forma de generar una cadena con celda diatómica

Con el método de renormalización, cada cadena de N átomos se verá como una de dos sitios equivalente y sin perder información. La forma en que se disminuye el tamaño de la cadena se describe esquemáticamente en la Figura 3.2.

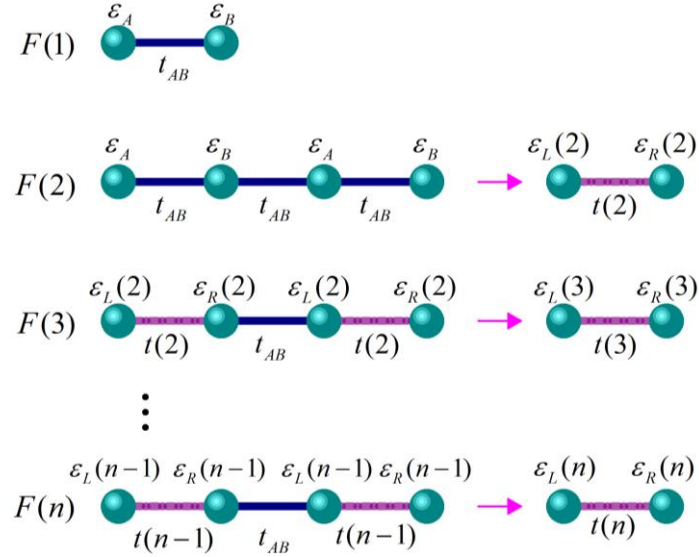


Figura 3.2 Renormalización de una cadena periódica diatómica para sitios

Ahora, arriba se puede ver cómo se reduce la cadena, sin embargo, no conocemos los valores de $\varepsilon_R(n)$, $\varepsilon_L(n)$ y $t(n)$, que están mostrados en el esquema, dichos resultados son dados a continuación

$$\varepsilon_L(n) = \varepsilon_L(n-1) + \frac{t(n-1)^2[E - \varepsilon_L(n-1)]}{[E - \varepsilon_R(n-1)][E - \varepsilon_L(n-1)] - t_{ab}^2} \quad (3.1)$$

$$\varepsilon_R(n) = \varepsilon_R(n-1) + \frac{t(n-1)^2[E - \varepsilon_R(n-1)]}{[E - \varepsilon_L(n-1)][E - \varepsilon_R(n-1)] - t_{ab}^2} \quad (3.2)$$

$$t(n) = \frac{t(n-1)^2 t_{ab}}{[E - \varepsilon_R(n-1)][E - \varepsilon_L(n-1)] - t_{ab}^2} \quad (3.3)$$

Con esto, los nuevos valores de la función de Green son

$$G_{11} = \frac{E - \varepsilon_R(n)}{[E - \varepsilon_R(n)][E - \varepsilon_L(n)] - t(n)^2} \quad (3.4)$$

$$G_{22} = \frac{E - \varepsilon_L(n)}{[E - \varepsilon_R(n)][E - \varepsilon_L(n)] - t(n)^2} \quad (3.5)$$

$$G_{21} = G_{12} = \frac{t(n)}{[E - \varepsilon_R(n)][E - \varepsilon_L(n)] - t(n)^2}. \quad (3.6)$$

Las ecuaciones (3.1)-(3.6) se obtuvieron utilizando la ecuación de Dyson (1.43). Una vez obtenido lo anterior, la densidad de estados en función de la energía E es

$$DOS(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}\{A(n)G_{11} + B(n)G_{22} + C(n)G_{21} + D(n)\} \quad (3.7)$$

donde A , B , C y D son los coeficientes de renormalización, dados por

$$A(n) = A(n-1) \left\{ 1 + \left[\frac{t(n-1)t_{AB}}{\gamma_R\gamma_L - t_{AB}^2} \right]^2 \right\} \\ + B(n-1) \left[\frac{t(n-1)\gamma_L}{\gamma_R\gamma_L - t_{AB}^2} \right]^2 + C(n-1) \frac{t(n-1)\gamma_L}{\gamma_R\gamma_L - t_{AB}^2}, \quad (3.8)$$

$$B(n) = A(n-1) \left[\frac{t(n-1)\gamma_R}{\gamma_R\gamma_L - t_{AB}^2} \right]^2 \\ + B(n-1) \left\{ 1 + \left[\frac{t(n-1)t_{AB}}{\gamma_R\gamma_L - t_{AB}^2} \right]^2 \right\} + C(n-1) \frac{t(n-1)\gamma_R}{\gamma_R\gamma_L - t_{AB}^2}, \quad (3.9)$$

$$C(n) = A(n-1) \frac{2t(n-1)^2 t_{AB}\gamma_R}{(\gamma_R\gamma_L - t_{AB}^2)^2} \\ + B(n-1) \frac{2t(n-1)^2 t_{AB}\gamma_L}{(\gamma_R\gamma_L - t_{AB}^2)^2} + C(n-1) \frac{2t(n-1)t_{AB}}{\gamma_R\gamma_L - t_{AB}^2}, \quad (3.10)$$

$$D(n) = A(n-1) \frac{\gamma_R}{\gamma_R\gamma_L - t_{AB}^2} + B(n-1) \frac{\gamma_L}{\gamma_R\gamma_L - t_{AB}^2} + 2D(n-1), \quad (3.11)$$

donde $\gamma_R = E - \varepsilon_R(n-1)$ y $\gamma_L = E - \varepsilon_L(n-1)$.

Como se puede notar en las ecuaciones (3.1)-(3.11), estos valores son recursivos y dependen de alguna condición inicial que se asigna para la primera generación, es decir, $n=1$.

Con esto, el número de operaciones para obtener la densidad de estados de una cadena periódica se reduce considerablemente, al igual que el tiempo de cómputo necesario para resolver dichas operaciones. Lo único que falta para completar el cálculo de la densidad de estados, son las condiciones iniciales, que se obtienen al aplicar las ecuaciones anteriores al caso $F(1)$ de la Figura 3.2 y son:

$$A(1) = 1, B(1) = 1, C(1) = 0, D(1) = 0 \quad (3.12)$$

$$\varepsilon_L(1) = \varepsilon_A, \varepsilon_R(1) = \varepsilon_B, t(1) = t_{AB}. \quad (3.13)$$

La otra propiedad física que nos interesa estudiar es la conductividad eléctrica, por lo que vamos a obtener los coeficientes de renormalización para la matriz de transferencia de la cadena representada en la Figura 3.1. Para cada sitio de la cadena tenemos una matriz y lo que buscamos es construir el producto de todas esas matrices, dicho producto será la matriz (1.65) con la cual podremos calcular la transmitancia.

A partir de lo mostrado en la Figura 3.1 podemos ver que la sucesión de matrices debe también tener un comportamiento recursivo. En la Figura 3.3 se muestra cómo

las matrices $\tau(n)$ se forman recursivamente, obteniéndose la matriz correspondiente a cada sitio o conjunto de sitios.

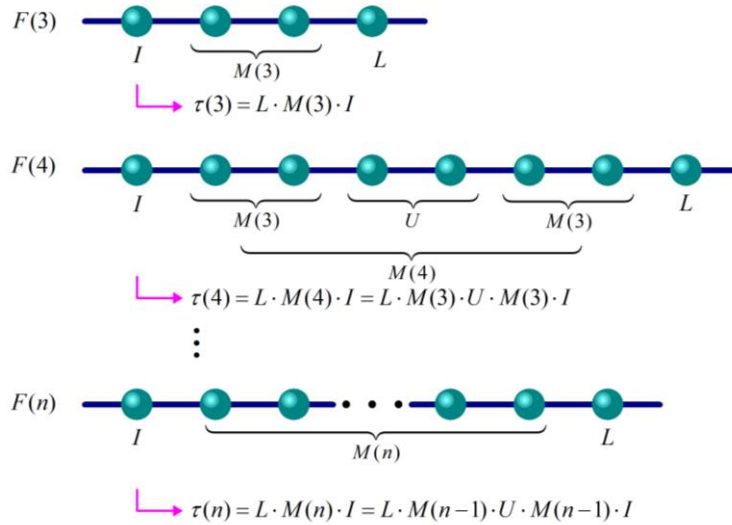


Figura 3.3 Construcción de las matrices de transferencia

De la Figura 3.3 se deduce que

$$\tau(n) = L \cdot M(n) \cdot I \quad (3.14)$$

$$M(n) = M(n-1) \cdot U \cdot M(n-1) \quad (3.15)$$

además, aplicando la ecuación (1.63) a este caso concreto, encontramos que

$$L = \begin{pmatrix} \frac{E-\varepsilon_B}{t} & -\frac{t_{AB}}{t} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

$$I = \begin{pmatrix} \frac{E-\varepsilon_A}{t_{AB}} & -\frac{t}{t_{AB}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

$$U = M(3) = \begin{pmatrix} \frac{(E-\varepsilon_A)(E-\varepsilon_B)}{t_{AB}^2} - 1 & -\frac{E-\varepsilon_A}{t_{AB}} \\ \frac{E-\varepsilon_B}{t_{AB}} & -1 \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

Para completar el problema solo necesitamos la condición inicial, que en este caso es $M(3)$ y los coeficientes de renormalización de la matriz $M(n)$ son:

$$M_{11}(n) = M_{11}(n-1)[U_{11} * M_{11}(n-1) + U_{12} * M_{21}(n-1)] \\ + M_{12}(n-1)[U_{21} * M_{11}(n-1) + U_{22} * M_{21}(n-1)] \quad (3.19)$$

$$M_{21}(n) = M_{21}(n-1)[U_{11} * M_{11}(n-1) + U_{12} * M_{21}(n-1)] \\ + M_{22}(n-1)[U_{21} * M_{11}(n-1) + U_{22} * M_{21}(n-1)] \quad (3.20)$$

$$M_{12}(n) = M_{11}(n-1)[U_{11} * M_{12}(n-1) + U_{12} * M_{22}(n-1)] \\ + M_{12}(n-1)[U_{21} * M_{12}(n-1) + U_{22} * M_{22}(n-1)] \quad (3.21)$$

$$M_{22}(n) = M_{21}(n-1)[U_{11} * M_{12}(n-1) + U_{12} * M_{22}(n-1)] \\ + M_{22}(n-1)[U_{21} * M_{12}(n-1) + U_{22} * M_{22}(n-1)] \quad (3.22)$$

Sustituyendo en la Ec. (3.14) obtenemos las entradas de la matriz de transferencia, para evaluar la Ec. (1.70) y así poder analizar la conductividad eléctrica de las cadenas periódicas diatómicas.

Todo lo anterior fue para el sistema donde partimos de energías de salto fijas y dos distintas energías de sitio. Ahora formaremos nuestras cadenas a partir de dos energías de salto diferentes y energías de sitio fijas, que bien podrían ser cero, a este tipo de alambre, mostrado en la Figura 3.4, se le llama problema de enlace.

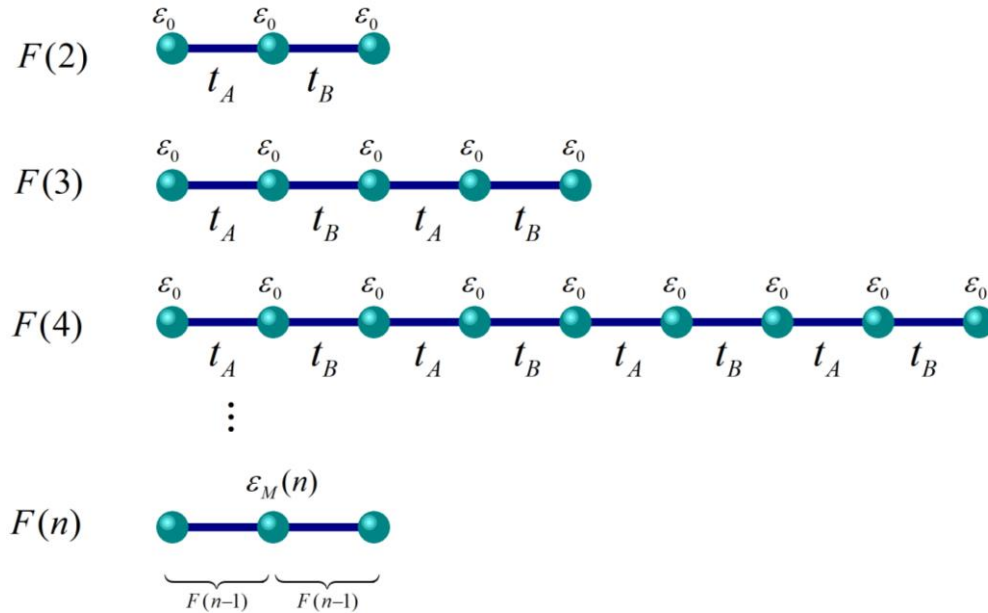


Figura 3.4 Forma en que se genera una cadena periódica de enlaces.

En estas nuevas cadenas periódicas, la forma en que se renormaliza es bastante similar, pero no la misma, pues en lugar de aparecer un nuevo enlace en la unión, se unen en un sitio compartido, esto se puede ver en la Figura 3.5

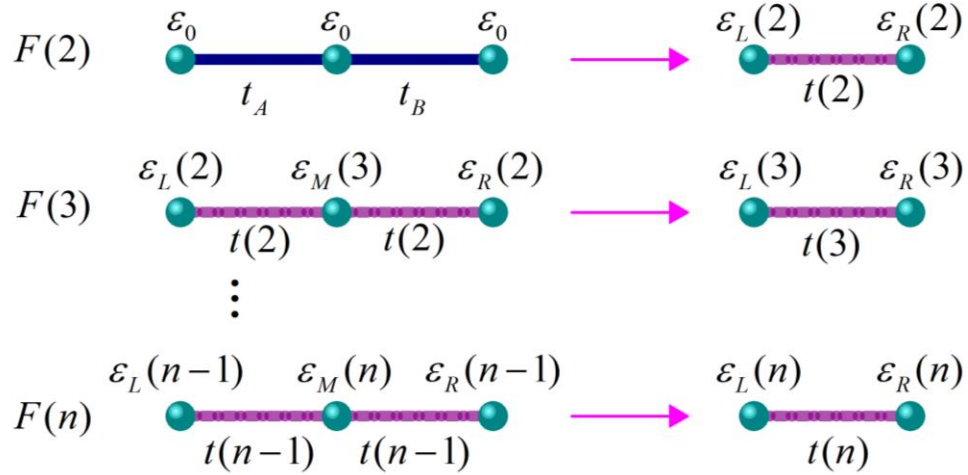


Figura 3.5 Renormalización para una cadena periódica de enlaces.

Al igual que en el caso anterior, la densidad de estados se calcula con la ecuación (3.7), pero los coeficientes de renormalización cambian. Primero, las energías efectivas, que contienen toda la información de las energías del sistema, son

$$\varepsilon_M(n) = \varepsilon_L(n-1) + \varepsilon_R(n-1) \quad (3.23)$$

$$\varepsilon_L(n) = \varepsilon_L(n-1) + \frac{t(n-1)^2}{E - \varepsilon_M(n)} \quad (3.24)$$

$$\varepsilon_R(n) = \varepsilon_R(n-1) + \frac{t(n-1)^2}{E - \varepsilon_M(n)} \quad (3.25)$$

$$t(n) = \frac{t(n-1)^2}{E - \varepsilon_M(n)} \quad (3.26)$$

A continuación se presentan los nuevos coeficientes de renormalización, mientras que las entradas de la matriz de Green se mantienen igual que en las ecuaciones (3.4)-(3.6), pero utilizando las nuevas energías.

$$A(n) = A(n-1) + [A(n-1) + B(n-1) - 1] \frac{t(n-1)^2}{[E - \varepsilon_M(n)]^2} + C(n-1) \frac{t(n-1)}{E - \varepsilon_M(n)} \quad (3.27)$$

$$B(n) = B(n-1) + [A(n-1) + B(n-1) - 1] \frac{t(n-1)^2}{[E - \varepsilon_M(n)]^2} + C(n-1) \frac{t(n-1)}{E - \varepsilon_M(n)} \quad (3.28)$$

$$C(n) = 2[A(n-1) + B(n-1) - 1] \frac{t(n-1)^2}{[E - \varepsilon_M(n)]^2} + 2C(n-1) \frac{t(n-1)}{E - \varepsilon_M(n)} \quad (3.29)$$

$$D(n) = [A(n-1) + B(n-1) - 1] \frac{1}{E - \varepsilon_M(n)} + 2D(n-1). \quad (3.30)$$

Las condiciones iniciales que nos permiten llevar a cabo el método de renormalización son:

$$A(2) = 1 + \frac{t_A^2}{[E - \varepsilon_0]^2} \quad (3.31)$$

$$B(2) = 1 + \frac{t_B^2}{[E - \varepsilon_0]^2} \quad (3.32)$$

$$C(2) = \frac{t_A t_B}{[E - \varepsilon_0]^2} \quad (3.33)$$

$$D(2) = \frac{1}{[E - \varepsilon_0]} \quad (3.34)$$

$$\varepsilon_L(2) = \varepsilon_0 + \frac{t_A^2}{E - \varepsilon_0} \quad (3.35)$$

$$\varepsilon_R(2) = \varepsilon_0 + \frac{t_B^2}{E - \varepsilon_0} \quad (3.36)$$

$$t(2) = \varepsilon_0 + \frac{t_A t_B}{E - \varepsilon_0} \quad (3.37)$$

En el caso de la matriz de transferencia se obtiene con la ecuación (3.14), pero con las siguientes condiciones:

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \frac{E - \varepsilon_0}{t_A} & -\frac{t_B}{t_A} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.38)$$

$$\mathbf{I} = \begin{pmatrix} \frac{E - \varepsilon_0}{t_A} & -\frac{t}{t_A} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.39)$$

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} \frac{E - \varepsilon_0}{t} & -\frac{t_A}{t} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.40)$$

$$\mathbf{M}(2) = \begin{pmatrix} \frac{E - \varepsilon_0}{t_B} & -\frac{t_A}{t_B} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.41)$$

donde los coeficientes de $\mathbf{M}(n)$ son los mismos que las ecuaciones (3.19) - (3.22).

3.2 Método de renormalización (Fibonacci)

El sistema cuasiperiódico unidimensional más conocido es la cadena donde sus autoenergías y/o integrales de salto siguen la secuencia de Fibonacci. Para la formación de estas cadenas se puede utilizar el método de corte y proyección de la Tabla 2.3 donde los segmentos largos y cortos se reemplazan por sitios con autoenergía ε_A y ε_B , respectivamente, con enlaces que dependen de la naturaleza de

los átomos vecinos, es decir, si se encuentra entre dos energías de sitio ε_A , la integral de salto entre dichas energías será t_{AA} . Este modelo en la literatura se le conoce como el problema mixto (Figura 3.6).

En la Figura 3.6 se puede observar que la integral de salto que une a las dos generaciones consecutivas cambia dependiendo de la paridad de la generación. En cambio, en la Figura 3.2 se puede ver que el enlace entre dos cadenas renormalizadas es la misma para cualquier $n > 2$, pues el último sitio tiene energía ε_B y el primer sitio tiene energía ε_A , por lo cual, la energía que los une es siempre t_{AB} , sin embargo, en el caso de Fibonacci, la autoenergía del último átomo de la generación puede ser cualquiera de las dos, aunque la inicial sea $\varepsilon_A \forall n \in \mathbb{N}$, entonces, la integral de salto en la Figura 3.6, $t_U(n)$ es

$$t_U(n) = \begin{cases} t_{AA} & \text{si } n \text{ es par} \\ t_{BB} & \text{si } n \text{ es impar.} \end{cases} \quad (3.42)$$

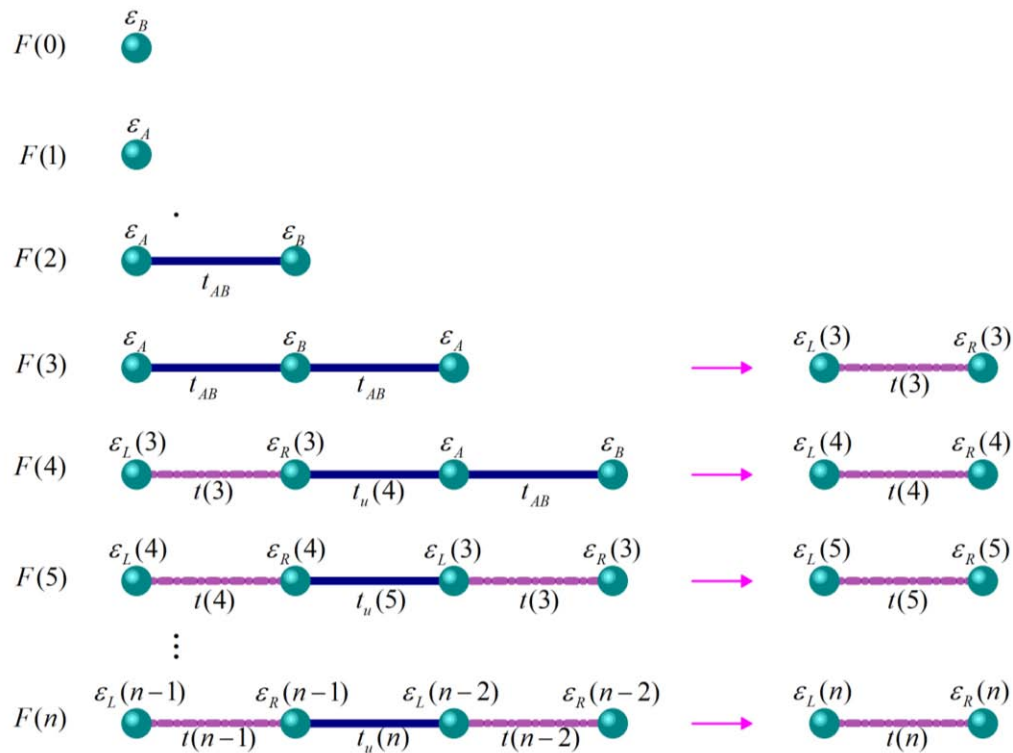


Figura 3.6 Construcción de una cadena mixta, cuyas autoenergías siguen la secuencia de Fibonacci

Aplicando el método de renormalización a la ecuación de Dyson se obtienen las relaciones que describen las autoenergías y las integrales de salto efectivas $\varepsilon_L(n)$, $\varepsilon_R(n)$ y $t(n)$, estos nuevos resultados son:

$$\varepsilon_L(n) = \varepsilon_L(n-1) + \frac{t(n-1)^2[E-\varepsilon_L(n-2)]}{[E-\varepsilon_L(n-2)][E-\varepsilon_R(n-1)]-t_U(n)^2} \quad (3.43)$$

$$\varepsilon_R(n) = \varepsilon_R(n-2) + \frac{t(n-2)^2[E-\varepsilon_R(n-1)]}{[E-\varepsilon_L(n-2)][E-\varepsilon_R(n-1)]-t_U(n)^2} \quad (3.44)$$

$$t(n) = \frac{t(n-1)t(n-2)t_U(n)}{[E-\varepsilon_L(n-2)][E-\varepsilon_R(n-1)]-t_U(n)^2}. \quad (3.45)$$

Las funciones de Green seguirán siendo las mismas de las ecuaciones (3.4)-(3.6), pero los coeficientes de renormalización toman la forma:

$$A(n) = A(n-1) + B(n-1) \left[\frac{t(n-1)}{\alpha\gamma_R} \right]^2 + C(n-1) \left[\frac{t(n-1)}{\alpha\gamma_R} \right] + A(n-2) \left[\frac{t(n-1)t_U(n)}{\alpha\gamma_R\gamma_L} \right]^2 \quad (3.46)$$

$$B(n) = B(n-2) + A(n-2) \left[\frac{t(n-2)}{\alpha\gamma_L} \right]^2 + C(n-2) \left[\frac{t(n-2)}{\alpha\gamma_L} \right] + B(n-1) \left[\frac{t(n-2)t_U(n)}{\alpha\gamma_R\gamma_L} \right]^2 \quad (3.47)$$

$$C(n) = \left[\frac{B(n-1)}{\gamma_R} + \frac{A(n-2)}{\gamma_L} \right] \frac{2t(n-1)t(n-2)t_U(n)}{\alpha^2\gamma_R\gamma_L} + [C(n-1)t(n-2) + C(n-2)t(n-1)] \frac{t_U(n)}{\alpha\gamma_R\gamma_L} \quad (3.48)$$

$$D(n) = D(n-1) + D(n-2) + B(n+1) \frac{1}{\alpha\gamma_R} + A(n-2) \frac{1}{\alpha\gamma_L} \quad (3.49)$$

donde $\gamma_R = E - \varepsilon_R(n-1)$, $\gamma_L = E - \varepsilon_L(n-2)$ y $\alpha = 1 - \frac{t_U(n)^2}{\gamma_L\gamma_R}$, con lo cual podemos calcular la densidad de estados si implementamos las siguientes condiciones iniciales:

$$A(2) = 1, B(2) = 1, C(2) = 0, D(2) = 0 \quad (3.50)$$

$$A(3) = 1 + \frac{t_{AB}^2}{(E-\varepsilon_B)^2} \quad (3.51)$$

$$B(3) = 1 + \frac{t_{AB}^2}{(E-\varepsilon_B)^2} \quad (3.52)$$

$$C(3) = \frac{2t_{AB}^2}{(E-\varepsilon_B)^2} \quad (3.53)$$

$$D(3) = \frac{1}{E - \varepsilon_B} \quad (3.54)$$

$$t(2) = t_{AB}, \quad \varepsilon_L(2) = \varepsilon_A, \quad \varepsilon_R(2) = \varepsilon_B \quad (3.55)$$

$$t(3) = \frac{t_{AB}^2}{E - \varepsilon_B} \quad (3.56)$$

$$\varepsilon_L(3) = \varepsilon_R(3) = \varepsilon_A + \frac{t_{AB}^2}{E - \varepsilon_B}. \quad (3.57)$$

Para la transmitancia, usaremos expresiones similares a las que utilizamos en el caso periódico

$$\boldsymbol{\tau}(n) = \mathbf{L}(n) \cdot \mathbf{M}(n) \cdot \mathbf{I}, \quad (3.58)$$

$$\mathbf{M}(n) = \mathbf{M}(n-2) \cdot \mathbf{U}(n) \cdot \mathbf{M}(n-1). \quad (3.59)$$

donde la principal diferencia con la expresión (3.14) es que la matriz $\mathbf{U}(n)$ ahora depende de la generación, al igual que la matriz final $\mathbf{L}(n)$. Además, en lugar de usar sólo la matriz $\mathbf{M}(n-1)$ también se requiere la $\mathbf{M}(n-2)$.

Dichas matrices dependen de la paridad de la generación de la siguiente forma:

$$\mathbf{L}(n) = \begin{cases} \begin{pmatrix} \frac{E - \varepsilon_B}{t} & -\frac{t_{AB}}{t} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \text{si } n \text{ es par} \\ \begin{pmatrix} \frac{E - \varepsilon_A}{t} & -\frac{t_{AB}}{t} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \text{si } n \text{ es impar} \end{cases} \quad (3.60)$$

$$\mathbf{U}(n) = \begin{cases} \begin{pmatrix} \frac{E - \varepsilon_A}{t_{AB}} & -\frac{t_{AA}}{t_{AB}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \text{si } n \text{ es par} \\ \begin{pmatrix} \frac{E - \varepsilon_B}{t_{AB}} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \text{si } n \text{ es impar} \end{cases}. \quad (3.61)$$

La matriz \mathbf{I} y las condiciones iniciales son

$$\mathbf{I} = \begin{pmatrix} \frac{E - \varepsilon_B}{t_{AB}} & -\frac{t}{t_{AB}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.62)$$

$$\mathbf{M}(3) = \begin{pmatrix} \frac{E - \varepsilon_B}{t_{AB}} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.63)$$

$$\mathbf{M}(4) = \begin{pmatrix} \frac{(E - \varepsilon_A)^2(E - \varepsilon_B)}{t_{AB}^2 t_{AA}} - \frac{t_{AA}(E - \varepsilon_B)}{t_{AB}^2} - \frac{E - \varepsilon_B}{t_{AA}} & \frac{t_{AA}}{t_{AB}} - \frac{(E - \varepsilon_A)^2}{t_{AB} t_{AA}} \\ \frac{(E - \varepsilon_A)(E - \varepsilon_B)}{t_{AB} t_{AA}} - \frac{t_{AB}}{t_{AA}} & -\frac{(E - \varepsilon_A)}{t_{AA}} \end{pmatrix}. \quad (3.64)$$

Los coeficientes renormalizados de la matriz $\mathbf{M}(n)$ son:

$$M_{11}(n) = M_{11}(n-1)[U_{11}(n) * M_{11}(n-2) + U_{12}(n) * M_{21}(n-2)] \\ + M_{12}(n-1)[U_{21}(n) * M_{11}(n-2) + U_{22}(n) * M_{21}(n-2)], \quad (3.65)$$

$$M_{21}(n) = M_{21}(n-1)[U_{11}(n) * M_{11}(n-2) + U_{12}(n) * M_{21}(n-2)] \\ + M_{22}(n-1)[U_{21}(n) * M_{11}(n-2) + U_{22}(n) * M_{21}(n-2)], \quad (3.66)$$

$$M_{12}(n) = M_{11}(n-1)[U_{11}(n) * M_{12}(n-2) + U_{12}(n) * M_{22}(n-2)] \\ + M_{12}(n-1)[U_{21}(n) * M_{12}(n-2) + U_{22}(n) * M_{22}(n-2)], \quad (3.67)$$

$$M_{22}(n) = M_{21}(n-1)[U_{11}(n) * M_{12}(n-2) + U_{12}(n) * M_{22}(n-2)] \\ + M_{22}(n-1)[U_{21}(n) * M_{12}(n-2) + U_{22}(n) * M_{22}(n-2)]. \quad (3.68)$$

entonces ya tenemos la matriz $\boldsymbol{\tau}(n)$ y así podemos calcular la transmitancia con la ecuación (1.70).

Por otro lado, los resultados para la cadena cuyas integrales de salto siguen la secuencia Fibonacci son análogos al problema de sitios, esto se puede ver esquemáticamente en la Figura 3.7, en lugar de cambiar los segmentos largos y cortos por sitios, los cambiamos por enlaces t_A y t_B , mientras que todos los sitios serán ε_0 .

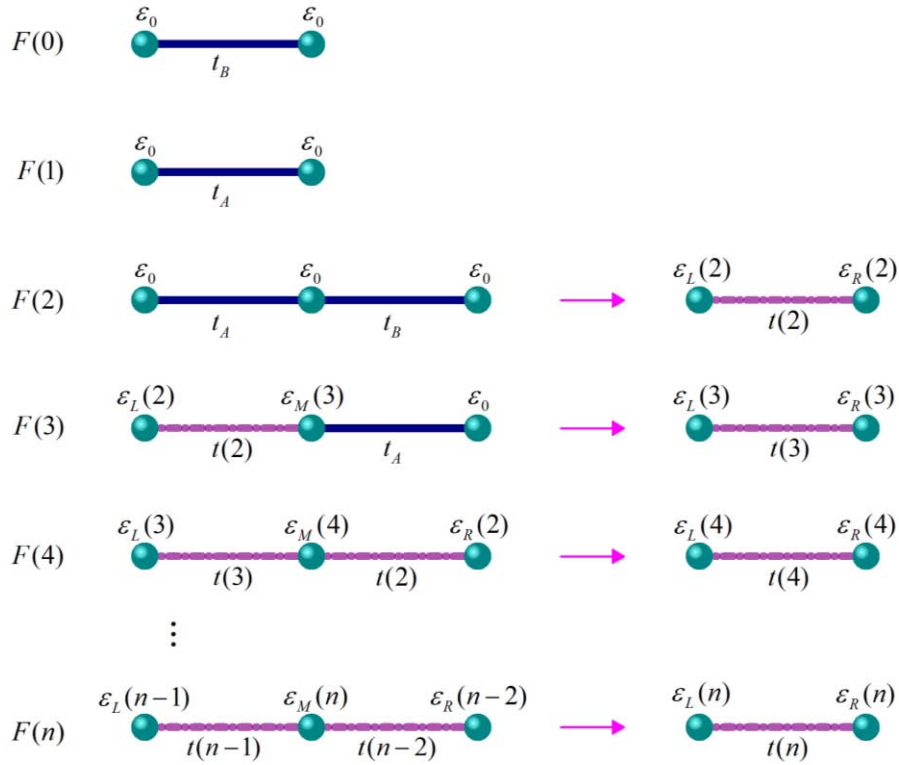


Figura 3.7 Proceso de renormalización para el problema de enlaces.

En esta cadena, los valores de las autoenergías e integrales de salto efectivas son:

$$\varepsilon_M(n) = \varepsilon_L(n-2) + \varepsilon_R(n-1) \quad (3.69)$$

$$t(n) = \frac{t(n-1)t(n-2)}{E - \varepsilon_M(n)} \quad (3.70)$$

$$\varepsilon_L(n) = \varepsilon_L(n-1) + \frac{t(n-1)^2}{E - \varepsilon_M(n)} \quad (3.71)$$

$$\varepsilon_R(n) = \varepsilon_R(n-2) + \frac{t(n-2)^2}{E - \varepsilon_M(n)}, \quad (3.72)$$

los coeficientes de renormalización para la densidad de estados toman la forma

$$A(n) = A(n-1) + [B(n-1) + A(n-2) - 1] \frac{t(n-1)^2}{[E - \varepsilon_M(n)]^2} + C(n-1) \frac{t(n-1)}{E - \varepsilon_M(n)} \quad (3.73)$$

$$B(n) = B(n-2) + [B(n-1) + A(n-2) - 1] \frac{t(n-2)^2}{[E - \varepsilon_M(n)]^2} + C(n-2) \frac{t(n-2)}{E - \varepsilon_M(n)} \quad (3.74)$$

$$C(n) = 2[B(n-1) + A(n-2) - 1] \frac{t(n-2)t(n-1)}{[E - \varepsilon_M(n)]^2} + C(n-1) \frac{t(n-2)}{E - \varepsilon_M(n)} + C(n-2) \frac{t(n-1)}{E - \varepsilon_M(n)} \quad (3.75)$$

$$D(n) = D(n-1) + D(n-2) + [B(n-1) + A(n-2) - 1] \frac{1}{E - \varepsilon_M(n)} \quad (3.76)$$

y sus condiciones iniciales

$$A(1) = 1, B(1) = 1, C(1) = 0, D(1) = 0 \quad (3.77)$$

$$\varepsilon_L(1) = \varepsilon_0, \varepsilon_R(1) = \varepsilon_0, t(1) = t_A \quad (3.78)$$

$$A(2) = 1 + \frac{t_A^2}{(E - \varepsilon_0)^2} \quad (3.79)$$

$$B(2) = 1 + \frac{t_B^2}{(E - \varepsilon_0)^2} \quad (3.80)$$

$$C(2) = \frac{2t_A t_B}{(E - \varepsilon_0)^2} \quad (3.81)$$

$$D(2) = \frac{1}{E - \varepsilon_0} \quad (3.82)$$

$$\varepsilon_L(2) = \varepsilon_0 + \frac{t_A^2}{E - \varepsilon_0} \quad (3.83)$$

$$\varepsilon_R(2) = \varepsilon_0 + \frac{t_B^2}{E - \varepsilon_0} \quad (3.84)$$

$$t(2) = \frac{t_A t_B}{E - \varepsilon_0} \quad (3.85)$$

Para la transmitancia, usaremos las expresiones de las ecuaciones (3.58) y (1.70), partiendo de las siguientes condiciones iniciales

$$\mathbf{M}(2) = \begin{pmatrix} \frac{E - \varepsilon_0}{t_B} & -\frac{t_A}{t_B} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.86)$$

$$\mathbf{M}(3) = \begin{pmatrix} \frac{(E - \varepsilon_0)^2}{t_A t_B} - \frac{t_B}{t_A} & -\frac{E - \varepsilon_0}{t_B} \\ \frac{E - \varepsilon_0}{t_B} & -\frac{t_A}{t_B} \end{pmatrix} \quad (3.87)$$

y de

$$\mathbf{U}(n) = \begin{cases} \begin{pmatrix} \frac{E - \varepsilon_0}{t_A} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \text{si } n \text{ es par} \\ \begin{pmatrix} \frac{E - \varepsilon_0}{t_A} & -\frac{t_B}{t_A} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \text{si } n \text{ es impar} \end{cases} \quad (3.88)$$

$$\mathbf{I} = \begin{pmatrix} \frac{E - \varepsilon_0}{t_A} & -t \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.89)$$

$$\mathbf{L}(n) = \begin{cases} \begin{pmatrix} \frac{E-\varepsilon_0}{t} & -\frac{t_B}{t} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \text{si } n \text{ es par} \\ \begin{pmatrix} \frac{E-\varepsilon_0}{t} & -\frac{t_A}{t} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \text{si } n \text{ es impar} \end{cases} . \quad (3.90)$$

Sustituyendo los términos anteriores en las expresiones de las ecuaciones (3.58) y (1.70) podemos analizar la transmitancia para el problema de enlaces, que se presenta en la sección de resultados.

3.3 Nanoalambres segmentados

Los nanoalambres se han vuelto atractivos en muchos sectores por su composición, tamaño y forma, algunos de estos sectores son la nanoelectrónica, optoelectrónica, catálisis y administración de medicamentos. Los nanoalambres segmentados pueden considerarse como una mejora a los nanoalambres de una sola fase o de un solo componente, pues la combinación de materiales con distinta nanoarquitectura conduce a propiedades únicas [Jin Zhang, 2016].

Los nanoalambres magnéticos han atraído gran atención debido a su uso en almacenamiento de datos y circuitos lógicos magnéticos. Estos nanoalambres pueden fabricarse alternando segmentos ferromagnéticos y segmentos no magnéticos [Jin Zhang, 2016].

El método más empleado para sintetizar nanoalambres es por deposición electroquímica en alúmina porosa. Estas plantillas ofrecen gran flexibilidad en términos de dimensiones para los nanoalambres, pues los poros se pueden formar de distintas longitudes y diámetros. En este caso, la segmentación se obtiene por deposición secuencial usando distintos electrolitos o en un solo baño alternando entre dos densidades de corriente (o potenciales electroquímicos) [Özkale, 2015].

Una de las principales dificultades es lograr obtener segmentos donde las partes ferromagnéticas y no magnéticas sean de composición pura, es decir, la presencia del material no magnético debe minimizarse en la capa ferromagnética y viceversa. Para obtener esto, se busca tener una diferencia lo suficientemente grande entre los potenciales electroquímicos que corresponden a cada una de las partes. La Figura 3.8 muestra el proceso de deposición en alúmina, donde primero se tiene el anodizado (para aumentar la capa natural de óxido), luego un tratamiento químico

ensancha los poros y finalmente los segmentos de nanoalambre se colocan en las plantillas alternando los potenciales de electrodeposición de los dos materiales.

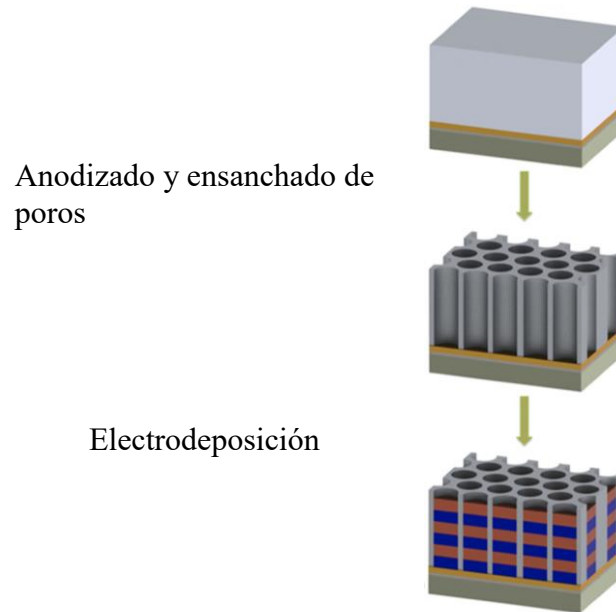


Figura 3.8 Esquema que representa la fabricación de nanoalambres segmentados [Özkale, 2015].

En la Figura 3.9 se puede ver el caso concreto de nanoalambres segmentados, con segmentos de FeCo y Cu, que tienen potenciales de deposición $-1.8V$ y $-0.7V$ respectivamente.

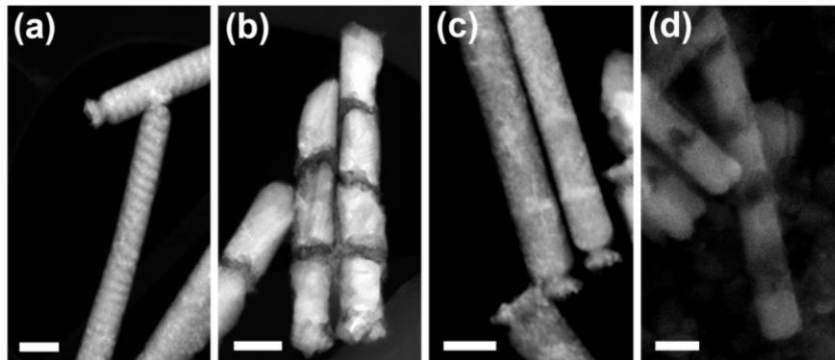


Figura 3.9 Nanoalambres segmentados con distintos tiempos de deposición (a) FeCo (0.5s), Cu (15s); (b) FeCo (0.5s), Cu (120s); (c) FeCo (3s), Cu (15s), and (d) FeCo (4s), Cu (120s) [Özkale, 2015].

Una vez resuelto el problema del sistema con segmentos, es posible abordar sistemas segmentados con simetría de espejo, Figura 3.10.

Estos alambres segmentados nos sirven tanto para modelar cadenas periódicas, como cuasiperiódicas, ya sea dentro del problema de enlaces o mixto. El análisis de

la densidad de estados y la transmitancia que se presentará más adelante se desarrolló para sistemas segmentados con y sin simetría de espejo.

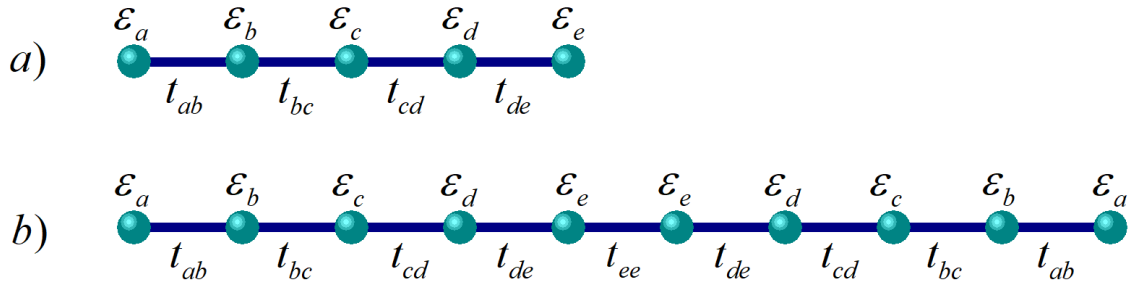


Figura 3.10 (a) Cadena original. (b) Cadena con simetría de espejo.

Para abordar el problema con simetría de espejo seguimos la misma filosofía del método de renormalización en espacio real para obtener los coeficientes tanto de densidad de estados como de transmitancia y así poder analizar los efectos en el espectro de conductividad eléctrica.

CAPÍTULO IV: Conductividad eléctrica

En este capítulo se presenta un análisis de las propiedades electrónicas de cadenas segmentadas con y sin simetría de espejo, a través de los coeficientes obtenidos por el método de renormalización en espacio real para la matriz de transferencia en el caso de la conductividad eléctrica y para la función de Green en la densidad de estados. El objetivo de este trabajo es estudiar los efectos en la conductividad que producen la cuasiperiodicidad del sistema, las simetrías de espejo, así como las impurezas agregadas a cadenas de tamaño macroscópico del orden de 10^8 átomos sin mayor aproximación que el Hamiltoniano de amarre fuerte.

4.1 Sistemas segmentados periódicos y aperiódicos

En esta sección se presenta la conductividad eléctrica DC para cadenas segmentadas. La Figura 4.1 muestra el espectro de la transmitancia eléctrica en función del potencial químico (μ) para una cadena segmentada donde el ordenamiento de sus átomos sigue una secuencia (a) periódica diatómica, (b) Fibonacci de enlaces, (c) Fibonacci de sitios y (d) Fibonacci mixto. El número de átomos en cada segmento es 3 si el problema de enlaces y 2 si es mixto, las integrales de salto para el problema de enlaces son $t_B=t$ y $t_A=0.8t$, con autoenergías nulas ($\varepsilon_0=0$) y el número de átomos en cada cadena es 536,870,912 para el caso diatómico y 126,491,973 para el Fibonacci de enlaces, estos números se obtuvieron al multiplicar el número de elementos en cada tipo de segmentos por la cantidad de veces que se repite ese segmento en la cadena y luego sumarlos. En cambio, para el problema de sitios las integrales de salto son $t_A=t_B=t$ y los valores de las autoenergías están dadas por $\varepsilon_A=-\varepsilon_B=-0.5t$, además el número de átomos en la cadena es 126,491,972. Por otro lado, en el problema mixto sólo varían las integrales de salto dadas por $t_{AB}=t$, $t_{AA}=0.8t$ y $t_{BB}=0.7t$, mientras que las autoenergías y el número de átomos son iguales que en el problema de sitios.

Obsérvese en la Figura 4.1(a) tres bandas de conducción con espectros oscilantes y dos bandas de energía prohibida (gap), debido al número de átomos por segmento

en la cadena diatómica. Además, cuando el ordenamiento en la cadena sigue una secuencia de Fibonacci para el problema de enlaces, su espectro de transmitancia presenta múltiples gaps y estados de alta conductividad alrededor de $\mu = 0$. Al ser bipartitas las dos cadenas anteriores, los espectros de transmitancia son simétricos con respecto al potencial químico igual a cero.

En la Figura 4.1 (c) y (d) se observa un espectro antisimétrico y tiene gaps más anchos en comparación con los dos espectros anteriores, además de tener menos estados de alta conductividad.

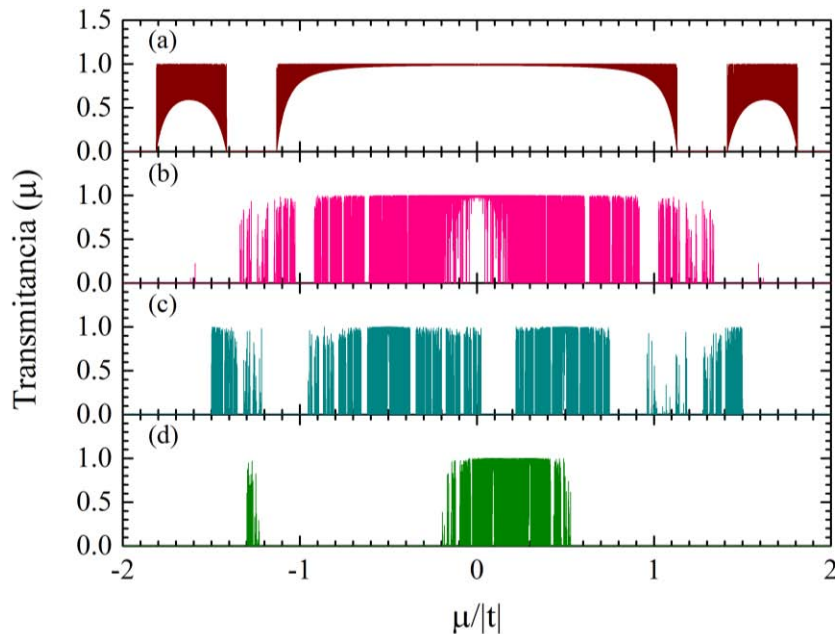


Figura 4.1 Transmitancia eléctrica versus potencial químico (μ) para cadenas segmentadas cuyo ordenamiento atómico sigue una secuencia (a) periódica diatómica, (b) Fibonacci de enlaces, (c) Fibonacci de sitios y (d) Fibonacci mixto.

La Figura 4.2 muestra los mismos casos que la Figura 4.1, pero con segmentos de 16 átomos para el problema de enlaces y 15 para el de sitios. Además, tiene los mismos parámetros del Hamiltoniano que la figura anterior y el número de átomos en cada cadena es (a) periódico diatómico 536,870,912, (b) Fibonacci de enlaces 119,442,817, Fibonacci (c) sitios y (d) mixto 119,442,816. Nótese el aumento en el número de gaps en la Figura 4.2(a) en comparación con la 4.1(a), esto se debe al incremento en el número de átomos por segmento, en consecuencia, las bandas de conducción son más reducidas. Contrario a lo que pasa en el espectro de la Figura 4.2(b), donde se tiene un mayor ancho de banda con respecto al de 4.1(b), generado por el tamaño del segmento. Además, tiene picos de conducción más alta en los

extremos de la banda. Para el problema de sitios y mixto Figuras 4.2(c) y 4.2(d), también presenta un mayor número de picos de conducción en comparación y sus anchos de banda son más drásticamente afectados que en las Figuras 4.1(c) y 4.1(d). Estos efectos se generan ya que al tener segmentos más grandes el sistema es menos cuasiperiódico.

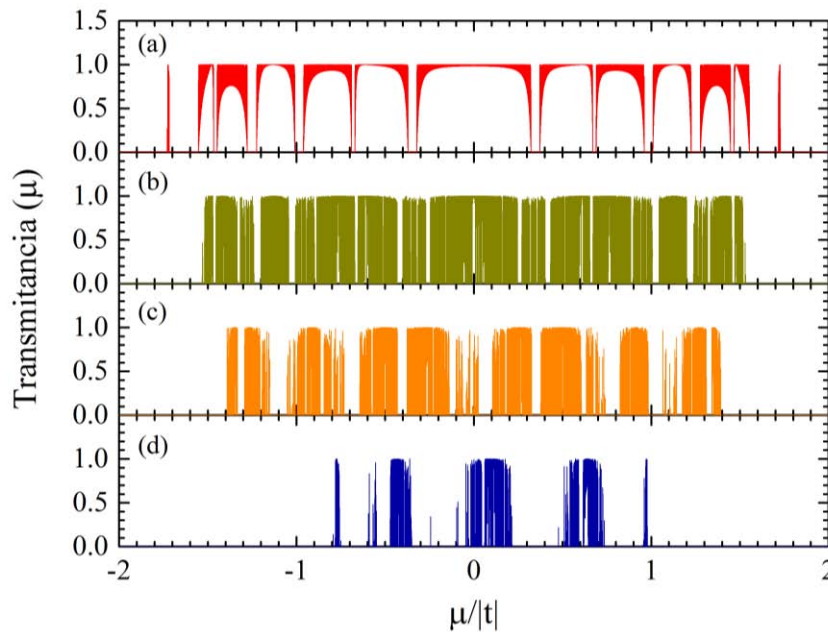


Figura 4.2 Transmitancia eléctrica versus el potencial químico (μ) de cadenas por segmentos generación 4 (a) periódica diatómicas (b) Fibonacci de enlaces (c) Fibonacci de sitios y (d) Fibonacci mixto.

4.2 Sistemas segmentados con espejo periódico y aperiódicos

Analizamos el efecto de la simetría de espejo en la transmitancia eléctrica en cadenas periódicas diatómicas y cuasiperiódicas segmentadas, la representación esquemática de estos sistemas se muestra en la Figura 3.10. La Figura 4.3 muestra el espectro de transmitancia versus el potencial químico para cadenas con segmentos de 3 átomos (a) periódica diatómica, (b) Fibonacci de enlaces y segmentos de 2 átomos (c) Fibonacci de sitios y (d) Fibonacci mixto. El número de sitios en las cadenas (a) y (b) es 536,870,912 y 156,352,677 respectivamente, mientras que en (c) y (d) es 156,352,676, las autoenergías y las integrales de salto utilizadas son las mismas que en la Figura 4.1. Obsérvese que, para las cadenas periódicas, el espectro

de conductividad presenta una mayor oscilación en comparación con el de la Figura 4.1(a) y en los demás espectros las bandas de conducción tienen un mayor número de picos con una altura muy cercana a uno. Se logró determinar analíticamente un estado de transmisión balística (estado transparente) para potencial químico es cero, no importando el orden de los segmentos y el valor de las integrales de salto, esta demostración se encuentra en la siguiente sección.

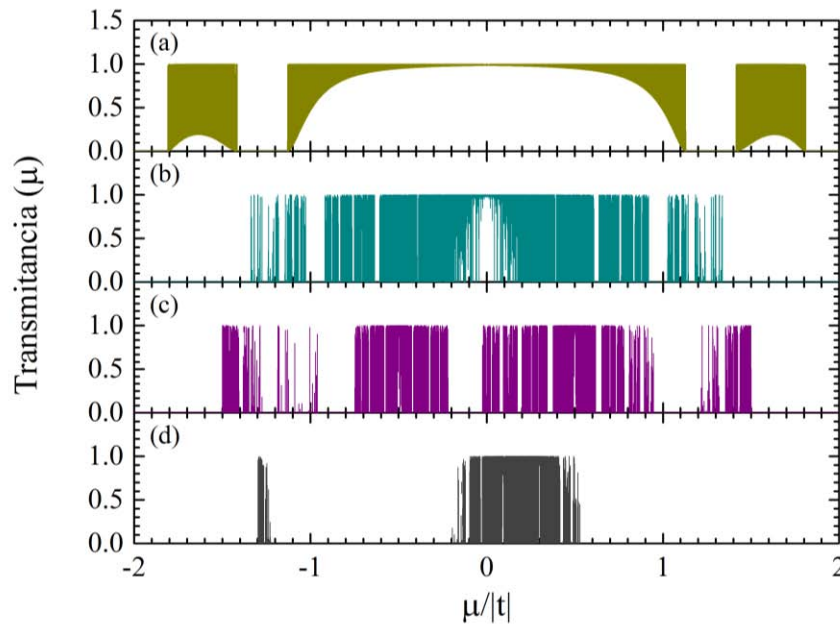


Figura 4.3 Transmitancia eléctrica en función del potencial químico (μ) para de cadenas con simetría de espejo y segmentos de 2 átomos (a) periódica diatómica, (b) Fibonacci de enlaces y segmentos de 3 átomos (c) Fibonacci de sitios y (d) Fibonacci mixto.

La Figura 4.4 muestra el espectro de transmitancia eléctrica versus el potencial químico, para cadenas con el mismo orden de sus átomos y parámetros del Hamiltoniano que en la Figura anterior. El cambio se encuentra en el número de átomos de cada segmento que compone a la cadena. Para el caso del orden periódico diatómico y Fibonacci de enlaces el segmento lo constituyen 16 átomos, en cambio, para el de Fibonacci sitios y mixto es 15 átomos. El tamaño de cada cadena es (a) 536,870,912, (b) 238,885,633, (c) 238,885,632 y (d) 238,885,632. Nótese que el espectro de la Figura 4.4 (d) tiene un mayor número de bandas de conducción distribuidas en el ancho de banda. Además, se sigue conservando la simetría de los espectros y un mayor número de picos cuasi-balísticos en cada banda de conducción en las Figuras 4.4 (a) y 4.4 (b). También, se puede ver que los gaps en la Figura 4.4

(c) reducen su tamaño. Todo lo anterior se debe al aumento de átomos que conforman cada segmento.

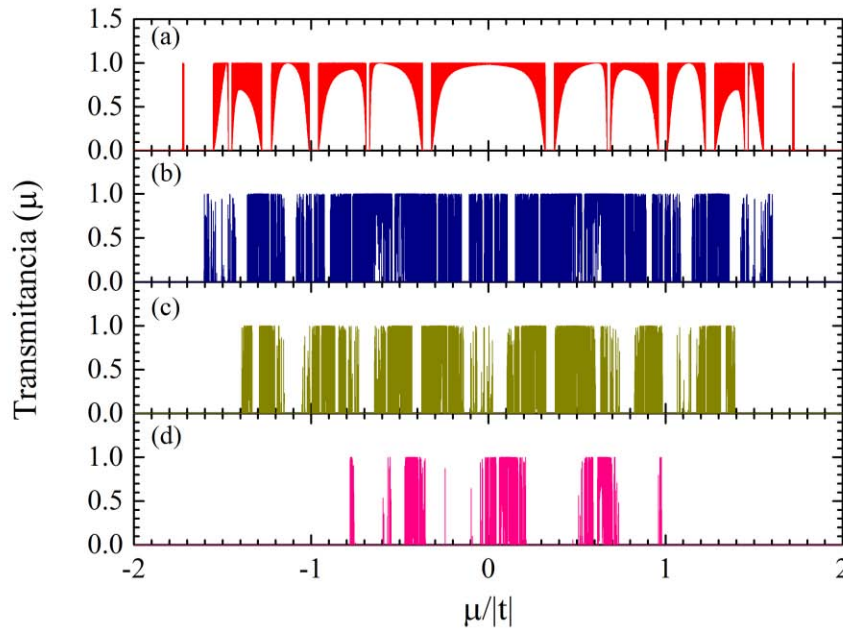


Figura 4.4 Transmitancia eléctrica versus el potencial químico (μ) para cadenas con simetría de espejo y segmentos de 16 átomos (a) periódica, (b) Fibonacci de enlaces y segmentos de 15 átomos (c) Fibonacci de sitios y (d) Fibonacci mixto.

4.3 Sistemas segmentados con espejo e impureza central

El último sistema por analizar es aquel con una impureza central y simetría de espejo. Por lo que se conserva el mismo tamaño de las cadenas de la sección 4.2, aumentando solo los átomos del segmento central que definen a la impureza. Los parámetros del Hamiltoniano de la impureza ya sea de enlaces, sitios o mixto son $t_C = 0.5t$, $\varepsilon_C = 0.3t$, $t_{CC} = 0.5t$, $t_{AC} = 0.4t$ y $t_{BC} = 0.4t$.

En la Figura 4.5 se muestra la transmitancia eléctrica en función del potencial químico (μ) para cadenas con orden en sus átomos (a) periódica diatómica, (b) Fibonacci de enlaces, el segmento de impureza central fue de enlaces para estos casos, (c) Fibonacci de sitios y (d) Fibonacci mixto. El tamaño de la impureza para (a) y (b) fue de 3 átomos, en cambio para (c) y (d) fue de 2 átomos. Obsérvese en la Figura 4.5(a) que las bandas prohibidas se mantienen en las mismas energías, pero la transmitancia en general decae, ya que en el caso sin impureza el espectro era casi transparente [Figura 4.3(a)] en cada banda de conducción. En el caso de 4.5(b) vemos

que los tamaños de las bandas de conducción se reducen considerablemente en comparación con las de Figura 4.3(b). En cambio, en la Figura 4.5(c) el efecto de la impureza es menos perceptible en el espectro de conducción. En el caso de la cadena con ordenamiento de Fibonacci mixto Figura 4.5(d) se conservan las bandas de conducción cerca de cero y desaparece la banda de conducción que se encontraba cerca de $\mu = -1.25|t|$.

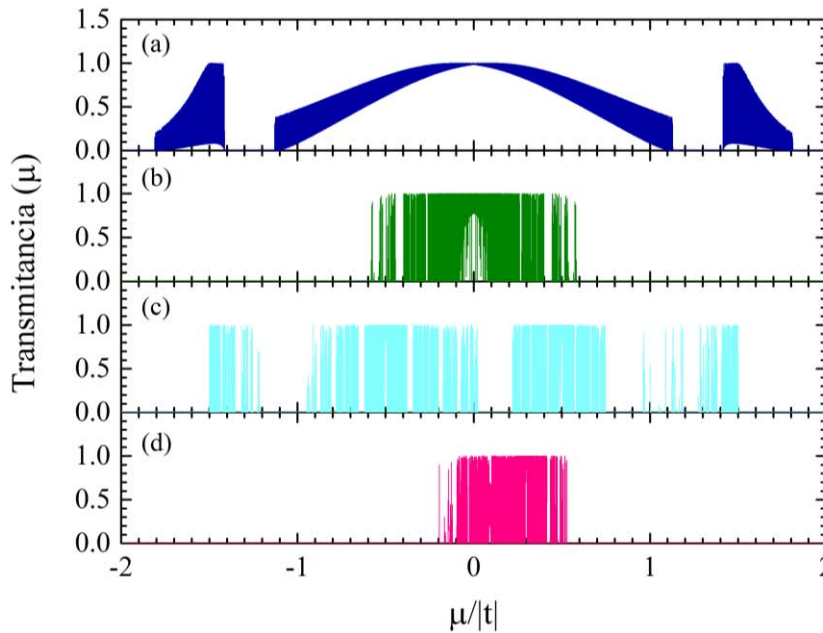


Figura 4.5 Transmitancia de cadenas con impureza central generación 2 (a) periódica (b) Fibonacci de enlaces (c) Fibonacci de sitios y (d) Fibonacci mixto.

Considerando un aumento en el número de átomos de los segmentos que forman las cadenas y sus impurezas en la Figura 4.6, analizamos la conductividad eléctrica para cadenas con segmentos de 16 átomos en caso de (a) periódica diatómica, (b) Fibonacci enlaces, y con segmentos de 15 átomos (c) Fibonacci de sitios y (d) Fibonacci mixto. Nótese en el espectro de transmitancia de la Figura 4.6(a) como el tamaño de las bandas de conducción decrecen y la mayoría de los picos ya no tienen conducción balística. Para cuando los átomos en las cadenas siguen una secuencia de Fibonacci de enlaces [Figura 4.6(b)], el espectro de transmitancia continúa siendo simétrico con respecto a $\mu = 0$, debido a que el segmento de impureza tiene solo diferentes integrales de salto, por lo que la red sigue siendo bipartita y tiene más separadas las bandas de conducción.

Para el problema de sitios cuando tiene una impureza, el espectro de transmitancia eléctrica se observa que se reduce el tamaño de los gaps y que tiene un mayor número

picos de conducción cercanos al balístico [Figura 4.6(c)]. En el caso del problema mixto con segmento de impureza central, en el espectro de conductividad se puede observar que aumenta el ancho de los gaps, por lo que se distribuyen más las bandas de conducción en vez de tenerlas concentradas cerca de $\mu = 0$ [Figura 4.3(d)].

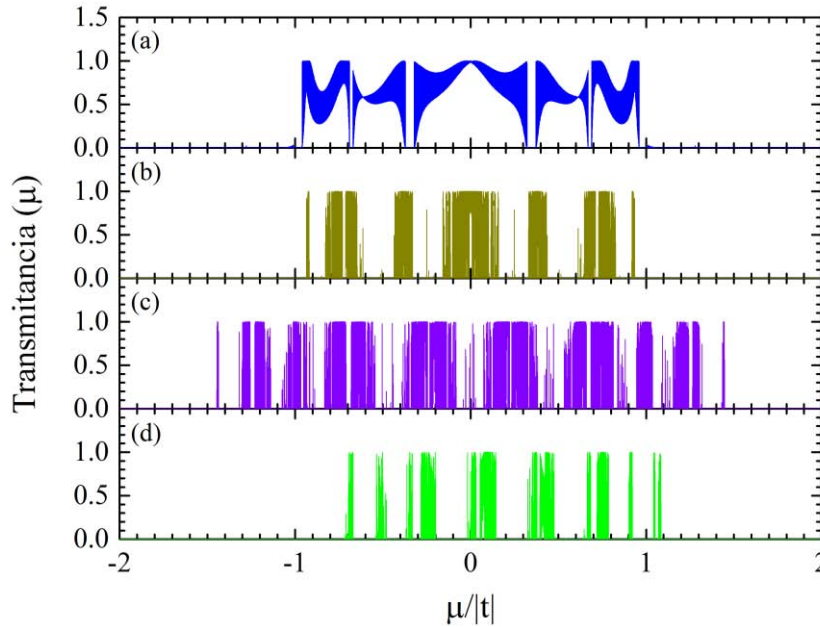


Figura 4.6 Transmitancia de cadenas con impureza central generación 5 (a) periódica (b) Fibonacci de enlaces (c) Fibonacci de sitios y (d) Fibonacci mixto.

4.4 Estados transparentes

El análisis de la transmitancia eléctrica en nanoalambres segmentados con ordenamientos periódicos diatómicos y tipo Fibonacci de enlaces, sitios y mixtos fue llevado a cabo mediante la Fórmula de Landauer Ec. (1.70) revelando estados de alta conductividad en las diferentes minibandas. En particular, para un potencial químico cero ($\mu = 0$) encontramos un estado balístico (coeficiente de transmisión uno) en los nanoalambres segmentados tipo Fibonacci de enlaces cada seis generaciones y en todas las generaciones en Fibonacci de enlaces con espejo.

Con el objetivo de demostrar analíticamente la existencia de dichos estados balísticos evaluamos la ecuación de Landauer en $\mu = 0$, siendo esta

$$T(\mu = 0) = \frac{4}{(\tau_{21} - \tau_{12})^2 + (\tau_{11} + \tau_{22})^2}, \quad (4.1)$$

donde τ_{ij} son los elementos de la matriz de transferencia total del sistema. A continuación, presentamos las matrices de transferencia para cualquier generación de los sistemas estudiados, así como, su respectiva transmitancia.

En el caso del problema de Fibonacci de enlaces con simetría de espejo, las matrices de transferencia en función de la generación n , se dividen en cuatro casos que dependen del número de sitios en cada segmento (N_A y N_B). Cuando N_A y N_B son impares, tenemos

$$\tau = \begin{pmatrix} 0 & [Q(M+2) - Q(M+1)]2^{[Q(M)][Q(M)-2]} \\ [Q(M+1) - Q(M+2)]2^{[Q(M)][Q(M)-2]} & 0 \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

por otro lado, si N_A es par y N_B es impar,

$$\tau = \begin{pmatrix} 0 & [Q(M) - Q(M+2)]2^{\frac{[1-Q(M)][Q(M)-2]}{2}} \\ [Q(M+2) - Q(M)]2^{\frac{[1-Q(M)][Q(M)-2]}{2}} & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.3)$$

si N_A es impar y N_B es par

$$\tau = \begin{pmatrix} 0 & [Q(M+1) - Q(M)]2^{\frac{[Q(M)][Q(M)-1]}{2}} \\ [Q(M) - Q(M+1)]2^{\frac{[Q(M)][Q(M)-1]}{2}} & 0 \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

y si ambos son pares,

$$\tau = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.5)$$

donde $Q(M) = M \bmod 3 \in [0,1,2]$.

Al sustituir los elementos de matriz de las ecuaciones (4.2)-(4.5) en (4.1) la transmitancia eléctrica en todos los casos es $T(\mu=0) = 1$, lo que significa que es un estado balístico.

Para el problema de Fibonacci de enlaces, las matrices de transferencia son:

N_A y N_B son impares

$$\tau_{11} = 0 \quad (4.6)$$

$$\tau_{12} = [P(2N + 4) - P(2N + 2)]2^{P(2N)[P(2N)-2]} \quad (4.7)$$

$$\tau_{21} = [P(2N + 2) - P(2N + 4)]2^{P(2N)[P(2N)-2]} \quad (4.8)$$

$$\tau_{22} = 0 \quad (4.9)$$

N_A es par y N_B es impar

$$\tau_{11} = \{\Theta(N) + \Theta(N + 1)[P(N + 1) - 1]\} \gamma \quad (4.10)$$

$$\tau_{12} = \{\Theta(N + 1)P(N + 1)[P(N + 1) - 2]\} \quad (4.11)$$

$$\tau_{21} = \{\Theta(N + 1)P(N + 1)[P(N + 1) - 2]\} \quad (4.12)$$

$$\tau_{22} = \{\Theta(N) + \Theta(N + 1)[P(N + 1) - 1]\} \gamma^{-1} \quad (4.13)$$

N_A es impar y N_B es par

$$\tau_{11} = \Theta(N)[1 - P(N)] - \Theta(N + 1) \frac{P(N + 1)}{P(N + 5) + 1} \quad (4.14)$$

$$\tau_{12} = \Theta(N)P(N)[P(N) - 2] + \frac{\Theta(N + 1)}{2} [P(N + 1) - 1][P(N + 1) - 2] \quad (4.15)$$

$$\tau_{21} = \Theta(N)P(N)[P(N) - 2] - \Theta(N + 1) \frac{[P(N + 1) - 1][P(N + 1) - 2]}{2} \quad (4.16)$$

$$\tau_{22} = \Theta(N)[1 - P(N)] - \Theta(N + 1) \frac{P(N + 1)}{P(N + 5) + 1} \quad (4.17)$$

N_A y N_B son pares

$$\tau_{11} = \Theta(N) \frac{P(N)\gamma^{2-P(N)}}{2^{P(N)-1}} + \frac{\Theta(N + 1)[1 - P(N + 5)]}{\gamma^{-[P(N+1)+1]}} \quad (4.18)$$

$$\tau_{12} = \Theta(N) \frac{[P(N) - 1][P(N) - 2]}{2\gamma} - \frac{\Theta(N + 1)}{2\gamma^{-1}} P(N + 1)[P(N + 1) - 1] \quad (4.19)$$

$$\tau_{21} = \Theta(N) \frac{[1 - P(N)][P(N) - 2]}{2\gamma^{-1}} + \Theta(N + 1) \frac{P(N + 1)[P(N + 1) - 1]}{2\gamma} \quad (4.20)$$

$$\tau_{22} = \frac{\Theta(N)[P(N + 2) - 1]}{\gamma^{1-P(N-2)}} + \frac{\Theta(N + 1)[1 - P(N + 5)]}{\gamma^{P(N+1)+1}} \quad (4.21)$$

donde $\Theta(N) = [1 + (-1)^N]/2$, $P(N) = N/2 \pmod{3} \in [0, 1, 2]$ y $\gamma = t_A/t_B$.

La fórmula analítica para transmitancia eléctrica en $\mu = 0$ para la cadena de Fibonacci de enlaces simple al sustituir las expresiones anteriores son:

N_A y N_B son impares

$$T(\mu = 0) = \frac{2^{2P(2N)[2-P(2N)]}}{[P(2N+2) - P(2N+4)]^2}, \quad (4.22)$$

N_A es par y N_B es impar

$$T(\mu = 0) = \left\{ \frac{P(N)[P(N)-2]}{\Theta(N)^{-1}} - \Theta(N+1)[P(N+1)-1][P(N+1)-2] \right\}^2 + \frac{[\Theta(N) + \Theta(N+1)(P(N+1)-1)]^2}{4(\gamma^{-1} + \gamma)^{-2}} \quad (4.23)$$

N_A es impar y N_B es par

$$T(\mu = 0) = \left\{ \frac{\{\Theta(N+1)[P(N+1)-1][P(N+1)-2]\}^2}{4} + \left\{ \Theta(N)[1-P(N)] - \Theta(N+1) \frac{P(N+1)}{P(N+5)+1} \right\}^2 \right\}^{-1} \quad (4.24)$$

N_A y N_B son pares

$$T(\mu = 0) = 4 \left[\left\{ \Theta(N) \left[\frac{P(N)}{\gamma^{P(N)-3} 2^{P(N)-2}} + \frac{[P(N+2)-1]}{\gamma^{2-P(N-2)}} \right] + \frac{\Theta(N+1)[1-P(N+5)]}{(\gamma^{P(N+1)} + \gamma^{-P(N+1)})^{-1}} \right\}^2 + \frac{\{\Theta(N)[1-P(N)][P(N)-2] - \Theta(N+1)P(N+1)[P(N+1)-1]\}^2}{4(\gamma^{-1} - \gamma)^{-2}} \right]^{-1}. \quad (4.25)$$

La Figura 4.7 nos muestra una amplificación de la transmitancia eléctrica versus el potencial químico para cadenas segmentadas sencillas [(a) y (b)] y con simetría de espejo [(c) y (d)], los parámetros del Hamiltoniano fueron los mismos que los de las Figuras 4.1(b) y 4.3(b), respectivamente. El tamaño de los átomos en cada segmento fue de (a) 3, (b) 6, (c) 3 y (d) 6. Obsérvese que, en el problema de enlaces simple, tal como se demostró en las ecuaciones de transmitancia analítica, hay generaciones que tienen estados balísticos alrededor de cero [Figura 4.7(a)] y estados no balísticos [figura 4.7(b)], ya que una de cada seis generaciones presenta coeficiente de transmisión igual a uno.

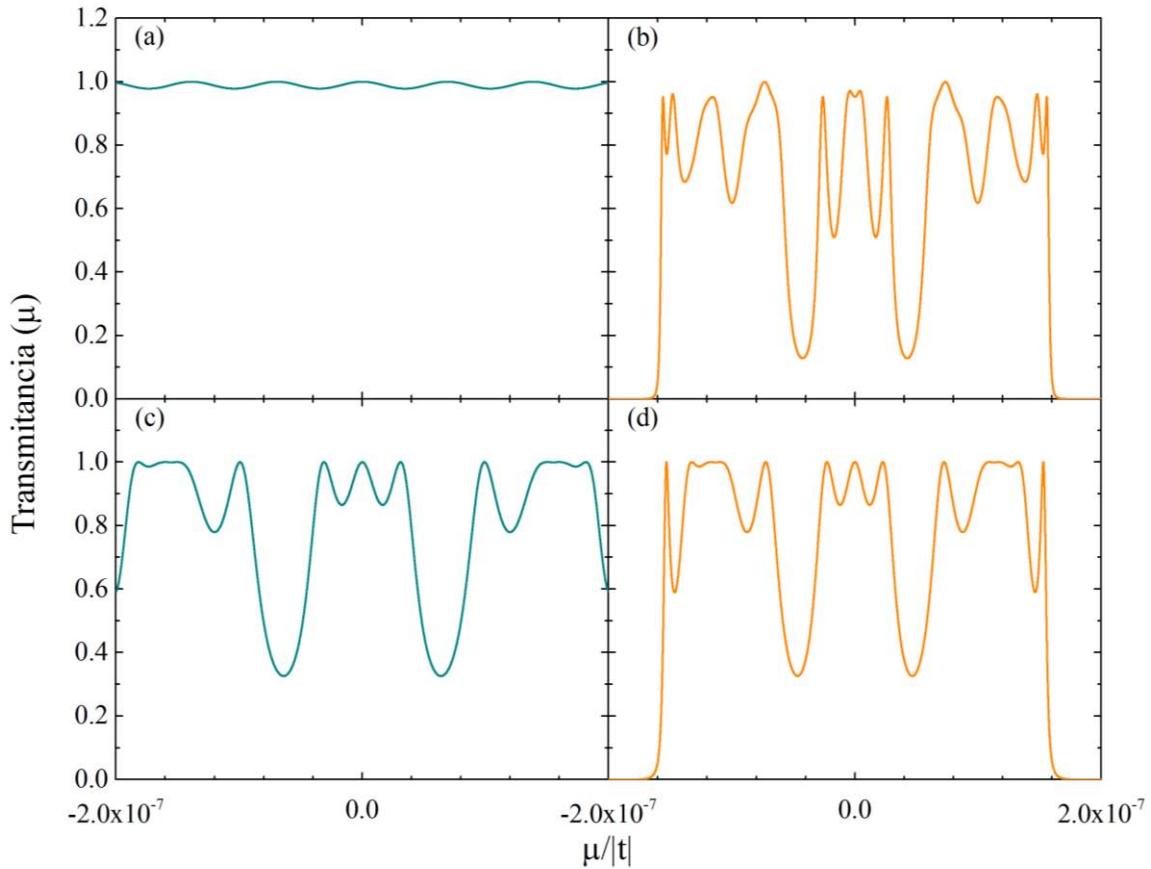


Figura 4.7 Espectro de transmitancia amplificado alrededor del potencial químico igual a cero, para cadenas segmentadas de Fibonacci de enlaces [(a) generación 2 y (b) generación 4 en cada segmento] y Fibonacci de enlaces con simetría de espejo [(c) espejo generación 2 y (d) espejo generación 4 en cada segmento], los parámetros del Hamiltoniano son los mismos que las Figuras 4.1(b) y 4.3(b), respectivamente.

Nótese que, para el caso de cadenas segmentadas de Fibonacci de enlaces con simetría de espejo, todas las generaciones presentan estados de conducción balística en $\mu=0$ [Figura 4.7(c) y 4.7(d)]. Las demostraciones analíticas de este caso demuestran esta observación.

4.5 Promedios espectrales de transmitancia eléctrica

Después de analizar la transmitancia en las secciones 4.1, 4.2 y 4.3, surgió una pregunta, cómo afecta el tamaño del segmento a la transmitancia en el panorama general. Para responder la cuestión se calculó el promedio espectral de transmitancias. Este promedio está ponderado por la densidad de estados de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$\langle T \rangle = \int_{-2|t|}^{2|t|} T(E) \text{DOS}(E) dE, \quad (4.26)$$

donde $T(E)$ es la transmitancia y $\text{DOS}(E)$ es la densidad de estados electrónica, la integral se realizó por el método de Simpson de paso fijo, el total de pasos de integración fue de 8×10^6 , ya que a partir de 8×10^5 la curva del promedio ya no se modificaba.

La Figura 4.8 muestra el promedio espectral de la transmitancia ($\langle T \rangle$) en función del número de átomos de cada cadena (N) para el problema de Fibonacci de enlaces y diferentes tamaños de segmentos con (a) 3 átomos, (b) 21 átomos, (c) 987 átomos y (d) 6765 átomos, siendo las generaciones 3, 7, 15 y 19 respectivamente. Los parámetros del Hamiltoniano son los mismos que en la Figura 4.1(b).

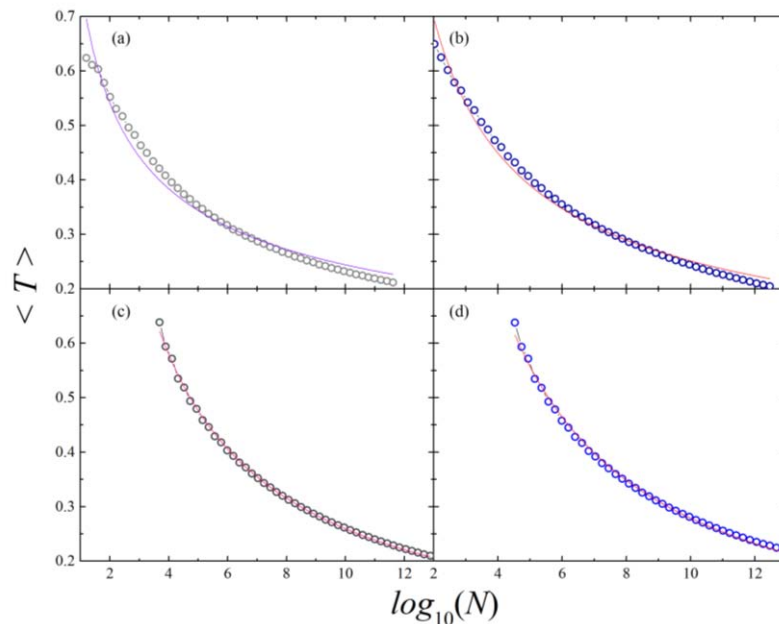


Figura 4.8 Promedio espectral de transmitancia ($\langle T \rangle$) versus el número de átomos (N) para cadenas con ordenamiento tipo Fibonacci de enlaces y formadas por segmentos (a) 3 sitios, (b) 21 sitios, (c) 987 sitios y (d) 6765 sitios, los parámetros del Hamiltoniano son los mismos que en la Figura 4.1(b).

La Figura 4.9 muestra el promedio espectral de la transmitancia versus el número de átomos del sistema en el problema de sitios formada por segmentos de (a) 3 átomos, (b) 34 átomos, (c) 610 átomos y (d) 4181 átomos. Los parámetros del Hamiltoniano son los mismos que los de la Figura 4.1(c).

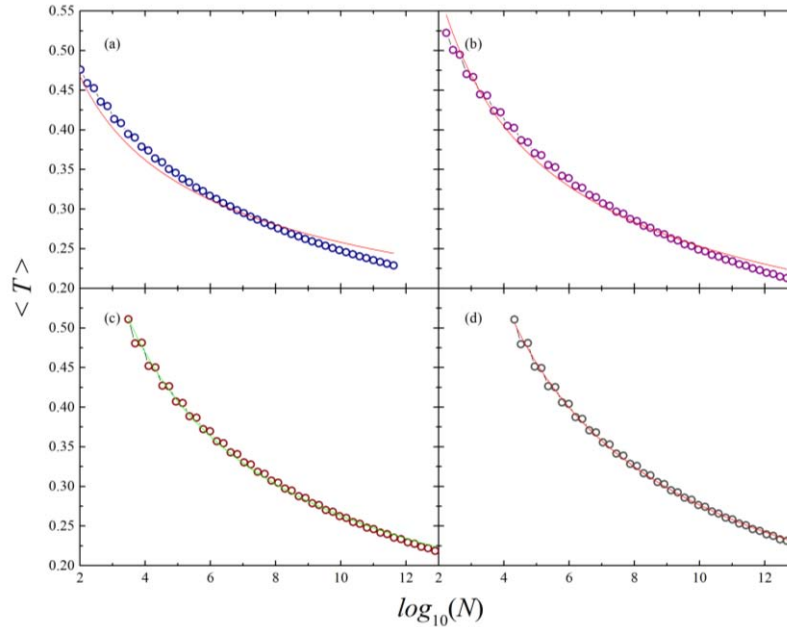


Figura 4.9 Promedio espectral de la transmitancia ($\langle T \rangle$) versus el número de átomos (N) para cadenas con ordenamiento tipo Fibonacci de sitios con simetría de espejo y formadas por segmentos de tamaño (a) 3 sitios, (b) 34 sitios, (c) 610 sitios y (d) 4181 sitios.

Obsérvese tanto en la Figura 4.8 y 4.9 que el promedio espectral decae como una ley de potencias cuando crece el logaritmo del número de átomos. Además, entre más grande el tamaño del segmento el decaimiento es más lento. Se realizó este estudio para todos los sistemas cuasiperiódicos mostrados en secciones anteriores y se obtuvo la misma forma del decaimiento, por lo que solo se presentaron dos ejemplos (Figuras 4.8 y 4.9).

De dichas gráficas se encontró que el comportamiento del promedio está dado por

$$\langle T \rangle = a \log_{10}(N)^{-b} \quad (4.27)$$

donde N es el total de sitios en la cadena, a y b son parámetros con que se ajustó la curva (línea en las Figuras).

Este análisis se realizó considerando diferentes tamaños de segmentos, por lo que fue posible determinar el comportamiento de a y b con respecto al número de átomos que constituyen el segmento. En la figura 4.10 se puede ver el comportamiento de a en función al número de sitios en el segmento y es posible notar que, al aplicar una escala logarítmica a ambos elementos, se obtiene una recta.

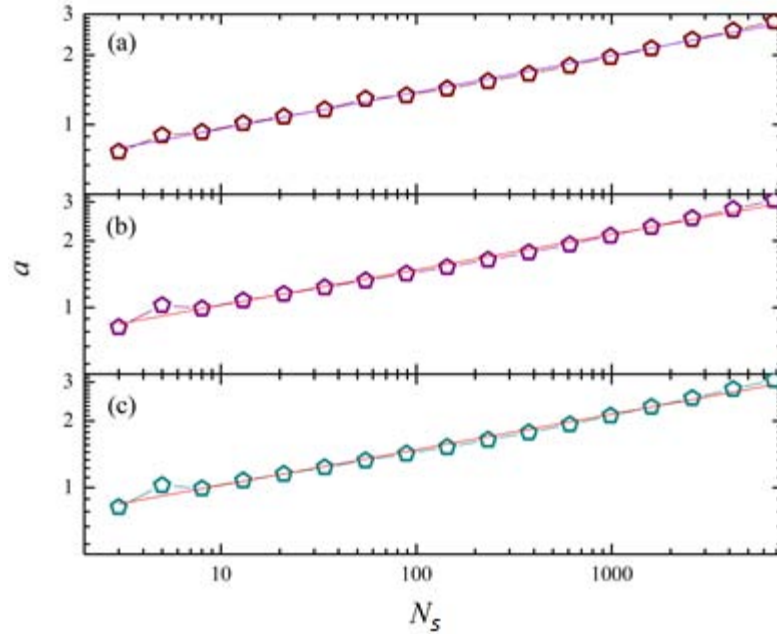


Figura 4.10 Comportamiento de a con respecto al tamaño del segmento en los sistemas (a) enlaces simples, (b) enlaces con simetría de espejo y (c) enlaces con simetría de espejo e impureza central.

Por lo que a crece en forma de potencias cuando el número de átomos en el segmento (N_s) se incrementa, es decir, $a = dN_s^c$.

Lo mismo sucede al analizar para diferentes tamaños del segmento el valor de b , ver Figura 4.11. el cual en los tres casos es una recta al aplicar escala logarítmica a la cantidad de sitios, pero no al valor de b .

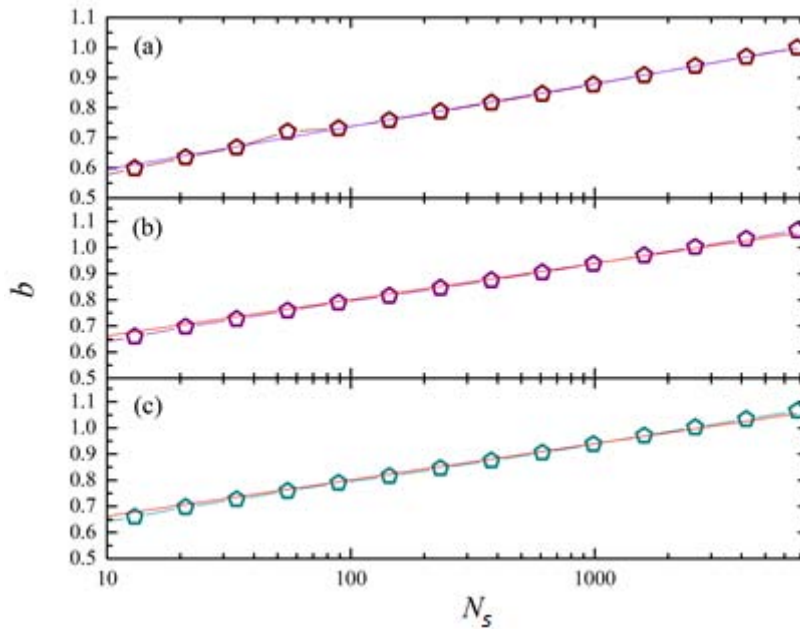


Figura 4.11 Comportamiento de b con respecto al tamaño del segmento en los sistemas (a) enlaces simples, (b) enlaces con simetría de espejo y (c) enlaces con simetría de espejo e impureza central.

Por lo que b crece cuando aumenta el número de átomos en el segmento, es decir, $b = g \log_{10}(N_s)^f$.

Posteriormente, realizamos el mismo análisis del promedio espectral de la transmitancia en cadenas donde sus átomos siguen un ordenamiento de Fibonacci de sitios. Las curvas que nos muestra son similares a las obtenidas en la Figura 4.9. La ecuación que describe a este tipo de curvas también es la (4.27). La Figura 4.12 muestra la variación del parámetro a en función del número de átomos que compone cada segmento (N_s). Obsérvese que a tiene un comportamiento creciente también como una ley de potencias en función del número de átomos de cada segmento, es decir, $a = dN_s^c$, esto semejante a lo que sucede en el problema de enlaces.

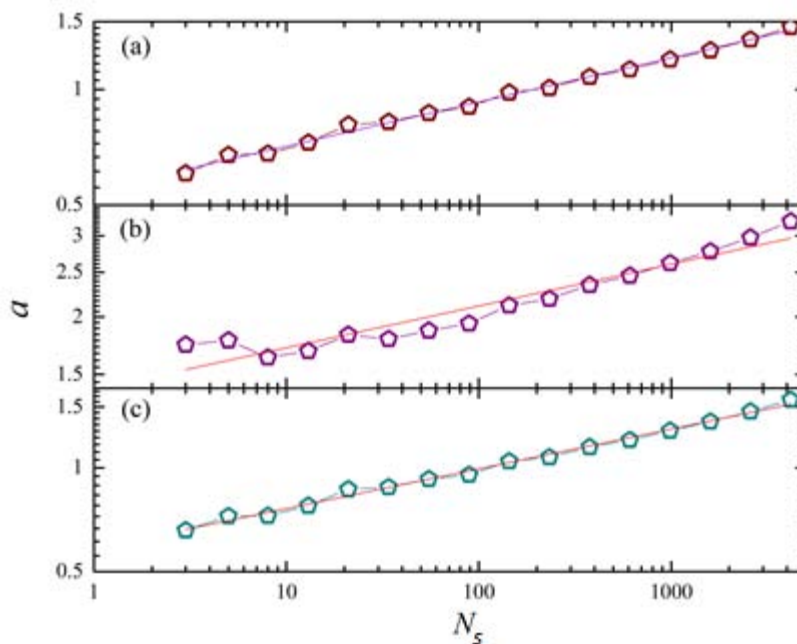


Figura 4.12 Comportamiento de a con respecto al tamaño del segmento en los sistemas (a) sitios simples, (b) sitios con simetría de espejo y (c) sitios con simetría de espejo e impureza central.

En el caso de b (Figura 4.13), el valor varía mucho, nuevamente debido a la falta de simetría en el sistema de sitios, llegando al punto en el que no puede considerarse una recta, sin embargo, se colocó la recta en las gráficas como punto de comparación para notar dicha variación.

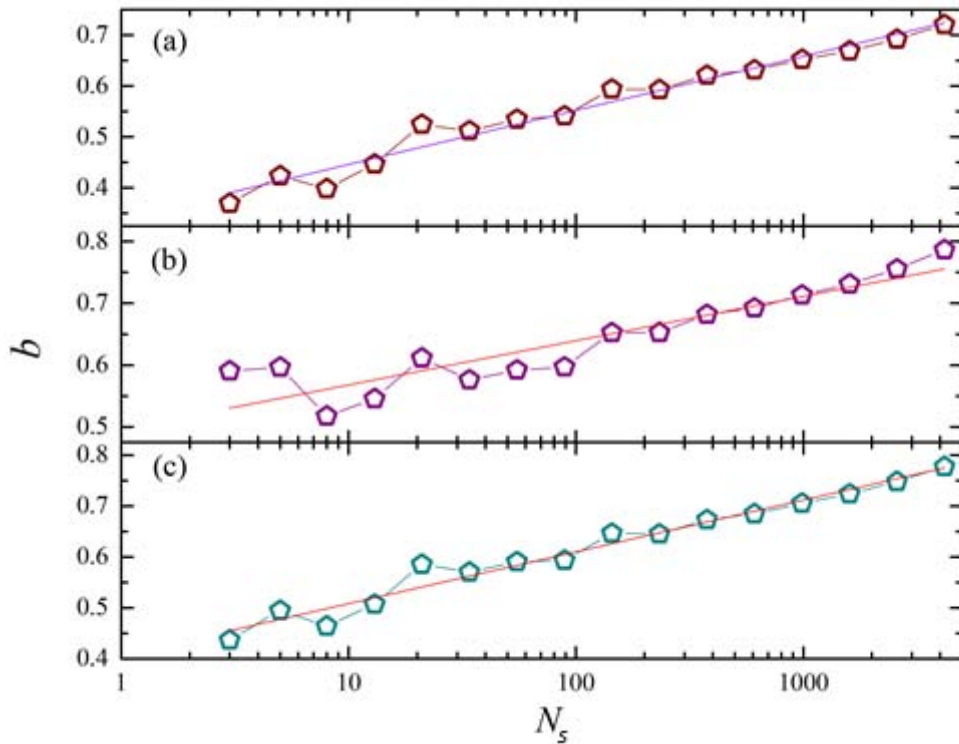


Figura 4.13 Comportamiento de b con respecto al tamaño del segmento en los sistemas (a) sitios simples, (b) sitios con simetría de espejo y (c) sitios con simetría de espejo e impureza central.

En conclusión, tanto a como b , siendo los parámetros que describen la curva de promedio espectral crecen conforme se incrementa el número de átomos en cada segmento que forman las cadenas cuasiperiódicas de todos los sistemas estudiados. El crecimiento de a y b significa que al aumentar el número de sitios en los segmentos, la transmitancia para un total de sitios fijo, aumenta, pues al tener celdas de mayor tamaño, el sistema se vuelve menos cuasiperiódico y el promedio espectral de transmitancia se acerca al de un sistema periódico.

Conclusiones

En esta tesis se estudió el efecto de la periodicidad y cuasiperiodicidad en la transmitancia eléctrica de cadenas segmentadas de tamaño macroscópico en espacio real. La investigación se realizó dentro del formalismo de amarre fuerte a primeros vecinos, la función de Green y la fórmula de Landauer. Para abordar sistemas de orden macroscópico se desarrollaron métodos de renormalización en espacio real para la matriz de transferencia y la función de Green, con el objetivo de analizar la transmitancia y la densidad de estados de cadenas segmentadas macroscópicas con ordenamiento periódico y cuasiperiódico. A continuación, enumeramos las principales conclusiones de este trabajo.

- 1.-Los métodos de renormalización nos permiten estudiar cadenas segmentadas macroscópicas en espacio real de forma exacta dentro de la aproximación de amarre fuerte.
- 2.-El tamaño de los segmentos en las cadenas periódicas diatómicas tiene efecto en los espectros de conducción eléctrica, obteniendo que aumenta el número de gaps conforme crece el número de átomos en los segmentos.
- 3.-Cuando se incrementa el número de átomos en los segmentos de las cadenas cuasiperiódicas, los espectros de conducción tienen un mayor número de picos con alta conductividad (cercana a uno).
- 4.-Los estados transparentes para cadenas cuasiperiódicamente segmentadas (enlaces) dependen del número de átomos que conforman al segmento, para un número impar de átomos tanto en segmento A como en el segmento B se tiene estados de conducción balística cada seis generaciones. En cambio, si ambos segmentos tienen un número par de átomos, el estado transparente se presenta en todas las generaciones.
- 5.-En los sistemas con simetría de espejo tienen un estado transparente en $\mu = 0$ para cualquier tamaño de los segmentos y de la cadena.
- 6.-Obtuvimos expresiones analíticas para los estados transparentes en $\mu = 0$ para las cadenas segmentadas con ordenamiento de sus átomos tipo Fibonacci de enlaces y Fibonacci de enlaces con simetría de espejo.

- 7.- El promedio espectral de la transmitancia eléctrica decae en función del logaritmo del número de átomos de la cadena, como: $\langle T \rangle = a \log_{10}(N)^{-b}$.
- 8.-El valor a en la ecuación del promedio espectral, depende del número de átomos que forma el segmento. Obteniendo que a crece como una ley de potencias cuando aumenta el número de átomos en el segmento, es decir, $a = dN_s^c$, donde d y c son constantes positivas.
- 9.-El valor de b en el promedio espectral crece en función del aumento del logaritmo del número átomos en el segmento, es decir, $b = g \log_{10}(N_s)^f$, donde f y g son constantes positivas
- 10.-La inclusión de un segmento de impureza central para los sistemas con simetría de espejo, tiene un efecto mayor en el espectro de transmitancia para el problema periódico y cuasiperiódico de enlaces, debido a que el espectro presenta un menor número de picos de transmisión casi balística y tiene un mayor número de gaps. Además, son menos afectados los espectros obtenidos para el problema de sitios con y sin simetría de espejo.

El ordenamiento en los sólidos produce efectos relevantes en el transporte eléctrico, particularmente en sistemas cuasiperiódicos, ya que son ordenados, pero no periódicos; dichos ordenamientos provienen de simetrías en espacios de mayor dimensión y han tomado relevancia en los últimos años. Estas estructuras tienen propiedades interesantes para la física del estado sólido porque presentan estados críticos, a diferencia de los periódicos que son extendidos y los desordenados aleatoriamente, donde todos están localizados debajo de un umbral crítico. Más aún, si a un sistema cuasiperiódico se le añaden impurezas, se obtienen nuevos comportamientos con relación a su localización, lo cual nos permitirá entender y mejorar las características inherentes del material. Para el estudio de las propiedades físicas de este tipo de sistemas es necesario utilizar el método de renormalización en espacio real, ya que no se tienen las simetrías propias de un sistema periódico. Este trabajo puede extenderse al estudio de impurezas en otros sitios de la estructura, no sólo centrales. Además, el método de renormalización en espacio real puede utilizarse para estudiar otras propiedades, tales como temperatura y campo magnético en sistemas multidimensionales.

Bibliografía

- [Aragón, 1994] Aragón, J.L. «La estructura atómica de los cuasicristales». *Revista Mexicana de Física*, Febrero 1994: 339-365.
- [Askeland, 1998] Askeland, Donald. «Ciencia e ingeniería de los materiales». Missouri: *International Thomson*, 1998.
- [Baquero, 2008] Baquero, R. «Amarre Fuerte I». Septiembre de 2008.
http://www.fis.cinvestav.mx/~rbaquero/amarre_fuerte_I.pdf.
- [Bilmes, 2007] Bilmes, Sara Aldabe. «Ciencias Naturales: Materiales Cristalinos». Buenos Aires: *Ministerio de educación, ciencia y tecnología*, 2007.
- [Bruijn, 1980] Bruijn, N. G. «Algebraic theory of Penrose's non-periodic tilings in the plane». *Indagationes mathematicae*, 1980: 39-66.
- [Cristalografía, s.f.] «Cristalografía». Sin fecha.
http://www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia/parte_05_5-en.html.
- [Cullity, 1956] Cullity, B.D. «Elements of X-Ray diffraction». Massachusetts: *Addyson-Wesley Publishing Company*, 1956.
- [D. Shechtman, 1984] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, J.W. Cahn. «Metallic Phase with Long-Range Orientational Order and No Translational Symmetry». *Physical Review Letters*, 1984: 1951-1954.
- [Dunlap, 1997] Dunlap, Richard A. «The Golden Ratio and Fibonacci Numbers». Singapore: *World Scientific Publishing Co.*, 1997.
- [Dyson, 2005] Dyson, N. A. «X-rays in atomic and nuclear physics». Cambridge: *Cambridge University Press*, 2005.

- [Economou, 2005] Economou, E. N. «Green's Functions in Quantum Physics». Creta, Grecia: *Springer*, 2005.
- [Eldredge, 2006] Eldredge, Bruce A. Averill and Patricia. «Chemistry: Principles, Patterns, and Applications». *Prentice Hall College*, 2006.
- [Fan, 2001] Fan, Tianyou. «Mathematical Theory of Elasticity of Quasicrystals and its Applications». Beijing, China: *Springer*, 2001.
- [Ferry, 2008] Ferry, David K. «Nanowires in Nanoelectronics». *Science*, 2008: 579-580.
- [Fitzpatrick, 2005] Fitzpatrick, Richard. «Thermodynamics and Statistical Mechanics». Austin, Texas: *University of Texas*, 2005.
- [Grifalco, 2003] Grifalco, Louis. «Statistical Mechanics of Solids». Oxford: *Oxford University Press*, 2003.
- [H. Kind, 2002] H. Kind, H. Yan, B. Messer, M. Law, P. Yang. «Nanowire Ultraviolet Photodetectors and Optical Switches.» *Advanced Materials*, Enero 2002: 158-160.
- [Jin Zhang, 2016] Jin Zhang, Salvador Pané , Jordi Sort , and Eva Pellicer. «Toward Robust Segmented Nanowires: Understanding the Impact of Crystallographic Texture on the Quality of Segment Interfaces in Magnetic Metallic Nanowires». *Adv. Mater. Interfaces*, 2016.
- [Kittel, 1996] Kittel, Charles. «Introduction to solid state physics». New York: *John Wiley & Sons*, 1996.
- [Landauer, 1992] Landauer, Rolf. «Conductance from Transmission: Common Sense Points.» *Physica Scripta*, 1992: 110-114.
- [Lifshitz, 2002] Lifshitz, Ron. «The Square Fibonacci Tiling.» *Journal of Alloys and Compounds*, 2002: 186-190.

- [McElroy, 2017] McElroy, Kyle. «Notes on the Drude Model.» Colorado, 2017.
- [Naumis, 2007] Naumis, Gerardo García. «Simetrías exóticas: de cuasicristales y otros sistemas políticamente incorrectos.» *Revista Iberoamericana de Física*, 2007: 40-17.
- [Neil W. & N. David, 1976] Neil W. Ashcroft, y N. David Mermin. «Solid State Physics».
Orlando, USA: *Harcourt College Publishers*, 1976.
- [Özkale, 2015] Özkale, Berna. «Multisegmented FeCo/Cu Nanowires: Electrosynthesis, Characterization, and Magnetic Control of Biomolecule Desorption». *Applied Materials & Interfaces*, 2015.
- [Penrose, 1974] Penrose, R. «The Role of Aesthetics in Pure and Applied Mathematical Research». *Bulletin of the Institute of Mathematics and Its Applications*, Vol. 10, No. 2, pp. 266-271, 1974.
- [Sánchez Morales, 2003] Sánchez Morales, Vicenta. «Transporte electrónico en sistemas cuasiperiódicos (Tesis)». Ciudad de México, 2003.
- [Sánchez Rueda, 2012] Sánchez Rueda, Fernando. «Localización y transporte electrónico en redes de Fibonacci generalizado (Tesis)». Ciudad de México, 2012.
- [Shahtahmasebi, 2005] Shahtahmasebi, S. A. Ketabi. and N. «The electronic properties of a Fibonacci chain». *Iranian Journal of Physics Research* 4, nº 3 (2005): 71-76.
- [Sólyom, 2002] Sólyom, Jenó. «Fundamentals of the Physics of Solids». Budapest: *Springer*, 2002.
- [Steinhardt, 1984] Steinhardt, Dov Levine and Paul. «Quasicrystals: A New Class of Ordered Structures.» *Physical Review Letters*, Diciembre 1984: 2477-2480.

- [Süto, 1994] Süto, András. «Schrödinger difference equation with deterministic ergodic potentials.» En *Beyond Quasicrystals*, de Denis Gratias, 481-549. Berlin: Springer-Verlag Berlin Heidelberg GmbH , 1994.
- [T.C. Scott, 2014] T.C. Scott, P. Marketos. «On the origin of the Fibonacci Sequence». Aachen, Germany: *MacTutor History of Mathematics* , 2014.
- [Wikimedia Commons, 2015] Wikimedia Commons. «Pyrite». 22 de Marzo de 2015.
https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Pyrite_60608.jpg.
- [Yanega, 1996] Yanega, Douglas. «Sex Ratio and Sex Allocation in Sweat Bees (Hymenoptera: Halictidae).» *Journal of the Kansas Entomological Society*, 1996: 98-115.
- [Yang Sun, 2014] Yang Sun, Fengying Zhang, Li Xu, Zhilei Yina and Xinyu Song. «Roughness-controlled copper nanowires and Cu nanowires–Ag heterostructures: synthesis and their enhanced catalysis.» *Journal of Materials Chemistry A*, Septiembre 2014: 18583-18592 .