



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

FACULTAD DE CIENCIAS

**LOCALIZACIÓN Y CONDUCTIVIDAD ELÉCTRICA
EN SISTEMAS UNIDIMENSIONALES RAMIFICADOS**

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:

ALEJANDRO FLORES MONTES DE OCA



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

CIUDAD DE MÉXICO

2019



Universidad Nacional
Autónoma de México



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

Flores
Montes de Oca
Alejandro
55 3796 1029
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ciencias
Física
310076920

2. Datos del tutor

Doctora
Vicenta
Sánchez
Morales

3. Datos del sinodal 1

Doctor
Chumin
Wang
Chen

4. Datos del sinodal 2

Doctora
Renela María
Valladares
Mc Nelis

5. Datos del sinodal 3

Doctor
José Eduardo
Barrios
Vargas

6. Datos del sinodal 4

Doctor
Víctor Hugo
Meza
Laguna

7. Datos del trabajo escrito.

Localización y conductividad eléctrica en sistemas unidimensionales ramificados.
75 pp
2019

Agrededimientos

Dra. Vicenta Sánchez Morales y su grupo de trabajo. Dr. Fernando Sánchez, Antonio Galeote y Benjamín Castro son la combinación perfecta para los días de trabajo, aprecio todos los consejos, pláticas, risas y apoyo que me han brindado en mi estancia en el grupo de trabajo. Dra. Vicenta gracias por el apoyo incondicional que me ha brindado para realizar el presente trabajo, la motivación y palabras de aliento para seguir adelante a pesar de las adversidades que se han presentado.

A mis sinodales. Agradezco al Dr. Chumin Wang C., la Dra. Renela María Valladares M., el Dr. José Eduardo Barrios y el Dr. Víctor Hugo Meza L. por el tiempo y dedicación que se han tomado para la revisión y corrección de este trabajo.

A mis amigos de licenciatura. Durante mi etapa de licenciatura he conocido personas únicas y especiales, el aprecio que tengo por cada uno de ustedes siempre lo he demostrado, por lo que pido una disculpa si olvido mencionar alguno; Irving, Manuel, Hugo, Mariana, Fernanda, Fabiola, Leonardo, Oliver, Sergio, Berenice, Julio y Hodek. Las tres personas con las que he compartido experiencias inolvidables Oswaldo A., Erik Z. y Karina Jaqueline P. no tengo palabras para describir lo importante que es su amistad para mí, gracias por todo.

Mi acompañante de 3 años. María Fernanda Ponce M., la persona que ha tenido que lidiar con cada uno de mis estados de ánimo, eres una persona tan especial que quiero y admiro mucho, gracias por apoyarme, alentarme, amarme y sobre todo acompañarme en los momentos más difíciles.

A mi hermana. María A. Flores M. Agradezco todo el cariño y la calidad de vida que nos brindaste a mi madre y a mí, sin ti no habría logrado ninguno de mis objetivos cumplidos.

Mi segundo hogar. Familia Granados Aldama, gracias por darme la oportunidad de ser parte de su familia. Cuando mi entorno se tornó gris, ustedes estuvieron ahí para apoyarme sin pedir nada a cambio. Aurelio Granados Buendía, es la imagen del padre que nunca tuve, agradezco cada uno de sus consejos, además de la confianza que me ha brindado.

A una amistad de cientos de kilómetros. Karla Meneses B. me has enseñado que la amistad no tiene fronteras, gracias por estar siempre en los momentos difíciles.

A mi madre. La persona más importante de mi vida no puede faltar, gracias por nunca perder la fe en mí, por apoyarme y aconsejarme en cada etapa, me habría encantado poder vivir más momentos increíbles a su lado, en particular, este logro que tanto anhelábamos. Agradezco todo el amor y los cuidados que me brindó por 23 años.

Finalmente agradezco a la **DGAPA** por el apoyo a través del proyecto **PAPIIT IN115519** y a la **DGTIC** por permitirme utilizar la supercomputadora Miztli para la realización de los cálculos utilizados en esta tesis.

Resumen

En esta tesis se estudió la conductividad eléctrica de cadenas unidimensionales de tamaño macroscópico con orden aperiódico (tipo *Nickel Mean*) y periódico incluyendo impurezas tipo integrales de salto, energías de sitio, estructuras rómbicas y hexagonales con y sin saturación. Dentro de la fórmula de Landauer y utilizando la transmitancia, la matriz de transferencia, el coeficiente de Lyapunov y la función de Green para la densidad de estados (DOS). Este estudio se llevó a cabo a temperatura cero y dentro del formalismo de amarre fuerte. Se desarrollaron métodos de renormalización en espacio real para la matriz de transferencia y la DOS con el objetivo de investigar los efectos de las impurezas.

En particular se estudió la transmitancia en cadenas periódicas con impurezas tipo Fano lineal, rómbica y hexagonal, variando las integrales de salto. Los resultados muestran que cuando la cadena periódica tiene una impureza de Fano lineal que contiene N sitios, el espectro presenta $N - 1$ estados de reflectancia total y $N - 2$ estados balísticos. En cambio, si la impureza Fano es rómbica o hexagonal se reducen ambos estados de reflectancia y transmitancia perfectas. Más aún, cuando se incrementa el número de impurezas y la distancia entre ellas, se presentan más zonas de energía prohibida y menos picos de alta transmitancia. Después de analizar numéricamente los espectros de transmitancia, se obtuvieron de forma analítica las energías de las impurezas y con ello la ecuación de la transmitancia para cada una de ellas. Además, diseñamos un dispositivo molecular, ya sea de impurezas rómbicas o hexagonales saturadas para obtener un gap en el centro del espectro, cuyo ancho se puede modificar con la integral de salto de la impureza.

Con respecto, a las cadenas aperiódicas (tipo *Nickel Mean*) un estudio comparativo de los diferentes problemas tipo enlaces, sitios y mixto conduce a observar que los gaps de mayor ancho se encuentran en los espectros de transmitancia del problema de sitios. Además, al ir creciendo el tamaño de las cadenas se incrementa el número de picos de alta conductividad. En cambio, los espectros de la DOS se conservan sin importar el tamaño de la cadena, debido al valor de la parte imaginaria de la función de Green. Por último, se observó que el efecto de una impureza tipo Fano lineal en la DOS incorpora estados dentro y fuera de la banda cuya amplitud es menor comparada con los estados de la cadena original y en los espectros del coeficiente de Lyapunov se obtienen un mayor número de estados localizados.

Introducción

La nanociencia y nanotecnología se ocupan del estudio y aplicación en sistemas de dimensiones pequeñas (1-100 nanómetros), controlando la forma en cómo se acomodan los átomos (o moléculas) con el objetivo de modificar sus propiedades para obtener dispositivos electrónicos más precisos y eficientes, ejemplos de ello son la fabricación de dispositivos electrónicos que se usan en lectores de cd, teléfonos celulares, diodos emisores o fotoceldas solares [Gregorio, 2010]. Además, las propiedades físicas de cada material están intrínsecamente relacionadas con el ordenamiento atómico que poseen, basándose en este ordenamiento se pueden clasificar a los materiales en metales, semiconductores y aislantes. Dentro de este campo, los alambres cuánticos o nanoalambres descritos por un sistema periódico tendrán todos sus estados electrónicos extendidos, en cambio, un sistema aleatoriamente desordenado, P. W. Anderson demostró que, cruzando un grado crítico de desorden, todos los estados son localizados, es decir, la difusión en el sistema es suprimida debido a la localización espacial de todos los estados electrónicos [Ishii, 1973] [Anderson, 1958] [Dunlap, 1990]. La localización está estrechamente ligada al transporte electrónico y es un concepto fundamental para entender la existencia de materiales metálicos y aislantes.

En esta tesis se estudia el transporte electrónico, densidad de estados y localización en cadenas periódicas con impurezas tipo Fano lineales, rómbicas y hexagonales. Además, para un sistema aperiódico tipo Nickel Mean el cual forma parte de las redes de Fibonacci generalizada. Con el objetivo de analizar las cantidades antes mencionadas se desarrollaron métodos de renormalización en espacio real para la función de Green y la matriz de transferencia, más aún, se realizaron programas en Fortran para iterar los coeficientes obtenidos por renormalización, ya que el estudio directo para sistemas macroscópicos trae complicaciones en el tiempo de computo. El trabajo se realizó en espacio real con la ayuda de funciones de Green y el modelo de amarre fuerte (TB), esto es dentro del formalismo de Landauer. Este trabajo se dividió en 3 capítulos y una sección donde se exponen las conclusiones de esta investigación.

En el capítulo 1 se presenta una introducción de los conceptos generales sobre la estructura de los sólidos y sus diferentes defectos. Además, se detalla el formalismo de amarre fuerte (TBH por sus siglas en inglés) así como la función de Green y su estrecha relación con la densidad de estados. También incluye el desarrollo del método de renormalización en espacio real para la densidad de estados en cadenas periódicas.

El capítulo 2 muestra el concepto de transporte electrónico en sus tres variantes: clásico, semi-clásico y cuántico. La conductividad clásica es un modelo implementado por Paul Drude en 1900 en donde los electrones son considerados como esferas sólidas, además los electrones de conducción forman un gas clásico que se desplaza a través de los iones que permanecen inmóviles en el material. Arnold Sommerfeld fue el encargado de reforzar el modelo de Drude, para esto utiliza la ecuación de transporte y distribución de Boltzmann y la estadística de Fermi-Dirac esto es conocido como transporte semiclásico. El transporte cuántico esta dado por el formalismo de Landauer donde lo considera como un proceso debido a la dispersión llegando a la conclusión que *conductancia es transmisión*, este último nos permite introducir el concepto de transmitancia y localización para los sistemas de interés en el

presente trabajo.

En el capítulo 3 se analizan los efectos de las impurezas tipo Fano (estructuras lineales, rómbicas y hexagonales) en los espectros de transmitancia y densidad de estados en cadenas periódicas y en cadenas con desorden correlacionado conocido como Nickel Mean. Los problemas abordados fueron el de enlaces (cambian las integrales de salto en la cadena), el de sitios (varían las auto-energías de la cadena) y el mixto (se modifican tanto las energías de sitio como las integrales de salto). Así mismo, se muestran los espectros del exponente de Lyapunov en función de la energía. Finalmente se presentan las conclusiones de este trabajo.

Índice general

1. Conceptos Generales	1
1.1. Estructura Cristalina	1
1.1.1. Redes de Bravais	2
1.1.2. Sólidos Amorfos	4
1.1.3. Cuasicristales	5
1.2. Desorden y Defectos Cristalinos	6
1.3. Función de Green y Densidad de Estados	9
1.4. Modelo de Amarre Fuerte (Tight-Binding)	11
1.4.1. Cadena Periódica	12
1.5. Hamiltoniano de Amarre Fuerte en Funciones de Green	13
1.6. Método de Renormalización	15
2. Transporte y Localización	20
2.1. Transporte Clásico (Modelo de Drude)	20
2.2. Transporte Semiclásico (Modelo de Sommerfeld)	22
2.3. Transporte Cuántico (Modelo de Landauer)	23
2.3.1. Transmitancia	25
2.4. Localización	27
3. Efecto de las Impurezas en el Transporte Electrónico	29
4. Conclusiones	50
5. Apéndice	52

Capítulo 1

Conceptos Generales

1.1. Estructura Cristalina

Se sabe que la materia presenta cinco estados de agregación: gases, líquidos, sólidos, plasmas y condensados de Bose-Einstein, donde a temperatura ambiente la mayoría de los materiales de la corteza terrestre son sólidos, como la arena, el cuarzo, las rocas, etc. Los sólidos se pueden dividir en tres tipos: amorfos, cristales y cuasicristales.

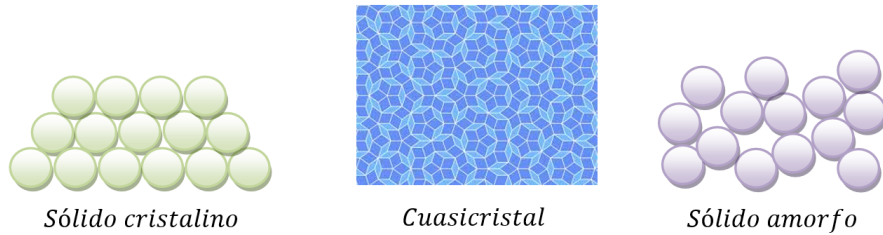


Figura 1.1: Los sólidos cristalinos tienen sus moléculas acomodadas en estructuras geométricas bien definidas por lo que poseen orden de largo alcance, por otro lado un sólido amorfo no tiene una estructura ordenada ni periódica y los cuasicristales se caracterizan por tener una estructura ordenada pero no periódica, éste llena todo el espacio aunque tiene ausencia de simetría traslacional.

La física de estado sólido está fundamentalmente relacionada con los cristales y con los electrones en ellos, su estudio empezó después del descubrimiento de la difracción de rayos X y la publicación de una serie de cálculos que predicen algunas de sus propiedades.

La estructura de todos los cristales puede escribirse en función de una red, con un grupo de átomos ligados a cada punto de la misma, a ese grupo de átomos se le denomina base, cuando se repite en todo el espacio forma una *estructura cristalina*, la red se define mediante tres vectores de traslación \bar{a}_1 , \bar{a}_2 y \bar{a}_3 , de tal forma que la distribución atómica en dos puntos diferentes (\bar{r} y \bar{r}') parece la misma en todos los aspectos, la relación entre estos dos puntos es:

$$\bar{r}' = \bar{r} + u_1\bar{a}_1 + u_2\bar{a}_2 + u_3\bar{a}_3,$$

donde u_1 , u_2 y u_3 son números enteros y arbitrarios, por lo que podemos ver la red como una distribución regular de puntos en el espacio.

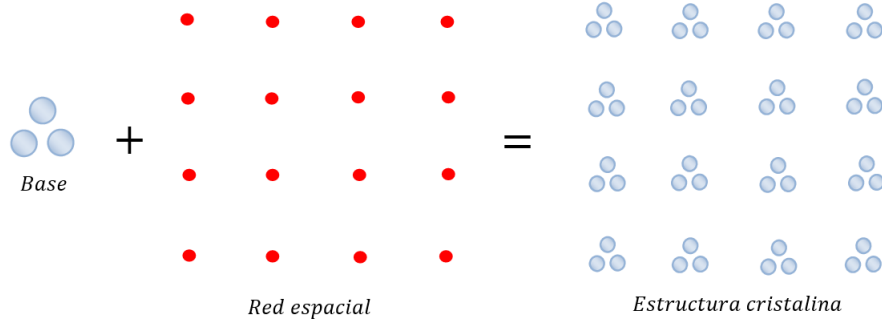


Figura 1.2: El centro de cada una de las posiciones se llama punto reticular y la base ocupa cada una de estas posiciones, dicha base puede ser un átomo, un grupo de átomos o una molécula.

La celda unitaria es la subdivisión de la red cristalina que sigue conservando las características generales de toda la red [Askeland, 1998]. Debido a la periodicidad de las redes cristalinas, estos arreglos pueden llegar a ser millones de celdas unitarias, por lo que podrían pensarse como infinitos en extensión.

Una forma de obtener la celda primitiva es por el método de Wigner-Seitz, el cual consiste en dibujar líneas rectas desde un determinado elemento de la red conectándolo con sus primeros vecinos, luego se trazan líneas rectas que bisectan las primeras líneas dibujadas y finalmente la celda primitiva es el área contenida por la intersección de las bisectrices, tal y como se observa en la figura (1.3).

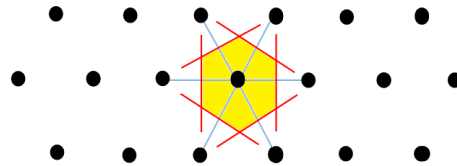


Figura 1.3: En espacio recíproco la celda de Wigner-Seitz es conocida como la *primera zona de Brillouin*. En esta zona se encuentra contenida toda la información del sistema, por eso su estudio es tan importante.

Por otro lado, es necesaria una clasificación general de las redes cristalinas, actualmente se sabe que existen 14 arreglos diferentes que se agrupan en 7 tipos para sistemas tridimensionales y 5 arreglos diferentes que se agrupan en 4 tipos para dos dimensiones, estos arreglos son conocidos como redes de Bravais.

1.1.1. Redes de Bravais

Uno de los conceptos fundamentales en la descripción de un sólido cristalino es la red de Bravais, que especifica cómo las unidades básicas que lo componen (átomos, grupo de átomos o moléculas) se repiten periódicamente a lo largo del cristal, existen dos definiciones equivalentes para las redes de Bravais:

1. Un arreglo infinito de puntos discretos con una posición y orientación que es exactamente igual desde cualquier punto de la estructura

2. Un conjunto formado por todos los puntos cuyo vector de posición es de la forma

$$\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3,$$

donde \vec{a}_1 , \vec{a}_2 y \vec{a}_3 son 3 vectores linealmente independientes conocidos como vectores primitivos de la red, además n_1 , n_2 y n_3 son números enteros, para un sistema tridimensional las redes de Bravais son paralelepípedos formados por tres vectores primitivos y los ángulos que forman entre ellos (α , β , γ), donde α es el ángulo entre $\{\vec{a}_3, \vec{a}_2\}$, β el ángulo entre $\{\vec{a}_3, \vec{a}_1\}$ y γ el ángulo $\{\vec{a}_1, \vec{a}_2\}$, tal como se muestra en la figura (1.4).

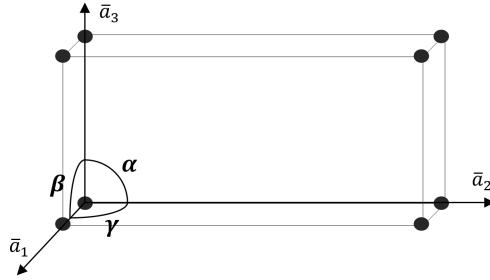


Figura 1.4: Relación entre los vectores primitivos y los ángulos en una red de Bravais.

Anteriormente se mencionó que existen 14 arreglos diferentes que se agrupan en 7 tipos para sistemas tridimensionales, los arreglos se diferencian entre sí por la relación entre los vectores primitivos y sus ángulos, cada una con sus propias simetrías de traslación y rotación, la forma estructural de las redes de Bravais se muestra en la figura (1.5).

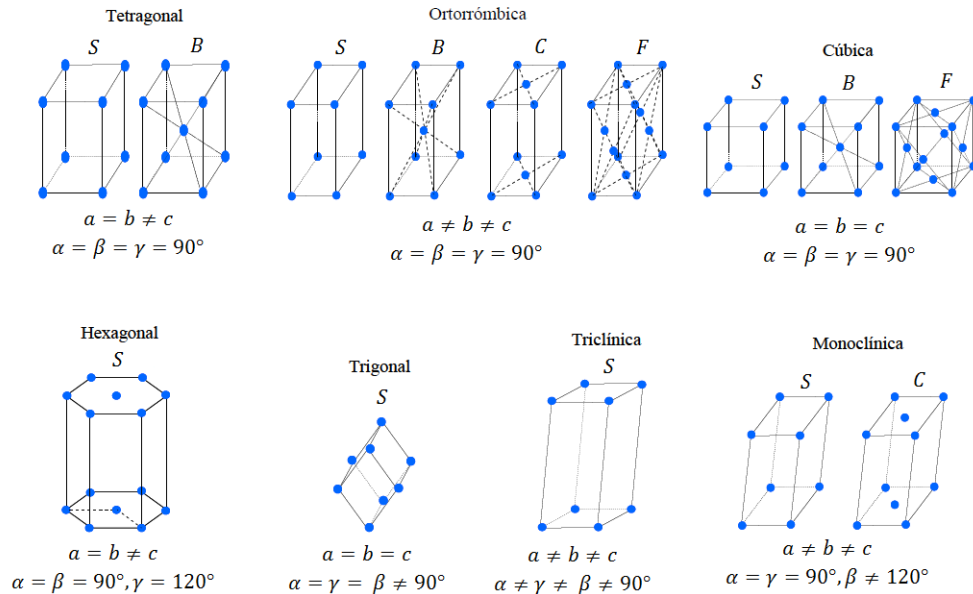


Figura 1.5: Donde S: Simple o primitiva, B: Centrada en el cuerpo, C: Centrada en las bases y F: Centrada en las caras. La red primitiva de una estructura cristalina está definida por alguno de estos parámetros, es decir, siempre se puede asociar una red de Bravais a una estructura cristalina.

1.1.2. Sólidos Amorfos

En los amorfos no existe un ordenamiento periódico; el vidrio y algunos materiales plásticos como el poliestireno son los ejemplos más comunes. Desde el punto de vista estructural, los sólidos amorfos se clasifican según si están compuestos de redes tridimensionales no periódicas (vidrio), moléculas individuales de cadena larga (polímeros naturales y plásticos) u ordenamientos intermedios entre estos dos casos límite (cristales líquidos). La estructura amorfa carece de ordenamiento de largo alcance, es decir, superior al tamaño de las moléculas o unidades repetitivas [Melo, 2000]. Algunas formas de describir o visualizar la estructura amorfa es a partir de la difracción de rayos X o por la curva de distribución radial, por otra parte los amorfos no tienen una temperatura de solidificación definida, cuando se encuentran en estado líquido y la temperatura disminuye, éstos se hacen más y más viscosos. Este proceso está asociado al cambio de entalpía y entropía molecular, la temperatura en que se presenta este fenómeno se conoce como *temperatura de transición vítrea* (T_g).

Vidrio: Es el amorfo más conocido, su estructura es similar a la de un líquido, no existe un arreglo definido de largo alcance, pero sus propiedades elásticas son típicas de un sólido isotrópico. Se obtiene en un reactor de fusión, donde se calienta una mezcla de arena sílica y óxidos metálicos, pulverizados o granulados. La fusión forma un líquido viscoso que se hace transparente y homogéneo a una temperatura superior a $1000^{\circ}C$.

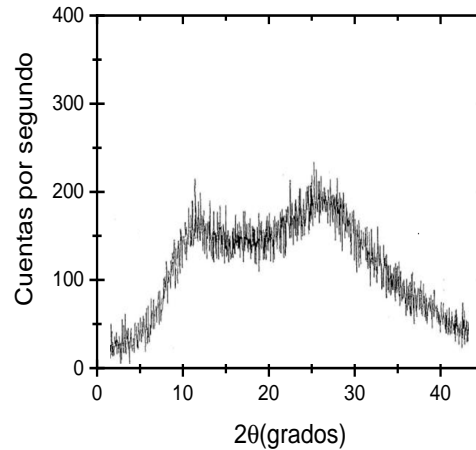


Figura 1.6: Espectro de difracción de un sólido amorfo, en ocasiones aparecen dos o tres protuberancias difusas, lo cual es evidencia de ordenamiento de corto alcance.

Polímeros: Son compuestos moleculares de cadenas largas, su composición química es a base de C, H, O y N principalmente. En la mayoría de los casos el carbono forma la columna vertebral de las cadenas. Los polímeros son el resultado de la unión de moléculas simples (monómeros) mediante una reacción química denominada polimerización. La polimerización puede llevarse a cabo de manera natural mediante reacciones bioquímicas en el interior de las células, dando origen a polímeros naturales como las proteínas y el hule natural.

Cristales líquidos: son compuestos de bajo peso molecular. Presentan ordenamiento, pero sólo en una dirección del espacio, en la otra son amorfos. Si dicho orden es función de la temperatura, se denominan termotrópicos y si es función de la concentración cuando se encuentran en solución se denominan lyotrópicos.

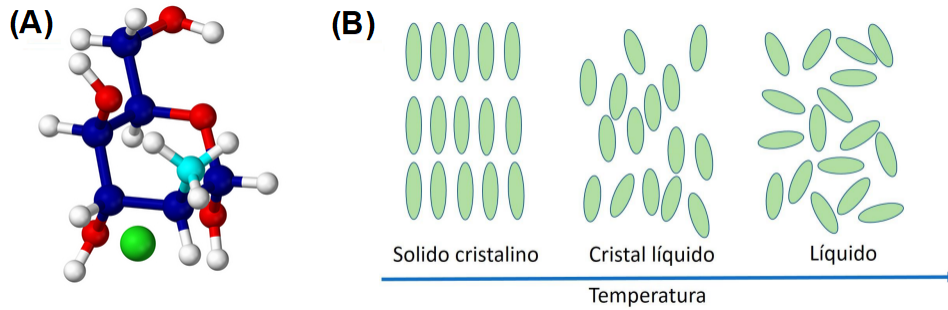


Figura 1.7: A) Estructura de polímero reticulado, B) Se observa el orden en tres fases diferentes, donde los cristales líquidos están en medio de los dos límites (orden y desorden).

1.1.3. Cuasicristales

Comúnmente, cuando se hace mención a sólidos ordenados se entiende que existe cierto patrón de regularidad. Más aún, regularidad ha sido, por lo general, asociada a la periodicidad. Sin embargo, existe otra forma de orden presente en la naturaleza: el orden aperiódico, es decir, existen sistemas que siguen reglas bien definidas (orden) pero sin ser repetitivas (periodicidad). En 1982 Dan Shechtman descubre la fase *Al-Mg* con simetría icosaédrica (cuerpo geométrico de 20 caras) pero sin periodicidad, estos resultados fueron publicados en 1984 [Shechtman, 1984]. Para describir dicha fase se introdujo el término cuasicristal (CC). En las últimas décadas, el concepto de orden aperiódico ha surgido para describir adecuadamente un número creciente de sistemas complejos, como los materiales cuasiperiódicos, un ejemplo de ello es una cadena de átomos obtenida de la secuencia de Fibonacci donde la regla de construcción es: $B \rightarrow A$ y $A \rightarrow AB$ como se muestra en la figura (1.8) donde se observa un arreglo unidimensional ordenado pero no periódico (sin simetría de traslación).

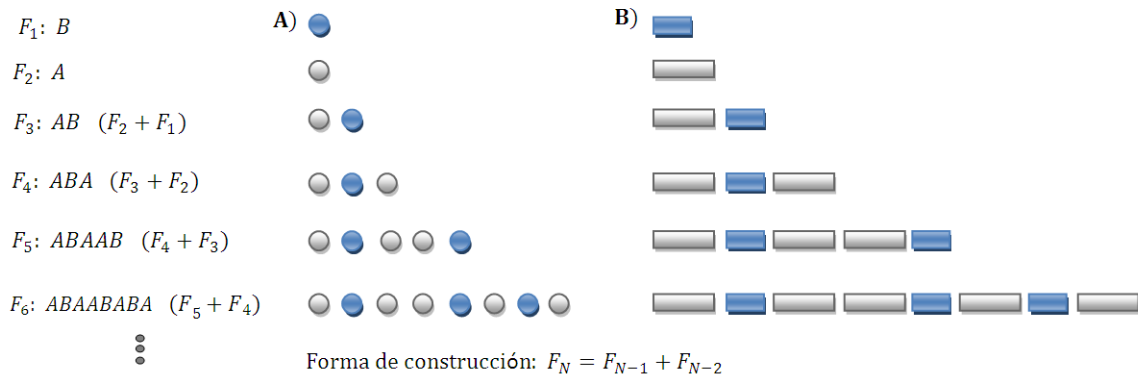


Figura 1.8: Secuencia aperiódica tipo Fibonacci, esta consta de unir la secuencia $(N - 2)$ a la secuencia $(N - 1)$. **A)** Aperiodicidad química: los círculos definen dos clases de átomos diferentes separados por la misma distancia, **B)** Aperiodicidad estructural: hay dos distancias características diferentes entre átomos de un sólo tipo.

Los cuasicristales forman parte de la familia de las aleaciones intermetálicas, se definen como estructuras con orden aperiódico (a corto o largo alcance) y con simetrías rotacionales prohibidas por

la cristalografía clásica, lo cual es posible al costo de no tener simetría de traslación. Es así como se tienen cuasicristales con simetría pentagonal, octagonal, decagonal y dodecagonal [Janssen, 2007]. La evidencia de esto se da en los patrones de difracción, donde se puede notar la simetría de grupos puntuales icosaédricos [Janot, 1994]. Esto llevó a la Unión Cristalográfica Internacional, a incluir a los materiales cuasicristalinos en la definición de cristal [IUC, 1992], *un cristal es aquel material que presenta un patrón de difracción esencialmente discreto*.

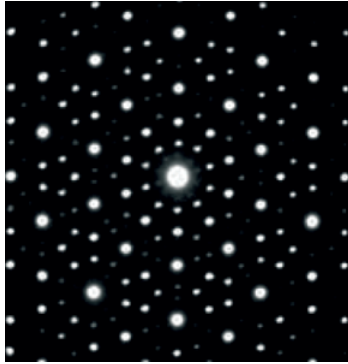


Figura 1.9: Patrón de difracción para una muestra de aleación Al-Mn [Shechtman, 1984].

1.2. Desorden y Defectos Cristalinos

Los cristales descritos por las redes de Bravais son cristales ideales, en la naturaleza esto no pasa; los cristales tienen imperfecciones o defectos que rompen la periodicidad de la estructura, esto complica su estudio debido a que no pueden usarse los métodos usuales para estructuras cristalinas. Existe un fuerte interés en la investigación por los sistemas desordenados pero no sólo eso; el interés tecnológico es enorme, ya que poseen propiedades nuevas que han causado revoluciones tecnológicas y en los dispositivos en que se aprovechan las propiedades análogas a las cristalinas, su costo es menor. La sociedad moderna está íntimamente relacionada con la tecnología, por lo que podríamos decir que la aplicación de los materiales desordenados está teniendo un gran impacto social [Aguilar, 1983]. Desorden no significa caos, más bien implica un orden defectuoso, este es un concepto intuitivo que sólo puede entenderse con respecto al orden. En los cristales se habla de orden de largo alcance, mientras en los materiales desordenados no existe pero sigue habiendo otro tipo de orden: el de corto alcance, donde hay correlaciones entre un átomo y sus vecinos cercanos, los cuales no pueden ser ignorados.

En lo que se refiere al estudio de las propiedades electrónicas el concepto clave que sigue siendo válido en sistemas desordenados es la densidad de estados $DOS(E)$ [Mott, 1979] donde los resultados no son tan diferentes de los cristalinos, excepto porque pierden detalles finos y aparecen nuevos estados electrónicos llamados *localizados*, dichos estados son una consecuencia fundamental del desorden. En el caso de un cristal sólido, los electrones de las bandas no están asociados con ningún átomo en particular, sino que pueden encontrarse con igual probabilidad en cualquier sitio; por eso se dice que sus estados son *extendidos*. En cambio, un estado localizado implica que el electrón queda atrapado en una cierta región, por lo que no puede producir una corriente de forma convencional; éste tendrá que saltar de una zona localizada a otra. Una consecuencia directa de los defectos de la red es el desorden, existen dos grandes grupos para clasificar al desorden: el primero llamado *sustitucional*, donde aún se puede definir una red cristalina, pero no se sabe qué tipo de átomo se encontrara en cada lugar, un ejemplo son las aleaciones. El segundo el de los materiales amorfos o *desorden topológico* donde no hay rastro de red cristalina.

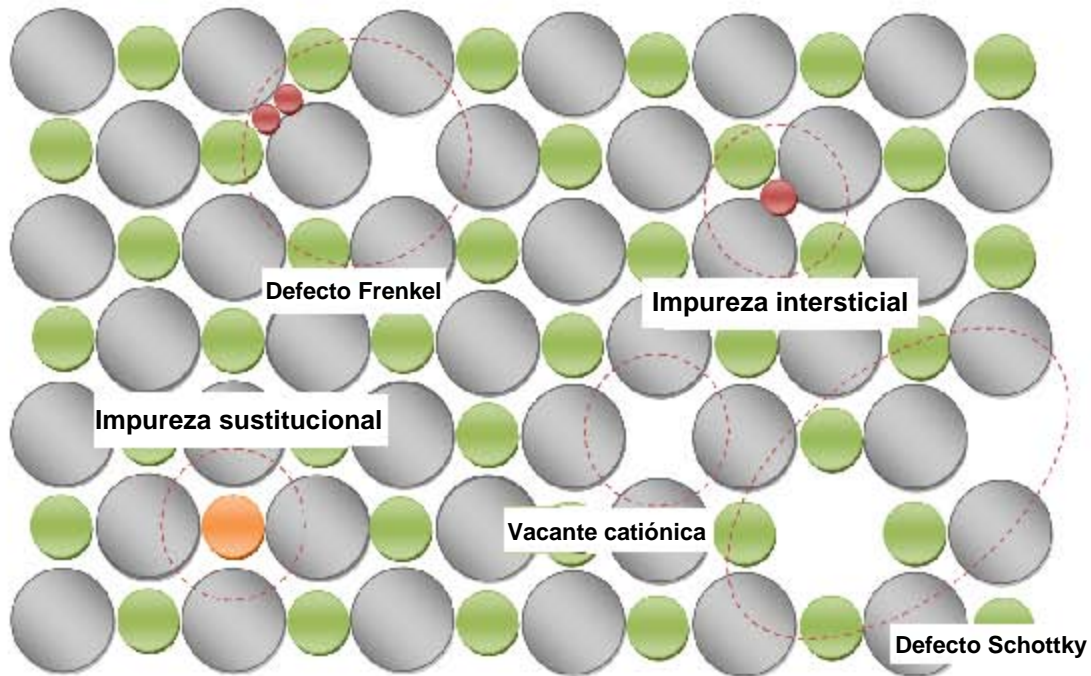


Figura 1.10: Los *defectos Schottky* están asociados a dos vacantes de diferente signo (vacante catiónica y vacante aniónica), mientras que los *defectos Frenkel* están asociados a una vacante y un intersticio.

Desorden sustitucional: Está constituido por los defectos puntuales, estos se encuentran localizados cerca de un punto de la red cristalina o alguna impureza ocupa un lugar de la red, el ejemplo más común de desorden sustitucional son las aleaciones binarias A_xB_{1-x} donde x es la concentración de átomos A , estas son comunes en metales, semiconductores y cristales iónicos, aquí una impureza ocupa el lugar de un átomo de la cadena por lo que sigue existiendo una red cristalina aunque esto de alguna manera distorsiona la vecindad de la impureza. El defecto intersticial es otro ejemplo el cual ocurre cuando un átomo deja el sitio de la red y ocupa un lugar donde normalmente no existen átomos, la ocupación de dicho lugar también la puede tomar una impureza. Por último tenemos la vacancia, que corresponde a la ausencia de un átomo de algún lugar de la red.

Desorden topológico: Aquí la forma en que se acomodan los átomos es aleatoria por lo que es imposible formar una red periódica. Las dislocaciones son el desorden topológico más débil, estas son imperfecciones lineales o bidimensionales, generalmente se introducen durante el proceso de solidificación del material o al trasladar una parte del cristal con respecto al resto; si estos se dan en los planos de la frontera se llaman fronteras de grano, también puede darse el caso en que una parte del cristal rote con respecto al resto, creándose una dislocación de rotación llamada *disclinación*. Un concepto clave en el entendimiento de las dislocaciones es el vector de Burgers, el cual nos da la magnitud y dirección de la distorsión, usualmente denotado como \vec{b} .

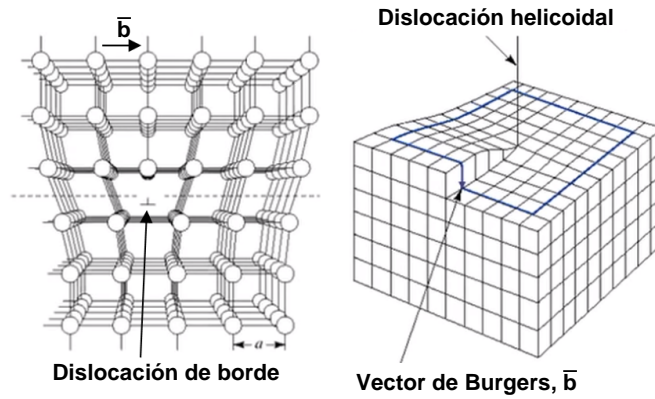


Figura 1.11: La *dislocación de borde* se origina al introducir en el material un plano de átomos adicionales, en este caso el vector de Burgers es perpendicular a la dislocación, la *dislocación helicoidal* se origina cuando las partes continuas del material sufren esfuerzos cortantes paralelos pero en sentido contrario.

También tenemos el *desorden magnético*, el cual es utilizado para materiales magnéticos donde a cada lugar de un cristal regular se le asocia un momento magnético proporcional a un valor de espín. Si el momento magnético varía al azar, se dice que tiene un material magnético desordenado, el espín para fines prácticos lo podemos ver como un vector que apunta en la dirección de la magnetización por lo que para un desorden paramagnético tenemos todos los espines orientados al azar, sin ninguna correlación entre ellos, lo cual ocurre sólo a altas temperaturas. A bajas temperaturas, las interacciones magnéticas son importantes, pues aparece el orden magnético, ya sea como ferromagneto, antiferromagneto o ferrimagneto.

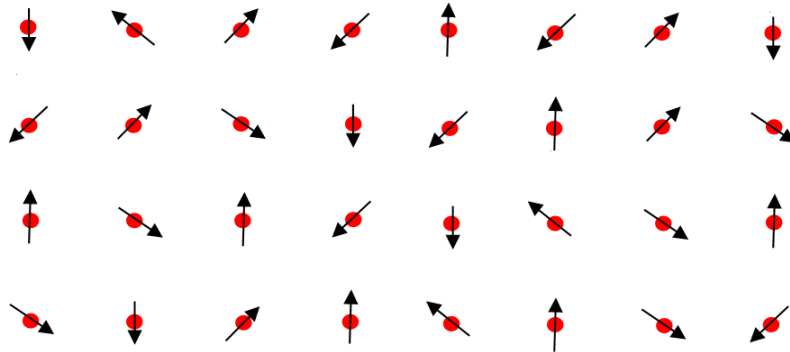


Figura 1.12: Un material *paramagnético* tiene desorden magnético, en presencia de un campo magnético externo los espines se alinean paralelos al campo. Si los momentos magnéticos están fuertemente acoplados entre sí, el fenómeno será *ferromagnetismo* o *ferrimagnetismo*.

1.3. Función de Green y Densidad de Estados

El matemático británico George Green (1793-1841) es el encargado del desarrollo de la función de Green, la cual es usada como núcleo de un operador lineal integral, si tenemos $\hat{L}(\bar{r})$ un operador diferencial, hermitiano, lineal e independiente del tiempo. La función de Green es definida como una solución de una ecuación diferencial inhomogénea [Economou, 2006],

$$[z - \hat{L}(\bar{r})]G(\bar{r}, \bar{r}', z) = \delta(\bar{r} - \bar{r}'), \quad (1.1)$$

donde $z \in \mathbb{C}$ con $\lambda = \text{Re}(z)$ y $\eta = \text{Im}(z)$, las condiciones de frontera se dan sobre \bar{r} y \bar{r}' en la superficie S de dominio Ω . El operador $\hat{L}(\bar{r})$ posee un sistema completo de funciones $\{\phi_n(\bar{r})\}$ que cumplen con ortonormalidad y completitud.

$$\hat{L}(\bar{r})\phi_n(\bar{r}) = \lambda_n\phi_n(\bar{r}), \quad (1.2)$$

$$\int_{\Omega} \phi_n^*(\bar{r})\phi_m(\bar{r}) = \delta_{nm}, \quad \text{Ortonormal} \quad (1.3)$$

$$\sum_n \phi_n(\bar{r})\phi_n^*(\bar{r}') = \delta(\bar{r} - \bar{r}'). \quad \text{Completez} \quad (1.4)$$

La suma \sum_n en su forma más general es $\sum'_n + \int dc$, donde \sum'_n es la suma de eigenfunciones en el espectro discreto y $\int dc$ es la integración sobre el espectro continuo, las ecuaciones (1.2)-(1.4) se pueden escribir en la notación de Dirac de la siguiente forma:

$$\hat{L}|\phi_n\rangle = \lambda_n|\phi_n\rangle, \quad (1.5)$$

$$\langle\phi_n|\phi_n\rangle = \delta_{nm}, \quad (1.6)$$

$$\sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = I. \quad (1.7)$$

Entonces la función de Green se puede expresar como:

$$G(z) = \frac{1}{z - \hat{L}} = \sum_n \frac{|\phi_n\rangle\langle\phi_n|}{z - \hat{L}} \stackrel{(*)}{=} \sum_n \frac{|\phi_n\rangle\langle\phi_n|}{z - \lambda_n}, \quad (1.8)$$

donde $G(z)$ se puede representar por una matriz, si sustituimos \sum_n tenemos:

$$G(z) = \sum'_n \frac{|\phi_n\rangle\langle\phi_n|}{z - \lambda_n} + \int dc \frac{|\phi_c\rangle\langle\phi_c|}{z - \lambda_c}. \quad (1.9)$$

La última igualdad (1.8) se da apartir de usar la serie de Taylor de la función $1/(1-x)$ donde $x = \hat{L}$ y así poder usar la propiedad de la ecuación (1.5). Dado que el operador \hat{L} es hermitiano, se tiene que todos los eigenvalores $\{\lambda_n\}$ son reales, esto nos lleva a las siguientes consideraciones:

- $G(z)$ es definida de forma única si y sólo si $z \neq \{\lambda_n\}$
- Si z coincide con alguno de los eigenvalores discretos ($z = \lambda$) G exhibe polos simples (de primer orden), entonces G no existe.
- Los polos de $G(z)$ no siempre son eigenvalores del espectro discreto.
- Si z pertenece al espectro continuo, generalmente existe $G(z)$, pero no de forma única. Por lo que se definen dos expresiones particulares G^+ y G^- .

$$G^+(\bar{r}, \bar{r}'; \lambda) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} G(\bar{r}, \bar{r}'; \lambda + i\eta) = G^+(\lambda), \quad (1.10)$$

$$G^-(\bar{r}, \bar{r}'; \lambda) = \lim_{\eta \rightarrow 0^-} G(\bar{r}, \bar{r}'; \lambda - i\eta) = G^-(\lambda). \quad (1.11)$$

- En sistemas desordenados existe la posibilidad que en el espectro continuo asociado a estados propios localizados, los límites laterales (G^+ , G^-) no existan, por lo que la línea de singularidad de dicho espectro no es un corte de la rama, esto da origen a una *frontera natural* en el eje real.

Las funciones de Green G^+ y G^- son conocidas como funciones avanzada y retardada respectivamente, su forma explícita es:

$$G^\pm = \sum_n \frac{|\phi_n\rangle \langle \phi_n|}{(\lambda \pm i\eta) - \lambda_n} = \frac{1}{(\lambda \pm i\eta) - \lambda_n} = \frac{1}{(\lambda - \lambda_n) \pm i\eta} = \sum_n \frac{|\phi_n\rangle \langle \phi_n|}{(\lambda - \lambda_n) \pm i\eta}, \quad (1.12)$$

o en la representación de \bar{r} tenemos:

$$G^\pm(\bar{r}, \bar{r}'; \lambda) = \sum_n \frac{\phi_n(\bar{r})\phi_n^*(\bar{r}')}{(\lambda - \lambda_n) \pm i\eta}. \quad (1.13)$$

Usando la siguiente identidad

$$\lim_{y \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm iy} = P\left(\frac{1}{x}\right) \mp i\pi\delta(x), \quad (1.14)$$

y la ecuación (1.12) se puede escribir la discontinuidad $\tilde{G}(\lambda)$ en términos de una función delta de Dirac, tomando $y = \eta$ y $x = (\lambda - \lambda_n)$.

$$\tilde{G}(\lambda) \equiv G^+(\lambda) - G^-(\lambda) = -2i\pi\delta(\lambda - \lambda_n). \quad (1.15)$$

En la representación \bar{r} tenemos:

$$\tilde{G}(\bar{r}, \bar{r}'; \lambda) = -2i\pi \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n) \phi_n(\bar{r})\phi_n^*(\bar{r}'). \quad (1.16)$$

Si aplicamos la identidad (1.14) a la ecuación (1.13) y considerando sólo los elementos diagonales de la matriz, tenemos que:

$$G^\pm(\bar{r}, \bar{r}; \lambda) = P \sum_n \frac{\phi_n(\bar{r})\phi_n^*(\bar{r})}{\lambda - \lambda_n} \mp i\pi \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n) \phi_n(\bar{r})\phi_n^*(\bar{r}), \quad (1.17)$$

integrando con respecto a \bar{r} tenemos:

$$\text{Tr}\{G^\pm(\lambda)\} \equiv \int d\bar{r} G^\pm(\bar{r}, \bar{r}; \lambda) = \int d\bar{r} \langle \bar{r} | G^\pm(\lambda) | \bar{r} \rangle = P \sum_n \frac{1}{\lambda - \lambda_n} \mp i\pi \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n), \quad (1.18)$$

donde la cantidad $\sum_n \delta(\lambda - \lambda_n)$ es la densidad de estados (DOS(λ)) y la densidad de estados local es:

$$\varrho = \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n) \phi_n(\bar{r})\phi_n^*(\bar{r}), \quad (1.19)$$

la relación entre ambas densidades de estados está dada como:

$$N(\lambda) = \int \varrho(\bar{r}; \lambda) d\bar{r}, \quad (1.20)$$

de las ecuaciones (1.16) y (1.18) tenemos la densidad de estados en término de la función de Green:

$$\varrho(\bar{r}; \lambda) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im}\{G^\pm(\bar{r}, \bar{r}; \lambda)\} = -\frac{1}{2\pi i} \tilde{G}(\bar{r}, \bar{r}; \lambda) \quad (1.21)$$

y

$$\text{DOS}(\lambda) = N(\lambda) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im}\{\text{Tr}[G^\pm(\lambda)]\}. \quad (1.22)$$

1.4. Modelo de Amarre Fuerte (Tight-Binding)

Existen dos puntos de partida simples diametralmente opuestos para obtener eigenvalores electrónicos $E_n(\bar{k})$ y eigenfunciones $\Psi_{n,k}(\bar{r})$, en sólidos cristalinos [Economou, 2006]:

- Modelo de electrón casi libre (*NFE*), considera que en un sólido el potencial efectivo total que siente cada electrón es lo suficientemente débil como para ser tratado por métodos de perturbación, por lo que las eigenfunciones son ondas planas.
- El *LCAO* (*Linear Combinations of Atomic Orbitals*), considera que los sólidos están formados por átomos reunidos desde una distancia relativamente infinita, por lo que es natural tratar de expresar las funciones de onda electrónicas desconocidas como combinaciones lineales de orbitales atómicos .

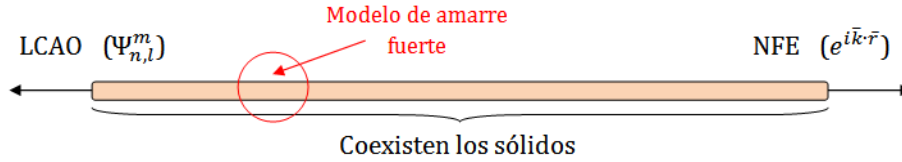


Figura 1.13: Modelo de amarre fuerte usa funciones de onda plana y orbitales atómicos.

Existe una versión más simple del *LCAO* denominada como *modelo de amarre fuerte* (TB), el cual considera un átomo por celda primitiva con un solo orbital atómico por átomo, así como el simple acoplamiento de sus vecinos más cercanos y la ortonormalidad de los orbitales atómicos. Este modelo es usado ampliamente en sistemas cristalinos tridimensionales, bidimensionales y aún más unidimensionales para el cálculo de la relación de dispersión electrónica, así como algunas propiedades ópticas [Voon, 1997]. Por otra parte el estudio de las propiedades eléctricas, térmicas u ópticas de sistemas desordenados se dificulta por la carencia de modelos cuando se desea analizar el efecto de correlaciones y de la estructura a nivel molecular. No obstante el TB tiene la virtud de permitir analizar las propiedades electrónicas de sistemas que no posean simetría traslacional.

El modelo se basa en una teoría semiempírica en una base de funciones de Wannier $|\bar{l}\rangle$ que son las transformadas de Fourier de las funciones de Bloch $|\bar{k}\rangle$, localizadas en las posiciones atómicas y ortonormales entre sí. Las funciones de Wannier son orbitales atómicos normalizados en espacio real, las cuales *amarre fuerte* supone que existen sin dar una forma explícita de ellas, la relación entre ambas funciones de onda es:

$$|\bar{k}\rangle = \sum_l C_l |\bar{l}\rangle = C_0 \sum_l e^{i\bar{k}\cdot\bar{l}} |\bar{l}\rangle, \quad (1.23)$$

donde la ortonormalidad de las funciones propias $\{|\bar{k}\rangle\}$ implican que $C_0 = \frac{1}{\sqrt{N}}$. El Hamiltoniano de amarre fuerte (TBH) es de la forma:

$$\hat{H} = \sum_l |\bar{l}\rangle \varepsilon_l \langle \bar{l}| + \sum_{l,m \neq l} |\bar{l}\rangle V_{lm} \langle \bar{m}|, \quad (1.24)$$

donde cada estado $|\bar{l}\rangle$ es un orbital atómico centrado en el sitio l , por lo que dichos sitios forman una red, los elementos diagonales de la matriz ε_l son la energía del electrón localizado en el sitio l , los elementos fuera de la diagonal V_{lm} ($V_{lm} = 0$, si $l = m$) son la amplitud de probabilidad (integral de salto) para que el electrón pase del sitio l al m . Dado que TBH es un enfoque local en el espacio real tiene algunas ventajas como el trabajar con fronteras, desfases, impurezas, etc. y no sólo sistemas periódicos infinitos como usualmente lo requiere espacio recíproco, la desventaja del modelo es que debe contar átomo por átomo, lo cual para un sistema comparado con el número de avogadro (10^{23} átomos) es complicado.

1.4.1. Cadena Periódica

El problema de los electrones en un potencial periódico es, en principio, un problema de muchos electrones, dado que el Hamiltoniano completo del sólido contiene además de los potenciales de interacción de un electrón con el núcleo atómico, los potenciales de interacción electrón-electrón, en la aproximación de electrón independiente, estas interacciones se presentan mediante un potencial efectivo de un electrón $V(\vec{r})$. El problema de cómo elegir este potencial efectivo es complicado, sin embargo existe un potencial cristalino que tiene la forma mostrada en la figura (1.14), en el cual se aprecia a los potenciales atómicos individuales a medida de que nos acercamos al ion y nivelado en la región entre los iones.

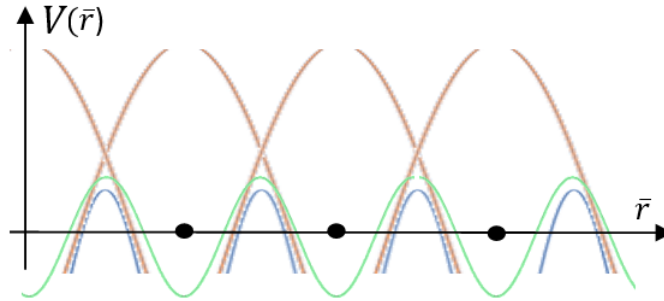


Figura 1.14: Potencial periódico para una cadena unidimensional de iones, las líneas rojas dan el potencial de los iones aislados, las líneas azules dan el potencial a lo largo de la cadena entre planos de iones, las líneas verdes dan el potencial de la cadena de iones y los puntos son las posiciones de equilibrio de los iones [Ashcroft, 1976].

Dado que los iones en un cristal perfecto están distribuidos de forma periódica, podemos considerar el problema de un electrón en un potencial $V(\vec{r})$ con la periodicidad de la red de Bravais, es decir,

$$V(\vec{r} + \vec{R}) = V(\vec{r}), \quad (1.25)$$

para todos los vectores \vec{R} de la red de Bravais. Para el análisis de una cadena periódica, también es necesario conocer algo sobre sus funciones de onda, para ello tenemos el *teorema de Bloch* [Ashcroft, 1976]:

- Las funciones propias Ψ de un electrón asociadas a un Hamiltoniano $\hat{H} = -\hbar^2 \nabla^2 / 2m + V(\vec{r})$, donde $V(\vec{r} + \vec{R}) = V(\vec{r})$ para todo \vec{R} en la red de Bravais, tienen la forma de una onda plana ($e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$) multiplicada por una función con la periodicidad de la red de Bravais ($u_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{n\vec{k}}(\vec{r})$):

$$\Psi_{n\bar{k}}(\bar{k}) = e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}} u_{n\bar{k}}(\bar{r}). \quad (1.26)$$

Otra forma de encontrar el teorema de Bloch es:

$$\Psi_{n\bar{k}}(\bar{r} + \bar{R}) = e^{i\bar{k}\cdot\bar{R}} \Psi_{n\bar{k}}(\bar{r}), \quad (1.27)$$

donde $\Psi_{n\bar{k}}$ son las funciones de Bloch, un electrón descrito por las funciones de Bloch tiene la misma posibilidad de estar en todas las celdas unitarias de la red, estos estados se conocen como *estados extendidos*. El teorema de Bloch fue probado por primera vez por el matemático francés Achile M. G. Floquet (1847-1920) en un caso unidimensional, esta prueba es conocida como el *teorema de Floquet* [Peña, 2006].

Ahora consideramos una cadena lineal periódica monoorbital cuyo Hamiltoniano obedece el modelo de amarre fuerte con interacción a primeros vecinos,

$$\hat{H} = \sum_l |\bar{l}\rangle \varepsilon \langle \bar{l}| + \sum_l |\bar{l}\rangle t \langle \bar{l} - \bar{1}| + \sum_l |\bar{l}\rangle t \langle \bar{l} + \bar{1}| \quad (1.28)$$

utilizando la ecuación de Schrödinger $\hat{H} |\bar{k}\rangle = E |\bar{k}\rangle$, donde $|\bar{k}\rangle$ está dado por la ecuación (1.23) y \hat{H} por la ecuación (1.28), tenemos que:

$$E e^{i\bar{k}l} = \varepsilon e^{i\bar{k}l} + t(e^{i\bar{k}(l-a)} + e^{i\bar{k}(l+a)}),$$

$$E(k) = \varepsilon + 2t \cdot \cos(ka), \quad (1.29)$$

donde $E(k)$ es la relación de dispersión, la forma más general de encontrarla es [Economou, 2006]:

$$E(\bar{k}) = \varepsilon_0 + t \sum_{\bar{l}} e^{i\bar{k}\cdot\bar{l}}. \quad (1.30)$$

Para dos dimensiones (red cuadrada con 4 primeros vecinos) y tres dimensiones (red cúbica simple con 6 primeros vecinos), tenemos:

$$E(\bar{k})_{2D} = \varepsilon_0 + 2t[\cos(k_1 a) + \cos(k_2 a)], \quad (1.31)$$

$$E(\bar{k})_{3D} = \varepsilon_0 + 2t[\cos(k_1 a) + \cos(k_2 a) + \cos(k_3 a)]. \quad (1.32)$$

1.5. Hamiltoniano de Amarre Fuerte en Funciones de Green

Si tomamos el Hamiltoniano de amarre fuerte y lo sustituimos en la ecuación (1.8), la función de Green es:

$$G(z) = \sum_{\bar{k}} \frac{|\bar{k}\rangle \langle \bar{k}|}{z - E(\bar{k})}, \quad (1.33)$$

donde $|\bar{k}\rangle$ son las funciones de Bloch dadas por la ecuación (1.23), esta nos dice que los modos propios son ondas de propagación tales que la amplitud de cada sitio es la misma y la fase cambia de forma regular ($\phi_l = \bar{k} \cdot \bar{l}$), por otro lado $E(\bar{k})$ es la relación de dispersión dada por la ecuación (1.30).

Los elementos de la matriz $G(z)$ están dados como:

$$G(\bar{l}, \bar{m}; z) = \langle \bar{l}| G(z) |\bar{m}\rangle = \sum_{\bar{k}} \frac{\langle \bar{l}| |\bar{k}\rangle \langle \bar{k}| |\bar{m}\rangle}{z - E(\bar{k})} = \frac{\Omega}{N(2\pi)^d} \int_{1BZ} \frac{e^{i\bar{k}\cdot(\bar{l}-\bar{m})}}{z - E(\bar{k})}. \quad (1.34)$$

La integral está restringida a la primera zona de Brillouin (1BZ), si el sistema es unidimensional ($d = 1$) podemos usar la ecuación (1.29) en (1.34) y tener que:

$$G(l, m; z) = \frac{L}{2\pi N} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk \frac{e^{ika(l-m)}}{z - \varepsilon_0 - 2V \cos(ka)} \stackrel{\phi=ka}{=} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\phi \frac{e^{i\phi(l-m)}}{z - \varepsilon_0 - 2V \cos(\phi)}, \quad (1.35)$$

donde se tuvo en cuenta que $L/N = a$. Para resolver la integral es necesario usar algún método de variable compleja, para esto podemos tomar $\omega = e^{i\phi}$ e integrar a lo largo del círculo unitario, por lo que la integral va a depender del valor absoluto $|l - m|$.

$$G(l, m; z) = \frac{1}{2\pi |V|} \oint d\omega \frac{\omega^{|l-m|}}{\omega^2 + 2x\omega + 1}, \quad (1.36)$$

donde $x = \frac{z - \varepsilon_0}{2V}$ y $B = 2|V|$ (la mitad del ancho de banda), para utilizar el método de residuo de variable compleja es importante localizar los polos de la función, es decir, donde se cumple que $\omega^2 + 2x\omega + 1 = 0$, las soluciones son:

$$\begin{aligned} \varrho_1 &= \omega_1 = -x + \sqrt{x^2 - 1}, \\ \varrho_2 &= \omega_2 = -x - \sqrt{x^2 - 1}. \end{aligned}$$

Si ambas raíces se encuentran en el círculo unitario, x necesariamente debe estar entre $[-1, 1]$ y la integral (1.36) no está definida en el plano complejo, por lo tanto esta condición da el espectro continuo de \hat{H} que se encuentra en el eje real E , el cual está acotado en $[\varepsilon_0 - 2|V|, \varepsilon_0 + 2|V|]$ este intervalo de energías permitidas es conocido como *banda de energía*.

Si z no coincide con esta línea singular y utilizamos el método de residuos, tenemos que:

$$G(l, m; z) = \frac{1}{|V|} \frac{\varrho_1^{|l-m|}}{\varrho_1 - \varrho_2} = \frac{1}{\sqrt{(z - \varepsilon_0)^2 - B^2}} \varrho_1^{|l-m|}. \quad (1.37)$$

Para z que coincide con la línea singular (espectro) tenemos:

$$G^\pm(l, m; z) = \frac{\mp i}{\sqrt{B^2 - (E - \varepsilon_0)^2}} (-x \pm i\sqrt{1 - x^2})^{|l-m|}, \quad (1.38)$$

donde $\varepsilon_0 - B \leq E \leq \varepsilon_0 + B$ y $x = \frac{E - \varepsilon_0}{B}$, observe que tanto $G(z)$ y $G^\pm(z)$ tienen solución analítica. Entonces la densidad de estados local (ϱ) de una cadena periódica infinita está dada por:

$$\varrho(E) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im}\{G^\pm(l, l; E)\} = \frac{\theta(B - |E - \varepsilon_0|)}{\pi \sqrt{B^2 - (E - \varepsilon_0)^2}}. \quad (1.39)$$

Existe otro camino de encontrar la solución de la ecuación diferencial (1.1), que consiste en discretizar la coordenada espacial. Esto permite transformar la función de Green en una matriz [Ferry, 2009],

$$G(\vec{r}, \vec{r}') \longrightarrow G(i, j),$$

donde los índices i, j denotan los puntos en una red discreta espacial, estos puntos en la red pueden significar puntos de una discretización artificial (método de diferencias finitas), o átomos reales de un material [Davies, 1998]. En este último caso la aproximación de amarre fuerte puede hacerse más detallada al incluir diferentes bandas, términos de interacción espín-órbita, etc. [Mireles, 2002]. Dado que la ecuación diferencial ahora es una ecuación matricial, encontrar la función de Green se convierte en un problema de inversión, la siguiente relación es conocida como la ecuación de Dyson:

$$[(\lambda + i\eta)\underline{I} - \hat{H}]\underline{G} = \underline{I}, \tag{1.40}$$

donde \underline{I} es la matriz identidad y \hat{H} el Hamiltoniano de amarre fuerte, por lo tanto la matriz de Green está dada por:

$$\underline{G} = [(\lambda + i\eta)\underline{I} - \hat{H}]^{-1}.$$

En sistemas abiertos el espacio a discretizar es infinito, entonces la matriz asociada al TBH tiene un número infinito de elementos, por lo que es imposible de invertir. El problema se puede hacer más soluble, si la inversión de la matriz se limita, es decir, resolver un sistema cerrado con fronteras reflejantes. Una vez que se conoce explícitamente la matriz de Green, se utiliza la ecuación (1.22) donde obtenemos la relación directa de los elementos diagonales de la matriz con la densidad de estados:

$$\text{DOS}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ \sum_{i=1}^N G(i, i) \right\} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \{ \text{Tr}[G(\lambda)] \}. \tag{1.41}$$

El problema de invertir matrices muy grandes asociadas a cadenas semi-infinitas, se vuelve más soluble mediante el método de renormalización.

1.6. Método de Renormalización

El método de renormalización o grupo de renormalización en espacio real fue introducido originalmente como un método para remover divergencias en la teoría cuántica de campos. En la década de 1970, Kenneth Wilson estudió el efecto de electrones dispersados por impurezas magnéticas en un metal, conocido como problema de Kondo [Wilson, 1975], usando grupo de renormalización en espacio real. Los métodos de grupo de renormalización que normalmente se usan, son principalmente de bloques, en los cuales un cúmulo que contiene un cierto número de sitios o grados de libertad es reemplazado por un nuevo sitio renormalizado llevando menos grados de libertad efectivos y conservando todas las propiedades del sistema [Sánchez, 2003]. La forma en que Wilson resuelve el problema de Kondo da origen a muchos algoritmos de grupo de renormalización en espacio real, para poder obtener el crecimiento de una red, un pequeño ejemplo se muestra a continuación.

Consideremos una cadena periódica con las mismas características mostradas en la subsección (1.4.1), definimos como primera generación $N(1)$ a la celda unitaria dada por dos sitios con autoenergías ε_0 y una integral de salto t , la segunda generación $N(2)$ con dos celdas unitarias, es decir, 4 sitios y 3 integrales de salto, la tercera generación $N(3)$ con cuatro celdas unitarias y así sucesivamente de tal forma que cada generación tiene el doble de celdas unitarias que su generación antecesora, tal como se muestra en la figura (1.15).

La ventaja del método de renormalización es que una cadena semi-infinita se puede reducir a un problema de 2 sitios efectivos, con las energías efectivas $\varepsilon_L(n)$, $\varepsilon_R(n)$ y una integral de salto efectiva $t(n)$ donde estas tres cantidades tienen toda la información del sistema renormalizado, por lo que es un modelo exacto y no una aproximación como se puede llegar a pensar.

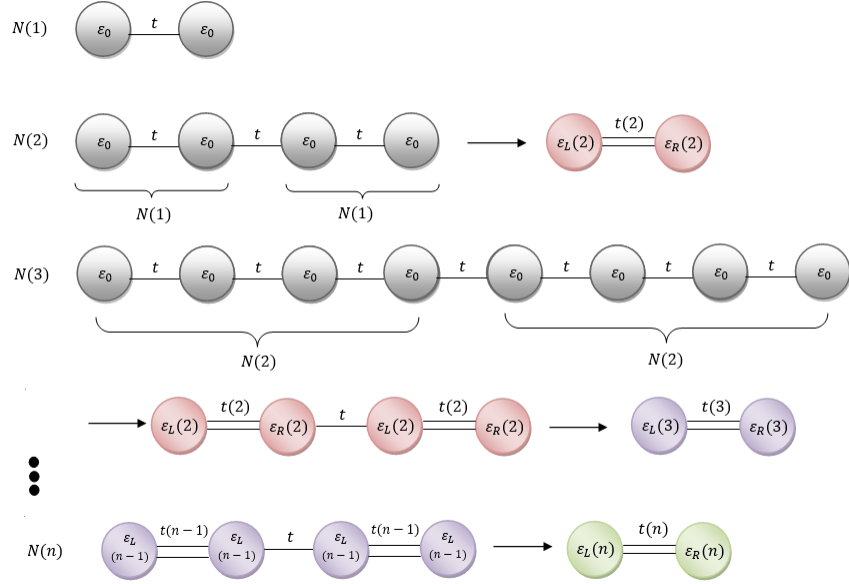


Figura 1.15: Renormalización de una cadena periódica: el problema de 4 sitios siempre se reduce a un problema de 2 sitios efectivos, donde el doble enlace denota una red finita renormalizada y dada la forma de construcción tenemos que la generación n -ésima tiene 2^n sitios.

Para calcular el conjunto $\{\varepsilon_L(n), \varepsilon_R(n), t(n)\}$ necesitamos la ecuación de Dyson dada por (1.40), si definimos $\epsilon = \lambda + i\eta$ entonces para la generación n -ésima tenemos que:

$$\begin{pmatrix} \epsilon - \varepsilon_L(n-1) & -t(n-1) & 0 & 0 \\ -t(n-1) & \epsilon - \varepsilon_R(n-1) & -t & 0 \\ 0 & -t & \epsilon - \varepsilon_L(n-1) & -t(n-1) \\ 0 & 0 & -t(n-1) & \epsilon - \varepsilon_R(n-1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & G_{13} & G_{14} \\ G_{21} & G_{22} & G_{23} & G_{24} \\ G_{31} & G_{32} & G_{33} & G_{34} \\ G_{41} & G_{42} & G_{43} & G_{44} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.42)$$

Si multiplicamos la matriz asociada al Hamiltoniano de amarre fuerte por alguna de las columnas de la matriz de Green tenemos que:

$$[\epsilon - \varepsilon_L(n-1)]G_{11} - t(n-1)G_{21} = 1, \quad (1.43)$$

$$-t(n-1)G_{11} + [\epsilon - \varepsilon_R(n-1)]G_{21} - tG_{31} = 0, \quad (1.44)$$

$$-tG_{21} + [\epsilon - \varepsilon_L(n-1)]G_{31} - t(n-1)G_{41} = 0, \quad (1.45)$$

$$-t(n-1)G_{31} + [\epsilon - \varepsilon_R(n-1)]G_{41} = 0. \quad (1.46)$$

La idea es pasar la información de los sitios centrales a los sitios laterales, por lo que necesitamos sustituir las ecuaciones (1.44) y (1.45) en la ecuación (1.43), de la misma forma para la ecuación (1.46) por lo que éstas quedarán expresadas en términos de G_{11} y G_{41} de la siguiente manera:

$$[\epsilon - \epsilon_L(n-1) - \frac{[\epsilon - \epsilon_L(n-1)]t(n-1)^2}{Kappa(n)}]G_{11} + [\frac{-t(n-1)^2t}{Kappa(n)}]G_{41} = 1, \quad (1.47)$$

$$[\frac{-t(n-1)^2t}{Kappa(n)}]G_{11} + [\epsilon - \epsilon_R(n-1) - \frac{[\epsilon - \epsilon_R(n-1)]t(n-1)^2}{Kappa(n)}]G_{41} = 0, \quad (1.48)$$

donde $Kappa(n) = [\epsilon - \epsilon_L(n-1)][\epsilon - \epsilon_R(n-1)] - t^2$, si lo vemos de forma matricial tenemos que:

$$\begin{pmatrix} \epsilon - [\epsilon_L(n-1) + \frac{[\epsilon - \epsilon_L(n-1)]t(n-1)^2}{Kappa(n)}] & -\frac{t(n-1)^2t}{Kappa(n)} \\ -\frac{t(n-1)^2t}{Kappa(n)} & \epsilon - [\epsilon_R(n-1) + \frac{[\epsilon - \epsilon_R(n-1)]t(n-1)^2}{Kappa(n)}] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11} & G_{14} \\ G_{41} & G_{44} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.49)$$

Si comparamos la ecuación (1.49) con la ecuación de Dyson, es claro observar cuáles son las energías efectivas y la integral de salto efectiva, dadas de la siguiente manera:

$$\epsilon_L(n) = \epsilon_L(n-1) + \frac{[\epsilon - \epsilon_L(n-1)]t(n-1)^2}{Kappa(n)}, \quad (1.50)$$

$$\epsilon_R(n) = \epsilon_R(n-1) + \frac{[\epsilon - \epsilon_R(n-1)]t(n-1)^2}{Kappa(n)}, \quad (1.51)$$

$$t(n) = \frac{t(n-1)^2t}{Kappa(n)}. \quad (1.52)$$

Al calcular los coeficientes de la función de Green bajo estos nuevos parámetros tenemos que:

$$G_{11} = \frac{\epsilon - \epsilon_R(n)}{[\epsilon - \epsilon_R(n)][\epsilon - \epsilon_L(n)] - t(n)^2},$$

$$G_{44} = \frac{\epsilon - \epsilon_L(n)}{[\epsilon - \epsilon_R(n)][\epsilon - \epsilon_L(n)] - t(n)^2},$$

$$G_{14} = G_{41} = \frac{t(n)}{[\epsilon - \epsilon_R(n)][\epsilon - \epsilon_L(n)] - t(n)^2}.$$

La ecuación (1.41) nos dice que basta con obtener la traza de la matriz de Green para calcular la densidad de estados, esto es cierto si el sistema es no renormalizado, dado que nuestro sistema es renormalizado la relación entre la densidad de estados y la matriz de Green está dada como [Sánchez, 2014]:

$$\text{DOS}(\epsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[A(n)G_{11} + B(n)G_{44} + C(n)G_{14} + D(n)], \quad (1.53)$$

donde el conjunto $\{A(n), B(n), C(n), D(n)\}$ son los coeficientes de renormalización con $A(n)$ asociado a $\epsilon_L(n)$, $B(n)$ asociado a $\epsilon_R(n)$, $C(n)$ asociado con la interacción entre los dos sitios efectivos y $D(n)$ un término independiente. A continuación calcularemos los coeficientes de renormalización para la segunda generación tal y como se muestra en la figura (1.15). Usemos la ecuación (1.42) con $n = 2$ donde $t(1) = t$ y $\epsilon_L(1) = \epsilon_R(1) = \epsilon_0$ entonces tenemos que:

$$\begin{pmatrix} \epsilon - \varepsilon_0 & -t & 0 & 0 \\ -t & \epsilon - \varepsilon_0 & -t & 0 \\ 0 & -t & \epsilon - \varepsilon_0 & -t \\ 0 & 0 & -t & \epsilon - \varepsilon_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & G_{13} & G_{14} \\ G_{21} & G_{22} & G_{23} & G_{24} \\ G_{31} & G_{32} & G_{33} & G_{34} \\ G_{41} & G_{42} & G_{43} & G_{44} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Si multiplicamos las filas 2 y 3 de la matriz TBH por toda la matriz de Green tenemos las siguientes ocho ecuaciones, para la fila 2 tenemos:

$$\begin{aligned} a) & : (-t)G_{11} + (\epsilon - \varepsilon_0)G_{21} + (-t)G_{31} = 0, \\ b) & : (-t)G_{12} + (\epsilon - \varepsilon_0)G_{22} + (-t)G_{32} = 1, \\ c) & : (-t)G_{13} + (\epsilon - \varepsilon_0)G_{23} + (-t)G_{33} = 0, \\ d) & : (-t)G_{14} + (\epsilon - \varepsilon_0)G_{24} + (-t)G_{34} = 0 \end{aligned} \tag{1.54}$$

y para la fila 3:

$$\begin{aligned} a) & : (-t)G_{21} + (\epsilon - \varepsilon_0)G_{31} + (-t)G_{41} = 0, \\ b) & : (-t)G_{22} + (\epsilon - \varepsilon_0)G_{32} + (-t)G_{42} = 0, \\ c) & : (-t)G_{23} + (\epsilon - \varepsilon_0)G_{33} + (-t)G_{43} = 1, \\ d) & : (-t)G_{24} + (\epsilon - \varepsilon_0)G_{34} + (-t)G_{44} = 0. \end{aligned} \tag{1.55}$$

La densidad de estados para el sistema no renormalizado es $DOS(\epsilon, 2) = -\text{Im}[G_{11} + G_{22} + G_{33} + G_{44}]/\pi$, mientras que para el sistema renormalizado tenemos $DOS_N(\epsilon, 2) = -\text{Im}[A(2)G_{11} + B(2)G_{44} + C(2)G_{14} + D(2)]/\pi$, por lo que el objetivo será que dada la ecuación (1.54.b) se obtenga a G_{22} en términos de G_{11} , G_{44} y G_{14} sustituyendo las demás ecuaciones, de la misma forma para la ecuación (1.55.c) obtener a G_{33} en términos de G_{11} , G_{44} y G_{14} . Es importante recordar que la matriz de Green es simétrica por lo que sus coeficientes cumplen que $G_{ij} = G_{ji}$, bajo esta consideración y realizando el álgebra necesaria se obtiene:

$$G_{22} = \frac{\epsilon - \varepsilon_0}{Kappa(2)} + \left[\frac{(\epsilon - \varepsilon_0)t}{Kappa(2)}\right]^2 G_{11} + 2\left[\frac{(\epsilon - \varepsilon_0)t^3}{Kappa(2)^2}\right] G_{14} + \left[\frac{t^2}{Kappa(2)}\right]^2 G_{44}, \tag{1.56}$$

y

$$G_{33} = \frac{\epsilon - \varepsilon_0}{Kappa(2)} + \left[\frac{t^2}{Kappa(2)}\right]^2 G_{11} + 2\left[\frac{(\epsilon - \varepsilon_0)t^3}{Kappa(2)^2}\right] G_{14} + \left[\frac{(\epsilon - \varepsilon_0)t}{Kappa(2)}\right]^2 G_{44}, \tag{1.57}$$

donde $Kappa(2) = (\epsilon - \varepsilon_0)^2 - t^2$, al sustituir G_{22} y G_{33} en $DOS(\epsilon, 2)$ tenemos la densidad de estados del sistema no normalizado en función de G_{11} , G_{44} y G_{14} , y podemos comparar de forma unívoca con $DOS_N(\epsilon, 2)$, de esta manera conocemos los coeficientes de normalización para la segunda generación:

$$\begin{aligned} A(2) & = 1 + \left[\frac{(\epsilon - \varepsilon_0)t}{Kappa(2)}\right]^2 + \left[\frac{t^2}{Kappa(2)}\right]^2, \\ B(2) & = \left[\frac{t^2}{Kappa(2)}\right]^2 + \left[\frac{(\epsilon - \varepsilon_0)t}{Kappa(2)}\right]^2 + 1, \end{aligned}$$

$$C(2) = 4\left[\frac{(\epsilon - \epsilon_0)t^3}{Kappa(2)^2}\right], \quad D(2) = 2\left[\frac{\epsilon - \epsilon_0}{Kappa(2)}\right].$$

Para calcular los coeficientes de renormalización para la generación n –ésima se usa la misma filosofía, sólo que existe un cambio, la cadena a renormalizar tiene dos subcadenas renormalizadas las cuales tienen 2 sitios efectivos cada una y estas se encuentran unidas por una integral de salto de valor t , como se muestra en la figura (1.15), por lo tanto el valor de estos coeficientes está dado de la siguiente manera:

$$A(n) = A(n-1) \left\{ 1 + \left[\frac{t(n-1)t}{Kappa(n)} \right]^2 \right\} + B(n-1) \left[\frac{t(n-1)\alpha}{Kappa(n)} \right]^2 + C(n-1) \left[\frac{t(n-1)\alpha}{Kappa(n)} \right],$$

$$B(n) = A(n-1) \left[\frac{t(n-1)\beta}{Kappa(n)} \right]^2 + B(n-1) \left\{ 1 + \left[\frac{t(n-1)t}{Kappa(n)} \right]^2 \right\} + C(n-1) \left[\frac{t(n-1)\beta}{Kappa(n)} \right],$$

$$C(n) = \left[\frac{2t(n-1)^2t}{Kappa(n)^2} \right] [A(n-1)\beta + B(n-1)\alpha] + C(n-1) \left[\frac{2t(n-1)t}{Kappa(n)} \right],$$

$$D(n) = [A(n-1)\beta + B(n-1)\alpha] \left[\frac{1}{Kappa(n)} \right] + 2D(n-1),$$

donde $\alpha = \epsilon - \epsilon_L(n-1)$, $\beta = \epsilon - \epsilon_R(n-1)$, podemos observar cómo el conjunto $\{\epsilon_L(n), \epsilon_R(n), t(n)\}$ y los coeficientes de renormalización $\{A(n), B(n), C(n), D(n)\}$ dependen de los parámetros que definen a la generación anterior, es decir, son recursivos, por lo que basta con dar una condición inicial para aumentar el tamaño de la cadena tanto como se requiera y contener su información en dos sitios efectivos, dicha condición inicial puede ser la celda unitaria, donde: $A(1) = B(1) = 1$, $C(1) = D(1) = 0$ y $\epsilon_L(1) = \epsilon_R(1) = \epsilon_0$, $t(1) = t$. La densidad de estados para una cadena periódica del orden de 10^8 átomos se muestra en la figura (1.16).

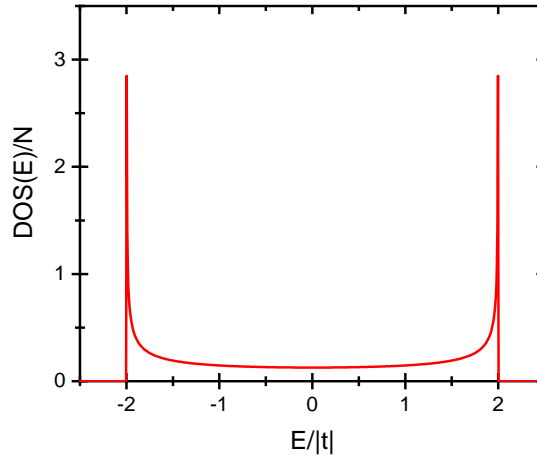


Figura 1.16: Densidad de estados para una cadena monoatómica unidimensional periódica, obtenida por el método de renormalización.

Capítulo 2

Transporte y Localización

2.1. Transporte Clásico (Modelo de Drude)

En abril de 1897, Joseph J. Thomson (1856-1940) anunció el descubrimiento del electrón (al cual llamó corpúsculo) en una conferencia impartida en la *Royal Institution* (Londres) cuyos resultados se publicaron en la revista *Philosophical magazine*, dicho descubrimiento trajo consigo un gran impacto en las teorías de la estructura de la materia. Un año después, propone el primer modelo atómico en el cual se presenta al átomo como una esfera formada por una masa fluida con carga eléctrica positiva y electrones incrustados dentro de ella, también conocido como el modelo de pudín de pasas.

Posteriormente en 1900 Paul Drude (1863-1906) desarrolló un modelo para la conducción de transporte eléctrico y térmico de los metales, en el cual consideró que los electrones de conducción forman un gas clásico que se desplaza a través de los iones que permanecen inmóviles en el material. Las suposiciones básicas de modelo son [Ashcroft, 1976]:

- Los electrones son considerados esferas sólidas y distinguibles (de forma clásica).
- Las interacciones electrón-electrón (aprox. electrón independiente) y electrón-ion (aprox. electrón libre) son despreciables. En ausencia de campo magnético, un electrón se mueve en línea recta salvo por efectos de colisión, en dichos casos el movimiento del electrón es descrito por las leyes de movimiento de Newton.
- Las colisiones que se presentan son instantáneas y cambian abruptamente la velocidad de los electrones debido a los choques con los iones.
- Los electrones logran el equilibrio térmico localmente mediante colisiones, por lo que el sistema total también se encuentra en equilibrio térmico con sus alrededores.
- La probabilidad con la que colisionan los electrones es de $\frac{1}{\tau}$, donde τ es el tiempo de relajación.
- El sistema adopta la función de distribución de Boltzmann $f_B(\varepsilon) = \exp(-\frac{\varepsilon-\mu}{K_B T})$.

El teorema de equipartición de la energía predice que las moléculas en equilibrio térmico tienen la misma energía promedio ($\frac{1}{2}K_B T$) asociada a cada grado de libertad de movimiento las cuales son independientes entre sí, por lo que una partícula clásica en 3 dimensiones y en equilibrio térmico posee una energía térmica dada por:

$$\varepsilon_t = \frac{3}{2}K_B T. \quad (2.1)$$

Para una partícula en ausencia de campos externos y que se mueve con una velocidad promedio $v = \langle \bar{v} \rangle$, existe una relación entre la energía cinética media con la energía térmica dada de la siguiente forma:

$$\frac{1}{2}mv^2 = \frac{3}{2}K_B T. \quad (2.2)$$

De la ecuación (2.2) se puede obtener la velocidad térmica promedio $v_t = v$

$$v_t = \sqrt{\frac{3K_B T}{m}}. \quad (2.3)$$

Dado que es un modelo clásico, la dinámica del electrón se describe por la segunda ley de Newton:

$$\bar{F} = m_e \bar{a} = m_e \frac{d\bar{v}}{dt} = e\bar{E}, \quad (2.4)$$

con m_e masa del electrón, v velocidad del electrón y e la carga del electrón. Dado que en la última igualdad tenemos una ecuación diferencial separable, la solución se puede obtener integrando (considerando velocidad inicial igual a cero, $\bar{v}_0 = 0$):

$$\bar{v}(t) = \bar{v}_d(t) = \int_0^t \frac{e\bar{E}}{m_e} dt, \quad (2.5)$$

donde \bar{v}_d es la velocidad promedio de arrastre de los electrones (el resultado neto de la aceleración de los electrones en presencia de un campo \bar{E} y la disipación su energía cinética por colisiones con los iones de la red). Por lo tanto tenemos que:

$$\bar{v}_d(t) = \frac{et}{m_e} \bar{E}. \quad (2.6)$$

El tiempo característico para las colisiones de los electrones en la red cristalina es el tiempo de relajación $t = \tau$.

$$\bar{v}_d(t) = \frac{e\tau}{m_e} \bar{E} = \mu' \bar{E}, \quad (2.7)$$

donde μ' es la movilidad eléctrica. Por otro lado si existen cargas de diferentes clases por unidad de volumen N_i , con velocidades distintas \bar{v}_i , la densidad de corriente está dada como:

$$\bar{J} = \sum_i q_i N_i \bar{v}_i, \quad (2.8)$$

la cual tiene unidades de $\frac{A}{m^2}$, en el caso particular donde el número de electrones atravesando una sección transversal en un tiempo dado es $N_e \bar{v}_d$ la densidad de corriente es de la forma:

$$\bar{J} = \frac{\bar{I}}{A} = e N_e \bar{v}_d, \quad (2.9)$$

donde A es la sección transversal del conductor y N_e la densidad volumétrica de electrones. Al sustituir la ecuación (2.7) en (2.9) se puede llegar a la ley de Ohm al considerar que $\sigma = \frac{e^2 N_e}{m_e} \tau$ (conductividad eléctrica del material).

$$\bar{J} = e N_e \left(\frac{e\tau}{m_e} \right) \bar{E} = \frac{e^2 N_e}{m_e} \tau \bar{E} = \sigma \bar{E}, \quad (2.10)$$

$$\bar{J} = \sigma \bar{E}. \quad (2.11)$$

Si las dimensiones del conductor son mucho mayores a la longitud de onda de Fermi (λ_F), el camino libre medio (l_m) y la longitud de coherencia de fase (l_ϕ) entonces los materiales tienen un comportamiento óhmico, es decir, existe una relación lineal entre la tensión que se le aplica y la

corriente que lo atraviesa. Aunque este modelo predice la ley de Ohm, así como dar la explicación de la ley empírica de Wiedemann y Franz (1853) la cual establece que la razón entre la conductividad térmica y eléctrica de un metal es directamente proporcional a la temperatura por una constante de proporcionalidad universal, se observó que los resultados teóricos difieren de los experimentales, por lo que existe la necesidad de construir una nueva teoría del transporte electrónico que concuerde con los resultados experimentales y se pueda aplicar a sistemas en diferentes escalas (no sólo a macroscópicos).

2.2. Transporte Semiclásico (Modelo de Sommerfeld)

El físico alemán Arnold Sommerfeld (1868-1951) fue el encargado de reforzar el modelo de Drude, él utiliza la ecuación de transporte de Boltzmann así como la estadística de Fermi-Dirac (electrones como partículas indistinguibles de espín $\frac{1}{2}$) y la velocidad de Fermi para los electrones, la ecuación de Boltzmann usa la función de distribución $f(\bar{r}, \bar{k}, t)$.

El teorema de Liouville dice que durante una evolución hamiltoniana el volumen del espacio fase permanece invariante, es decir, un elemento de volumen a lo largo de una línea de flujo la función de distribución se conserva.

$$f(\bar{r}, \bar{k}, t) = f(\bar{r} + \bar{v}dt, \bar{k} + \dot{\bar{k}}dt, t + dt) = f(\bar{r} + \bar{v}dt, \bar{k} + \frac{\dot{\bar{p}}}{\hbar}dt, t + dt). \quad (2.12)$$

La variación total de la función de probabilidad con respecto al tiempo está dado cómo:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial \bar{r}} \frac{d\bar{r}}{dt} + \frac{\partial f}{\partial \bar{k}} \frac{d\bar{k}}{dt} + \frac{\partial f}{\partial t}. \quad (2.13)$$

Para el caso estacionario (número de estados constante) $df/dt = 0$, por lo tanto:

$$-\frac{\partial f}{\partial t} = \bar{v} \cdot \bar{\nabla}_{\bar{r}} f + \dot{\bar{k}} \cdot \bar{\nabla}_{\bar{k}} f = \bar{v} \cdot \bar{\nabla}_{\bar{r}} f + \frac{\dot{\bar{p}}}{\hbar} \cdot \bar{\nabla}_{\bar{k}} f, \quad (2.14)$$

recordemos que $\dot{\bar{p}} = \bar{F}_a$ donde \bar{F}_a es la fuerza total que actúa sobre una partícula, la cual se puede descomponer como $\bar{F}_a = \bar{F} + \bar{F}_d$ con \bar{F} la fuerza externa que se aplica al sistema y \bar{F}_d la fuerza interna promedio que ejercen las demás partículas, entonces:

$$-\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right) = \bar{v} \cdot \bar{\nabla}_{\bar{r}} f + \frac{1}{\hbar} \bar{F} \cdot \bar{\nabla}_{\bar{k}} f + \frac{1}{\hbar} \bar{F}_d \cdot \bar{\nabla}_{\bar{k}} f, \quad (2.15)$$

donde $\bar{v} \cdot \bar{\nabla}_{\bar{r}} f$ representa el cambio que se presenta en la función f debido al flujo de partículas que entran y salen, $\bar{F} \cdot \bar{\nabla}_{\bar{k}} f$ es la relación de fuerzas netas (internas y externas) que actúan sobre el sistema, por lo que ambas fuerzas nos dan la evolución dada por las traslaciones en el espacio fase asociadas a campos y $\bar{F}_d \cdot \bar{\nabla}_{\bar{k}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{col}$ describe el cambio de la función que es originado por las colisiones entre las partículas.

Si tomamos $\bar{F} = e(\bar{E} + \frac{1}{c}\bar{v} \times \bar{H})$ la fuerza de Lorenz y el término de colisiones como $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{col} = -\frac{f(\bar{k}) - f_0(\bar{k})}{\tau}$ donde f_0 es la función de distribución de Fermi-Dirac en equilibrio térmico ($f_0 = \{exp[(E - E_F)/K_B T] + 1\}^{-1}$), entonces:

$$-\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right) = \bar{v} \cdot \bar{\nabla}_{\bar{r}} f + \frac{e}{\hbar} (\bar{E} + \frac{1}{c}\bar{v} \times \bar{H}) \cdot \bar{\nabla}_{\bar{k}} f - \frac{f(\bar{k}) - f_0(\bar{k})}{\tau}. \quad (2.16)$$

Como f no depende explícitamente del tiempo tenemos que $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$, por lo que:

$$\frac{f(\bar{k}) - f_0(\bar{k})}{\tau} = \bar{v} \cdot \bar{\nabla}_{\bar{r}} f + \frac{e}{\hbar} (\bar{E} + \frac{1}{c}\bar{v} \times \bar{H}) \cdot \bar{\nabla}_{\bar{k}} f. \quad (2.17)$$

Si la conductividad eléctrica se puede describir en un sistema homogéneo ($\bar{\nabla}_{\bar{r}} f = 0$) en ausencia de campo de magnético ($\bar{H} = 0$), f está dada de la siguiente manera:

$$\frac{f(\bar{k}) - f_0(\bar{k})}{\tau} = e\bar{E} \cdot \bar{\nabla}_{\bar{k}} f,$$

$$f(\bar{k}) = f_0(\bar{k}) + \frac{\tau e}{\hbar} E \cdot \bar{\nabla}_{\bar{k}} f_0(\bar{k}) \cong f_0(\bar{k}) + \frac{\tau e}{\hbar} \bar{E} \cdot \bar{\nabla}_{\bar{k}} f_0(\bar{k}). \quad (2.18)$$

Por otro lado la densidad de corriente (\bar{J}) en tres dimensiones es:

$$\bar{J} = -\frac{2}{(2\pi)^3} \iiint e\bar{v} f(\bar{k}) d^3 k. \quad (2.19)$$

Podemos sustituir la ecuación (2.18) en (2.19).

$$\bar{J} = -\frac{e}{4\pi^3} \iiint \bar{v} f_0 d^3 k - \frac{e^2}{4\pi^3 \hbar} \iiint \bar{v} \tau \bar{E} \cdot (\bar{\nabla}_{\bar{k}} f_0) d^3 k. \quad (2.20)$$

Dado que la integral de f_0 no contribuye a la conductividad y considerando que $\bar{\nabla}_{\bar{k}} f_0 = (\frac{\partial f_0}{\partial E})(\frac{dE}{d\bar{k}})$ tenemos que la densidad de corriente está dada como:

$$\bar{J} = -\frac{e^2}{4\pi^3} \iiint \bar{v} \tau \bar{E} \cdot (\frac{\partial f_0}{\partial E})(\frac{1}{\hbar} \frac{dE}{d\bar{k}}) d^3 k. \quad (2.21)$$

donde $\frac{1}{\hbar} \frac{dE}{d\bar{k}} = \bar{v}$ es la velocidad de grupo y $\frac{\partial f_0}{\partial E} \approx -\delta(E - E_F)$ es una delta de Dirac.

$$\bar{J} = \frac{e^2}{4\pi^3} \iiint \bar{v} \tau \bar{E} \cdot \bar{v} \delta(E - E_F) d^3 k = \frac{e^2}{4\pi^3} \iint_{S_F} \tau \bar{v} \bar{E} \cdot \bar{v} \frac{ds}{|\bar{\nabla}_{\bar{k}} E|}, \quad (2.22)$$

donde S_F es la superficie de Fermi del sistema. Si el material es isotrópico y se le aplica un campo eléctrico en la dirección x , es decir $\bar{E} = E_x \hat{x}$, tenemos que:

$$\bar{J} = \frac{e^2}{4\pi^3} \iint_{S_F} \tau v_x^2 E_x \frac{ds}{|\bar{\nabla}_{\bar{k}} E|} = \sigma E_x. \quad (2.23)$$

Por lo que, la conductividad eléctrica es:

$$\sigma = \frac{e^2}{4\pi^3} \iint_{S_F} \tau v_x^2 \frac{ds}{|\bar{\nabla}_{\bar{k}} E|}. \quad (2.24)$$

Para el caso de electrones libres, la ecuación (2.24) se reduce a:

$$\sigma = \frac{ne^2 \tau_l}{m^*}, \quad (2.25)$$

donde m^* es la masa efectiva, además el tiempo libre medio tiene dependencia de la energía de Fermi, es decir, $\tau_l = \tau_l(E_F)$ por lo que esta es la diferencia con el modelo de Drude visto en la sección 2.1.

2.3. Transporte Cuántico (Modelo de Landauer)

Rolf Landauer W. (1927-1999) propone que la conductancia está determinada por las probabilidades mecano-cuánticas de transmisión y reflexión. Para esto considera un conductor delgado de longitud L y ancho W que se encuentra entre dos saturadores periódicos semi-infinitos con potenciales químicos μ_1 y μ_2 respectivamente, cuando las dimensiones del conductor son del orden de la longitud de onda de Fermi (λ_F) nos encontramos en el régimen de transporte cuántico.

Si las dimensiones del conductor son mayores al camino libre medio de los electrones (l_m), tenemos la siguiente relación para la conductancia.

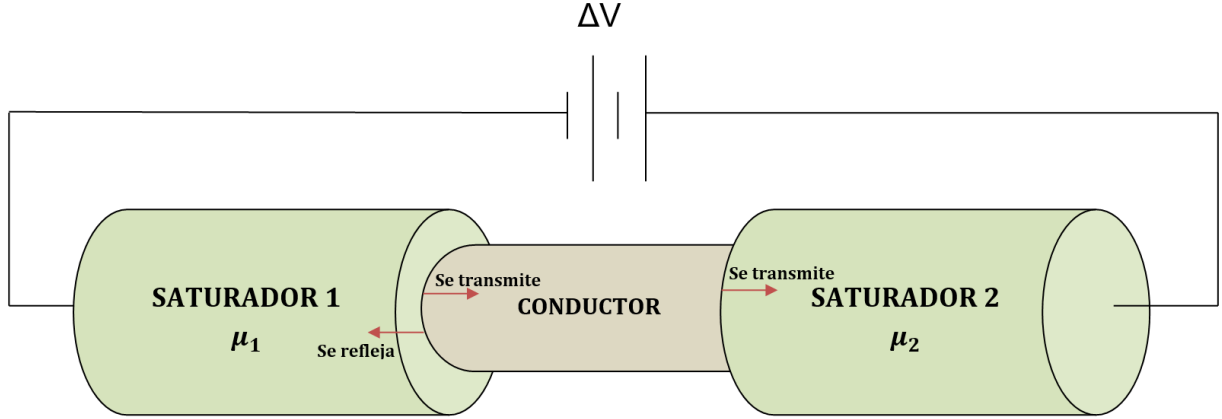


Figura 2.1: El modelo de Landauer toma en cuenta que si el electrón viaja de izquierda a derecha, entonces éste tiene una probabilidad de ser reflejado en la frontera del saturador 1 y el conductor.

$$G = \sigma \frac{W}{L}. \quad (2.26)$$

Consideremos un conductor ideal ($\tau \rightarrow \infty$) y homogéneo por lo que la ecuación (2.17) nos lleva a que la función de distribución f se puede considerar una constante y normalizada ($f = 1$), para un sistema unidimensional y un solo canal la corriente se puede calcular a partir de la ecuación (2.19).

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

$$I = -\frac{e(\mu_2 - \mu_1)}{\pi \hbar}. \quad (2.27)$$

Por otro lado tenemos que la conductancia en términos de la corriente está dada por la ley de ohm:

$$G = \frac{I}{V}. \quad (2.28)$$

Dado que la diferencia de los potenciales químicos está dado como $(\mu_2 - \mu_1) = -eV$ donde V es la diferencia de potencial tenemos que:

$$G = -\frac{e(\mu_2 - \mu_1)}{\pi \hbar \cdot V} = \frac{e^2}{\pi \hbar} = \frac{2e^2}{h}. \quad (2.29)$$

Si el conductor no es totalmente puro, es decir, tiene impurezas (obstáculos) a lo largo del canal, los electrones tendrán una probabilidad de transmisión T por lo que la conductancia estará dada por:

$$G = \frac{2e^2}{h} T. \quad (2.30)$$

La forma más general es para M canales transversales y se expresa de la siguiente manera:

$$G = \frac{2e^2}{h} MT. \quad (2.31)$$

En resumen, la conductancia para muestras largas y macroscópicas obedece la ecuación (2.26) pero para dimensiones más pequeñas existen dos correcciones.

1. La existencia de una resistencia en la interface independiente de la longitud L del conductor.
2. La conductancia no decrece linealmente con el ancho del conductor (W), está depende del número de canales y disminuye en pasos discretos.

El formalismo de Landauer incorpora ambas correcciones, la fórmula de Landauer en su forma más general (temperatura finita) está dada como:

$$I = \frac{2e^2}{h} \int_{-\infty}^{\infty} T(\varepsilon)[f_1(\varepsilon) - f_2(\varepsilon)]d\varepsilon, \quad (2.32)$$

donde $f_i(\varepsilon)$ es la función de distribución de Fermi-Dirac para cada uno de los saturadores y $T(\varepsilon)$ la probabilidad de transmisión. Al considerar un conductor perfecto (coeficiente de transmisión $T = 1$) en un solo canal, se llega de nuevo a $g_0 = 2e^2/h$, a esta cantidad se le conoce como *cuanto de conductancia*.

2.3.1. Transmitancia

Consideremos el formalismo referente al Hamiltoniano de amarre fuerte (TBH) a primeros vecinos para una cadena finita de N átomos, con energías de sitio $\{\varepsilon_l\}$ no nulas e integrales de salto $\{t_{l,l-1}$ y $t_{l,l+1}\}$, la cual se encuentra conectada a dos saturadores periódicos en sus extremos con autonergía nula (ε_0) e integrales de salto (t), como se muestra en la figura (2.2.a). Gracias al teorema del desarrollo tenemos que dada una función de onda, se puede escribir de la siguiente forma:

$$|\varphi\rangle = \sum_{m=1}^N C_m |m\rangle. \quad (2.33)$$

Al sustituir la ecuación (2.33) en nuestro problema de eigenvalores $\hat{H}|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$ tenemos lo siguiente:

$$\begin{aligned} \sum_{m=1}^N E C_m |m\rangle &= \sum_{m=1}^N \sum_{l=1}^N C_m |l\rangle \varepsilon_l \langle l|m\rangle + \sum_{m=1}^N \sum_{l=1}^N C_m |l\rangle t_{l,l-1} \langle l-1|m\rangle + \\ &\sum_{m=1}^N \sum_{l=1}^N C_m |l\rangle \varepsilon_{l,l+1} \langle l+1|m\rangle. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Al tomar un sitio fijo ($l = n$) y al correr la suma sobre m , dado que las funciones de Wannier son ortonormales, la ecuación (2.34) se reduce a:

$$EC_n |n\rangle = \varepsilon_n C_n |n\rangle + t_{n,n+1} C_{n+1} |n\rangle + t_{n,n-1} C_{n-1} |n\rangle,$$

por lo tanto:

$$C_{n+1} = \frac{E - \varepsilon_n}{t_{n,n+1}} C_n + \frac{t_{n,n-1}}{t_{n,n+1}} C_{n-1}. \quad (2.35)$$

La forma matricial de la ecuación (2.35) es:

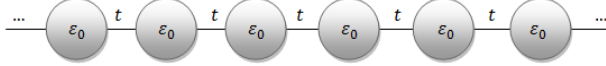
$$\bar{C}_{n+1} = \begin{pmatrix} C_{n+1} \\ C_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{E - \varepsilon_n}{t_{n,n+1}} & \frac{t_{n,n-1}}{t_{n,n+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_n \\ C_{n-1} \end{pmatrix} = \underline{T}(n) \bar{C}_n, \quad (2.36)$$

donde $\underline{T}(n)$ es la matriz de transferencia y los \bar{C}_j son vectores que dan amplitudes de la función de onda. El electrón se debe propagar a lo largo de toda la cadena por lo que la matriz de transferencia

($\underline{T}(S)$) asociada al sistema completo será el producto de las matrices $\underline{T}(i)$ ($i = \{1, 2, \dots, n\}$) que le corresponde a cada átomo (autoenergía / sitio).

$$\underline{T}(S) = \underline{T}(n)\underline{T}(n-1)\underline{T}(n-2)\cdots\underline{T}(2)\underline{T}(1) = \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix}. \quad (2.37)$$

a)



b)

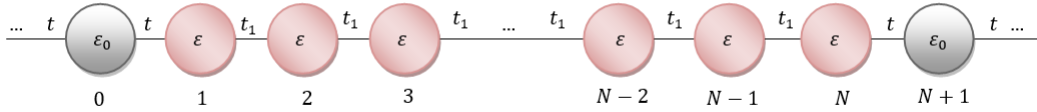


Figura 2.2: a) Diagrama de un saturador. b) Diagrama de un conductor periódico semi-infinito con autoenergía ε (no nulas) e integrales de salto (t_1) conectada a un saturador en cada uno de sus extremos.

Gracias a $\underline{T}(S)$ conocemos como se propaga el electrón dentro de nuestro conductor, por lo que el siguiente paso es ver el comportamiento antes de entrar y después de salir, es decir, en los saturadores. Para tener una propagación dentro del conductor, el electrón necesita una energía E dentro de la banda permitida (banda de conducción), las funciones de onda del electrón en los saturadores son ondas planas dadas de la siguiente forma :

$$\varphi_n(k) = \begin{cases} Ae^{ikna} + Be^{-ikna}, n \leq 1 \\ \alpha e^{ikna} + \beta e^{-ikna}, n \geq N \end{cases}, \quad (2.38)$$

donde n es el sitio ocupado por el átomo en la cadena finita como se observa en la figura (2.2.b). Cuando el electrón incide en el extremo izquierdo y $k > 0$, tenemos el sistema ligado a ciertas condiciones de frontera: $A = 1$, $B = r$ (amplitud de reflectancia), $\alpha = \varkappa$ (amplitud de transmitancia) y $\beta = 0$, esto se debe a que el electrón incide por el saturador izquierdo ($n = 1$) donde éste cuenta con una probabilidad de ser reflejado, una vez dentro de la cadena se propaga hasta incidir al saturador del lado derecho ($n = N$) dentro del saturador el electrón ya no regresa a la cadena. La amplitud de transmitancia y la amplitud de reflectancia satisfacen la siguiente relación:

$$|\varkappa|^2 + |r|^2 = 1. \quad (2.39)$$

Dada la consideración de los saturadores conectados al conductor la ecuación (2.36) nos conduce a [Süto, 1994]:

$$\begin{pmatrix} \varkappa e^{ika(N+1)} \\ \varkappa e^{ikNa} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ika} + r e^{-ika} \\ 1 + r \end{pmatrix}. \quad (2.40)$$

Tenemos un sistema de ecuaciones de 2x2 donde las variables a encontrar son $\{\varkappa, r\}$ al resolver el sistema de ecuaciones y considerando que el determinante de la matriz \underline{T}_S es uno, se tiene que:

$$\varkappa = -\frac{2ie^{ikNa}\text{Sin}(ka)}{\tau_{11}e^{-ika} + \tau_{12} - e^{ika}(\tau_{21}e^{-ika} + \tau_{22})}, \quad (2.41)$$

$$r = -\frac{\tau_{11}e^{ika} + \tau_{12} - e^{ika}(\tau_{21}e^{ika} + \tau_{22})}{\tau_{11}e^{-ika} + \tau_{12} - e^{ika}(\tau_{21}e^{-ika} + \tau_{22})}. \quad (2.42)$$

La transmitancia $T(E)$ se puede calcular con la norma al cuadrado de la amplitud de transmitancia $\varkappa \cdot \varkappa^* = |\varkappa|^2$, también es necesaria la relación de dispersión dada por la ecuación (1.29). Por lo tanto dentro del formalismo de Landauer la conductancia es:

$$T(E) \equiv |\varkappa|^2 = \frac{4 - (E/t)^2}{[\tau_{21} - \tau_{12} + (\tau_{22} - \tau_{11})E/2t]^2 + (\tau_{11} + \tau_{22})^2(1 - E^2/4t^2)}. \quad (2.43)$$

2.4. Localización

En términos teóricos, las propiedades de localización de modelos de estructura electrónica tipo amarre fuerte (TB) fueron estudiadas inicialmente por Philip W. Anderson [Anderson, 1958], quien mostró que ciertos estados resultan ser localizados debido al desorden. Posteriormente en 1961 Mott y Twose conjeturaron que en una dimensión espacial, todos los estados electrónicos son localizados, sea cual sea el tipo y grado de desorden [Mott, 1961], a diferencia de lo que ocurre en modelos tridimensionales donde los electrones resultan completamente localizados sólo si el grado de desorden es suficientemente grande, por esto concluyen que en las cadenas unidimensionales no existen estados extendidos, es decir, no puede producirse una transición metal-aislante análoga a lo que ocurre en muestras tridimensionales cuando la intensidad del desorden rebasa un umbral crítico [Sánchez, 2012].

Hoy en día se sabe que en sistemas unidimensionales existen muy pocos casos en los cuales aparecen bandas de estados extendidos cuando existe correlación de largo o corto alcance en el desorden. Lo que ocurre es que la existencia de correlación en el desorden es una condición necesaria, pero no suficiente para la aparición de estados extendidos. Cuando hablamos de correlación en el desorden, nos referimos a que el desorden no se introduce totalmente al azar, sino que se agrega alguna otra regla que permite introducir algún grado de orden en el desorden original. Como ejemplo consideremos una cadena lineal de átomos tipo A con impurezas tipo B introducidas al azar en algunos sitios de la cadena. Si no se agrega otra condición, este sistema define a una aleación binaria unidimensional. En dicho sistema no es posible encontrar ninguna energía cuánticamente permitida, para la cual existan estados extendidos, sin embargo, si se pone una condición adicional (que las impurezas B sólo pueden aparecer en parejas BB), se dice que se ha introducido una correlación de corto alcance en el desorden [Lazo, 2000].

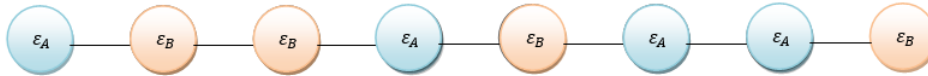


Figura 2.3: Aleación binaria unidimensional sin correlación

Se ha demostrado que en la aleación binaria con correlación de corto alcance, sí es posible encontrar energías específicas para las cuales los estados cuánticamente permitidos poseen las características de los estados extendidos. Dos de estas características son:

1. La posibilidad de encontrar valores para la amplitud de la función de onda, distintas de cero (para cualquier sitio de la cadena y aun para cadenas muy grandes), por lo contrario al caso

del estado localizado, en el cual la función de onda tiene amplitudes distintas de cero, en una pequeña región de toda la cadena.

2. El coeficiente de transmisión $T(E)$ a través de la cadena desordenada presenta valores más cercanos a 1 que a 0, indicando que de este modo existe una probabilidad muy alta de que el electrón se transmita desde un extremo al otro de la cadena.

Una de las formas de estudiar localización de electrones en sistemas desordenados es mediante la caracterización de los estados cuánticos descrita por el coeficiente de Lyapunov (λ), introducido en 1960 por Furstenberg y Kesten [Ishii, 1973], éste depende de la energía del electrón E y depende, además, del grado y tipo de desorden de la cadena en el cual el electrón se va a propagar. El exponente de Lyapunov $\lambda(E)$ se define de la siguiente manera:

$$\lambda(E) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\ln \|T_S\|}{N}.$$

Los valores que asume el exponente de Lyapunov permiten clasificar a los estados cuánticos como extendidos o localizados, es decir, permiten caracterizar el grado de localización de la función de onda, en la siguiente forma:

$$\lambda(E) \rightarrow 0 \quad \textit{Extendida}, \quad (2.44)$$

$$\lambda(E) > 0 \quad \textit{Localizada}. \quad (2.45)$$

Por último existe una relación entre el coeficiente de transmisión $T(E)$ de extremo a extremo de la cadena de N sitios y el exponente de Lyapunov $\lambda(E)$, la cual es:

$$T(E) = e^{-N\lambda(E)}. \quad (2.46)$$

Notemos que si $\lambda(E) \rightarrow 0$ tenemos un coeficiente de transmisión 1, es decir, transmitancia perfecta. De lo contrario si $\lambda(E) > 0$ el coeficiente de transmisión tiende a cero, por lo que no existe transmisión de un punto a otro de la cadena.

Capítulo 3

Efecto de las Impurezas en el Transporte Electrónico

Los efectos de las impurezas en las propiedades del transporte de electrones en sistemas cuánticos unidimensionales han atraído la atención de los investigadores en el campo de la electrónica molecular, quienes se han propuesto condensar las funcionalidades electrónicas en moléculas individuales mediante el diseño químico [Cuevas, 2017] [Ratner, 2013]. Para fabricar componentes electrónicas moleculares, es necesario comprender las características electrónicas en sistemas de una sola molécula, en esta línea de investigación se han tenido grandes avances en transistores [Perrin, 2015], switches [Van der Molen, 2010] y diodos [Capozzi, 2015] [Trasobares, 2016] [Aragonès, 2017] [Perrin, 2017]. Actualmente, identificar los mecanismos físicos detrás de estas funcionalidades no es tarea fácil, por lo que las predicciones basadas en modelos existentes suelen ser poco confiables, en consecuencia, la realización de dispositivos funcionales requiere una comprensión más profunda del transporte cuántico. A lo largo de esta sección serán analizados los efectos cuánticos de las impurezas en el transporte electrónico a través del formalismo de Landauer en sistemas periódicos. Esto nos permitirá diseñar dispositivos con distintos rangos de energía prohibida (gaps).

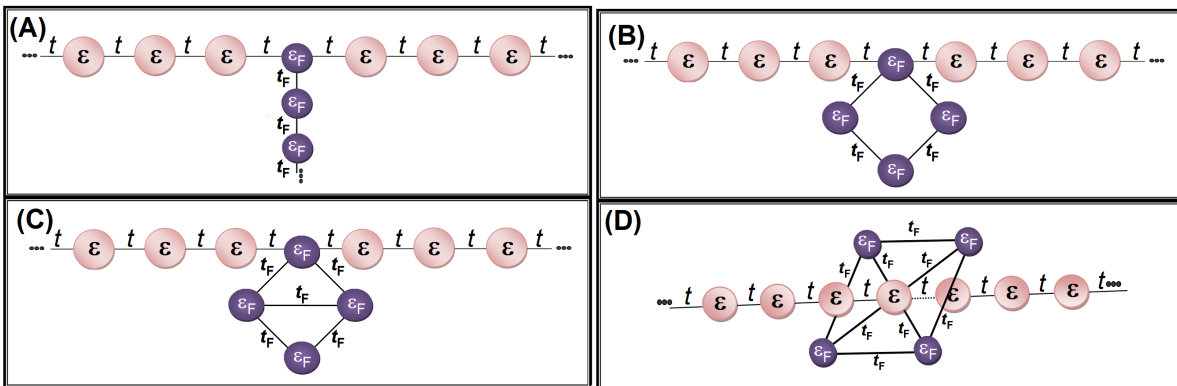


Figura 3.1: Esquemización de una cadena lineal periódica con impurezas Fano de tipo (A) cadena lineal, (B) rombo y (C) rombo conectado y (D) rombo central.

En la Figura (3.1) se hace una representación esquemática de una cadena periódica con tres distintos tipos de impureza Fano; A) cadena lineal, B) rombo, C) rombo conectado y D) rombo central. Los parámetros considerados en estos sistemas son las energías de sitio ϵ y las integrales de salto t para la parte periódica, mientras que las impurezas tendrán ϵ_F y t_F .

Los espectros de la transmitancia eléctrica de los sistemas representados en la Figura (3.1) se muestran en la Figura (3.2), respectivamente. Estos espectros se muestran en función de la energía y la integral de salto de la impureza Fano, las energías de sitio se consideraron nulas tanto en la cadena periódica como en la impureza. El espectro obtenido presenta simetría con respecto a la energía en los sistemas donde el defecto Fano es lineal (a) y rómbico (b), la cual se perdió al conectar los sitios como lo muestran (3.1.C) y (3.1.D), esto es consecuencia del aumento en el número de primeros vecinos para cada sitio, con lo que la red deja de ser bipartita. Por otro lado, el número de energías con reflectancia total depende directamente del número de sitios (N) en la impureza lineal como $N - 1$, mientras que en el espectro (b) se presentan dos energías con transmitancia nula, es decir, cuando la energía vale $\pm\sqrt{2}|t_F|$

Para el caso de los sistemas (c y d) la reflectancia total se da en las energías $-t_F$ y $\pm 2|t_F|$ para (c), mientras que la otra se da en $\pm|t_F|$ y $\pm 2|t_F|$. Esto se obtuvo analíticamente a partir de la ecuación (3.1).

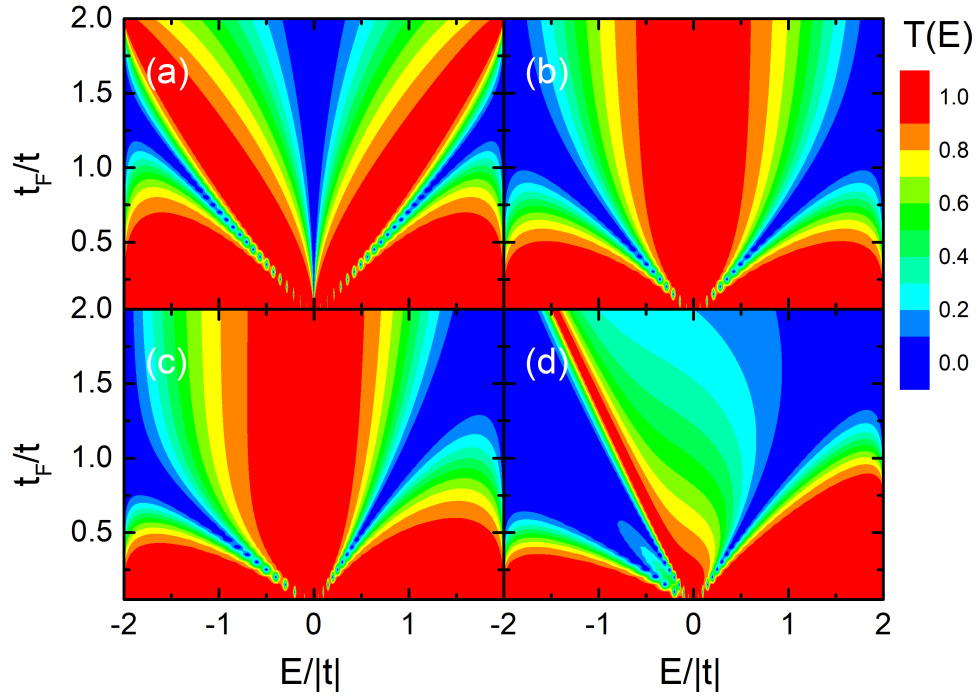


Figura 3.2: Transmitancia en función del salto de Fano y la energía para los sistemas representados en la Figura (3.1).

La ecuación analítica de la transmitancia para una impureza es [Sánchez, 2014]:

$$T(E) = \frac{4 - (E/t)^2}{4 - (E/t)^2 + (\varepsilon_{imp}/t)^2}, \quad (3.1)$$

donde la energía de las impurezas para cada caso se encuentra en la Tabla 3.1.

Sistema	Energía de la Impureza
Lineal	$\varepsilon_{imp} = \frac{t_F^2(E^2 - t_F^2)}{E^3 - 2Et_F^2}$
Rombo	$\varepsilon_{imp} = \frac{2t_F^2 E}{E^2 - 2t_F^2}$
Rombo Conectado	$\varepsilon_{imp} = \frac{2t_F^2(E^2 - Et_F)}{E^3 - 3Et_F^2 - 2t_F^3}$
Rombo Centrado	$\varepsilon_{imp} = \frac{2t_F^2(E^2 + 2Et_F - 2t_F^2)}{E^3 - 2E^2t_F - Et_F^2 + 2t_F^3}$

Tabla 3.1

Otro tipo de impureza conectada a la cadena periódica, son las hexagonales, que se trabajaron de tres formas distintas, mostradas en la Figura (3.3). Los parámetros utilizados son los mismo que en la Figura (3.1).

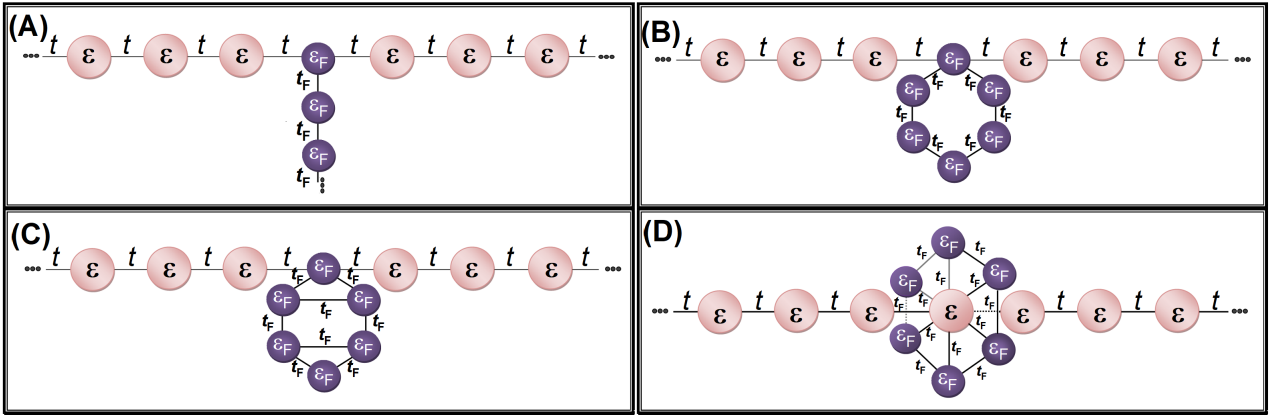


Figura 3.3: Distintos ordenamientos con una impureza hexagonal.

En la Figura (3.4) se representan la transmitancia contra la energía y el salto de Fano para los sistemas de Figura (3.3). Obsérvese que en el caso de la impureza lineal (a) se comprueba que la cantidad de zonas con transmitancia nula será $N - 1$, que en este caso es cinco. Con la impureza como se muestra en (b), el espectro es simétrico con respecto a la energía como en el caso anterior. Las energías de reflectancia total son $E = 0$ y $E = \pm\sqrt{3}|t_F|$. Al igual que con las impurezas rómbicas, al tener vecinos impares se rompe la simetría del espectro (c), dando lugar a zonas de transmitancia nula en $E = -1.170086t_F$, $E = 0.688892t_F$ y $E = 2.481194t_F$, esto se encontró numéricamente a partir de la Tabla 3.2. En el caso (d), sólo se encuentra una zona con transmitancia cero, en $E = 2.0t_F$, mientras que al aumentar la integral de salto Fano, los estados de alta transmitancia desaparecen.

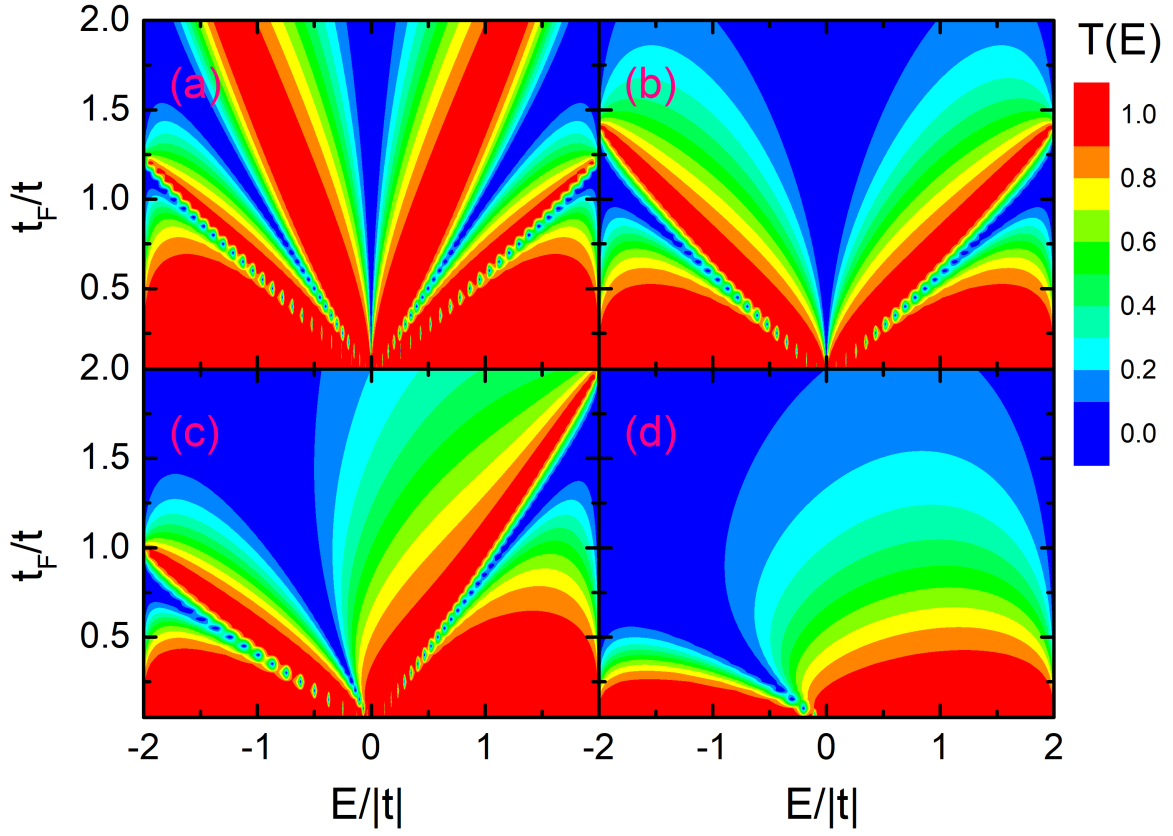


Figura 3.4: Transmitancia en función del salto de Fano y la energía para los sistemas representados en la Figura (3.3).

Sistema	Energía de la Impureza
Lineal	$\varepsilon_{imp} = \frac{t_F^2 (E^4 - 3E^2 t_F^2 + t_F^4)}{E^5 - 4E^3 t_F^2 + 3E t_F^4}$
Hexágono	$\varepsilon_{imp} = \frac{2t_F^2 (E^2 - 2t_F^2)}{E(E^2 - 3t_F^2)}$
Hexágono Conectado	$\varepsilon_{imp} = \frac{2t_F^2 (E - 2t_F)(E + t_F)}{E^3 - 2E^2 t_F - 2E t_F^2 + 2t_F^3}$
Hexágono Centrado	$\varepsilon_{imp} = \frac{2t_F^2}{E - 2t_F}$

Tabla 3.2

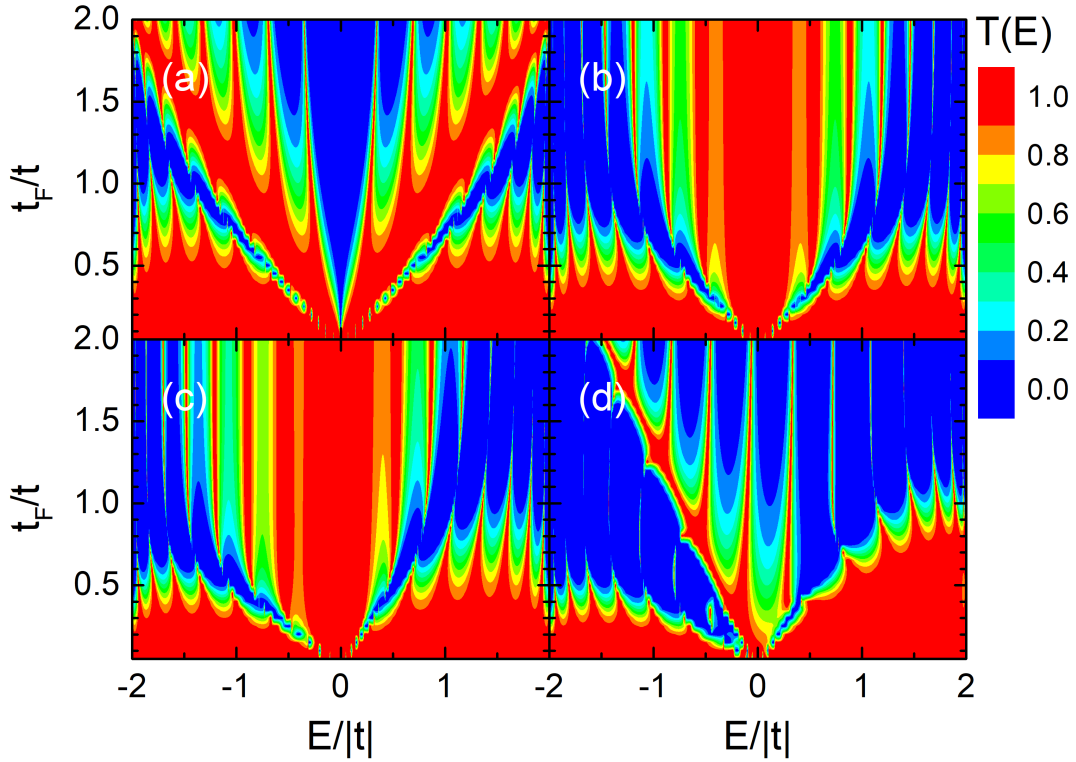


Figura 3.5: Transmitancia en función del salto de Fano y la energía para los sistemas con doble impureza.

Hasta este punto sólo hemos analizado una impureza en una cadena periódica, pero la mayoría de los sólidos tienen más de un defecto, en la Figura (3.5) se muestra la transmitancia en función de la energía y la integral de salto del sistema Fano para una cadena periódica con dos impurezas como las mostradas en la Figura (3.1). Los parámetros son los mismos que en la Figura (3.2), mientras que la separación entre las impurezas es de cuatro sitios. Obsérvese que los espectros presentan una envolvente similar al de la Fig. (3.2), con la diferencia de que exhiben un mayor número de estados balísticos, lo cual está estrechamente relacionado con la separación entre las impurezas.

De forma similar, se añadió una impureza extra a los sistemas de la Fig. (3.3), igual a la que tenían, esto nos permitió observar el comportamiento de la transmitancia en función de la integral de salto Fano y la energía (Figura 3.6).

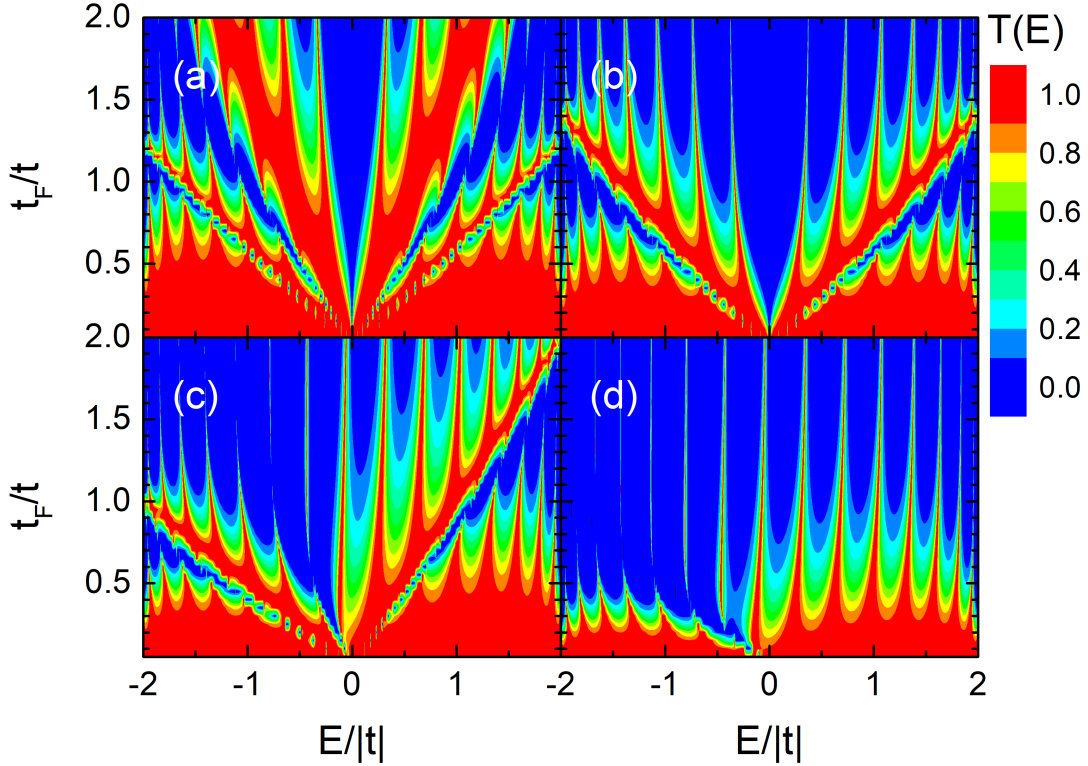


Figura 3.6: Transmitancia en función del salto de Fano y la energía para los sistemas representados en la figura (3.3) con doble impureza con separación de cuatro sitios.

Nótese que, nuevamente, el espectro presenta una envolvente similar a la del sistema con una sola impureza (Fig. 3.4), pero modificado, pues presenta estados de alta transmitancia discretos. La presencia de estados balísticos es especialmente notoria en la Figura (3.6.d), pues al compararse con la que sólo tiene una impureza (3.4d), ésta mantiene estados de alta transmitancia al aumentar la integral de salto de Fano, mientras que, con una sola impureza, el espectro tiende a una reflexión total.

Las uniones moleculares son sistemas metálicos híbridos donde una molécula forma un puente entre dos electrodos metálicos. Estos empalmes han atraído recientemente la atención de la comunidad científica debido a sus potenciales aplicaciones en dispositivos electrónicos ultra pequeños y sus propiedades únicas [Joachim, 2000] [Kiguchi, 2017] [Sankey, 2006]. En particular, la medición del transporte de carga de una sola o un pequeño número de moléculas se ha realizado en gran medida utilizando uniones de ruptura y varias técnicas de sondas de exploración [Cui, 2001] [Donhauser, 2001] [Reichert, 2002] [Selzer, 2004] [Keane, 2006] [Seferos, 2006]. La dinámica de transferencia de electrones de una sola molécula se ha estudiado teóricamente [Xue, 2005] [Selzer, 2006] [Long, 2006]. La mayoría de estos análisis se realizan en ambientes bien definidos y la influencia de las impurezas en el transporte de carga comienza a analizarse y entenderse [Huimin, 2016]. En la Figura (3.7) se muestran las cadenas periódicas con una impureza tipo (A) rombo y (B) hexágono, los parámetros son los mismos que en la Fig. (3.1).

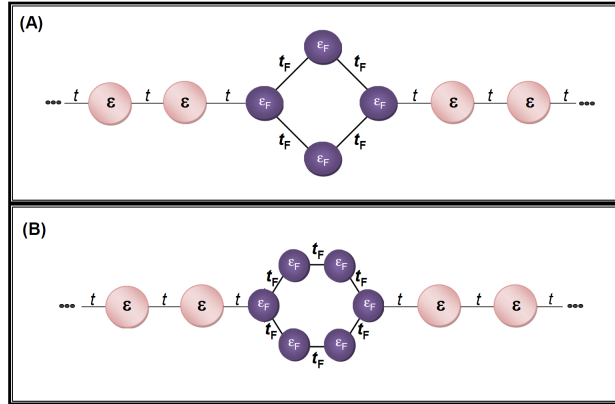


Figura 3.7: Cadenas periódicas con impurezas tipo (A) rombo y (B) hexágono. Esquematizan dispositivos moleculares

En la Figura (3.8) se muestra la transmitancia en función de la energía y de la integral de salto de Fano para una red periódica con una impureza tipo (a) rombo, (b) rombo saturada con impureza Fano, (c) hexágono y (d) hexágono saturado con impureza Fano. Estas estructuras son representadas en la Fig. (3.7) y los parámetros son los mismos que la Fig. (3.2). Nótese que cuando los sistemas no están saturados [Fig. (a) y (c)] los espectros de transmitancia tienen grandes zonas de alta conductividad, por ejemplo, la Fig. (a) la zona casi no se ve perturbada por la variación de la integral de salto Fano.

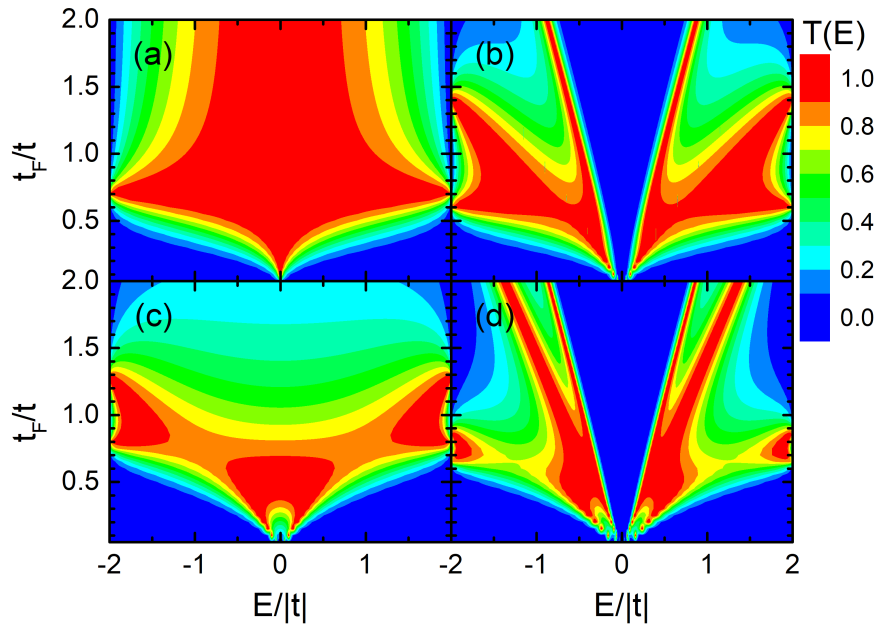


Figura 3.8: Transmitancia versus energía (E) e integral de salto Fano (t_F) para una cadena periódica con una impureza tipo (a) rombo, (b) rombo saturada, (c) hexágono y (d) hexágono saturada.

En cambio, cuando son saturados se abre un gap en el centro del espectro que crece al incrementarse el t_F en los dos sistemas y las zonas de conductividad balística son menos extendidas, pero para el espectro del rombo saturado conserva dos zonas de este tipo de conductividad que cambia de posición al incrementarse el t_F . En el caso del hexágono saturado estas zonas son cuatro, que no existían en el espectro de la Fig. (3.8.c).

Los espectros anteriores pueden ser obtenidos a partir de la ecuación analítica para la transmitancia

$$T(E) = \frac{t_I^2(4t^2 - E^2)}{E_I^4 - 2E_I^3E - 2E_I^2t_I^2 + 2E_I^2t^2 + E_I^2E^2 + 2E_I t_I^2 E - 2E_I t^2 E + t_I^4 + 2t_I^2 t^2 - t_I^2 E^2 + t^4}, \quad (3.2)$$

donde E_I y t_I se encuentran definidos en la Tabla 3.3.

Sistema	Sin saturación	Saturado
Rombo	$E_I = \frac{2t_F^2}{E}$ y $t_I = \frac{2t_F^2}{E}$	$E_I = \frac{t_F^2}{E} + \frac{2t_F^2 E}{E^2 - t_F^2}$ y $t_I = \frac{2t_F^2 E}{E^2 - t_F^2}$
Hexágono	$E_I = \frac{2t_F^2 E}{E^2 - t_F^2}$ y $t_I = \frac{2t_F^3}{E^2 - t_F^2}$	$E_I \frac{t_F^2}{E} + \frac{2t_F^2 (E^2 - t_F^2) E}{(E^2 - t_F^2)^2 - t_F^2 E^2} =$ y $t_I = \frac{2t_F^2 E^2}{(E^2 - t_F^2)^2 - t_F^2 E^2}$

Tabla 3.3

Ahora vamos a analizar los espectros de transmitancia al incluir en la cadena periódica más de una estructura (rombos o hexágonos). Para tres impurezas tipo rombo o hexágono con y sin saturación en la cadena periódica los espectros de transmitancia son presentados en la Figura (3.9) y Figura (3.10), respectivamente.

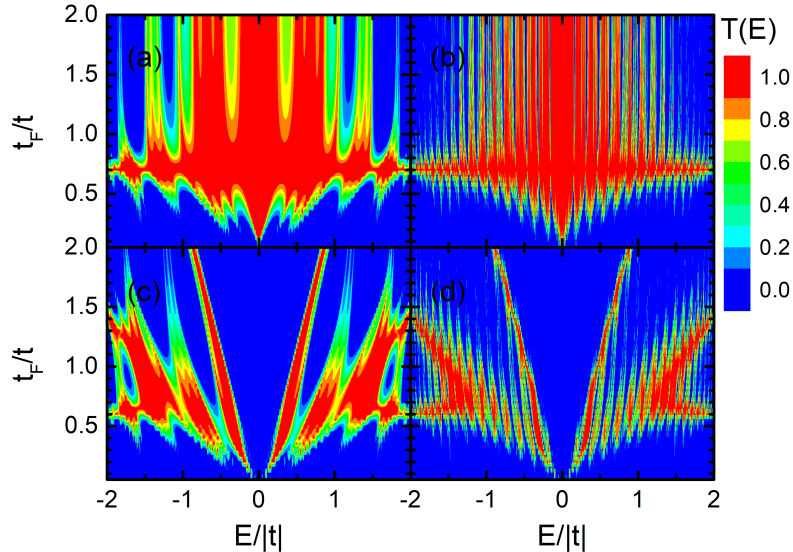


Figura 3.9: Transmitancia versus energía (E) e integral de salto Fano para tres impurezas tipo rombo sin saturación con separación de (a) 6 y (b) 22 sitios entre ellas, con saturación de (c) 6 y (d) 22 de separación.

Obsérvese que, al crecer la distancia entre las impurezas, las zonas con picos de alta transmitancia se reducen y empiezan abrirse nuevos pseudo-gaps, siendo más remarcado este comportamiento cuando saturamos la impureza. Además, podemos notar que no importa el número de estructuras que sean anexadas, los gaps que se formaron con una impureza siguen preservándose. Los pseudo-gaps nuevos aparecen donde había picos de alta transmitancia.

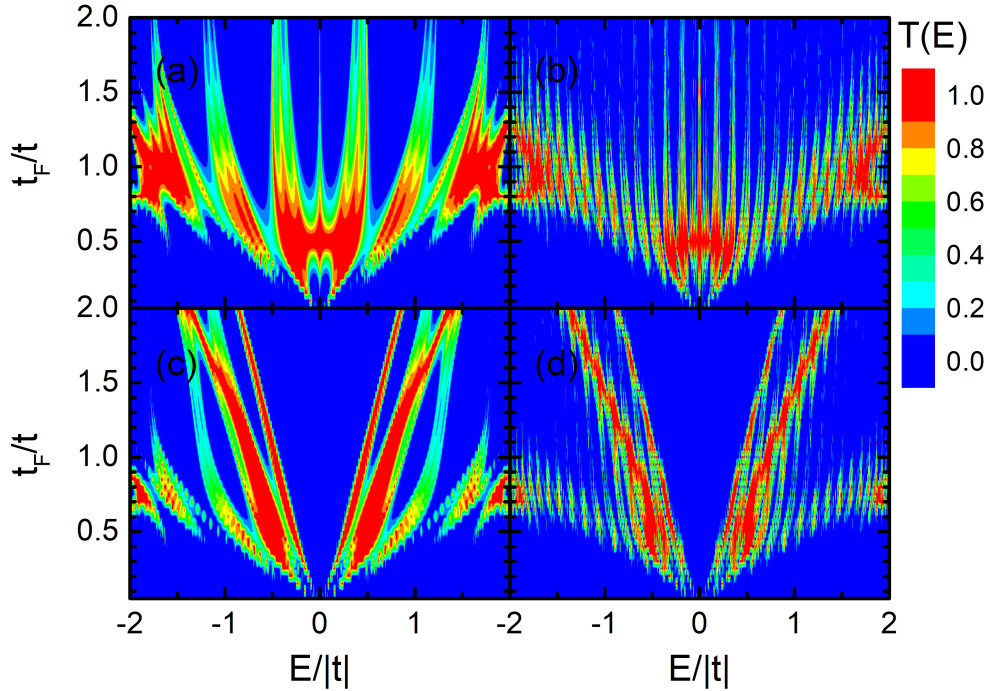


Figura 3.10: Transmitancia versus energía (E) e integral de salto Fano para tres impurezas tipo hexágono sin saturación con separación de (a) 6 y (b) 22 sitios entre ellas, con saturación de (c) 6 y (d) 22 de separación.

El análisis de los espectros de transmitancia cuando el número de impurezas crece se presenta en las Figuras (3.11) (rombos) y (3.12) (hexágonos), los parámetros son los mismos que en la Fig. (3.2) y la integral de Fano es $t_F = t$. Obsérvese en la Fig. (3.11.a) que cuando se incrementa el número de rombos en la cadena periódica, empiezan a abrirse bandas de energía prohibida cerca del borde de la banda, también las zonas con alta transmitancia disminuyen, mientras que el estado balístico en energía cero siempre se conserva. En la Fig. (3.11.b), cuando los rombos están saturados, el ancho del gap central no cambia porque depende de la integral de salto Fano y no del número de impurezas, más aún, el gap abre más rápido en comparación con la Fig. (3.11.a).

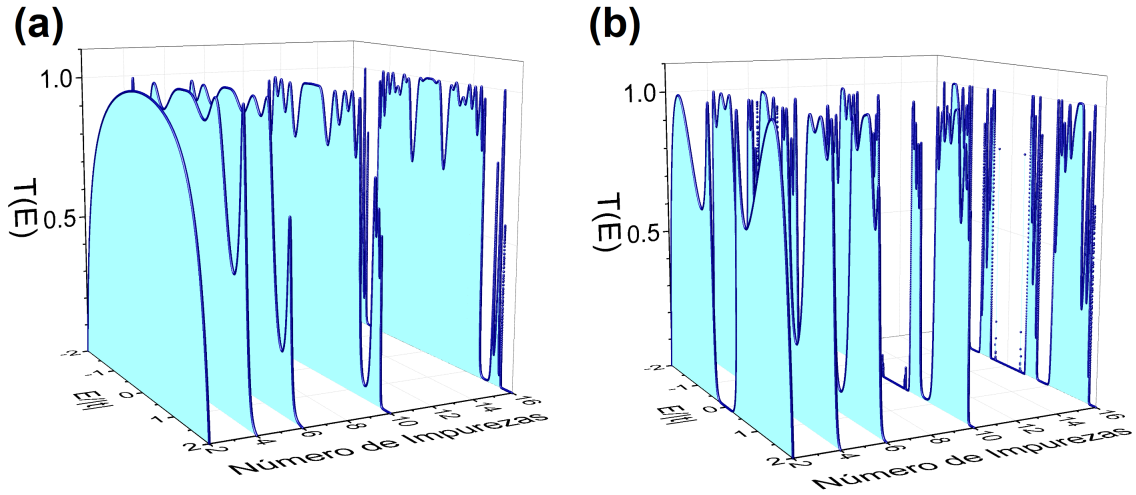


Figura 3.11: Transmitancia versus energía (E) y número de impurezas para una cadena periódica con impurezas tipo rombo (a) sin saturación y (b) saturadas. La distancia entre las impurezas sigue una secuencia de Fibonacci. Los parámetros son iguales a la Fig. (3.2) y la integral de salto Fano es $t_F = t$.

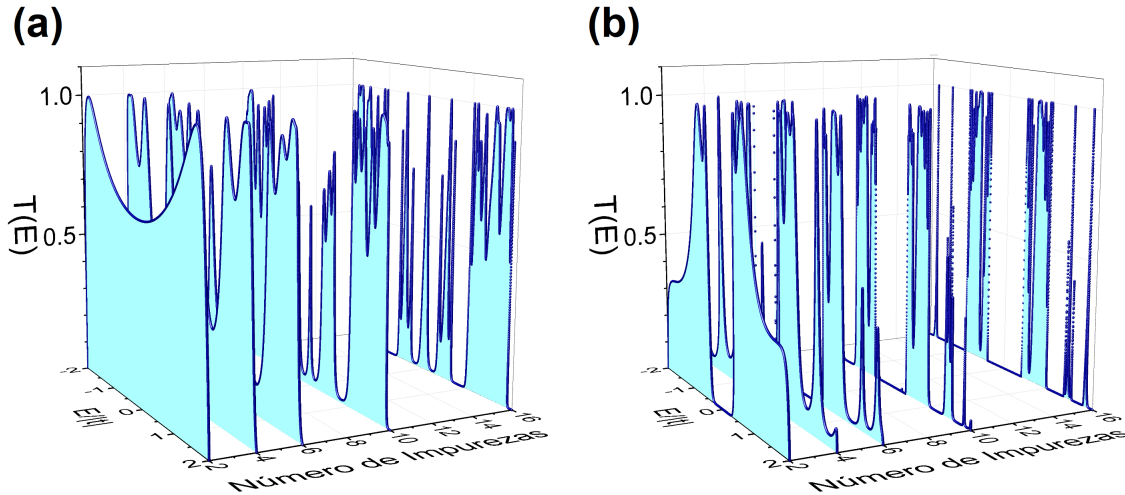


Figura 3.12: Transmitancia en función de la energía (E) y número de impurezas para una cadena periódica con impurezas tipo hexágono (a) sin saturación y (b) saturadas. La distancia entre las impurezas sigue una secuencia de Fibonacci. Los parámetros son iguales a la Fig. (3.2) y la integral de salto Fano es $t_F = t$.

Nótese en la Fig. (3.12.a) que presenta un estado de transmisión balística cuando tiene 16 impurezas en energía cero. Realizamos un análisis alrededor de esta energía y encontramos que como la separación entre los hexágonos es cuasiperiódica se obtiene este estado transparente [$T(E) = 1.0$] cada seis generaciones, es decir, los espectros tienen un ciclo de seis que es una herencia del ordenamiento tipo Fibonacci. En la Figura (3.12.b) cuando los hexágonos están saturados los espectros de transmitancia conservan el gap central y conforme se incrementa el número de impurezas se abren más brechas de

energía prohibida.

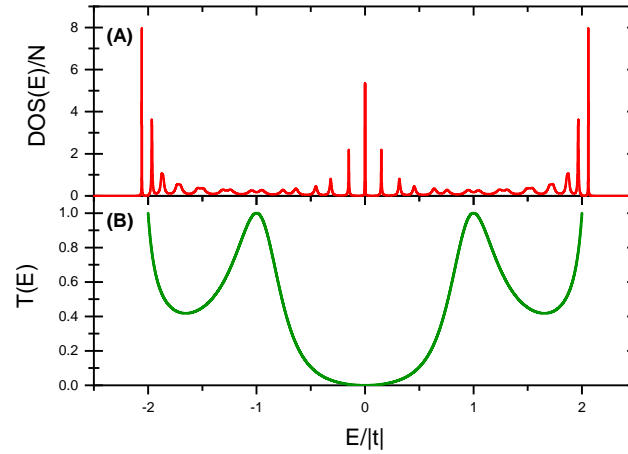


Figura 3.13: Densidad de estados y transmitancia versus la energía, para una cadena lineal de 1×10^8 sitios con dos impurezas, la distancia entre las impurezas es de 8 sitios.

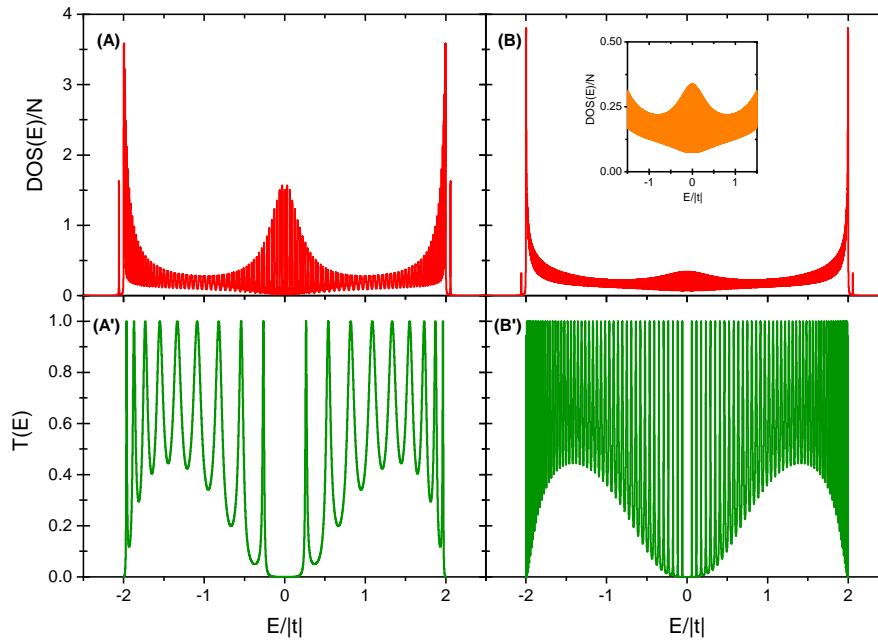


Figura 3.14: Densidad de estados y transmitancia en función de la energía de Fermi para una cadena lineal de 1×10^8 sitios con dos impurezas, (A) 32 sitios de separación y (B) 509 sitios de separación.

En los espectros que se muestran en las Figuras (3.13) y (3.14) tenemos dos impurezas donde se varia la distancia entre ellas. Observe que los espectros presentan oscilaciones cuya frecuencia es mayor conforme la distancia de separación aumenta, en transmitancia se forma una envolvente compuesta por estados balísticos. Para densidad de estados, observamos que los estados alrededor de $E = 0|t|$ aumentan su tamaño, así mismo aparecen dos estados fuera de la banda.

Hasta ahora hemos analizado los efectos de las impurezas en el espectro de transmitancia en cadenas periódicas y observamos que existen estados extendidos y localizados [Mott, 1979]. Existe una combinación de estos estados en las propiedades eléctricas de cadenas con desorden correlacionado, un ejemplo de estos sistemas es la cadena de Nickel Mean (por sus siglas en ingles), la cual forma parte de las redes de Fibonacci generalizada. En esta sección se estudiará la densidad de estados, transmitancia y localización para este sistema. La forma de construcción de Nickel Mean es: $B \rightarrow A$ y $A \rightarrow ABBB$ como se muestra en la figura (3.15).

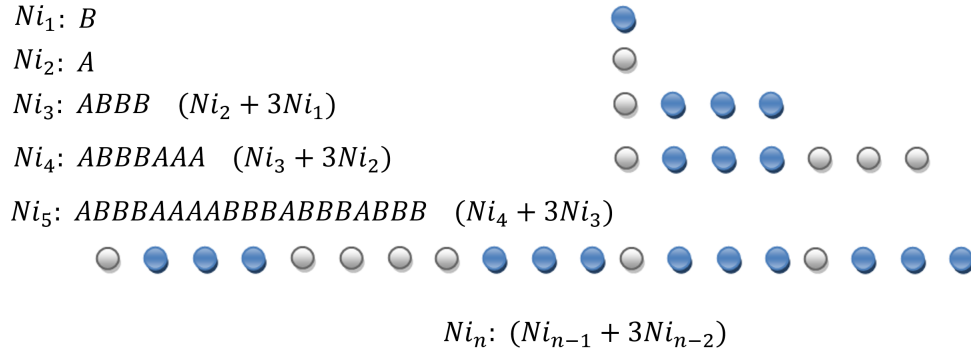


Figura 3.15: Secuencia aperiódica tipo Nickel Mean, consta de unir tres secuencias $Ni(n - 2)$ a la secuencia $Ni(n - 1)$.

La aperiodicidad analizada en este apartado es: problema de enlaces, sitios y mixto. Para el caso de enlaces, las Figuras (3.16) y (3.17) muestran la densidad de estados “DOS(E)” y transmitancia “ $T(E)$ ” en función de la energía, considerando los parámetros de integrales de salto $t_A = 0.7t$, $t_B = t$ y autoenergías nulas (ε_0), la parte imaginaria de la energía en la función de Green fue $\eta = 10^{-3}|t|$ para 3.16.(A)-3.16.(A’) 98 y 3.16.(B)-3.16.(B’) 6161 sitios, en cambio, para 3.17.(A)-3.17.(A’) 4×10^5 y 3.17.(B)-3.17.(B’) 1×10^8 sitios.

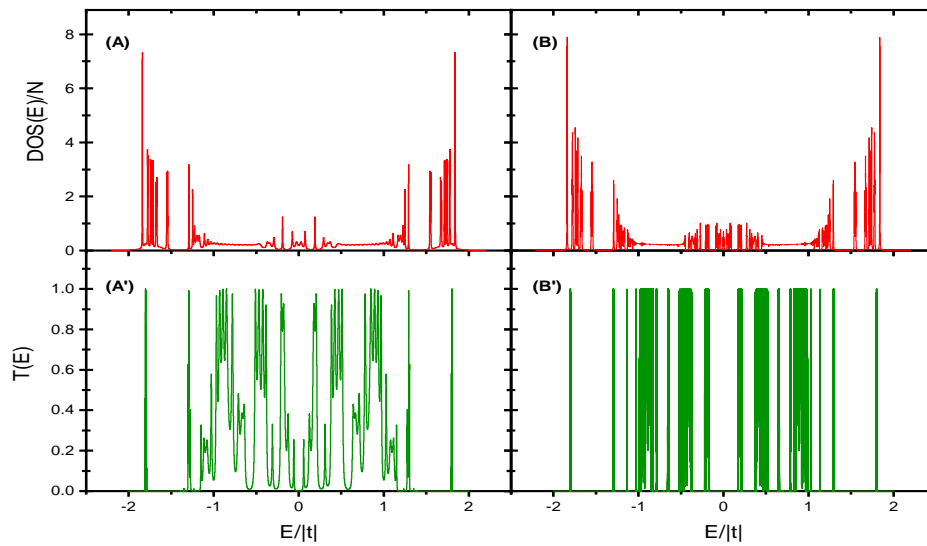


Figura 3.16: Densidad de estados y Transmitancia versus la energía en cadenas de Nickel mean con (A) – (A') 98 y (B) – (B') 6161 sitios.

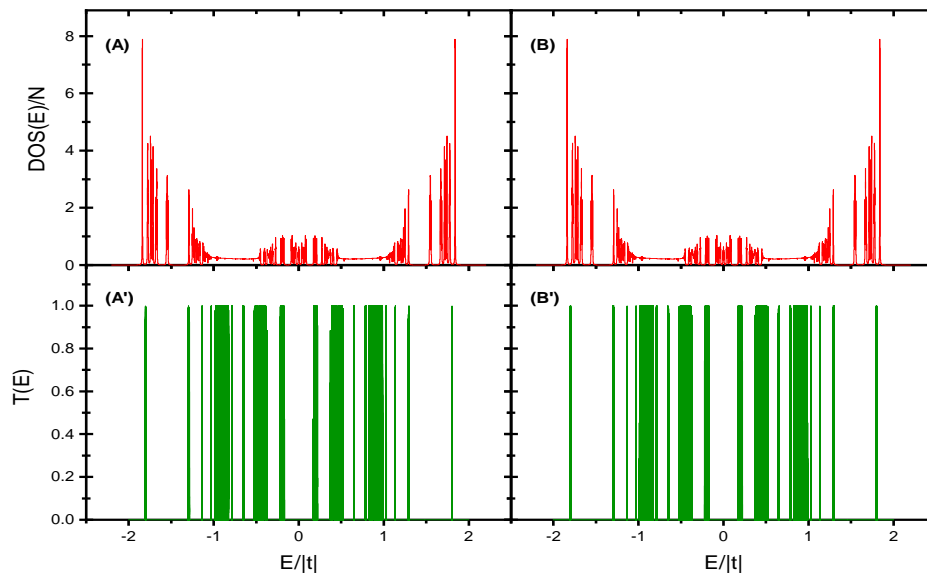


Figura 3.17: Densidad de estados y Transmitancia en función de la energía en cadenas de Nickel mean con (A) – (A') 4×10^5 y (B) – (B') 10^8 sitios.

Obsérvese en las Fig. (3.16) y (3.17) la simetría de los espectros con respecto a la energía de Fermi igual a cero, esto es consecuencia que para el problema de enlaces la red es bipartita. Otro aspecto a notar es la buena definición de las energías prohibidas en el espectro de la densidad de estados sin importar el tamaño de la red y solo se incrementan los estados permitidos cuando crece el número de sitios en la cadena. Por otro lado, en los espectros de transmitancia tenemos la presencia de pseudo-gaps en redes pequeñas y se forman gaps cuando los átomos en las redes aumentan, esto también crea zonas con un mayor número de estados de alta transmitancia.

Las Figuras (3.18) y (3.19) muestran densidad de estados y transmitancia en función de la energía de Fermi para el problema de sitios, considerando los parámetros para autoenergías $E_A = -0.7|t|$ y $E_B = 0.6|t|$ e integrales de salto $t_A = t_B = t$, la parte imaginaria de la energía en la función de Green fue $\eta = 10^{-3}|t|$. Para 3.18(A)-3.18(A') 116 y 3.18(B)-3.18(B') 7319 sitios, en cambio, 3.19(A)-3.19(A') y 3.19(B)-3.19(B') tenemos el mismo número de sitios que en la Fig. (3.17) respectivamente.

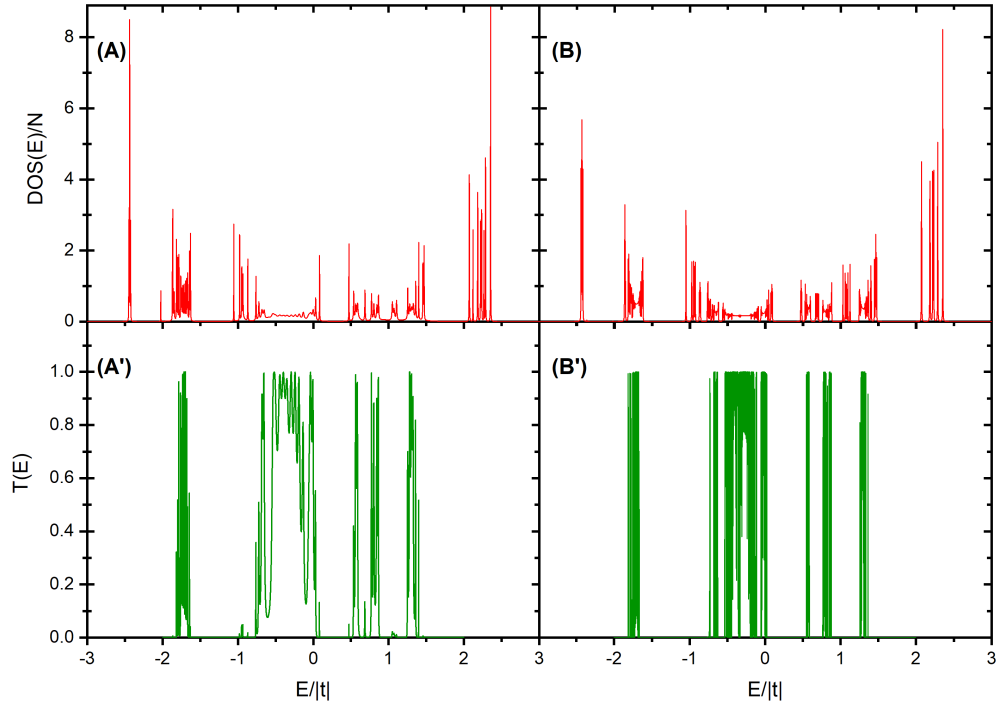


Figura 3.18: Densidad de estados y Transmitancia versus la energía en cadenas de Nickel mean en problema de sitios con (A) – (A') 116 y (B) – (B') 7319 sitios.

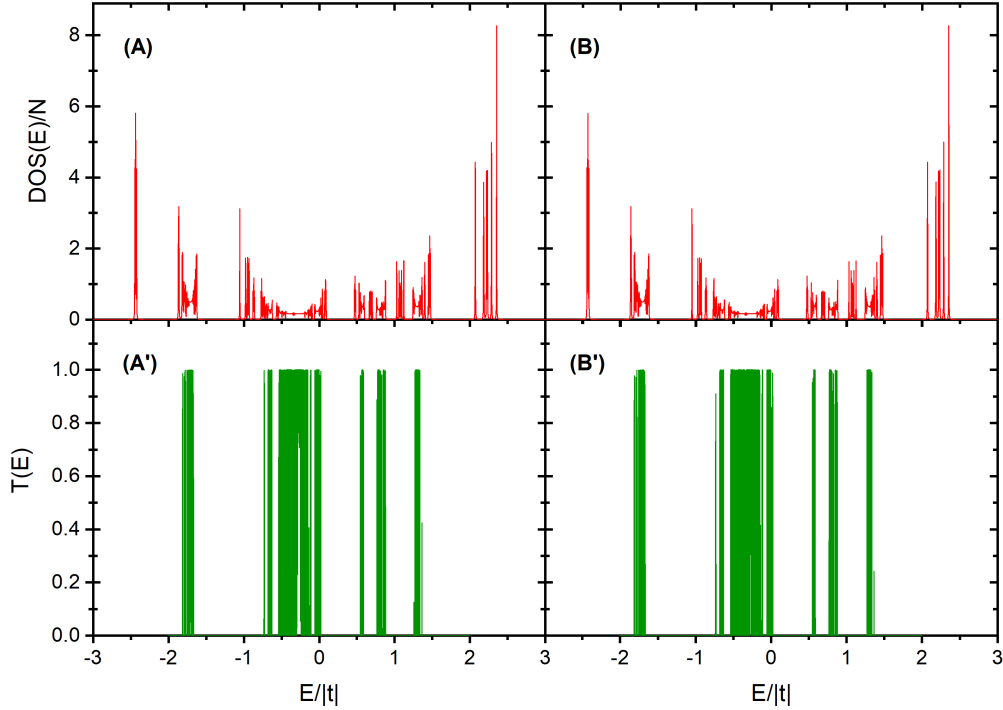


Figura 3.19: Densidad de estados y Transmitancia en función de la energía con aperiodicidad en sitios en cadenas de Nickel mean con (A) – (A') 4×10^5 y (B) – (B') 1×10^8 sitios.

Obsérvese en todos los espectros de densidad de estados o de transmitancia de las Figuras (3.18.A-3.18.A'), (3.18.B-3.18.B'), (3.19.A-3.19.A') y (3.19.A-3.19.A') que las bandas prohibidas son mayores a las mostradas en el caso de enlaces [Fig. (3.16) y (3.17)]. Otro aspecto por notar es el ancho de la zona de picos de alta transmitancia y está cerca de la energía de Fermi igual a cero.

También analizamos cadenas Nickel Mean con aperiodicidad mixta. Las Figuras (3.20) y (3.21) muestran la densidad de estados y la transmitancia versus la energía, considerando los parámetros de autoenergías $E_A = 0.9|t|$ y $E_B = 0.5|t|$ e integrales de salto $t_{AA} = 0.9t$, $t_{BB} = 0.6t$ y $t_{AB} = t$, la parte imaginaria de la energía y el número de átomos mismos presentados en las Fig. (3.18) y (3.19) respectivamente.

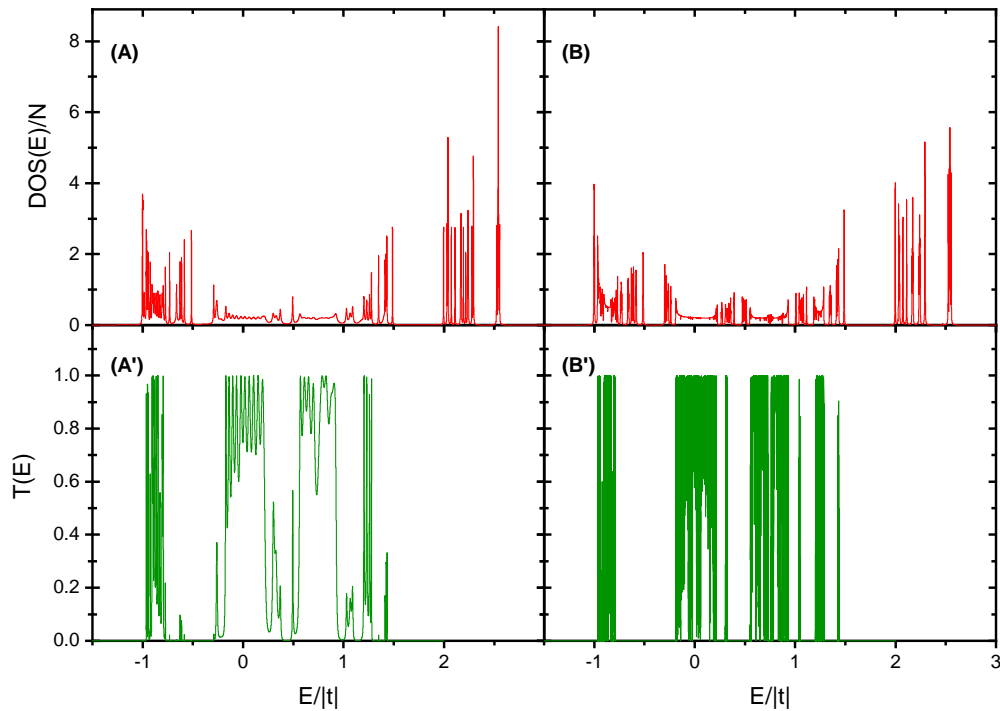


Figura 3.20: Densidad de estados y Transmitancia en función de la energía en cadenas de Nickel Mean con el mismo número de sitios que en la Fig. (3.18) respectivamente.

En los espectros de transmitancia versus la energía [Fig. (3.21.A'-3.21.B')] se observa un mayor número de zonas de picos de alta transmisión en comparación con los espectros para el problema de enlaces y de energías de sitio. Además, los espectros dejan de ser simétricos alrededor de la energía cero y tiene pocos estados con picos de conductividad baja. Otro aspecto por notar es la similitud de los gaps con los casos anteriores, la banda prohibida con mayor ancho es similar al presentado en problema de sitios Fig. (3.19), por otro lado, los gaps de menor anchura se observan en el problema de enlaces Fig. (3.17).

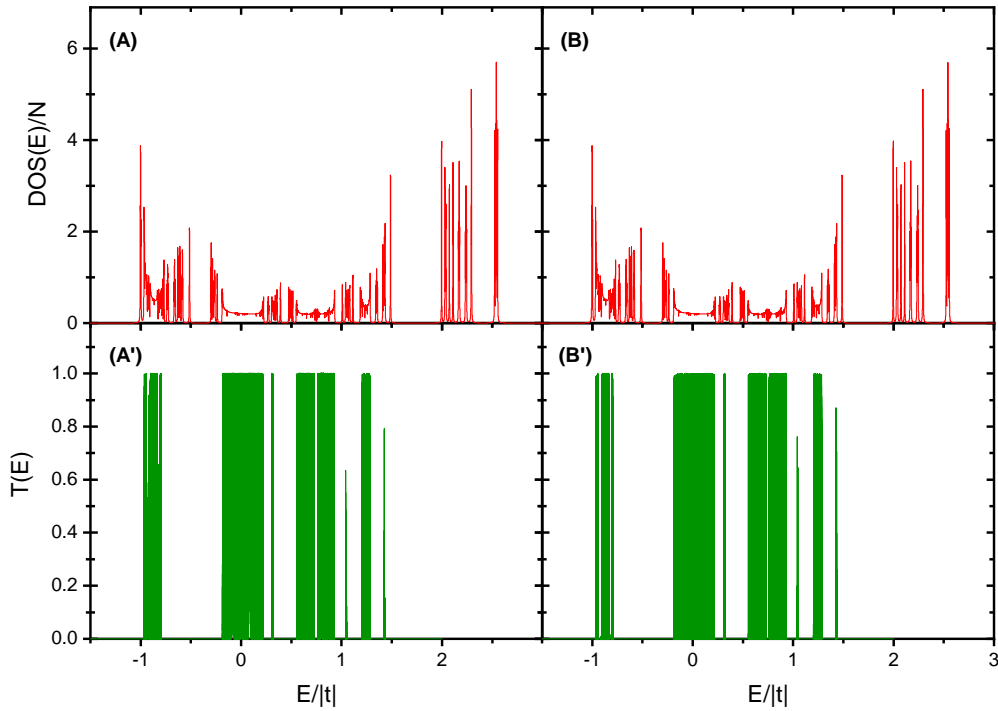


Figura 3.21: Densidad de estados y Transmitancia vs de la energía en cadenas de Nickel Mean con aperiodicidad mixto, el mismo número de sitios que en la Fig. (3.19) respectivamente.

Los sistemas con desorden correlacionado, al igual que el caso periódico presentan impurezas, el efecto de una impureza tipo Fano lineal se muestra en las figuras (3.22) y (3.23) donde se tiene densidad de estados y transmitancia en función de la energía de Fermi, los parámetros considerados son: autoenergías nulas e integrales de salto $t_A = 0.9t$, $t_B = 0.7t$, la parte imaginaria de la energía considerada es $\eta = 10^{-3}|t|$. Los espectros con líneas rojas y verdes representan $DOS(E)$ y $T(E)$ respectivamente en ausencia de la impureza.

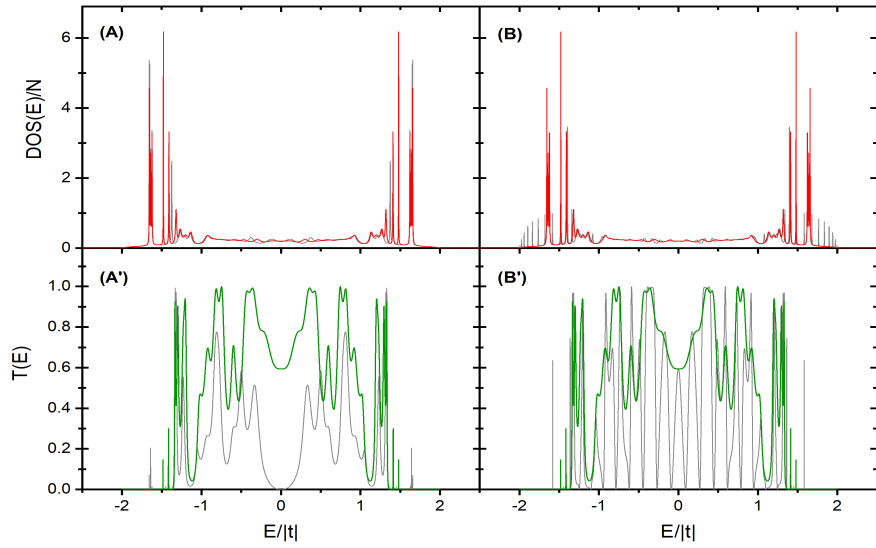


Figura 3.22: Densidad de estados y Transmitancia versus la energía en cadenas de Nickel mean, el espectro gris muestra el efecto de la impureza Fano lineal con (A) – (A') 2 y (B) – (B') 256 sitios Fano.

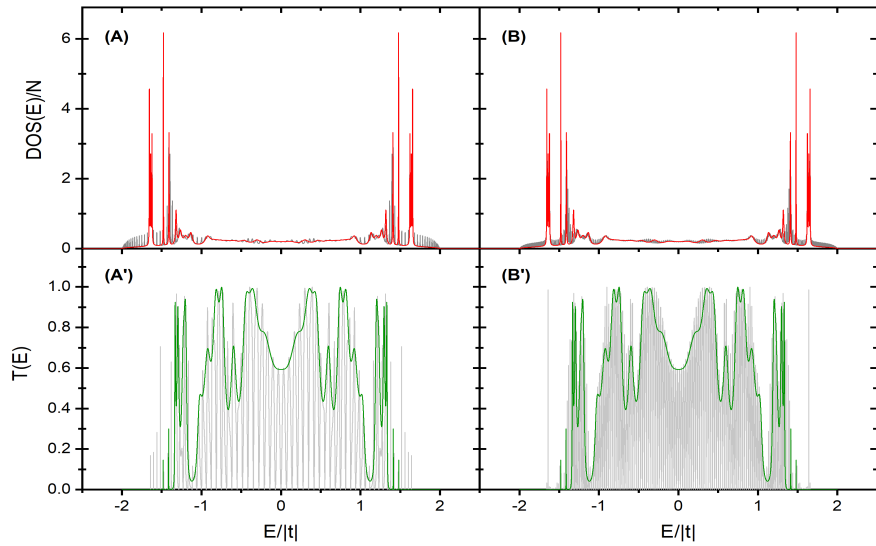


Figura 3.23: Densidad de estados y Transmitancia en función de la energía en cadenas de Nickel mean, el espectro gris muestra el efecto de la impureza Fano lineal con (A) – (A') 1024 y (B) – (B') 4096 sitios Fano.

Observe en los espectros de DOS [Fig. (3.22.A)-(3.22.B) y (3.23.A)-(3.23.B)] que al acoplar una cadena de impurezas a nuestro sistema se presentan nuevos estados dentro y fuera de la banda, cabe mencionar que su amplitud es menor comparada con los estados de la cadena original. Otro punto a considerar es en transmitancia [Fig. (3.22.A')-(3.22.B')] donde el espectro del sistema sin la impureza sirve como envolvente de los espectros generados por la impureza cuando el número de sitios en la cadena acoplada es pequeño. En cambio, cuando crece el número de átomos en la cadena Fano el espectro de transmitancia tiene más picos de alta conductividad en comparación con la cadena sencilla.

La ecuación (2.46) nos da la relación directa entre transmitancia y el exponente de Lyapunov, donde observamos que un estado de reflectancia total da origen a un estado localizado. La Fig. (3.24.A')-(3.24.B') muestra el exponente de Lyapunov en función de la energía, además los espectros de transmitancia se presentan en la Fig. (3.24.A)-(3.24.B) para el mismo sistema presentado en la Fig. 3.22(A')-(B') con impureza Fano. En (A') se observa un estado localizado en $E = 0.0|t|$ y en (B') muestra que la presencia de estados localizados aumenta conforme la cadena lineal Fano incrementa en número de átomos.

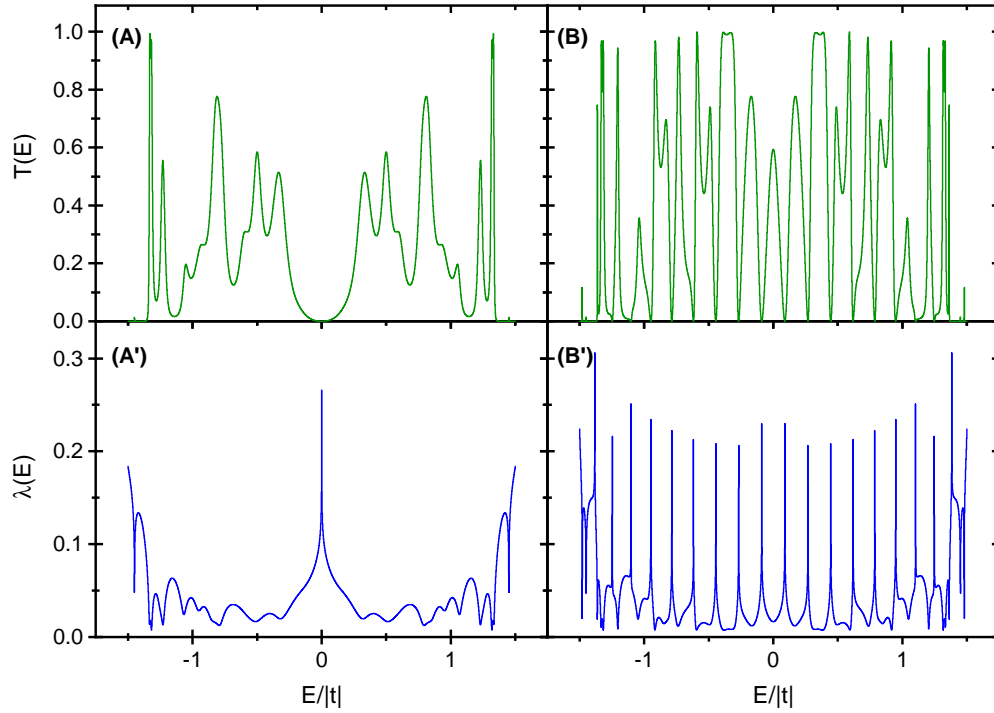


Figura 3.24: Transmitancia y exponente de Lyapunov vs la energía en cadenas Nickel Mean con aperiocidad en el problema de enlaces e impurezas tipo Fano lineal con (A) – (A') 2 y (B) – (B') 256 sitios.

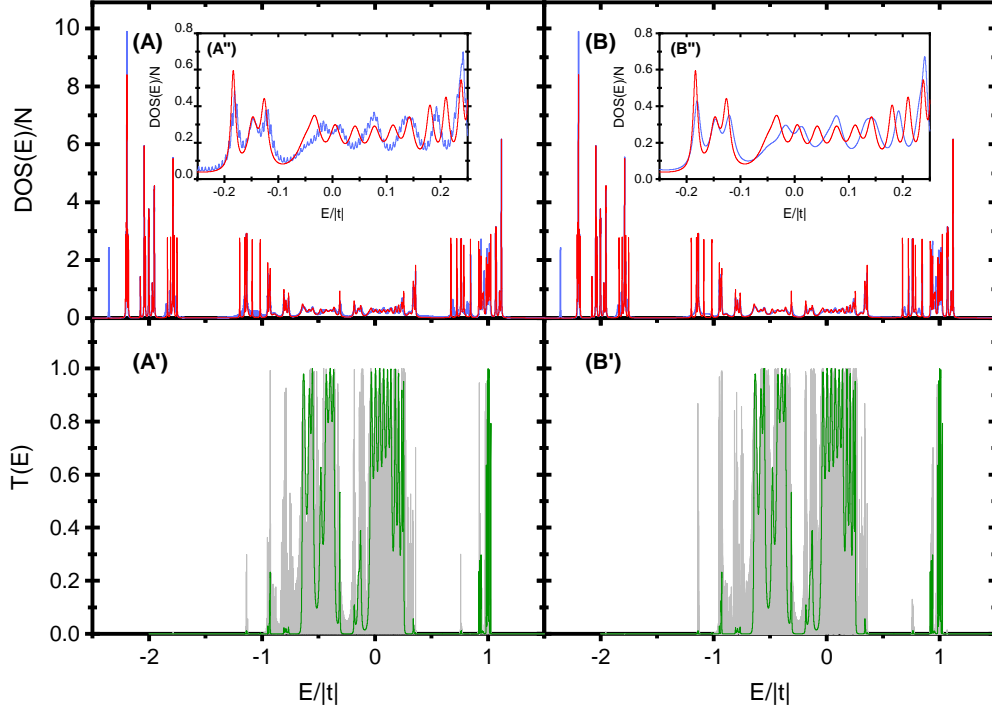


Figura 3.25: Densidad de estados y Transmitancia vs la energía en cadenas de Nickel mean con aperiodicidad mixta. Los espectros azul y gris representan la cadena en presencia de una impureza Fano con $(A) - (A') - (A'') 1 \times 10^4$ y $(B) - (B') - (B'') 4 \times 10^6$ sitios.

Para una cadena de 116 átomos tipo Nickel Mean con aperiodicidad mixta, los parámetros considerados son: integrales de salto $t_{AA} = 0.8t$, $t_{BB} = 0.5t$, $t_{AB} = t$ y autoenergías $E_A = -0.7|t|$, $E_B = -0.3|t|$ con parte imaginaria de la energía $\eta = 10^{-3}|t|$. Los espectros de densidad de estados y transmitancia en función de la energía se muestran en la Fig. (3.25) y el exponente de Lyapunov en la Fig. (3.26.B). El cambio en la densidad de estados se da en las oscilaciones que presenta el espectro cuya frecuencia aumenta conforme la cadena Fano es mayor (líneas azules, Fig. 3.25.A'). Nótese que en el espectro del exponente de Lyapunov [Fig. (3.26.B)] para energías menores a $E = -1.25|t|$ no existe una zona de energías prohibidas como lo muestra el espectro de transmitancia [Fig. (3.26.A)], ya que presenta mínimos en esta región, haciendo una amplificación de dicha zona [Fig. (3.27)] se encuentran picos de muy baja de transmitancia.

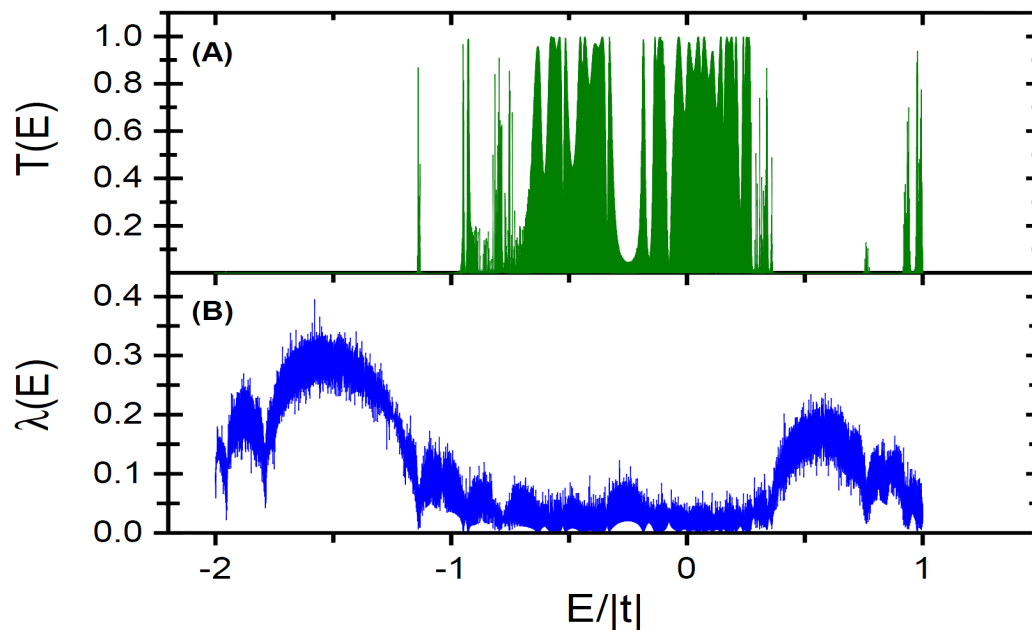


Figura 3.26: Transmitancia y exponente de Lyapunov en función de la energía para una cadena tipo Nickel Mean con aperiodicidad mixta. Cuenta con una cadena Fano lineal de 4×10^6 átomos como impureza.

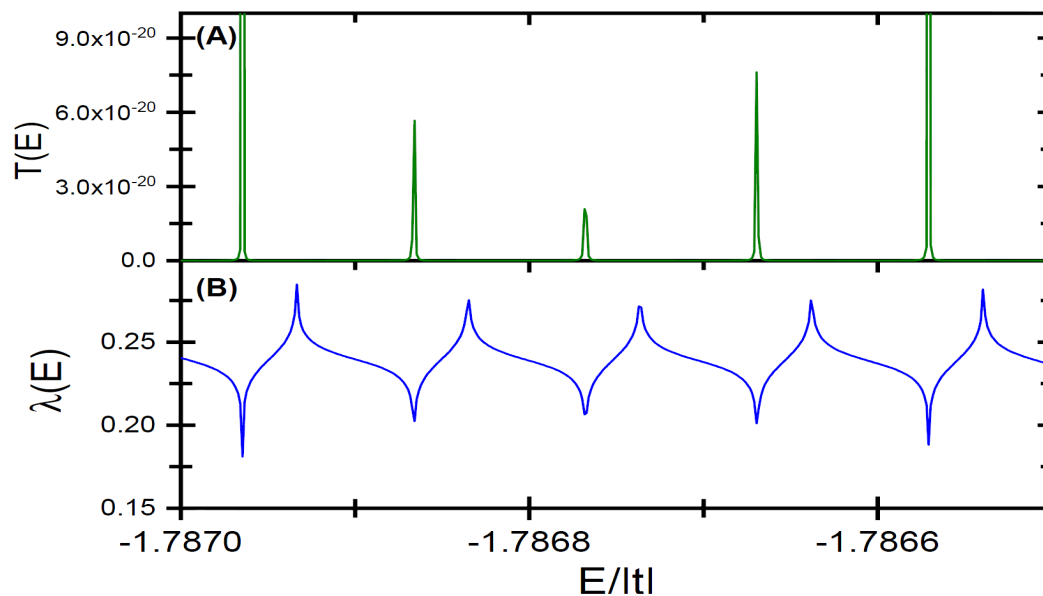


Figura 3.27: Se muestra una ampliación de los espectros de transmitancia y exponente de Lyapunov mostrados en la Figura (3.26).

Capítulo 4

Conclusiones

En esta tesis cuantificamos el efecto en la transmitancia y la densidad de estados al introducir impurezas a cadenas periódicas, considerando que la distancia entre ellas sigue una secuencia de Fibonacci. Las impurezas estudiadas fueron de tipo integrales de salto, o de energías de sitio, o estructuras rómbicas y hexagonales con y sin saturación. Además, se analizó dichas propiedades físicas en la cadena de *Nickel mean*. Los formalismos empleados fueron los de Landauer, matriz de transferencia, amarre fuerte, coeficientes de Lyapunov y funciones de Green para la Densidad de Estados (DOS). Más aún, para DOS y la matriz de transferencia se desarrollaron métodos de renormalización en espacio real para poder estudiar cadenas macroscópicas del orden 10^8 átomos. Además, obtuvimos ecuaciones analíticas para la transmitancia donde se presentan estados de reflectancia perfecta y estados de conducción balística.

Las conclusiones más relevantes de esta tesis son:

- Los métodos de renormalización en espacio real nos permiten analizar las propiedades físicas de forma exacta en cadenas con impurezas de tamaño macroscópico (10^8 átomos).
- Se obtuvieron de forma analítica las energías de las distintas impurezas empleadas en este trabajo.
- Se dedujo en que energías el espectro es balístico y en cuales tiene reflectancia perfecta.
- Se diseñan dos sistemas (rombos y hexágonos saturados) para generar una banda central de energía prohibida, donde su ancho depende de la integral de salto de la impureza.
- Se obtiene un estado transparente en espectro de transmitancia [$T(E) = 1.0$] en energía cero para una cadena con rombos no saturada, este estado se presenta un ciclo de seis, ya que la distancia entre los rombos sigue la secuencia de Fibonacci.
- En todos los sistemas periódicos se observa que, al ir incrementando impurezas, crecen las zonas de energía prohibida y se reducen las zonas con picos de alta transmitancia.
- Cuando se incrementa el número de átomos en las cadenas aperiódicas los espectros de conducción tienen un mayor número de picos de alta conductividad.
- Las zonas de estados de alta transmitancia con mayor ancho se forman en el problema sitios.
- La impureza Fano lineal crea estados localizados, la cantidad de estos es mayor cuando el número de sitios Fano aumenta.
- Para todos los sistemas, la presencia de una impureza incorpora estados fuera de la banda.

En resumen, al introducir impurezas o defectos, se pierde la periodicidad del sistema, lo cual imposibilita el uso del espacio recíproco, por ende, el análisis de sus propiedades debe ser llevado a

cabo en espacio real, en donde los métodos de renormalización han resultado ser eficientes y exactos computacionalmente al permitir el estudio de sistemas macroscópicos. Por lo que este trabajo se puede extender al estudio de las uniones moleculares en sistemas periódicos, aperiódicos y cuasiperiódicos multidimensionales empleando teoremas de convolución, para diseñar dispositivos reales.

Apéndice

A

Densidad de Estados sin Impurezas

Renormalización para Aperiodicidad Estructural o Problema de Enlaces

Recordemos que para la generación n –ésima necesitamos hacer dos renormalizaciones ya que la cadena es de cinco sitios efectivos, la primera renormalización es de los primeros cuatro sitios efectivos, usando la ecuación de Dyson (1.40) tenemos que:

$$\begin{pmatrix} \epsilon - \varepsilon_L(n-1) & -t(n-1) & 0 & 0 \\ -t(n-1) & \epsilon - W(n) & -t(n-2) & 0 \\ 0 & -t(n-2) & \epsilon - V(n) & -t(n-2) \\ 0 & 0 & -t(n-2) & \epsilon - U(n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & G_{13} & G_{14} \\ G_{21} & G_{22} & G_{23} & G_{24} \\ G_{31} & G_{32} & G_{33} & G_{34} \\ G_{41} & G_{42} & G_{43} & G_{44} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Seguimos el mismo camino de la sección (1.6) para la cadena periódica, es decir, multiplicar la matriz de TBH por alguna de las columnas de la matriz de Green y sustituir las ecuaciones intermedias a los extremos, si tomamos la primera columna de G llegamos a que:

$$\begin{pmatrix} \epsilon - [\varepsilon_L(n-1) + \frac{[\epsilon - V(n)]t(n-1)^2}{IKappa(n)}] & -\frac{t(n-2)^2 t(n-1)}{IKappa(n)} \\ -\frac{t(n-2)^2 t(n-1)}{IKappa(n)} & \epsilon - [U(n) + \frac{[\epsilon - W(n)]t(n-2)^2}{IKappa(n)}] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11} & G_{14} \\ G_{41} & G_{44} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

donde $IKappa(n) = [\epsilon - W(n)][\epsilon - V(n)] - t(n-2)^2$ y el I denota una renormalización intermedia, por lo que las energías que describen al sistema renormalizado son:

$$I\varepsilon_L(n) = \varepsilon_L(n-1) + \frac{[\epsilon - V(n)]t(n-1)^2}{IKappa(n)}, \quad I\varepsilon_R(n) = U(n) + \frac{[\epsilon - W(n)]t(n-2)^2}{IKappa(n)},$$

$$It(n) = \frac{t(n-2)^2 t(n-1)}{IKappa(n)}.$$

La densidad de estados del sistema no renormalizado es:

$$IDOS(\epsilon, n) = -Im\{A(n-1)G_{11} + I\varnothing(n)G_{22} + C(n-1)G_{12} + D(n-1) + I\Delta(n)G_{33} + C(n-2)G_{23}$$

$$+D(n-2) + B(n-2)G_{44} + C(n-2)G_{34} + D(n-2)\}/\pi.$$

donde, $I\varnothing(n) = [B(n-1) + A(n-2) - 1]$ y $I\Delta(n) = [B(n-2) + A(n-2) - 1]$, los términos que están restando se deben a que dos generaciones comparten un mismo sitio efectivo por lo que la función de Green se está contando "doble" y es necesario evitar aportación extra, por otro lado para el sistema renormalizado tenemos:

$$IDOS_N(\varepsilon, n) = -Im\{IA(n)G_{11} + IB(n)G_{44} + IC(n)G_{14} + ID(n)\}/\pi.$$

Para encontrar los coeficientes de renormalización necesitamos escribir $\{G_{22}, G_{12}, G_{33}, G_{23}, G_{34}\}$ en términos de $\{G_{11}, G_{14}, G_{44}\}$, para esto necesitamos multiplicar las filas 2 y 3 de la matriz TBH por toda la matriz de Green, haciendo las sustituciones adecuadas y el álgebra necesaria se llega a:

$$G_{21} = \frac{[\varepsilon - V(n)]t(n-1)}{IKappa(n)}G_{11} + \frac{t(n-1)^2}{IKappa(n)}G_{41},$$

$$G_{34} = \frac{[\varepsilon - W(n)]t(n-2)}{IKappa(n)}G_{44} + \frac{t(n-1)t(n-2)}{IKappa(n)}G_{14},$$

$$G_{22} = \frac{\varepsilon - V(n)}{IKappa(n)} + \left[\frac{[\varepsilon - V(n)]t(n-1)}{IKappa(n)}\right]^2 G_{11} + 2\left[\frac{[\varepsilon - V(n)]t(n-2)^2 t(n-1)}{[IKappa(n)]^2}\right] G_{41} + \left[\frac{t(n-2)^2}{IKappa(n)}\right]^2 G_{44},$$

$$G_{33} = \frac{\varepsilon - W(n)}{IKappa(n)} + \left[\frac{t(n-1)t(n-2)}{IKappa(n)}\right]^2 G_{11} + 2\left[\frac{[\varepsilon - W(n)]t(n-2)^2 t(n-1)}{[IKappa(n)]^2}\right] G_{41} + \left[\frac{[\varepsilon - W(n)]t(n-2)}{IKappa(n)}\right]^2 G_{44},$$

$$G_{23} = \frac{t(n-2)}{IKappa(n)} + \frac{t(n-2)}{\varepsilon - W(n)} \left[\frac{t(n-1)^2}{IKappa(n)} + \left[\frac{t(n-1)t(n-2)}{IKappa(n)}\right]^2\right] G_{11} + \left[\frac{t(n-1)t(n-2)}{IKappa(n)} + 2\frac{t(n-1)t(n-2)^3}{[IKappa(n)]^2}\right] G_{14} \\ + t(n-2)[\varepsilon - W(n)] \left[\frac{t(n-2)}{IKappa(n)}\right]^2 G_{44}.$$

Estos valores se sustituyen en la densidad de estados para el sistema sin renormalizar, dado que la densidad de estados debe ser igual para ambas, podemos encontrar el valor de los coeficientes de renormalización $\{IA(n), IB(n), IC(n), ID(n)\}$, dados de la siguiente manera:

$$IA(n) = A(n-1) + I\varnothing(n) \left[\frac{[\varepsilon - V(n)]t(n-1)}{IKappa(n)}\right]^2 + C(n-1) \left[\frac{[\varepsilon - V(n)]t(n-1)}{IKappa(n)}\right] + I\Delta(n) \left[\frac{t(n-1)t(n-2)}{IKappa(n)}\right]^2 \\ + C(n-2) \frac{t(n-2)}{\varepsilon - W(n)} \left[\frac{t(n-1)^2}{IKappa(n)} + \left[\frac{t(n-1)t(n-2)}{IKappa(n)}\right]^2\right],$$

$$IB(n) = I\varnothing(n) \left[\frac{t(n-2)^2}{IKappa(n)}\right]^2 + I\Delta(n) \left[\frac{[\varepsilon - W(n)]t(n-2)}{IKappa(n)}\right]^2 + C(n-2)t(n-2)[\varepsilon - W(n)] \left[\frac{t(n-2)}{IKappa(n)}\right]^2 \\ + B(n-2) + C(n-2) \left[\frac{[\varepsilon - W(n)]t(n-2)}{IKappa(n)}\right],$$

$$IC(n) = 2 \cdot I\varnothing(n) \left[\frac{[\varepsilon - V(n)]t(n-1)t(n-2)^2}{[IKappa(n)]^2}\right] + C(n-1) \left[\frac{t(n-2)^2}{IKappa(n)}\right] + 2C(n-2) \left[\frac{t(n-1)t(n-2)}{IKappa(n)}\right]$$

$$+ \frac{t(n-1)t(n-2)^3}{[Kappa(n)]^2} + 2 \cdot I\Delta(n) \left[\frac{[\epsilon - W(n)]t(n-1)t(n-2)^2}{[Kappa(n)]^2} \right],$$

$$ID(n) = D(n-1) + 2D(n-2) + I\varnothing(n) \left[\frac{\epsilon - V(n)}{IKappa(n)} \right] + I\Delta(n) \left[\frac{\epsilon - W(n)}{IKappa(n)} \right] + C(n-2) \left[\frac{t(n-2)}{IKappa(n)} \right].$$

La ecuación de Dyson para la segunda renormalización es:

$$\begin{pmatrix} \epsilon - I\varepsilon_L(n) & -It(n) & 0 \\ -It(n) & \epsilon - I\varepsilon_R(n) & -t(n-2) \\ 0 & -t(n-2) & \epsilon - \varepsilon_R(n-2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & G_{13} \\ G_{21} & G_{22} & G_{23} \\ G_{31} & G_{32} & G_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Para encontrar las energías efectivas se realiza el mismo procedimiento anterior, es decir, multiplicamos toda la matriz TBH por la columna 1 de la matriz de Green y al sustituir la ecuación intermedia en las del extremo tenemos que:

$$\begin{pmatrix} \epsilon - [I\varepsilon_L(n) + \frac{It(n-1)^2}{Kappa(n)}] & -\frac{It(n)t(n-2)}{Kappa(n)} \\ -\frac{It(n)t(n-2)}{Kappa(n)} & \epsilon - [\varepsilon_R(n-2) + \frac{It(n-1)^2}{Kappa(n)}] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11} & G_{13} \\ G_{31} & G_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

donde $Kappa(n) = \epsilon - I\varepsilon_R(n)$, por lo tanto el sistema total renormalizado tiene las siguientes energías:

$$\varepsilon_L(n) = I\varepsilon_L(n) + \frac{It(n-1)^2}{Kappa(n)}, \quad \varepsilon_R(n) = \varepsilon_R(n-2) + \frac{It(n-1)^2}{Kappa(n)},$$

$$t(n) = \frac{It(n)t(n-2)}{Kappa(n)}.$$

Por otro lado las densidades de estados para los dos sistemas (renormalizado y sin renormalizar) son:

$$IDOS(\epsilon, n) = -Im\{IA(n)G_{11} + \varnothing(n)G_{22} + IC(n)G_{12} + ID(n) + B(n-2)G_{33} + C(n-2)G_{23} + D(n-2)\}/\pi$$

y

$$IDOS_N(\epsilon, n) = -Im\{A(n)G_{11} + B(n)G_{33} + C(n)G_{13} + D(n)\}/\pi.$$

con $\varnothing(n) = IB(n) + A(n-2) - 1$, si multiplicamos la fila 2 por toda la matriz de Green, podemos escribir al conjunto $\{G_{21}, G_{23}, G_{22}\}$ en términos de $\{G_{11}, G_{33}, G_{13}\}$ y encontrar que los coeficientes de renormalización son:

$$A(n) = IA(n) + \varnothing(n) \left[\frac{It(n)}{Kappa(n)} \right]^2 + IC(n) \left[\frac{It(n)}{Kappa(n)} \right],$$

$$B(n) = B(n-2) + \varnothing(n) \left[\frac{t(n-2)}{Kappa(n)} \right]^2 + IC(n-2) \left[\frac{t(n-2)}{Kappa(n)} \right],$$

$$C(n) = 2\varnothing(n) \left[\frac{It(n)t(n-2)}{[Kappa(n)]^2} \right] + IC(n) \left[\frac{t(n-2)}{Kappa(n)} \right] + C(n-2) \left[\frac{It(n)}{Kappa(n)} \right],$$

$$D(n) = \frac{\varnothing(n)}{Kappa(n)} + ID(n) + D(n-2),$$

Por lo tanto los coeficientes de la función de Green sin saturadores son:

$$G_{11} = \frac{\epsilon - \epsilon_R(n)}{[\epsilon - \epsilon_R(n)][\epsilon - \epsilon_L(n)] - t(n)^2}, \quad G_{44} = \frac{\epsilon - \epsilon_L(n)}{[\epsilon - \epsilon_R(n)][\epsilon - \epsilon_L(n)] - t(n)^2},$$

$$G_{14} = G_{41} = \frac{t(n)}{[\epsilon - \epsilon_R(n)][\epsilon - \epsilon_L(n)] - t(n)^2}.$$

Si la cadena está conectada a dos saturadores en sus extremos:

$$G_{11} = \frac{\epsilon_{RT}}{[\epsilon_{RT}][\epsilon_{LT}] - t(n)^2}, \quad G_{44} = \frac{\epsilon_{LT}}{[\epsilon_{RT}][\epsilon_{LT}] - t(n)^2},$$

$$G_{14} = G_{41} = \frac{t(n)}{[\epsilon_{RT}][\epsilon_{LT}] - t(n)^2}.$$

donde $\epsilon_{LT} = [\epsilon - (\epsilon_{RP}(n) + \epsilon_L(n))] - \frac{t_p(n)^2}{\epsilon - \epsilon_{LP}(n)}$ y $\epsilon_{RT} = [\epsilon - (\epsilon_R(n) + \epsilon_{LP}(n))] - \frac{t_p(n)^2}{\epsilon - \epsilon_{RP}(n)}$ con $\epsilon_{RP}(n)$, $\epsilon_{LP}(n)$ y $t_p(n)$ las energías efectivas de la renormalización de los saturadores. Obsérvese que para crecer el sistema necesitamos los valores explícitos de las energías efectivas y coeficientes de renormalización de dos generaciones consecutivas, para esto tomaremos las generaciones N(1) y N(2). Para la generación N(1) tenemos dos renormalizaciones de la siguiente forma:

$$\begin{pmatrix} \epsilon - \epsilon_0 & -t_A & 0 & 0 \\ -t_A & \epsilon - \epsilon_0 & -t_B & 0 \\ 0 & -t_B & \epsilon - \epsilon_0 & -t_B \\ 0 & 0 & -t_B & \epsilon - \epsilon_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & G_{13} & G_{14} \\ G_{21} & G_{22} & G_{23} & G_{24} \\ G_{31} & G_{32} & G_{33} & G_{34} \\ G_{41} & G_{42} & G_{43} & G_{44} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

donde encontramos que:

$$I\epsilon_L(1) = \epsilon_0 + \frac{[\epsilon - \epsilon_0]t_A^2}{IKappa(1)}, \quad I\epsilon_R(1) = \epsilon_0 + \frac{[\epsilon - \epsilon_0]t_B^2}{IKappa(1)},$$

$$It(1) = \frac{t_A t_B^2}{IKappa(1)}$$

y

$$IA(1) = 1 + \left[\frac{[\epsilon - \epsilon_0]t_A}{IKappa(1)} \right]^2 + \left[\frac{t_A t_B}{IKappa(1)} \right]^2,$$

$$IB(1) = 1 + \left[\frac{t_B^2}{IKappa(1)} \right]^2 + \left[\frac{[\epsilon - \epsilon_0]t_B}{IKappa(1)} \right]^2,$$

$$IC(1) = 4 \left[\frac{[\epsilon - \epsilon_0]t_A t_B^2}{IKappa(1)} \right]^2, \quad ID(1) = 2 \left[\frac{\epsilon - \epsilon_0}{IKappa(1)} \right].$$

donde $IKappa(1) = [\epsilon - \epsilon_0]^2 - t_B^2$, mientras que para la segunda renormalización tenemos:

$$\begin{pmatrix} \epsilon - I\epsilon_L(1) & -It(1) & 0 \\ -It(1) & \epsilon - I\epsilon_R(1) & -t_B \\ 0 & -t_B & \epsilon - \epsilon_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & G_{13} \\ G_{21} & G_{22} & G_{23} \\ G_{31} & G_{32} & G_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

donde obtenemos:

$$\varepsilon_L(1) = I\varepsilon_L(1) + \frac{It(1)^2}{\varepsilon - I\varepsilon_R(1)}, \quad \varepsilon_R(1) = \varepsilon_0 + \frac{t_B^2}{\varepsilon - I\varepsilon_R(1)},$$

$$t(1) = \frac{It(1)t_B}{\varepsilon - I\varepsilon_R(1)},$$

además:

$$A(1) = IA(1) + IB(1)\left[\frac{It(1)^2}{\varepsilon - I\varepsilon_R(1)}\right]^2 + IC(1)\left[\frac{It(1)}{\varepsilon - I\varepsilon_R(1)}\right],$$

$$B(1) = IB(1)\left[\frac{t_B}{\varepsilon - I\varepsilon_R(1)}\right]^2 + 1,$$

$$C(1) = 2 \cdot IB(1)\left[\frac{It(1)t_B}{[\varepsilon - I\varepsilon_R(1)]^2}\right] + IC(1)\left[\frac{t_B}{\varepsilon - I\varepsilon_R(1)}\right],$$

$$D(1) = ID(1) + \frac{IB(1)}{\varepsilon - I\varepsilon_R(1)}.$$

Por otro lado para la generación N(2), también se tienen dos renormalizaciones, la primera es:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon - \varepsilon_L(1) & -t(1) & 0 & 0 \\ -t(1) & \varepsilon - \varepsilon_R(1) & -t_A & 0 \\ 0 & -t_A & \varepsilon - \varepsilon_0 & -t_A \\ 0 & 0 & -t_A & \varepsilon - \varepsilon_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & G_{13} & G_{14} \\ G_{21} & G_{22} & G_{23} & G_{24} \\ G_{31} & G_{32} & G_{33} & G_{34} \\ G_{41} & G_{42} & G_{43} & G_{44} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

donde obtenemos:

$$I\varepsilon_L(2) = \varepsilon_L(1) + \frac{[\varepsilon - \varepsilon_0]t(1)^2}{IKappa(2)}, \quad I\varepsilon_R(2) = \varepsilon_0 + \frac{[\varepsilon - \varepsilon_R(1)]t_A^2}{IKappa(2)},$$

$$It(2) = \frac{t(1)t_A^2}{IKappa(2)}$$

y

$$IA(2) = A(2) + B(1)\left[\frac{[\varepsilon - \varepsilon_0]t(1)}{IKappa(2)}\right]^2 + C(1)\left[\frac{[\varepsilon - \varepsilon_0]t(1)}{IKappa(2)}\right] + \left[\frac{t(1)t_A}{IKappa(2)}\right]^2,$$

$$IB(2) = 1 + B(1)\left[\frac{t_A^2}{IKappa(2)}\right]^2 + \left[\frac{[\varepsilon - \varepsilon_R(1)]t_A}{IKappa(2)}\right]^2,$$

$$IC(2) = 2B(1)\left[\frac{[\varepsilon - \varepsilon_0]t(1)t_A^2}{[IKappa(2)]^2}\right] + C(1)\left[\frac{t_A^2}{IKappa(2)}\right] + 2\left[\frac{[\varepsilon - \varepsilon_R(1)]t(1)t_A^2}{[IKappa(2)]^2}\right],$$

$$ID(2) = D(1) + B(1)\left[\frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{IKappa(2)}\right] + \left[\frac{\varepsilon - \varepsilon_R(1)}{IKappa(2)}\right].$$

donde $IKappa(2) = [\varepsilon - \varepsilon_R(1)][\varepsilon - \varepsilon_0] - t_A^2$, la segunda renormalización es:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon - I\varepsilon_L(2) & -It(2) & 0 \\ -It(2) & \varepsilon - I\varepsilon_R(2) & -t_A \\ 0 & -t_A & \varepsilon - \varepsilon_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & G_{13} \\ G_{21} & G_{22} & G_{23} \\ G_{31} & G_{32} & G_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

donde se encuentra que:

$$\begin{aligned}\varepsilon_L(2) &= I\varepsilon_L(2) + \frac{It(2)^2}{\epsilon - I\varepsilon_R(2)}, & \varepsilon_R(2) &= \varepsilon_0 + \frac{t_A^2}{\epsilon - I\varepsilon_R(2)}, \\ t(2) &= \frac{It(2)t_A}{\epsilon - I\varepsilon_R(2)}\end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}A(2) &= IA(2) + IB(2)\left[\frac{It(2)^2}{\epsilon - I\varepsilon_R(2)}\right]^2 + IC(2)\left[\frac{It(2)}{\epsilon - I\varepsilon_R(2)}\right], \\ B(2) &= 1 + IB(2)\left[\frac{t_A^2}{\epsilon - I\varepsilon_R(2)}\right]^2, \\ C(2) &= 2 \cdot IB(2)\left[\frac{It(2)t_A}{[\epsilon - I\varepsilon_R(2)]^2}\right] + IC(2)\left[\frac{t_A}{\epsilon - I\varepsilon_R(2)}\right], \\ D(2) &= ID(2) + \frac{IB(2)}{\epsilon - I\varepsilon_R(2)}.\end{aligned}$$

Estos son los parámetros con los que se encontró la densidad de estados para un desorden estructural tipo Nickel Mean, con o sin saturadores.

Renormalización para Desorden Mixto (Estructural y Potencial químico)

La generación n -ésima para este problema tiene ocho sitios efectivos por lo que es necesario realizar tres renormalizaciones de cuatro sitios efectivos cada una, las primeras dos renormalizaciones provienen del tercer sitio efectivo al octavo y es para reducir el álgebra, pues tenemos tres cadenas renormalizadas de la misma generación, usando la ecuación de Dyson para la primera renormalización, tenemos:

$$\begin{aligned}&\begin{pmatrix} \epsilon - \varepsilon_L(n-2) & -t(n-2) & 0 & 0 \\ -t(n-2) & \epsilon - \varepsilon_R(n-2) & -t_{C2} & 0 \\ 0 & -t_{C2} & \epsilon - \varepsilon_L(n-2) & -t(n-2) \\ 0 & 0 & -t(n-2) & \epsilon - \varepsilon_R(n-2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & G_{13} & G_{14} \\ G_{21} & G_{22} & G_{23} & G_{24} \\ G_{31} & G_{32} & G_{33} & G_{34} \\ G_{41} & G_{42} & G_{43} & G_{44} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\end{aligned}$$

donde t_{C2} toma el valor de t_{AB} si la generación $N(n)$ es impar y t_{AA} si $N(n)$ es par, a partir de la ecuación de Dyson podemos encontrar el conjunto de energías efectivas y los coeficientes de renormalización de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}I\varepsilon_L(n) &= \varepsilon_L(n-2) + \frac{[\epsilon - \varepsilon_L(n-2)]t(n-2)^2}{IKappa(n)_S}, \\ I\varepsilon_R(n) &= \varepsilon_R(n-2) + \frac{[\epsilon - \varepsilon_R(n-2)]t(n-2)^2}{IKappa(n)_S}, \\ It(n) &= \frac{t(n-2)^2 t_{C2}}{IKappa(n)_S},\end{aligned}$$

además:

$$IA(n) = A(n-2) + B(n-2) \left[\frac{[\epsilon - \varepsilon_L(n-2)]t(n-2)}{IKappa(n)_S} \right]^2 + C(n-2) \left[\frac{[\epsilon - \varepsilon_L(n-2)]t(n-2)}{IKappa(n)_S} \right] \\ + A(n-2) \left[\frac{t(n-2)t_{C2}}{IKappa(n)_S} \right]^2,$$

$$IB(n) = B(n-2) + B(n-2) \left[\frac{t(n-2)t_{C2}}{IKappa(n)_S} \right]^2 + A(n-2) \left[\frac{[\epsilon - \varepsilon_R(n-2)]t(n-2)}{IKappa(n)_S} \right]^2 \\ + C(n-2) \left[\frac{[\epsilon - \varepsilon_R(n-2)]t(n-2)}{IKappa(n)_S} \right],$$

$$IC(n) = 2 \left[\frac{t_{C2}t(n-2)^2}{[IKappa(n)_S]^2} \right] [B(n-2)[\epsilon - \varepsilon_L(n-2)] + A(n-2)[\epsilon - \varepsilon_R(n-2)]] + 2C(n-2) \left[\frac{t_{C2}t(n-2)}{IKappa(n)_S} \right],$$

$$ID(n) = 2D(n-2) + \frac{B(n-2)[\epsilon - \varepsilon_L(n-2)] + A(n-2)[\epsilon - \varepsilon_R(n-2)]}{IKappa(n)_S},$$

donde $IKappa(n)_S = [\epsilon - \varepsilon_R(n-2)][\epsilon - \varepsilon_L(n-2)] - t_{C2}^2$, por otro lado la ecuación de Dyson para la segunda renormalización es:

$$\begin{pmatrix} \epsilon - I\varepsilon_L(n) & -It(n) & 0 & 0 \\ -It(n) & \epsilon - I\varepsilon_R(n) & -t_{C2} & 0 \\ 0 & -t_{C2} & \epsilon - \varepsilon_L(n-2) & -t(n-2) \\ 0 & 0 & -t(n-2) & \epsilon - \varepsilon_R(n-2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & G_{13} & G_{14} \\ G_{21} & G_{22} & G_{23} & G_{24} \\ G_{31} & G_{32} & G_{33} & G_{34} \\ G_{41} & G_{42} & G_{43} & G_{44} \end{pmatrix} \\ = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

de la cual se obtienen las energías efectivas y los coeficientes de renormalización de la siguiente forma:

$$II\varepsilon_L(n) = I\varepsilon_L(n) + \frac{[\epsilon - \varepsilon_L(n-2)]It(n)^2}{IIKappa(n)_S}, \quad II\varepsilon_R(n) = \varepsilon_R(n-2) + \frac{[\epsilon - I\varepsilon_R(n-2)]t(n-2)^2}{IIKappa(n)_S},$$

$$IIIt(n) = \frac{It(n)t(n-2)t_{C2}}{IIKappa(n)_S}$$

y

$$IIA(n) = IA(n) + IB(n) \left[\frac{[\epsilon - \varepsilon_L(n-2)]It(n)}{IIKappa(n)_S} \right]^2 + IC(n) \left[\frac{[\epsilon - \varepsilon_L(n-2)]It(n)}{IIKappa(n)_S} \right] + A(n-2) \left[\frac{It(n)t_{C2}}{IIKappa(n)_S} \right]^2,$$

$$IIB(n) = B(n-2) + IB(n) \left[\frac{t(n-2)t_{C2}}{IIKappa(n)_S} \right]^2 + A(n-2) \left[\frac{[\epsilon - I\varepsilon_R(n-2)]t(n-2)}{IIKappa(n)_S} \right]^2$$

$$+C(n-2)\left[\frac{[\epsilon - I\epsilon_R(n-2)]t(n-2)}{IIKappa(n)_S}\right],$$

$$IIC(n) = 2\left[\frac{It(n)t_{C_2}t(n-2)}{[IIKappa(n)_S]^2}\right][IB(n-2)[\epsilon - \epsilon_L(n-2)] + A(n-2)[\epsilon - I\epsilon_R(n-2)]] + C(n)\left[\frac{t_{C_2}t(n-2)}{IIKappa(n)_S}\right]$$

$$+C(n-2)\left[\frac{t_{C_2}t(n)}{IIKappa(n)_S}\right],$$

$$IID(n) = ID(n) + D(n-2) + \frac{IB(n-2)[\epsilon - \epsilon_L(n-2)] + A(n-2)[\epsilon - I\epsilon_R(n)]}{IIKappa(n)_S},$$

donde II denota una segunda renormalización, además $IIKappa(n)_S = [\epsilon - \epsilon_L(n-2)][\epsilon - I\epsilon_R(n-2)] - t_{C_2}^2$, por último para la tercera renormalización la ecuación de Dyson está dada como:

$$\begin{pmatrix} \epsilon - \epsilon_L(n-1) & -t(n-1) & 0 & 0 \\ -t(n-1) & \epsilon - \epsilon_R(n-1) & -t_{C_1} & 0 \\ 0 & -t_{C_1} & \epsilon - II\epsilon_L(n) & -II t(n) \\ 0 & 0 & -II t(n) & \epsilon - II\epsilon_R(n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & G_{13} & G_{14} \\ G_{21} & G_{22} & G_{23} & G_{24} \\ G_{31} & G_{32} & G_{33} & G_{34} \\ G_{41} & G_{42} & G_{43} & G_{44} \end{pmatrix} \\ = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

donde $t_{C_1} = t_{AB}$ si $N(n)$ es par, $t_{C_1} = t_{AA}$ si $N(n)$ es impar, los coeficientes de renormalización y sus energías efectivas son:

$$\epsilon_L(n) = \epsilon_L(n-1) + \frac{[\epsilon - II\epsilon_L(n)]t(n-1)^2}{Kappa(n)_S}, \quad \epsilon_R(n) = II\epsilon_R(n) + \frac{[\epsilon - \epsilon_R(n-1)]II t(n)^2}{Kappa(n)_S},$$

$$t(n) = \frac{II t(n)t(n-1)t_{C_1}}{Kappa(n)_S}$$

y

$$A(n) = A(n-1) + B(n-1)\left[\frac{[\epsilon - II\epsilon_L(n)]t(n-1)}{Kappa(n)_S}\right]^2 + C(n-1)\left[\frac{[\epsilon - II\epsilon_L(n)]t(n-1)}{Kappa(n)_S}\right] + IIA(n)\left[\frac{t(n-1)t_{C_1}}{Kappa(n)_S}\right]^2,$$

$$B(n) = B(n-1)\left[\frac{II t(n)t_{C_1}}{Kappa(n)_S}\right]^2 + IIA(n)\left[\frac{[\epsilon - \epsilon_R(n-1)]II t(n)}{Kappa(n)_S}\right]^2 + IIB(n) + IIC(n)\left[\frac{[\epsilon - \epsilon_R(n-1)]II t(n)}{Kappa(n)_S}\right],$$

$$C(n) = 2\left[\frac{II t(n)t(n-1)t_{C_1}}{[Kappa(n)_S]^2}\right][B(n-1)[\epsilon - II\epsilon_L(n)] + IIA(n)[\epsilon - \epsilon_R(n-1)]] + C(n-1)\left[\frac{II t(n)t_{C_1}}{Kappa(n)_S}\right]$$

$$+IIC(n)\left[\frac{t(n-1)t_{C_1}}{Kappa(n)_S}\right],$$

$$D(n) = D(n-1) + IID(n) + B(n-1) \frac{[\epsilon - II\varepsilon_L(n)]}{Kappa(n)_S} + IIA(n) \frac{[\epsilon - \varepsilon_R(n-1)]}{Kappa(n)_S},$$

donde $Kappa(n)_S = [\epsilon - \varepsilon_R(n-1)][\epsilon - II\varepsilon_L(n)] - t_{C1}^2$, los coeficientes de la matriz de Green son los mismos dados en la renormalización de aperiodicidad estructural. Para crecer la cadena necesitamos condiciones iniciales de dos generaciones consecutivas, si tomamos las generaciones $N(1)$ y $N(2)$, tenemos que para la primera generación, que consta de cuatro sitios, la ecuación de Dyson es:

$$\begin{pmatrix} \epsilon - \varepsilon_L(n-1) & -t(n-1) & 0 & 0 \\ -t(n-1) & \epsilon - \varepsilon_R(n-1) & -t_{C1} & 0 \\ 0 & -t_{C1} & \epsilon - II\varepsilon_L(n) & -II t(n) \\ 0 & 0 & -II t(n) & \epsilon - II\varepsilon_R(n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & G_{13} & G_{14} \\ G_{21} & G_{22} & G_{23} & G_{24} \\ G_{31} & G_{32} & G_{33} & G_{34} \\ G_{41} & G_{42} & G_{43} & G_{44} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

de la cual obtenemos que:

$$\varepsilon_L(1) = \varepsilon_A + \frac{[\epsilon - \varepsilon_B]t_{AB}^2}{Kappa(1)_S} \quad \varepsilon_R(1) = \varepsilon_B + \frac{[\epsilon - \varepsilon_B]t_{BB}^2}{Kappa(1)_S}$$

$$t(1) = \frac{t_{AB}t_{BB}^2}{Kappa(1)_S}$$

y

$$A(1) = 1 + \left[\frac{[\epsilon - \varepsilon_B]t_{AB}}{Kappa(1)_S} \right]^2 + \left[\frac{t_{AB}t_{BB}}{Kappa(1)_S} \right]^2,$$

$$B(1) = 1 + \left[\frac{t_{BB}^2}{Kappa(1)_S} \right]^2 + \left[\frac{[\epsilon - \varepsilon_B]t_{BB}}{Kappa(1)_S} \right]^2,$$

$$C(1) = 4 \left[\frac{[\epsilon - \varepsilon_B]t_{AB}t_{BB}^2}{Kappa(1)_S} \right], \quad D(1) = 2 \left[\frac{\epsilon - \varepsilon_B}{Kappa(1)_S} \right],$$

donde $Kappa(1)_S = [\epsilon - \varepsilon_B]^2 - t_{BB}^2$ para la segunda generación tenemos dos renormalizaciones, la primera está dada de la siguiente manera:

$$\begin{pmatrix} \epsilon - \varepsilon_L(1) & -t(1) & 0 & 0 \\ -t(1) & \epsilon - \varepsilon_R(1) & -t_{AB} & 0 \\ 0 & -t_{AB} & \epsilon - \varepsilon_A & -t_{AA} \\ 0 & 0 & -t_{AA} & \epsilon - \varepsilon_A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & G_{13} & G_{14} \\ G_{21} & G_{22} & G_{23} & G_{24} \\ G_{31} & G_{32} & G_{33} & G_{34} \\ G_{41} & G_{42} & G_{43} & G_{44} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

con:

$$I\varepsilon_L(2) = \varepsilon_L(1) + \frac{[\epsilon - \varepsilon_A]t(1)^2}{IKappa(2)_S}, \quad I\varepsilon_R(2) = \varepsilon_A + \frac{[\epsilon - \varepsilon_R(1)]t_{AA}^2}{IKappa(2)_S},$$

$$It(2) = \frac{t_{AB}t_{AA}t(1)}{IKappa(2)_S}$$

y

$$\begin{aligned}
 IA(2) &= A(1) + B(1) \left[\frac{[\epsilon - \epsilon_A]t(1)}{IKappa(2)_S} \right]^2 + C(1) \left[\frac{[\epsilon - \epsilon_A]t(1)}{IKappa(2)_S} \right] + \left[\frac{t_{AB}t(1)}{IKappa(2)_S} \right]^2, \\
 IB(2) &= 1 + B(1) \left[\frac{t_{AB}t_{AA}}{IKappa(2)_S} \right]^2 + \left[\frac{[\epsilon - \epsilon_R(1)]t_{AA}}{IKappa(2)_S} \right]^2, \\
 IC(2) &= 2 \left[\frac{t_{AB}t_{AA}t(1)}{[IKappa(2)_S]^2} \right] [B(1)[\epsilon - \epsilon_A] + C(1)[\epsilon - \epsilon_R(1)]] + C(1) \left[\frac{t_{AB}t_{AA}}{IKappa(2)_S} \right], \\
 ID(2) &= D(1) + B(1) \left[\frac{\epsilon - \epsilon_A}{IKappa(2)_S} \right] + \frac{\epsilon - \epsilon_R(1)}{IKappa(2)_S},
 \end{aligned}$$

donde $IKappa(2)_S = [\epsilon - \epsilon_R(1)][\epsilon - \epsilon_A] - t_{AB}^2$, mientras que para la segunda renormalización tenemos:

$$\begin{pmatrix} \epsilon - I\epsilon_L(2) & -It(2) & 0 \\ -It(2) & \epsilon - I\epsilon_R(2) & -t_{AA} \\ 0 & -t_{AA} & \epsilon - \epsilon_A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & G_{13} \\ G_{21} & G_{22} & G_{23} \\ G_{31} & G_{32} & G_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

con energías efectivas:

$$\begin{aligned}
 \epsilon_L(2) &= I\epsilon_L(2) + \frac{It(2)^2}{\epsilon - I\epsilon_R(2)}, & \epsilon_R(2) &= \epsilon_A + \frac{t_{AA}^2}{\epsilon - I\epsilon_R(2)}, \\
 t(2) &= \frac{It(2)t_{AA}}{\epsilon - I\epsilon_R(2)}
 \end{aligned}$$

y coeficientes de renormalización:

$$\begin{aligned}
 A(2) &= IA(2) + IB(2) \left[\frac{It(2)^2}{\epsilon - I\epsilon_R(2)} \right]^2 + IC(2) \left[\frac{It(2)}{\epsilon - I\epsilon_R(2)} \right], \\
 B(2) &= 1 + IB(2) \left[\frac{t_{AA}^2}{\epsilon - I\epsilon_R(2)} \right]^2, \\
 C(2) &= 2 \cdot IB(2) \left[\frac{It(2)t_{AA}}{[\epsilon - I\epsilon_R(2)]^2} \right] + IC(2) \left[\frac{t_{AA}}{\epsilon - I\epsilon_R(2)} \right], \\
 D(2) &= ID(2) + \frac{IB(2)}{\epsilon - I\epsilon_R(2)}.
 \end{aligned}$$

Con estos parámetros se encuentra la densidad de estados para una aperiodicidad mixta tipo Nickel Mean. Dado que la forma de construcción para la aperiodicidad química es similar, basta con tomar $t_{AA} = t_{AB} = t_{BB} = t$ donde t es la unidad.

Apéndice

B

Renormalización y Matriz de Transferencia

En la subsección (2.3.1) *Transmitancia*, se mostró la matriz de transferencia para una cadena lineal que interactúa con sus dos vecinos más cercanos, es decir, un sistema que define la matriz de transferencia en una cadena de tres sitios, se puede extender para todos los sitios que uno desee, aunque los más utilizados son el caso ya mencionado y el de cuatro sitios que es una multiplicación de dos matrices de transferencia dadas de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
 \underline{\tau}(1) &= \begin{pmatrix} \frac{E-\varepsilon_{n+1}}{t_{n,n+2}} & -\frac{t_{n,n+1}}{t_{n,n+2}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, & \underline{\tau}(2) &= \begin{pmatrix} \frac{E-\varepsilon_n}{t_{n,n+1}} & -\frac{t_{n,n-1}}{t_{n,n+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\
 \longrightarrow \underline{\tau}(1,2) &= \begin{pmatrix} \frac{E-\varepsilon_{n+1}}{t_{n,n+2}} & -\frac{t_{n,n+1}}{t_{n,n+2}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{E-\varepsilon_n}{t_{n,n+1}} & -\frac{t_{n,n-1}}{t_{n,n+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{cases} \tau_{11} = \left(\frac{E-\varepsilon_{n+1}}{t_{n,n+2}}\right)\left(\frac{E-\varepsilon_n}{t_{n,n+1}}\right) - \frac{t_{n,n+1}}{t_{n,n+2}} \\ \tau_{12} = \left(\frac{E-\varepsilon_{n+1}}{t_{n,n+2}}\right)\left(-\frac{t_{n,n-1}}{t_{n,n+1}}\right) \\ \tau_{21} = \frac{E-\varepsilon_n}{t_{n,n+1}}, \tau_{22} = -\frac{t_{n,n-1}}{t_{n,n+1}} \end{cases},
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

el sistema descrito anteriormente se puede observar en la figura (4.1), con esta generalización basta con dar el valor de cada uno de los parámetros $\{\varepsilon_n, \varepsilon_{n+1}, t_{n,n-1}, t_{n,n+1}, t_{n,n+2}\}$ para conocer la matriz de transferencia.

Aperiodicidad Estructural o Problema de Enlaces

Para la generación n -ésima, con aperiodicidad estructural de tipo Nickel Mean, la matriz de transferencia total es de la siguiente manera:

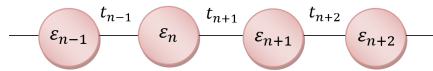


Figura 4.1: Representación esquemática de una cadena de 4 sitios.

$$\underline{T}(S) = \underline{T}(n-2)\underline{U}(n)\underline{T}(n-2)\underline{V}(n)\underline{T}(n-2)\underline{W}(n)\underline{T}(n-1),$$

donde $\underline{U}(n)$, $\underline{V}(n)$ y $\underline{W}(n)$ son conocidas como matrices de unión, cuya finalidad es unir dos sistemas renormalizados definidas de la siguiente manera:

$$\underline{U}(n) = \underline{V}(n) = \begin{pmatrix} \frac{E-\varepsilon_0}{t_A} & -\frac{t_{C2}}{t_A} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \underline{W}(n) = \begin{pmatrix} \frac{E-\varepsilon_0}{t_A} & -\frac{t_{C1}}{t_A} \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

donde $t_{C1} = t_B$, $t_{C2} = t_A$ si n es par, por otro lado si n es impar tenemos $t_{C1} = t_A$ y $t_{C2} = t_B$, para determinar la matriz de transferencia del sistema completo necesitamos conocer dos matrices de transferencia asociadas a dos generaciones consecutivas. Para la primera generación la matriz de transferencia es:

$$\underline{\tau}(1) = \underline{B}(1)\underline{A}(1) = \begin{pmatrix} \frac{E-\varepsilon_0}{t_B} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} [(\frac{E-\varepsilon_0}{t_B})^2 - 1] & (\frac{E-\varepsilon_0}{t_B})(-\frac{t_A}{t_B}) \\ \frac{E-\varepsilon_0}{t_B} & -\frac{t_A}{t_B} \end{pmatrix} = \begin{cases} \tau_{11}(1) = \frac{E-\varepsilon_0}{t_B} \{[(\frac{E-\varepsilon_0}{t_B})^2 - 1] - 1\} \\ \tau_{12}(1) = -\frac{t_A}{t_B} (\frac{E-\varepsilon_0}{t_B})^2 + \frac{t_A}{t_B} \\ \tau_{21}(1) = [(\frac{E-\varepsilon_0}{t_B})^2 - 1] \\ \tau_{22}(1) = -\frac{t_A}{t_B} (\frac{E-\varepsilon_0}{t_B}) \end{cases}$$

Para la segunda generación tenemos que $\underline{\tau}(2) = \underline{\tau}(1)\underline{B}(2)\underline{A}(2)$ donde $\underline{B}(2)$ y $\underline{A}(2)$ son de la siguiente forma:

$$\underline{A}(2) = \begin{pmatrix} \frac{1}{t_A} [(\frac{E-\varepsilon_0}{t_B})^2 - t_B] & (-\frac{E-\varepsilon_0}{t_A}) \\ \frac{E-\varepsilon_0}{t_B} & -1 \end{pmatrix}, \quad \underline{B}(2) = \begin{pmatrix} [(\frac{E-\varepsilon_0}{t_A})^2 - 1] & (-\frac{E-\varepsilon_0}{t_A}) \\ \frac{E-\varepsilon_0}{t_A} & -1 \end{pmatrix}.$$

Las matrices $\underline{A}(1)$, $\underline{A}(2)$ y $\underline{B}(2)$ se obtienen directamente de la ecuación (5.1), el siguiente paso es conectar los saturadores a los extremos de la cadena lineal. Para esto se definen las matrices $\underline{L}(s)$ (izquierda) y $\underline{R}(s)$ (derecha) que nos dan la transferencia entre saturador-cadena y cadena- saturador, dichas matrices son:

$$\underline{L}(s) = \begin{pmatrix} \frac{E-\varepsilon_0}{t_A} & -\frac{t}{t_A} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \underline{R}(s) = \begin{pmatrix} \frac{E-\varepsilon_0}{t} & -\frac{t_{C3}}{t} \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

donde $t_{C3} = t_A$ para $n - par$ mientras que $t_{C3} = t_B$ para $n - impar$, por lo tanto la matriz de transferencia para una cadena conectada a dos saturadores en sus extremos es:

$$\underline{T}(C_S) = \begin{pmatrix} \frac{E-\varepsilon_0}{t} & -\frac{t_{C3}}{t} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_{11}(S) & T_{12}(S) \\ T_{21}(S) & T_{22}(S) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{E-\varepsilon_0}{t_A} & -\frac{t}{t_A} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix}.$$

Los coeficientes de la matriz $\underline{T}(C_S)$ son los mismos de la ecuación (2.43).

Aperiodicidad Mixto (Estructural y Potencial químico)

Si la aperiodicidad mixta es tipo Nickel Mean, la generación $n - \acute{e}sima$ define una matriz de transferencia como:

$$\underline{T}(S) = \underline{T}(n-2)\underline{U}_S(n)\underline{T}(n-2)\underline{V}_S(n)\underline{T}(n-2)\underline{W}_S(n)\underline{T}(n-1),$$

donde las matrices de conexión $\underline{U}_S(n)$, $\underline{V}_S(n)$ y $\underline{W}_S(n)$ son:

$$\underline{U}(n) = \underline{V}(n) = \begin{pmatrix} \frac{1}{t_{AB}} \left[\frac{(E-\varepsilon_A)(E-\varepsilon_{C2})}{t_{C4}} - t_{C4} \right] & (-\frac{E-\varepsilon_A}{t_{AB}}) \left(\frac{t_{C3}}{t_{C4}} \right) \\ \frac{E-\varepsilon_{C2}}{t_{C4}} & -\frac{t_{C3}}{t_{C4}} \end{pmatrix}$$

y

$$\underline{W}(n) = \begin{pmatrix} \frac{1}{t_{AB}} \left[\frac{(E-\varepsilon_A)(E-\varepsilon_{C1})}{t_{C2}} - t_{C2} \right] & (-\frac{E-\varepsilon_A}{t_{AB}}) \left(\frac{t_{C1}}{t_{C2}} \right) \\ \frac{E-\varepsilon_{C1}}{t_{C2}} & -\frac{t_{C1}}{t_{C2}} \end{pmatrix},$$

donde $\varepsilon_{C1} = \varepsilon_B$, $\varepsilon_{C2} = \varepsilon_A$, $t_{C1} = t_{BB}$, $t_{C2} = t_{AB}$ y $t_{C3} = t_{C4} = t_{AA}$ para $n - par$, por otro lado para $n - impar$ tenemos que: $\varepsilon_{C1} = \varepsilon_A$, $\varepsilon_{C2} = \varepsilon_B$, $t_{C1} = t_{C2} = t_{AA}$, $t_{C3} = t_{BB}$ y $t_{C4} = t_{AB}$, las condiciones iniciales están dadas de la siguiente manera:

Para la primera generación tenemos:

$$\underline{\tau}(1) = \begin{pmatrix} \left[\left(\frac{E-\varepsilon_B}{t_{BB}} \right)^2 - 1 \right] & \left(\frac{E-\varepsilon_B}{t_{BB}} \right) \left(-\frac{t_{AB}}{t_{BB}} \right) \\ \frac{E-\varepsilon_B}{t_{BB}} & -\frac{t_{AB}}{t_{BB}} \end{pmatrix}.$$

Mientras que para la segunda tenemos $\underline{\tau}(2) = \underline{\tau}(1)\underline{B}_S(2)\underline{A}_S(2)$ con:

$$\underline{A}_S(2) = \begin{pmatrix} \frac{E-\varepsilon_B}{t_{AB}} & -\frac{t_{BB}}{t_{AB}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \underline{B}_S(2) = \begin{pmatrix} \left[\left(\frac{E-\varepsilon_A}{t_{AA}} \right)^2 - 1 \right] & \left(\frac{E-\varepsilon_A}{t_{AA}} \right) \left(-\frac{t_{AB}}{t_{AA}} \right) \\ \frac{E-\varepsilon_A}{t_{AA}} & -\frac{t_{AB}}{t_{AA}} \end{pmatrix}.$$

Las matrices asociadas a los saturadores son:

$$\underline{L}(s) = \begin{pmatrix} \frac{E-\varepsilon_A}{t_{AB}} & -\frac{t}{t_{AB}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \underline{R}(s) = \begin{pmatrix} \frac{E-\varepsilon_{C3}}{t} & -\frac{t_{C5}}{t} \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

donde $\varepsilon_{C3} = \varepsilon_A$ y $t_{C5} = t_{AA}$ para $n - par$, para el caso de $n - impar$ tenemos $\varepsilon_{C3} = \varepsilon_B$ y $t_{C5} = t_{BB}$. Por lo tanto la matriz de transferencia conectada por saturadores en los extremos para aperiodicidad mixta es:

$$\underline{T}(C_S) = \begin{pmatrix} \frac{E-\varepsilon_{C3}}{t} & -\frac{t_{C5}}{t} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_{11}(S) & T_{12}(S) \\ T_{21}(S) & T_{22}(S) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{E-\varepsilon_A}{t_{AB}} & -\frac{t}{t_{AB}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Por último para obtener aperiodicidad química o problema de sitios, basta con tomar $t_{AA} = t_{AB} = t_{BB} = t$ con t igual a la unidad.

Bibliografía

- [Anderson, 1958] P.W. Anderson, « *Phys. Rev.* 109 », 1942 (1958).
- [Aragonès, 2017] Aragonès, A. C. et al. « *Single molecule electrical contacts on silicon electrodes under ambient conditions* », *Nat. Commun.* 8, 15056 (2017).
- [Askeland, 1998] D. R. Askeland, « *Ciencia e Ingeniería de los materiales* », International Thomson Editores, 1998.
- [Ashcroft, 1976] N.W. Ashcroft y N. D. Mermin, « *Solid State Physics* », Saunders Collage Publishing, 1976.
- [Capozzi, 2015] Capozzi, B. et al. « *Single-molecule diodes with high rectification ratios through environmental control* », *Nat. Nanotechnol.* 10, 522–527 (2015).
- [Cuevas, 2017] Cuevas, J. C. & Scheer, E., « *Molecular Electronics : An Introduction to Theory and Experiment* », World Scientific, 2017.
- [Cui, 2001] Cui X D, Primak A, Zarate X, Tomfohr J, Sankey O F, Moore A L, Moore T A, Gust D, Harris G and Lindsay S M 2001 *Science* 294 571-4
- [Datta, 1995] S. Datta, « *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* », Cambridge University Press, London, 1995.
- [Donhauser, 2001] Donhauser Z J et al, 2001 *Science* 292 2303-7
- [Dunlap, 1990] D. H. Dunlap, H. L. Wu, P. Phillips, *Phys. Rev. Lett.* 65, 88, (1990).
- [Peña, 2006] L. de la Peña, « *Introducción a la Mecánica Cuántica* », 3a ed. México, FCE, UNAM.
- [Economou, 2006] E. N. Economou, « *Green's functions in Quantum Physics* », No 7 in Springer in Solid State Physics, 2006.
- [Elliott, 1990] S. R. Elliott, « *Physics of Disordered Materials* », 2nd ed. Longman, Essex, UK, 1990.
- [Ferry, 2009] David K. Ferry, « *Transport in Nanostructures* », 2nd ed. United States of America by Cambridge University Press, Singapore, São Paulo, Delhi, Dubai, Tokyo, 2009.
- [Galeote, 2017] Luis. A. Galeote. G. « *Conductancia Eléctrica en Nanoalambres Unidimensionales Segmentados con Impurezas (tesis)* », Ciudad de México, 2017.

- [Gregorio, 2010] Gregorio H. C., R. A. Vázquez Nava, Noboru T., «Nanomateriales en las instituciones de educación superior y de investigación en México», Mundo nano. Artículos Vol.3, No.2 (julio-diciembre) 2010.
- [Huimin, 2016] Huimin Wen, Wengang Li, Jiewei Chen, Gen He, Longhua Li, Mark A. Olson, Andrew C.-H. Sue, J. Fraser Stoddart, Xuefeng Guo. Sci. Adv. 2016; 2 : e1601113
- [Ishii, 1973] K. Ishii, « *Suppl. Prog. Theor. Phys.* », 53, 77 (1973).
- [Janot, 2002] C. Janot, « *Quasicrystals : A Primer* », Clarendon Press: Oxford, 1994.
- [Janssen, 2007] T. Janssen, G. Chapuis and M. de Boissieu, « *Aperiodic Crystals : From Modulated Phases to Quasicrystals* », Oxford University Press: Oxford, 2007.
- [Jacob, 2006] D. Jacob and J. J. Palacios, « *Phys. Rev. B* 73 », 075429 (2006).
- [Jacob, 2007] D. Jacob, « *Transporte de Espín en Nanocontactos y Nanohilos (tesis)* », San Vicente. España, 2007.
- [Joachim, 2000] Joachim, C., Gimzewski, J.K. and Aviram, A. « *Electronics using hybrid molecular and monomolecular devices* », Nature 408, 541 – 548 (2000).
- [Kiguchi, 2017] Kiguchi, M. and Fujii, S. « *Governing the metal molecule interface : towards new functionality in singlemolecule junctions* ». Bull. Chem. Soc. Jpn. 90, 1 – 11 (2017).
- [Landauer, 1957] R. Landauer, « *IBM J. Res. Dev.* 1 », 233 (1957).
- [Landauer, 1970] R. Landauer, « *Philos Mag.* 21 », 863 (1970).
- [Landauro, 2011] Carlos V. Landauro, « *Los Cristales Aperiódicos : 30 años del Descubrimiento de los Cuasicristales* », Revista de Química PUCP, Vol. 25, No 1-2, 2011.
- [Lazo, 2000] E. Lazo M. E. Onell, « *Deslocalización en Sistemas Continuos Desordenados* », Revista Charlas de Física, 17, 65(2000).
- [Lazo, 2001] E. Lazo M. E. Onell, « *Existencia de Estados Extendidos en Cadenas Unidimensionales de Anderson Diluidas por Desorden Periódico* », Revista Charlas de Física, 16, 65(2001).
- [Levine, 1986] D. Levine y P.J. Steinhardt, « *Phys. Rev. B* 34 », 596 (1986).
- [Long, 2006] Long D P, Lazorcik J L, Mantooth B A, Moore M H, Ratner M A, Troisi A, Yao Y, Cizek J W, Tour J M and Shashidhar R 2006 Nat. Mater. 5 901-8
- [Melo, 2000] Martín E. R. Melo, Moisés H. Rivera, « *Estructura de Sólidos Amorfos* », Ingenierías, Octubre-Diciembre 2000. Vol. III, No 9.
- [Mott, 1961] N. F. Mott y W. D. Twose, « *Adv. Phys.* 10 », 107 (1961).
- [Mott, 1978] N. F. Mott y Davis E. A., « *Electronic Processes in non Crystalline Materials* », Clarendon Press Oxford, 1979.

- [Perrin, 2015] Perrin, M. L., Burzurí, E. & Van der Zant, H. S. J., « *Single – molecule transistors* », Chem. Soc. Rev. 44, 902–919 (2015).
- [Perrin, 2017] Perrin, M. L., Doelman, M., Eelkema, R. & van der Zant, H. S. J. « *Design of an efficient multisite single molecule rectifier* », Phys. Chem. Chem. Phys. 19, 29187–29194 (2017).
- [Plazas, 2011] Carlos A. Plazas R. « *Transporte Electrónico a través de Alambres moleculares : Una aplicación al ADN (tesis)* », Bogotá Colombia, 2011.
- [Ratner, 2013] Ratner, M. A., « *A brief history of molecular electronics* », Nat. Nanotechnol. 8, 378–381 (2013).
- [Reichert, 2002] Reichert J, Ochs R, Beckmann D, Weber H B, Mayor M and von Lohneysen H 2002 Phys. Rev. Lett. 88 176804
- [Ryndyk, 2016] Dmitry A. Ryndyk, « *Theory of Quantum Transport at Nanoscale an Introduction* », Springer Series in Solid-State Sciences, 2016.
- [Sánchez, 2003] Vicenta Sánchez. M. « *Transporte Electrónico en Sistemas Cuasiperiódicos (tesis)* », Ciudad de México, 2003.
- [Sánchez, 2004] Vicenta Sánchez y C. Wang, Phys. Rev. B 70, 144207 (2004).
- [Sánchez, 2012] Fernando Sánchez R. « *Localización y en Transporte Electrónico en Redes de Fibonacci Generalizado (tesis)* », Ciudad de México, 2012.
- [Sánchez, 2014] V. Sánchez, C. Ramírez, F. Sánchez y C. Wang, Physica B 449, 121 (2014).
- [Sankey, 2006] He J, Sankey O, Lee M, Tao N J, Li X L and Lindsay S 2006 Faraday Discuss. 131 145-54
- [Seferos, 2006] Seferos D S, Blum A S, Kushmerick J G and Bazan G C 2006 J. Am. Chem. Soc. 128 11260-7
- [Selzer, 2004] Selzer Y, Cabassi M A, Mayer T S and Allara D L 2004 J. Am. Chem. Soc. 126 4052-3
- [Selzer, 2006] Selzer Y and Allara D L 2006 Annu. Rev. Phys. Chem. 57 593-623
- [Shechtman, 1984] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias y J. W. Chan, « *Phys. Rev Lett* 53 », 1951 (1984).
- [Süto, 1994] András Süto, « *Schrödinger Difference Equation whit Deterministic Ergodic Potentials* », En Beyond Quasicrystals, de Denis Gratias, 481-549. Berlin: Springer-Verlag, 1994.
- [Trasobares, 2016] Trasobares, J., Vuillaume, D., Théron, D. & Clément, « *N. A 17 GHz molecular rectifier* », Nat. Commun. 7, 12850 (2016).
- [Van der Molen, 2010] Van der Molen, S. J. & Liljeroth, P., « *Charge transport through molecular switches* », J. Phys. Condens. Matter. 22, 133001 (2010).
- [Voon, 1997] L. C. Voon, « *Electronics and Optical Properties of Semiconductors : A study Based on the empirical TB* », Worcester Polytechnic Institute, 1997.
- [Xue, 2005] Xue Y Q, Datta S and Ratner M A 2002 Chem. Phys. 281 151-70
- [Wilson, 1975] K. Wilson, « *Rev. Mod. Phys.* 57 », 773 (1975).