



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

FACULTAD DE CIENCIAS

**TRANSPORTE CUÁNTICO EN BILLARES
BIDIMENSIONALES CON CAMPO MAGNÉTICO.**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

FÍSICO

P R E S E N T A:

ALONDRA JAZMÍN TAPIA DE LA ROSA



DIRECTOR DE TESIS:

DR. CARLOS RAMÍREZ RAMOS

Ciudad Universitaria, Cd. Mx., 2021



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.

Agradecimientos.

Esta investigación fue realizada gracias al Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) en la UNAM IN116819. Agradezco a la DGAPA-UNAM la beca recibida. Los cálculos realizados en esta tesis fueron realizados en la supercomputadora Miztli a través del proyecto LANCAD-UNAM-DGTIC-329.

Un agradecimiento al Dr. Carlos Ramírez Ramos, quien es mi mentor y mi modelo para seguir, por siempre brindarme su ayuda y dejar de lado su trabajo para poder instruirme en este trabajo, por acogerme desde el principio, por sus consejos siempre oportunos y por siempre motivarme a superarme en este proyecto, así como por brindarme un espacio para trabajar.

Agradezco a mis amigos de toda la vida, quienes me conocieron desde niña y nunca me han abandonado, Jenni y Héctor, porque me han cuidado y me han querido, por qué me han permitido ser parte de su familia. La vida nos hizo hermanos, y es así como los considero.

A continuación, quiero agradecer a mi mejor amigo en la facultad: Jorge Betancourt, porque sus consejos académicos me hicieron llegar hasta este proyecto, por los momentos que compartimos fuera y dentro de la escuela. Gracias Fefesito.

No quiero dejar atrás un profundo agradecimiento a mis amigos físicos: Emma, Palenque, Sergio, Conde, Jules, Gupa. Les agradezco por todos los momentos memorables y sepan que no pude haber encontrado un mejor grupo en la facultad que ustedes. Agradezco también a Enriqueta Noriega por su ayuda académica y compañía; a Mauricio Rodríguez por su cariño y atención.

Quiero agradecer a otra parte importante en mi vida que es mi familia, primeramente, a mi hermano Edwin por ser un modelo desde siempre.

Un agradecimiento a Leonardo Uthhoff. A quien admiro por su inteligencia y por su constancia, quien me ha enseñado a mejorar en todos los aspectos académicos y quién me incita a seguir adelante, Leo te agradezco por hacerme sentir parte de tu familia y darme un segundo hogar.

Y finalmente quiero dar el agradecimiento más especial, para las personas que me inspiraron a estudiar esta carrera y sin las cuales no estaría aquí escribiendo este texto. Nunca podré escribir con palabras el agradecimiento que tengo por todos los sacrificios que han hecho por mí: ¡¡Muchas gracias, mamá y papá!!

Resumen.

En la presente tesis se realiza el estudio del magnetotransporte en un billar cuántico elíptico utilizando el método recursivo de la matriz de dispersión (RSMM). En primer lugar, se realiza una breve introducción a la física de estado sólido y al formalismo de Landauer-Büttiker con el fin de plantear al método recursivo sin incluir campos magnéticos. Seguido de esto, se extiende el método aplicándole los cambios pertinentes al considerar dichos campos obteniendo la forma analítica de la matriz de dispersión de una estructura de enlace y se muestra la variación de la transmitancia como función del campo magnético y la energía para un billar cuántico elipsoidal en una red cuadrada. Dichos resultados coinciden con los reportados en la literatura, comprobando así la veracidad del método. Finalmente se reportan los resultados aplicando variaciones en la geometría del billar cuántico para estudiar la robustez del sistema ante pequeñas deformaciones y se estudia el caso particular de una doble elipse.

Índice.

Introducción.	7
1.Estado Sólido.	9
1.1. Celdas Unitarias y celdas de Bravais	10
1.2. Celda de Wigner-Seitz	11
1.3. Red Recíproca	12
1.4. Celdas de Brillouin.	15
1.5. Electrones en Sólidos. Teorema de Bloch.	16
1.6. Funciones de Wannier.	18
1.6. Teoría de Bandas.	19
1.7. Teoría de Amarre Fuerte.	23
2. Conductancia Eléctrica.	25
2.1. Conductividad de Landauer-Büttiker.	26
2.2. Dispersión Cuántica.	32
2.3. Matriz de Dispersión.	36
2.4. Método Recursivo de la Matriz de Dispersión.	37
3. Sistemas con campo magnético.	48
3.1. Factor de fase de Peierls.	48
3.2. Transmitancia en un punto cuántico elipsoidal.	51
3.3. Construcción de la red cuadrada.	52
4. Aplicación en otros sistemas geométricos.	55
4.1. Billares Elipsoidales.	55
4.3. Doble Elipse.	59

5. Conclusiones	62
Apéndice A.	64
Apéndice B.	67
Apéndice C.	69
Referencias.	72

Introducción.

A través del avance tecnológico que ha tenido la industria electrónica, dos factores han sido los de mayor relevancia en la evolución y diseño de sus sistemas y dispositivos: la eficiencia y el tamaño de estos. Existe una tendencia en la fabricación de estos orientada en dirección hacia tamaños más pequeños siempre que se conserven o aumenten sus funciones, los aparatos que se conocen con estas características se conocen como nanodispositivos. La palabra nano proviene del griego, el cual es un prefijo que significa “enano” y que cotidianamente se utiliza para referirse a objetos cuyo tamaño se acerque a los nanómetros, que, en términos prácticos es como si se dividiera un cabello un millón de veces. Son objetos que no se pueden observar a simple vista, sin embargo, pueden estudiarse a través de la tecnología y las ciencias adecuadas.

Es de esperarse que las propiedades y leyes que cumplen dichos materiales ya no dependan únicamente de su tamaño y de las leyes clásicas de la física, sino que empiezan a ser de gran relevancia efectos cuánticos acerca de cómo se mueven y se comportan los átomos que los componen, tales como la dispersión e interferencia de dichas partículas, los cuales no eran de relevancia en escalas macrométricas. La ciencia que estudia estos materiales se conoce como *nanociencia* y las leyes que rigen en este campo son distintas a las de la escala macroscópica [Ryndyk, 2016]. Las reglas que permiten entender el comportamiento de este “nano universo” están dadas por las leyes de la mecánica cuántica, que determinan las propiedades de la materia cuando se ubican en el rango de interés de la nano escala. Actualmente ya existen algunas aplicaciones prácticas de la nanociencia y se prevé que habrá muchas más, por lo cual es necesario evaluar el impacto que tendrían. Países desarrollados ya cuentan con programas para financiar investigaciones en este campo y, recientemente, México y otros países latinoamericanos han hecho lo propio.

Una de las propiedades fundamentales para el estudio de estas tecnologías es la *conductancia*, la cual se define como la capacidad de un flujo de partículas cargadas de atravesar un sistema, ésta depende de la facilidad con la que se

transmiten bajo efectos cuánticos en una nanoestructura. A esto se le denomina *transporte electrónico*, ambos conceptos se relacionan mediante la *Fórmula de Landauer*.

Recientemente, se han planteado un método recursivo que logra modelar la transmitancia y reflectancia en sistemas cuánticos en el régimen coherente representados por estructuras geométricas bidimensionales dentro de las cuales pueden dispersarse electrones sin considerar un campo magnético. A estas estructuras se les conoce como *billares cuánticos*. A través del método propuesto es posible calcular la conductancia de nanoestructuras con geometría compleja, así como de algunos sistemas macroscópicos. Este método se basa en la construcción iterativa del sistema completo a partir de estructuras más simples, y cuya matriz de dispersión asociada corresponde a la operación de las matrices de dispersión de los subsistemas que lo integran. Los resultados obtenidos que aplican este método han resultado satisfactorios, y el objetivo principal de este trabajo fue realizar una extensión de este para que incluyan campos magnéticos en el sistema ya que la dispersión de las cargas puede ser alterada drásticamente cuando un campo magnético es aplicado.

En el primer capítulo de esta tesis se presentan las nociones básicas relacionadas al estado sólido como lo son: el Teorema de Bloch, funciones de Wannier y modelo de amarre fuerte, con el fin de poder hacer uso de este último en la representación del hamiltoniano de las redes bidimensionales aplicadas en el billar cuántico que se modela. En el Capítulo II se precisan los conceptos necesarios para el cálculo de la conductancia en sistemas nanoestructurados, se realiza una demostración de la fórmula de Landauer-Büttiker y se presentan los fundamentos sobre dispersión cuántica y su representación matricial seguido de una presentación de forma detallada del método recursivo para el cálculo de la matriz de dispersión sin la aplicación de campo magnético. En el Capítulo III se plantea el comportamiento y los cambios pertinentes en las ecuaciones propuestas aplicando un campo magnético y como una aplicación detallada en la construcción de una red cuadrada para un billar cuántico bidimensional de forma elíptica. En el capítulo IV se extiende este método para redes bidimensionales aplicando variaciones los parámetros de los ejes de las elipses, un caso particular con elipse circular y doble elipse. Finalmente, en el capítulo V se exhiben las conclusiones referentes a esta tesis.

1. Estado Sólido

En los últimos años hemos sido testigos del rápido avance tecnológico que ocurre en muchas áreas de la ciencia y en general, en todos los ámbitos de la vida del ser humano, facilitando y mejorando en muchos aspectos la manera en la que vivimos. En particular, se ha hecho necesario mejorar nuestro entendimiento de las propiedades de los dispositivos de tamaño cada vez más pequeño. Gracias a estos estudios es que se ha tenido un gran avance en la modernización de los dispositivos tecnológicos, de tal forma que estos productos han evolucionado hacia una escala nanoscópica, donde las leyes clásicas dejan de ser válidas, siendo ahora descritas por leyes cuánticas.

La rama de la física que se dedica al estudio de este tipo de sistemas es el *estado sólido*. Esta rama se encarga de ver cuáles son los cambios que se producen en los sólidos mediante el estudio de su estructura electrónica. Desde un punto de vista general, el término *sólido* se aplica a materiales rígidos, es decir, materiales que mantienen un comportamiento elástico cuando se les somete a fuerzas hidrostáticas, esfuerzos de tensión y esfuerzos cortantes. Sin embargo, de manera más general, un sólido es un material cuyos átomos o moléculas constituyentes están unidos por fuerzas que los mantienen en torno a una posición de equilibrio [Beiser, 2003].

A partir de su definición, los sólidos pueden clasificarse en dos categorías principales: amorfos y cristalinos. En los sólidos amorfos los átomos o moléculas pueden estar enlazados con firmeza entre sí, pero poseen poca o ninguna periodicidad geométrica en la forma en que sus átomos están acomodados en el espacio. Por otro lado, de acuerdo con la Unión Internacional de Cristalografía (IUCr) un material es un cristal, si tiene esencialmente un patrón de difracción de puntos. Esta cualidad tan importante facilita y proporciona un cuadro conceptual muy simple para comprender sus propiedades físicas (Véase Fig.1.1), por esta razón, gran parte del estudio del estado sólido se enfoca en

el estudio de los cristales. En este capítulo, se revisan los conceptos de celdas unitarias, redes de Bravais, red recíproca, teorema de Bloch y teoría de amarre fuerte, los que emplearemos en capítulos posteriores.

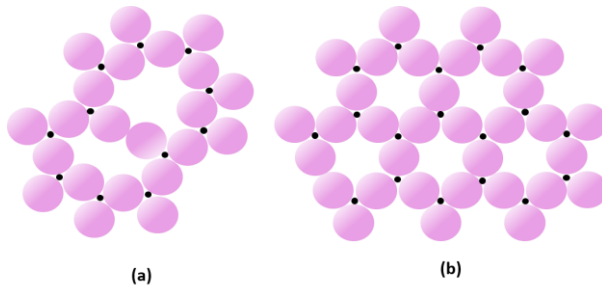


Fig.1.1. Representación bidimensional de un sólido (a) amorfo (b) cristalino.

1.1 Celdas unitarias y redes de Bravais.

Un sólido cristalino consta de un gran número de átomos acomodados en forma regular, para formar una estructura periódica. A partir de dicha estructura se define una *celda unitaria*, la cual corresponde al arreglo más simple de la estructura cristalina y cuya repetición de forma periódica conforma el sólido macroscópico [Kittel,2005]. Con frecuencia se trabaja con la celda unitaria más pequeña posible, la cual se denomina *celda unitaria primitiva* [Kittel, 2005]. Por otro lado, dependiendo del tipo de cristal que se esté tratando, se puede encontrar que la base que lo conforma puede estar constituida por átomos o por moléculas complejas, aunque en general nos referiremos a éstos como *sitios* o puntos de red. En este sentido, un sitio no siempre representa un solo átomo, sino que puede representar una molécula o un conjunto de éstas.

En un cristal tridimensional los átomos (o moléculas) dispuestos se encuentran definidos por tres vectores fundamentales de traslación \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 y \mathbf{a}_3 , llamados *vectores unitarios*, de forma que cada punto reticular de la red se puede describir mediante un vector como [Kittel, 2005],

$$\mathbf{R}_{h,k,l} = h\mathbf{a}_1 + k\mathbf{a}_2 + l\mathbf{a}_3, \quad (1.1)$$

donde h , k y l son números enteros. Una forma de encontrar una celda unitaria de la red es trazando el paralelepípedo que forman los vectores unitarios. En el caso de que este paralelepípedo tenga el mismo volumen que el de la celda unitaria primitiva, a estos vectores se les denomina *vectores unitarios primitivos*.

A partir del estudio de las celdas unitarias y las distintas maneras en que pueden acomodarse, se han encontrado 14 formas de colocar los puntos de una red cristalina, de tal modo que todos los puntos de dichas redes tengan exactamente el mismo medio circundante. Estas redes son conocidas como *redes de Bravais* (Véase Fig.1.2.). Para el caso de estas redes, no se consideran efectos de borde y un observador que vea el cristal desde uno de los puntos reticulares vería exactamente la misma disposición o arreglo de los puntos circundantes de la red, sea cual fuere el punto desde el que se observe.

1.1 Celdas unitarias y redes de Bravais.



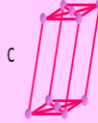
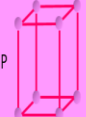
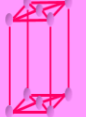









Sistema	Red de Bravais.	Símbolo	Características de la celda unitaria.		
Triclínico	• Simple	P	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$		
Monoclínico	• Simple	P	$a \neq b \neq c$		
	• Centrada en la base	C	$\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$		
Ortorrómico	• Simple	P	$a \neq b \neq c$		
	• Centrada en la base	C	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$		
	• Centrada en el cuerpo	I			
	• Centrada en la cara	F			
Tetraگونال	• Simple	P	$a = b \neq c$		
	• Centrada en el cuerpo	I	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$		
Cúbico	• Simple	P o sc	$a = b = c$		
	• Centrada en el cuerpo	I o bcc	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$		
	• Centrada en la cara	F o fcc			
Hexagonal	• Simple	P	$a = b \neq c$ $\alpha = 120^\circ$ $\beta = \gamma = 90^\circ$		
Trigonal (Romboédrico)	• Simple	P	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$		

Fig.1.2. Catorce redes espaciales de Bravais.

1.2. Celda de Wigner-Seitz.

La Celda de Wigner-Seitz es una manera de construir una celda unitaria primitiva, a través del siguiente procedimiento [Ibach, 2009]:

1. Se selecciona un punto de la red.
2. Se dibujan las rectas que unan al punto elegido con todos sus vecinos que formen el área (o volumen en el caso tridimensional) más pequeño.
3. Se traza la mediatriz de dichas rectas.
4. Se unen los puntos donde las mediatrices se intersecan. La figura resultante constituirá la celda de Wigner-Seitz.

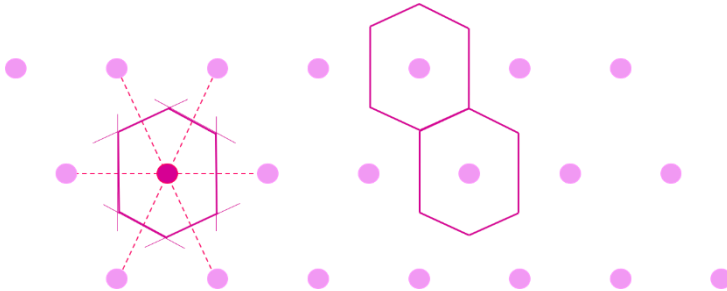


Fig.1.3. Construcción de la red de Wigner-Seitz en un cristal bidimensional. El área definida por las líneas perpendiculares a las líneas punteadas define la celda de Wigner-Seitz. En la derecha se muestra la celda de Wigner-Seitz como celda primitiva unitaria.

Una de las ventajas de la celda unitaria de Wigner-Seitz es que posee la misma simetría que la red, por lo cual proporciona ciertas facilidades para su descripción, además es única y siempre existe.

Una construcción análoga puede realizarse en tres dimensiones. En este caso, las mediatrices son planos perpendiculares que constituyen la celda de Wigner-Seitz (véase Fig.1.4.).

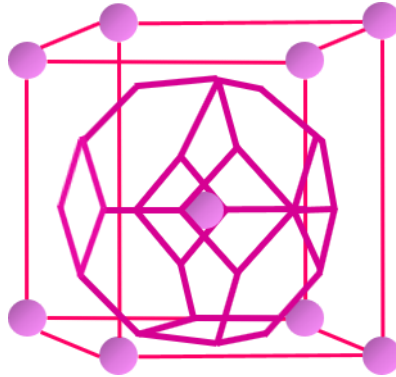


Fig.4. Celda de Wigner-Seitz para un cristal bcc, mejor conocido como octaedro truncado. La cara hexagonal es perpendicular al plano del cristal.

1.3. Red Recíproca.

Como se mencionó anteriormente, una red cristalina real tridimensional siempre estará constituida por tres vectores primitivos \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 y \mathbf{a}_3 . Dichos vectores determinan al cristal en el espacio *real* de coordenadas. Sin embargo, existe una forma alternativa de representar el mismo cristal en el llamado *espacio recíproco*, esta representación sirve para simplificar algunos cálculos, por ejemplo, el tamaño de una celda en el espacio recíproco es inversamente proporcional al tamaño de esta en el espacio real [Wang,2014] y esto permite que el estudio de una estructura de grandes dimensiones en el espacio real pueda simplificarse al estudiarla en el espacio recíproco. Los componentes de los vectores recíprocos se encuentran relacionados con los componentes de los vectores de la red cristalina real mediante las siguientes relaciones [Ibach, 2009]

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}, \quad (1.2)$$

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \quad (1.3)$$

$$\mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \quad (1.4)$$

y

$$\mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \quad (1.5)$$

donde δ_{ij} es la delta de Kronecker. Un vector de la red recíproca tridimensional estará representado como $\mathbf{G}_{m,s,t} = m\mathbf{b}_1 + s\mathbf{b}_2 + t\mathbf{b}_3$, con m , s y t enteros. La *red recíproca* corresponde a la red de puntos que se genera con los vectores $\mathbf{G}_{m,s,t}$. Por su definición, estos satisfacen la propiedad [Kittel, 2005]

$$\mathbf{G}_{m,s,t} \cdot \mathbf{R}_{h,k,l} = 2\pi\mu \quad (1.6)$$

con μ algún entero.

Tanto en la red real como en la red recíproca, los vectores primitivos no son coplanares entre sí. Debido a las ecuaciones (1.3) a (1.5), el tamaño de la celda en el espacio recíproco es inversamente proporcional al tamaño de la celda en el espacio real [Kittel,2005].

1.4. Zonas de Brillouin.

Para el estudio de los cristales, en ocasiones no es necesario trabajar sobre todo el espacio de éste, pues un cristal está conformado en su totalidad por un gran número de átomos o moléculas, por lo que es complicado tratar problemas en los que estén involucrados todos sus componentes. Sin embargo, es posible

englobar toda la física del sistema en una sola zona en el espacio recíproco. Esta zona lleva el nombre de *Primera Zona de Brillouin*, y corresponde a la celda unitaria primitiva de Wigner-Seitz de la red recíproca [Beiser,2003] (ver Fig. 1.5).

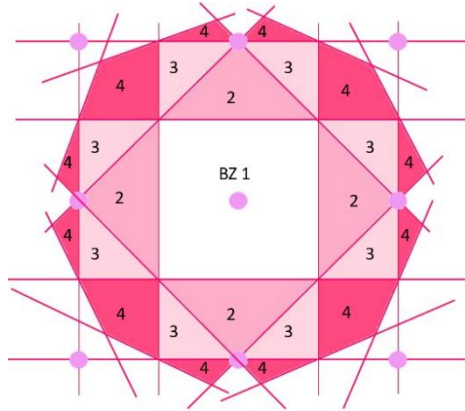


Fig.1.5. Primera, segunda, tercera y cuarta zona de Brillouin en una red cuadrada.

1.5. Electrones en sólidos. Teorema de Bloch.

Desde el punto de vista de la mecánica cuántica, un electrón contenido en un cristal está sometido a un potencial, y como primera aproximación podría considerarse que dicho potencial lo mantiene recluso en el interior del volumen del cristal. En consecuencia, el tratamiento matemático del electrón se reduce a un movimiento encerrado en una “caja vacía”, siendo esta una aproximación del comportamiento de los electrones en metales. Pese a su sencillez, este acercamiento explica con éxito algunas propiedades físicas, por ejemplo, la teoría del electrón libre en su forma más sencilla llevó a una predicción de la componente electrónica del calor específico que se encontraba en desacuerdo con los estudios experimentales y en conjunto con la estadística de Fermi-Dirac conforma una forma teórica muy directa y sencilla de analizar

los efectos de transporte en los metales [McKelvey, 1996], sin embargo, el mayor problema que presenta este modelo es su incapacidad para describir con precisión el comportamiento de los materiales aislantes y semiconductores. Debido a esto, en 1928 parecía clara la necesidad de considerar el efecto del potencial como uno que presente todas las simetrías de la red que definen la estructura del cristal en el que se encuentra contenido y, por lo tanto, dicho potencial debería ser perfectamente periódico extendiéndose al infinito, como se muestra en la Fig. 1.6. [McKelvey, 1996].

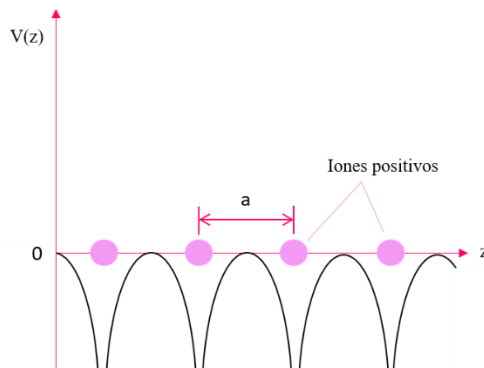


Fig.1.6. Potencial periódico para un arreglo periódico de iones positivos, nótese que se cumple $V(z)=V(z+a)$

Dicho lo anterior, el hamiltoniano que describe un cristal tiene que considerar en su potencial las interacciones electrón-electrón y también la interacción debido a los núcleos atómicos. Mediante el uso de la aproximación de campo medio, que toma en cuenta los efectos promedio de los demás electrones, podemos plantear el problema en la aproximación de una sola partícula [Beiser, 2003].

Consideremos un electrón moviéndose en un potencial periódico tal que $V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = V(\mathbf{r})$, de modo que \mathbf{r} es el vector de posición en la celda unitaria y \mathbf{R} es el vector de traslación en la red real. Por otro lado, consideremos la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (1.7)$$

Tomando en cuenta que un sólido posee una estructura periódica, el físico suizo Félix Bloch enunció el siguiente teorema conocido como *Teorema de Bloch*:

“Los eigenestados ψ de un electrón con hamiltoniano

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}), \text{ donde } V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = V(\mathbf{r}) \text{ para todo } \mathbf{R} \text{ en la red de}$$

Bravais, pueden ser elegidos de forma tal que tengan la forma de una onda plana multiplicada por una función con la periodicidad de la red de Bravais, esto es

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}).”$$

A dicha función periódica se le conoce como *función de Bloch* [Kittel, 2005].

En cuanto a los vectores de onda (\mathbf{k}) que señala el teorema, será suficiente con considerar que éstos se encuentran en la primera zona de Brillouin. Si no lo estuvieran, podríamos siempre encontrar un vector de la red recíproca (\mathbf{G}) tal que $\mathbf{k} = \mathbf{k}' + \mathbf{G}$ con \mathbf{k}' en la primera zona de Brillouin. Por otro lado, dado que $e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}} = 1$ para todos los vectores de la red real y recíproca, entonces podemos concluir que la forma de Bloch de la función de onda que es válida para el vector \mathbf{k} también lo es para el vector \mathbf{k}' .

1.6. Funciones de Wannier.

Las funciones de Bloch, por estar definidas como el producto de una onda plana y una función periódica en la red, son funciones deslocalizadas por todo el cristal. Al depender solo de \mathbf{k} , son adecuadas para trabajar en el espacio

recíproco. Sin embargo, no permiten tener una visión intuitiva del enlace entre los átomos que componen el cristal.

Las funciones de Wannier fueron introducidas en 1937 por el físico Gregory Wannier y constituyen un conjunto de funciones ortogonales localizadas que permiten describir el mismo espacio que las funciones de Bloch [Stangel, 2013]. Estas funciones se definen como [Altland, 2010]

$$|\mathbf{R}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} |\mathbf{k}\rangle, \quad (1.8)$$

donde $|\mathbf{R}\rangle$ es la función de Wannier localizada en la coordenada \mathbf{R} , $|\mathbf{k}\rangle$ es la función de Bloch con vector de onda \mathbf{k} , N es el número de celdas en el cristal y la suma sobre \mathbf{k} se extiende sobre vectores en la primera zona de Brillouin. Como \mathbf{k} es cuasicontinua la suma puede sustituirse por una integral, de forma que obtenemos la transformada de Fourier de la función de Bloch [Medina,2018],

$$|\mathbf{R}\rangle = \frac{V}{8\pi^3} \int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} |\mathbf{k}\rangle d\mathbf{k}. \quad (1.9)$$

Cabe mencionar que las funciones de Wannier forman una base ortogonal y dicha propiedad abre el camino para el estudio de sistemas con defectos.

1.7. Teoría de Bandas.

El átomo está compuesto por protones y neutrones que se encuentran en el núcleo y electrones que orbitan alrededor del mismo en diferentes niveles de energía discretos. A temperatura $\Theta = 0K$ todos los electrones en un sólido ocuparan el nivel de menor energía posible. Sin embargo, debido al principio de exclusión de Pauli no es posible que dos o más electrones ocupen el mismo estado cuántico, por lo que una vez que esté lleno el estado de mínima energía, se ocupará el siguiente nivel de energía y así de forma sucesiva (ver Fig. 1.7).

Los electrones que se encuentran en la última capa se denominan electrones de valencia y poseen una energía mayor en comparación con los electrones en otros niveles de energía más cercanos al núcleo [Beiser.2003], por lo que son más sensibles a perturbaciones que pudieran extraerlos del átomo.

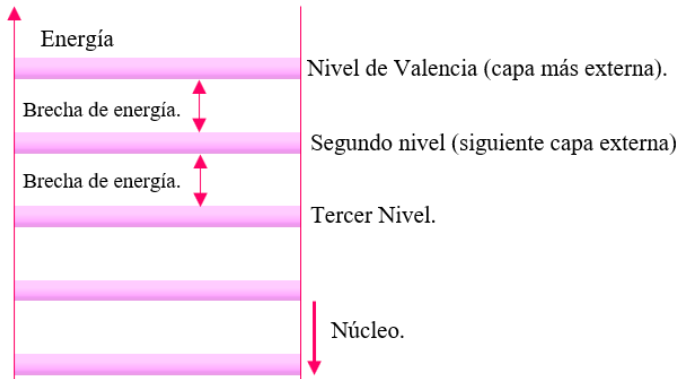


Fig.1.7. Niveles de energía discretos en estructuras atómicas aisladas.

En un sólido cristalino con parámetro de red a los electrones en la capa de valencia que se encuentren muy cercanos entre sí como para interactuar entre ellos, tendrán una mayor probabilidad de poder saltar de un sitio a otro. Debido a esto, los eigenestados que describen al sistema forman estados extendidos a lo largo de todos los sitios de la red y quedan determinados por funciones de Bloch. Por otro lado, si el parámetro de red es grande, los electrones no interactuarán entre sí y la probabilidad de que un electrón salte de un sitio a otro es pequeña, por lo que las eigenfunciones quedarán determinadas por funciones de Wannier. Dado que el sistema es periódico e infinito, entonces las energías que eran discretas ahora pasarán a formar un continuo que se puede visualizar como una banda energética, y cuyo ancho dependerá de dicho parámetro a , de modo que cuando dicho parámetro es grande entonces el ancho de la banda disminuye y cuando el parámetro es pequeño, entonces se hará más ancho (ver Fig. 1.8). Nuevamente, a temperatura cero, los electrones ocuparán estados de mínima energía. Se le llama *energía de Fermi* a la energía

del nivel más alto ocupado a $\Theta = 0K$ [Beiser,2003]. La banda ocupada por los orbitales moleculares con los electrones de valencia se nombrará *banda de valencia*, mientras que la banda formada por los orbitales moleculares vacíos recibirá el nombre de *banda de conducción*. En algunas ocasiones el parámetro de red es tan pequeño que ambas bandas se solapan energéticamente entre sí, aunque también puede existir una brecha energética que las separa. La teoría de bandas nos dice que la estructura de dicha banda de energía en un sólido nos determina si éste es un conductor, un aislante o un semiconductor [Beiser, 2003].

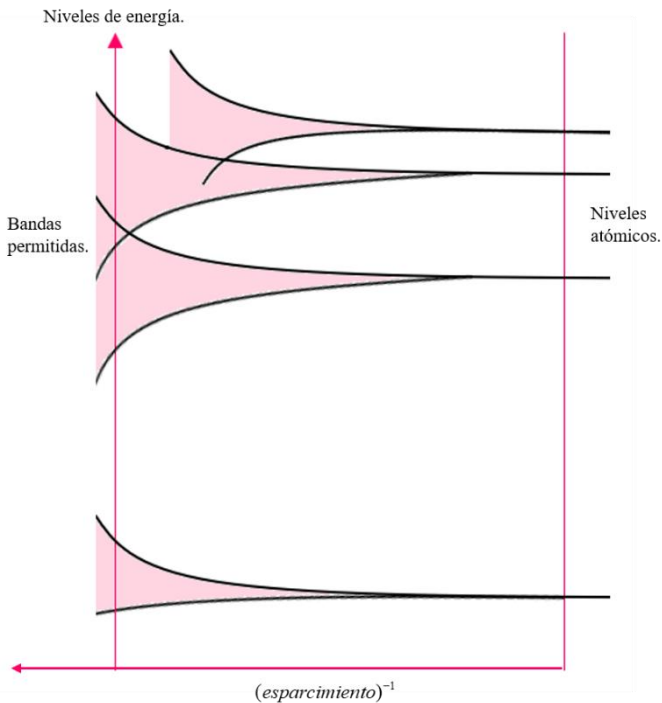


Fig.1.8. Desdoblamiento de niveles energéticos debido a la interacción atómica en bandas, conforme los átomos aislados se combinan en una red cristalina.

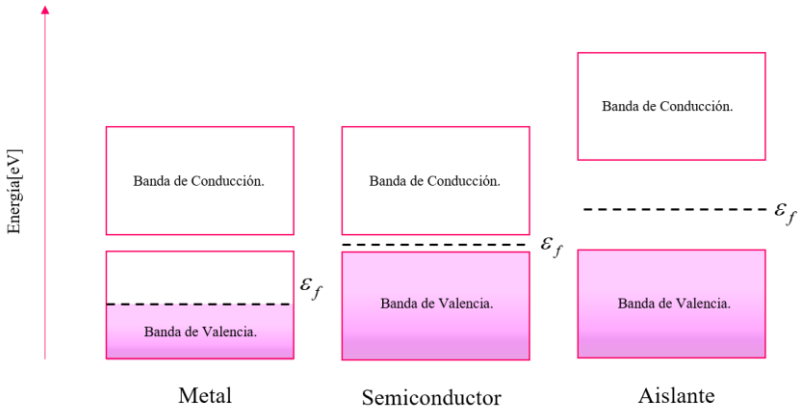


Fig.1.9. Bandas de conducción y valencia para un metal, un semiconductor y un aislante donde \mathcal{E}_f denota la energía de Fermi.

Basándonos en esta teoría, es posible que la energía de Fermi se encuentre en una banda energética o en una brecha (ver Fig. 1.9). En el primer caso se tratará de un metal y en el segundo al material se le denominará un semiconductor o un aislante.

Para el caso de los metales, dado que la energía de Fermi se encuentra dentro de una banda energética, entonces, ésta se encuentra parcialmente llena en el cero absoluto por lo cual bastará con aplicar un pequeño campo eléctrico para que los electrones empiecen a conducir, razón por la cual los metales tienen una alta conductancia [Beiser,2003]. En el caso de los aislantes la banda de valencia se encuentra completamente llena y la brecha energética en la que se encuentra la energía de Fermi es muy grande. Esto evita que los electrones se exciten y pasen a una banda de conducción, razón por la cual los aislantes tienen poca o nula conductividad. Para el caso de los semiconductores la brecha energética no es tan grande, por lo cual a temperatura ambiente puede ocurrir que existan electrones que se desplacen a la banda de conducción. Sin embargo, la cantidad de electrones que pueden lograrlo es poca [Beiser,2003].

1.8. Teoría de amarre fuerte.

Uno de los modelos más utilizados para el estudio de las propiedades de los electrones en los sólidos es el *modelo de amarre fuerte*. Para este modelo, suponemos que el electrón está fuertemente ligado al núcleo y que la interacción con otros átomos cercanos será relativamente débil para este caso, por lo cual las funciones de onda y los niveles de energía en todo el cristal estarán fuertemente relacionados con las funciones de onda y los niveles de energía respectivas de los átomos de forma aislada.

A partir de la ecuación (1.8) que describe las funciones de Wannier en términos de las funciones de Bloch, podemos escribir una ecuación análoga que represente las funciones de Bloch, $|\mathbf{k}\rangle$, en términos de las funciones de Wannier $|\mathbf{R}\rangle$ [Medina,2018],

$$|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} |\mathbf{R}\rangle. \quad (1.10)$$

Dado que las funciones de Bloch son soluciones del hamiltoniano para un sistema periódico, y éste a su vez cumple con la ecuación de Schrödinger, entonces

$$\hat{H} |\mathbf{k}\rangle = E(\mathbf{k}) |\mathbf{k}\rangle, \quad (1.11)$$

donde $E(\mathbf{k})$ es la energía asociada a la función de Bloch $|\mathbf{k}\rangle$. Sustituyendo (1.10) en (1.11) se obtiene:

$$\sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \hat{H} |\mathbf{R}\rangle = E(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} |\mathbf{R}\rangle. \quad (1.12)$$

Proyectando este resultado sobre la función de Wannier centrada en el punto con coordenadas \mathbf{R}_0 se obtiene

$$\sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \langle \mathbf{R}_0 | \hat{H} | \mathbf{R} \rangle = E(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \langle \mathbf{R}_0 | \mathbf{R} \rangle = E(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_0}, \quad (1.13)$$

donde se hizo uso de la ortonormalidad de las funciones de Wannier. Por lo tanto, la energía en el modelo de amarre fuerte es [Medina,2018]

$$E(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}-\mathbf{R}_0)} \langle \mathbf{R}_0 | \hat{H} | \mathbf{R} \rangle. \quad (1.14)$$

La ecuación (1.14) puede escribirse de una forma distinta definiendo como *energía de sitio* al término $\langle \mathbf{R}_0 | \hat{H} | \mathbf{R}_0 \rangle$ y como *integral de salto* entre los sitios \mathbf{R}_0 y \mathbf{R} al término $t_{\mathbf{R}_0\mathbf{R}} = \langle \mathbf{R}_0 | \hat{H} | \mathbf{R} \rangle$ [Mervyn, 2015], de forma que se obtiene

$$E(\mathbf{k}) = \varepsilon_{\mathbf{R}_0} + \sum_{\mathbf{R} \neq \mathbf{R}_0} t_{\mathbf{R}_0\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}-\mathbf{R}_0)}. \quad (1.15)$$

Finalmente, también es posible expresar el hamiltoniano correspondiente a un sistema periódico como el descrito en términos de la energía de sitio $\varepsilon_{\mathbf{R}_0}$ y la integral de salto $t_{\mathbf{R}\mathbf{R}_0}$, en virtud de que las funciones de Wannier forman una base completa y por lo tanto cumplen con la condición de cerradura. Así se obtiene [Stangel, 2013]

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{R}} \varepsilon_{\mathbf{R}} |\mathbf{R}\rangle \langle \mathbf{R}| + \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} t_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} |\mathbf{R}\rangle \langle \mathbf{R}'|, \quad (1.16)$$

que representa el hamiltoniano para el modelo de amarre fuerte. Este es el Hamiltoniano que utilizaremos en capítulos posteriores para representar los sistemas que se tratan en esta tesis.

2. Conductancia Eléctrica.

La conductancia eléctrica de un sistema es la facilidad con la que se permite el paso de corriente eléctrica a través de un camino, o visto de otra forma, es el inverso de la resistencia,

$$G = \frac{I}{V} = \frac{1}{R}, \quad (2.1)$$

donde V representa la diferencia de potencial e I la corriente que se aplica entre los extremos de una muestra.

Cuando se trata de un sistema macroscópico, la conductancia se vincula con las dimensiones del material por medio de la conductividad σ obedeciendo la Ley de Ohm [Mckelvey, 1996],

$$G = \sigma \frac{A}{L}, \quad (2.2)$$

donde A y L son el área de la sección transversal y la longitud de la muestra, respectivamente. Sin embargo, en los sistemas que se denominan mesoscópicos y cuyo tamaño se encuentra en el orden de décimas a centésimas de micrómetro, las relaciones clásicas de la ecuación (2.2) pueden dejar de ser válidas y esto sucede cuando alguna de las dimensiones del sistema (ya sea su largo o su ancho) es menor o comparable con una o más de las siguientes longitudes características [Morfonios, 2017]:

- I. La longitud de coherencia de fase l_ϕ : Cuando un electrón recorre distancias mayores a l_ϕ la fase de éstos pierde su “memoria” por efecto de dispersión inelástica. En cambio, cuando las dimensiones

del sistema son menores a l_p , el transporte es coherente y se presentan fenómenos característicos de la interferencia cuántica.

- II. La longitud de dispersión elástica (o mejor conocido como camino libre medio) l_p : Cuando las dimensiones del sistema no superan a l_p entonces el transporte de los electrones se considera balístico y, por ende, la descripción clásica deja de ser correcta.
- III. Longitud de onda de Fermi λ_F : Si el sistema tiene longitudes parecidas a la longitud de onda de Fermi (es decir, la longitud de onda asociada a la energía de Fermi), entonces la descripción clásica fracasa y el movimiento cuántico de las partículas debe ser considerado.

Algo crucial en este tipo de sistemas es que el espacio entre los niveles de energía puede ser mayor que la energía térmica $k_b T$, por lo que, para poder obtener las propiedades eléctricas y termodinámicas de éste se requiere el espectro de energías de forma detallada y no solo cantidades globales.

En este capítulo se resume el marco teórico que permite calcular la conductancia en sistemas mesoscópicos.

2.1. Conductividad de Landauer-Büttiker

Definiremos como *unión cuántica* a un sistema central que tiene dos o más electrodos ideales en sus extremos los cuales se encuentran [Morfonios,2017], en el caso más simple, en equilibrio térmico y son no interactuantes entre ellos (Véase Fig.2.1). Supongamos, además, que el transporte que hay entre ambos electrodos es coherente, es decir, en esta región la función de onda preserva la información de fase.



Fig.2.1. Estructura de una unión cuántica o nanoconexión.

A la región central la dividiremos en dos partes: la *región de dispersión* y los *saturadores* (o *leads*) *cuánticos* [Morfonios,2017]. Éstos últimos son aquellos que unen a la región de dispersión con los electrodos y tienen una estructura periódica que sirve como *guía de onda* a los electrones por la cual pueden definirse funciones entrantes y salientes. La región de dispersión es aquella en la cual ocurre dispersión de electrones debido a defectos o impurezas. Normalmente está conformada por alguna nanoestructura, la cual va a reflejar o transmitir a un electrón que incida en él. Llamaremos *proceso de dispersión* a la desviación de las partículas respecto de la dirección inicial del movimiento, provocada por la interacción con la región de dispersión [Datta,1997].

Cuando se estudian este tipo de sistemas, la conductancia descrita en la ecuación (2.2) deja de ser útil, y es necesario otro camino que nos permita entender el transporte cuántico en sistemas pequeños. Uno de éstos es el método de Landauer-Büttiker (LB), el cual establece una relación fundamental entre funciones de onda (amplitudes de dispersión) de una unión cuántica y sus propiedades conductoras [Landauer,1999]. Actualmente este método se utiliza con frecuencia en cálculos básicos de transporte a través de nanoestructuras y moléculas, y ha demostrado ser muy efectivo en la práctica, prediciendo acertadamente los modelos de la conductancia en estas estructuras. Una de sus condiciones principales es la ausencia de un entorno que rompa la fase. Este tipo de transporte, como se mencionó anteriormente, se conoce como transporte *coherente*, donde los efectos de interferencia juegan un papel importante.

2.1. Conductividad de Landauer-Büttiker

Una de las ventajas más relevantes del método LB es que relaciona el coeficiente de transmisión con la conductancia en una unión cuántica, lo que se conoce como la *fórmula de Landauer*, la cual se deduce a continuación.

En primera instancia, supongamos que cada electrodo o reservorio cuenta con un potencial químico distinto μ_1 y μ_2 . Debido a la presencia de una diferencia de potencial entre ellos entonces se cumple que

$$\mu_1 - \mu_2 = eV, \quad (2.3)$$

Para el caso particular en el que $\mu_1 = \mu_2$ el sistema se encontrará en equilibrio y no existirá desplazamiento neto de electrones, por lo que supondremos $\mu_1 \neq \mu_2$ y sin pérdida de generalidad usaremos que $\mu_1 > \mu_2$. En este caso, el flujo de electrones que van de izquierda a derecha es distinto al flujo que va de derecha a izquierda, produciendo un flujo neto de los mismos distintos de cero hasta que el sistema alcance el equilibrio. (Véase Fig.2.2).

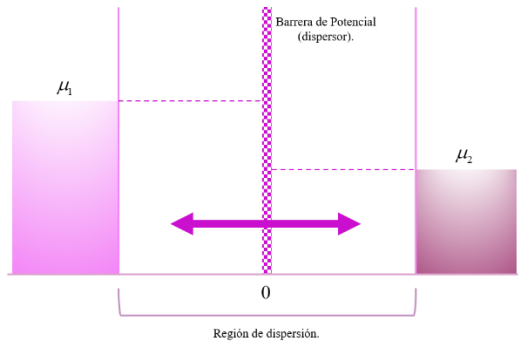


Fig.2.2. Diagrama esquemático de una nanounión con una barrera de potencial (o dispersor) en el origen. Las flechas indican que existen partículas en movimiento que se transmiten y se reflejan.

Si suponemos valores arbitrarios de eV entonces el problema se vuelve difícil de resolver ya que se tendría que hallar la distribución de corriente en presencia de un campo eléctrico en un sistema que inicialmente tendría densidad de carga uniforme, por lo que se tendría que recurrir a la solución de las ecuaciones de Boltzmann y Poisson. En cambio, si suponemos el límite

$eV \rightarrow 0$ la corriente se obtiene de forma correcta como resultado de la diferencia de densidades de los electrodos considerando campo eléctrico nulo dentro del sistema [Datta,1997], dicho de otra forma, toda la diferencia de potencial cae en el contacto con los reservorios.

Solamente aquellos electrones que pasan a través de la región de dispersión y llegan al otro electrodo originarán corriente, por lo que ésta va a depender de la probabilidad de transmisión que definimos como $T(n, k_z)$, donde n enumera los canales abiertos (se entenderá por canal abierto a un modo normal de propagación de ondas en los saturadores), k_z es el número de onda y $v(n, k_z)$ representa la velocidad de grupo de dichos electrones.

Es importante mencionar que los electrones que salen de un reservorio están ocupados de acuerdo con la distribución de Fermi-Dirac, por lo que, podemos expresar la probabilidad de encontrar un electrón con energía E viajando de izquierda a derecha en el electrodo izquierdo como [Tipler, 2012]

$$f_1(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu_1}{k_B \Theta}\right) + 1}, \quad (2.4)$$

donde Θ representa la temperatura del sistema. De forma análoga podemos expresar la probabilidad de encontrar un electrón viajando de derecha a izquierda en el electrodo derecho como

$$f_2(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu_2}{k_B \Theta}\right) + 1}. \quad (2.5)$$

En un sistema unidimensional donde existe una cantidad de electrones que pueden ir del reservorio 1 al 2 se debe considerar el potencial químico de la izquierda μ_1 , las diferentes energías y canales disponibles para la conducción de dichos electrones, así como la probabilidad de transmisión $T_{1,2}(n, k_z)$, es decir, [Datta,1997]

$$I_{1 \rightarrow 2} = 2e \sum_n \int_0^\infty v(n, k_z) f_1(n, k_z) T_{1 \rightarrow 2}(n, k_z) \frac{dk}{2\pi} \quad (2.6)$$

Por otro lado, podemos sustituir en la ecuación la definición de velocidad de grupo $v(n, k_z) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(k_z)}{\partial k_z}$ [Datta, 1997], de modo que esta corriente se transforma en

$$I_{1 \rightarrow 2} = \frac{2e}{h} \sum_n \int_{E_{n1}}^\infty f_1(E) T_{1 \rightarrow 2}(n, E) dE, \quad (2.7)$$

donde la energía total del sistema está definida como $E(n, k_z) = E_n + E_z(k_z)$. De forma análoga, se puede obtener la corriente para los electrones que van de derecha a izquierda,

$$I_{2 \rightarrow 1} = \frac{2e}{h} \sum_n \int_{E_{n2}}^\infty f_2(E) T_{2 \rightarrow 1}(n, E) dE. \quad (2.8)$$

En un sistema de dos terminales que se encuentra en equilibrio, se cumplirá que $T_{1 \rightarrow 2}(E) = T_{2 \rightarrow 1}(E) = T(E)$. De esta manera, la corriente neta es

$$I = I_{1 \rightarrow 2} - I_{2 \rightarrow 1} = \frac{2e}{h} \sum_n \int_{-\infty}^\infty T_n(E) [f(E, \mu_1) - f(E, \mu_2)] dE \quad (2.9)$$

Supongamos ahora que aplicamos una diferencia de potencial en el electrodo izquierdo, como la mencionada anteriormente, por lo que la ecuación (2.9) se transforma en

$$I = \frac{2e}{h} \sum_n \int_{-\infty}^\infty T_n(E) [f_0(E - eV) - f_0(E)] dE, \quad (2.10)$$

2.1. Conductividad de Landauer-Büttiker

donde $f_0(E)$ es la distribución de Fermi cuando $\mu_1 = \mu_2 = \mu$. Además, definamos a la función de transmisión como $T(E) = \sum_n T_n(E)$, de modo que obtenemos la *forma general de la fórmula de Landauer* [Landauer,1999],

$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} T(E)[f_0(E - eV) - f_0(E)]dE . \quad (2.11)$$

Para el caso de $\Theta \rightarrow 0K$, la distribución de Fermi toma la forma de una función escalón (Véase Fig. 2.3). De esta forma, la diferencia entre las funciones de distribución de la ecuación (2.11) se reduce a

$$I = \frac{2e}{h} \int_{E_f}^{E_f + eV} T(E)dE . \quad (2.12)$$

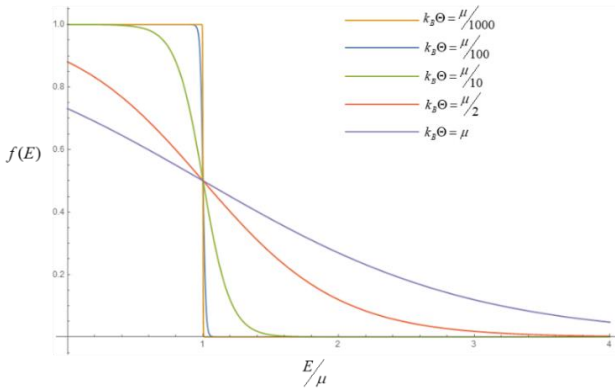


Fig.2.3. Función de distribución de Fermi para electrones a diferentes temperaturas.

Ahora, como una última aproximación, consideremos $V \rightarrow 0$, por lo que se espera que la función de transmisión tenga un comportamiento relativamente constante, de modo que se obtiene

$$I = \frac{2e}{h} T(\varepsilon_f) \int_{\varepsilon_f}^{\varepsilon_f + eV} dE \quad (2.13)$$

donde ε_f es la energía de Fermi. Resolviendo esta integral, llegamos a [Datta,1997]

$$I = \frac{2e}{h} T(\varepsilon_f) eV = \frac{2e^2}{h} T(\varepsilon_f) V. \quad (2.14)$$

Así la conductancia de un sistema unidimensional, considerando la degeneración del espín en un sistema balístico unidimensional a temperatura $\Theta = 0K$ se expresa como [Datta,1997]

$$G = \frac{2e^2}{h} T(E_f) = \frac{2e^2}{h} \sum_n T_n(E_f). \quad (2.15)$$

Observe que en el caso en el que hay total reflexión ($T=0$) no habría conducción de electrones. Por otro lado, si no hay dispersión (transporte balístico) la conductancia queda cuantizada por el número de canales abiertos y crece en pasos de $2e^2/h$. En resumen, el formalismo de Landauer nos permite expresar la conductancia en términos del coeficiente de transmisión, el cual podemos obtener por medio de la matriz \mathbf{S} , lo cual se explicará en las siguientes secciones.

2.2. Dispersión Cuántica.

Gran parte de la comprensión sobre la estructura de la materia se extrae propiamente de la dispersión de las partículas. De hecho, es a través de experimentos de dispersión que se conoce la constitución de la materia, como los núcleos atómicos, nucleones, quarks etc.

Para los propósitos de esta tesis, nos centraremos en la dispersión debida a un potencial V estático, es decir, independiente del tiempo. El problema para resolver es: conocido el potencial, predecir, mediante la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, el comportamiento de la partícula dispersada. Para el caso de una partícula que incide por la izquierda, la región de dispersión puede provocar que esta se refleje, o se transmita (ver Fig. 2.4). Queremos entonces calcular la probabilidad de transmisión, información que podría usarse dentro de la fórmula de Landauer.

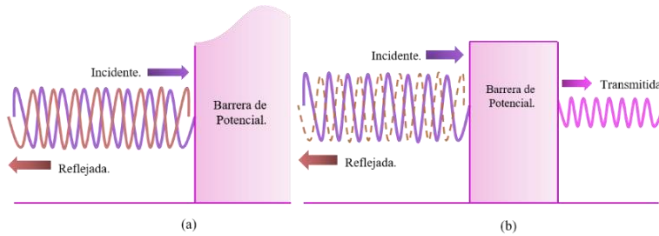


Fig.2.4. Ejemplificación de la transmisión y reflexión de una partícula (a) para una barrera de potencial mucho mayor a la energía de la partícula y (b) para una barrera de potencial cuyo tamaño permite la transmisión de la partícula.

Como ejemplo, consideremos un potencial unidimensional que cumpla con lo siguiente (representada gráficamente en Fig.2.5)

$$V(z) = \begin{cases} V_0 & \text{para } z \geq 0 \\ 0 & \text{para } z < 0 \end{cases} \quad (2.16)$$

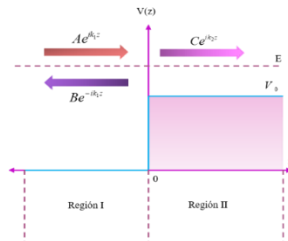


Fig.2.5. Potencial escalón y direcciones de propagación para sus ondas reflejada, transmitida e incidente para el caso $E > V_0$

Este potencial se conoce como *potencial escalón*. En este problema, tratamos de analizar la dinámica de un flujo de partículas (todas con la misma masa moviéndose con la misma velocidad) que se mueven de izquierda a derecha.

Para el caso $E > V_0$, el electrón incidente que viaja de izquierda a derecha siente un potencial V_0 que comienza en $z=0$ y permanece constante (Fig.2.5). En el momento en que el electrón se encuentra con dicho escalón, una porción de su función de onda cambia su dirección de propagación reflejándose, mientras que otra continúa transmitiéndose con la misma dirección [Zettili,2009]. Cada porción de estas ondas tendrá su correspondiente amplitud. En la mecánica cuántica, la dinámica de la partícula se puede determinar a partir de la ecuación de Schrödinger, donde se pueden apreciar dos regiones, de modo que obtenemos las ecuaciones diferenciales siguientes para cada región [Griffiths,2018]:

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} + k_1^2 \right) \psi_1(z) = 0 \quad z < 0 \quad (2.17)$$

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} + k_2^2 \right) \psi_2(z) = 0 \quad z \geq 0 \quad (2.18)$$

con $k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ y $k_2^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$. La solución más general utilizada para estas ecuaciones diferenciales serán ondas planas,

$$\psi_1(z) = Ae^{ik_1z} + Be^{-ik_1z} \quad z < 0 \quad (2.19)$$

$$\psi_2(z) = Ce^{ik_2z} + De^{-ik_2z} \quad z \geq 0, \quad (2.20)$$

donde Ae^{ik_1z} y Ce^{ik_2z} representan ondas moviéndose en la dirección en la que crece z , y los coeficientes Be^{-ik_1z} y De^{-ik_2z} corresponden al movimiento en la dirección en la que z disminuye.

Para el caso de partículas que inciden desde la izquierda, como ya se mencionó, estas pueden reflejarse o transmitirse. Sin embargo, como no se refleja ninguna onda desde la región $z > 0$, no habrá onda que viaje hacia la izquierda en el lado derecho, es decir, la constante D debe ser cero.

Para poder determinar la probabilidad de que una partícula se transmita o se refleje al cruzar el escalón se puede hacer uso de la densidad de corriente de probabilidad, la cual se encuentra definida de la siguiente manera [Griffiths, 2018]

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} [\psi(\mathbf{r})\nabla\psi^*(\mathbf{r}) - \psi^*(\mathbf{r})\nabla\psi(\mathbf{r})]. \quad (2.21)$$

de forma tal que la densidad de corriente incidente puede expresarse como [Zettili,2009]

$$j_{\text{incidente}} = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi_i(z) \frac{d\psi_i^*(z)}{dz} - \psi_i^*(z) \frac{d\psi_i(z)}{dz} \right) = \frac{\hbar k_1}{m} |A|^2 \quad (2.22)$$

De forma análoga ocurre para el caso de la densidad de corriente para las ondas reflejadas y transmitidas es [Zettili,2009]

$$j_{\text{reflejada}} = -\frac{\hbar k_1}{m} |B|^2 \quad (2.23)$$

y

$$j_{\text{transmitida}} = \frac{\hbar k_2}{m} |C|^2. \quad (2.24)$$

A partir de estos resultados podemos definir los coeficientes de transmisión T reflexión R respectivamente como [Zettili,2009]

$$R = \frac{j_{\text{reflejada}}}{j_{\text{incidente}}} = \frac{|B|^2}{|A|^2} \quad \text{y} \quad T = \frac{j_{\text{transmitida}}}{j_{\text{incidente}}} = \frac{k_2}{k_1} \frac{|C|^2}{|A|^2} \quad (2.25)$$

Por lo que el cálculo de R y T se reduce a hallar los valores de constantes B y C en términos de A . Para ello se puede hacer uso de las condiciones de continuidad en $z = 0$ que se expresan como

$$\begin{cases} \psi(0^+) = \psi(0^-) \\ \psi'(0^+) = \psi'(0^-) \end{cases}. \quad (2.26)$$

Usando estas condiciones, se obtiene

$$B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A \quad \text{y} \quad C = \frac{2k_2}{k_1 + k_2} A. \quad (2.27)$$

Así que, sustituyendo en (2.25), los coeficientes de reflectancia y transmitancia son [Zettili,2009]

$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 \quad \text{y} \quad T = \frac{k_2}{k_1} \left(\frac{2k_2}{k_1 + k_2} \right)^2. \quad (2.28)$$

Estas expresiones siempre satisfacen que $T + R = 1$, lo cual implica que una partícula que incide sobre la región dispersora solo tiene dos opciones, transmitirse o reflejarse, conservando el número de partículas. Esta propiedad la tienen que satisfacer siempre los coeficientes de transmisión y reflexión, ya que de otra forma significaría que tenemos fuentes o sumideros de partículas.

2.3. Matriz de Dispersión.

Retomando el problema del escalón de potencial, pudimos abordar directamente la función de onda general de la ecuación (2.19) y (2.20), que junto con las condiciones de frontera (2.26) nos llevan a la solución [Medina, 2018]

2.4. Método recursivo de la matriz de dispersión.

$$\begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} & \frac{2k_2}{k_1 + k_2} \\ \frac{2k_2}{k_1 + k_2} & \frac{k_2 - k_1}{k_1 + k_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix} = \mathbf{S} \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix}. \quad (2.29)$$

Esta matriz \mathbf{S} , llamada matriz de dispersión relaciona las amplitudes de onda entrantes con las amplitudes de onda salientes del sistema [Zettili,2009]. Es evidente que los elementos de esta matriz permiten el cálculo inmediato de los coeficientes de transmisión y reflexión del sistema, lo cual es especialmente útil al calcular la conductancia.

2.4. Método recursivo de la matriz de dispersión.

Considerando las facilidades que ofrece la matriz de dispersión para determinar los coeficientes de transmisión y reflexión se ha planteado una técnica que permite el cálculo recursivo de matrices de dispersión en sistemas modelados por Hamiltonianos de amarre fuerte, llamado el método recursivo de la matriz de dispersión [Ramírez, 2017].

Sea un sistema A con $N_s = 4$ sitios representado en la Figura 2.6. Dicho sistema tiene $N_c = 4$ cadenas acopladas, las cuales tienen energía de sitio nula e integrales de salto t_c . Los sitios del sistema tienen energía de sitio ε_k , y se conectan entre ellos por medio de integrales de salto $t_{kk'}$.

2.4. Método recursivo de la matriz de dispersión.

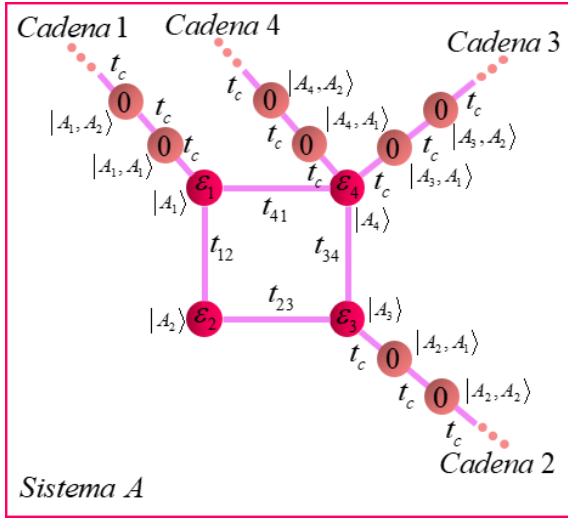


Fig.2.6. Representación esquemática del sistema A.

Los kets $|A_n\rangle$ representan funciones de Wannier para los sitios de sistema, mientras que $|A_j, A_k\rangle$ corresponde a las funciones para sitios pertenecientes a la j -ésima cadena acoplada. La función de onda que representa a este sistema puede escribirse como

$$|\Psi_A\rangle = \sum_{n=1}^{N_s} a_n |A_n\rangle + \sum_{j=1}^{N_c} \sum_{k=0}^{\infty} a_{j,k} |A_j, A_k\rangle, \quad (2.30)$$

donde, de forma general se tiene que [Ramírez, 2017]

$$a_{\beta,\delta} = A_{\beta}^{(+)} e^{-ik\delta} + A_{\beta}^{(-)} e^{ik\delta} \quad (2.31)$$

con $E = 2t_c \cos(\kappa)$, siendo E la energía. De este modo las soluciones las podemos interpretar como ondas entrantes y salientes que viajan a través de las cadenas acopladas con coeficientes de amplitud $A_{\beta}^{(+)}$ y $A_{\beta}^{(-)}$. Estos

2.4. Método recursivo de la matriz de dispersión.

coeficientes se relacionan por medio de la matriz de dispersión de este sistema, \mathbf{S}^A , en la siguiente manera [Ramírez,2017]

$$\begin{pmatrix} A_1^{(-)} \\ A_2^{(-)} \\ A_3^{(-)} \\ A_4^{(-)} \end{pmatrix} = \mathbf{S}^A \begin{pmatrix} A_1^{(+)} \\ A_2^{(+)} \\ A_3^{(+)} \\ A_4^{(+)} \end{pmatrix}. \quad (2.32)$$

Tomemos otro sistema B con $N_s = 3$ sitios y $N_c = 4$ cadenas acopladas, como el que se presenta en la Fig.2.7, y representemos como $B_\beta^{(+)}$ y $B_\beta^{(-)}$ a los coeficientes de amplitud de las ondas entrantes y salientes de este sistema. En forma análoga al caso anterior, la matriz de dispersión del sistema B, \mathbf{S}^B , establece la siguiente relación entre coeficientes,

$$\begin{pmatrix} B_1^{(-)} \\ B_2^{(-)} \\ B_3^{(-)} \\ B_4^{(-)} \end{pmatrix} = \mathbf{S}^B \begin{pmatrix} B_1^{(+)} \\ B_2^{(+)} \\ B_3^{(+)} \\ B_4^{(+)} \end{pmatrix} \quad (2.33)$$

2.4. Método recursivo de la matriz de dispersión.

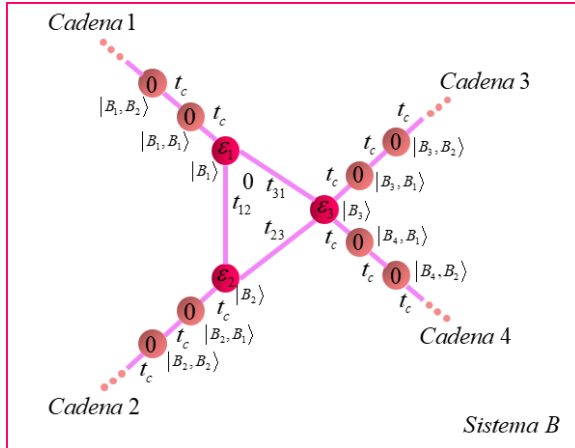


Fig.2.7. Representación esquemática del sistema B

Si ahora consideramos que

$$\mathbf{A}_1^{(\pm)} = \begin{pmatrix} A_1^{(\pm)} \\ A_2^{(\pm)} \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \mathbf{A}_2^{(\pm)} = \begin{pmatrix} A_3^{(\pm)} \\ A_4^{(\pm)} \end{pmatrix} \quad (2.34)$$

y

$$\mathbf{B}_1^{(\pm)} = \begin{pmatrix} B_1^{(\pm)} \\ B_2^{(\pm)} \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \mathbf{B}_2^{(\pm)} = \begin{pmatrix} B_3^{(\pm)} \\ B_4^{(\pm)} \end{pmatrix}, \quad (2.35)$$

podemos reescribir (2.32) y (2.33) como

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_1^{(-)} \\ \mathbf{A}_2^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{11}^A & \mathbf{S}_{12}^A \\ \mathbf{S}_{21}^A & \mathbf{S}_{22}^A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1^{(+)} \\ \mathbf{A}_2^{(+)} \end{pmatrix} \quad (2.36)$$

y

2.4. Método recursivo de la matriz de dispersión.

$$\begin{pmatrix} \mathbf{B}_1^{(-)} \\ \mathbf{B}_2^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{11}^B & \mathbf{S}_{12}^B \\ \mathbf{S}_{21}^B & \mathbf{S}_{22}^B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{B}_1^{(+)} \\ \mathbf{B}_2^{(+)} \end{pmatrix}. \quad (2.37)$$

El método recursivo consiste en hacer la siguiente igualdad [Ramírez 2017]

$$\mathbf{A}_1^{(\pm)} = \mathbf{B}_1^{(\mp)}, \quad (2.38)$$

que significa que las ondas que salen (entran) en las primeras 2 cadenas del sistema A coinciden con las ondas que entran (salen) en las primeras 2 cadenas del sistema B. Como consecuencia la igualdad (2.38), se genera un sistema fusionado, que en este ejemplo corresponde al que se muestra en la Fig. 2.8.

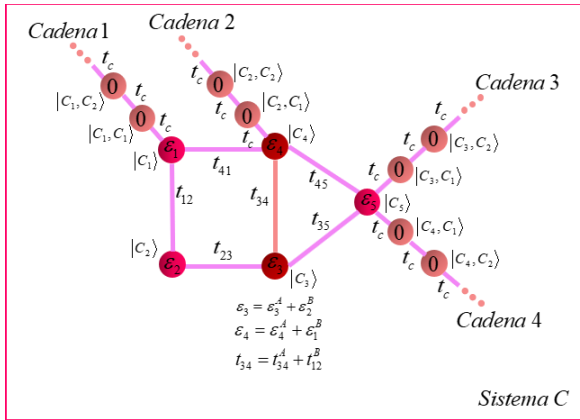


Fig.2.8. Representación esquemática del sistema C que resulta de la fusión del sistema A con B.

La matriz de dispersión del sistema fusionado es [Ramírez, 2017]

$$\mathbf{S}^C = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{22}^A + \mathbf{S}_{21}^A (\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{S}_{11}^A)^{-1} \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{S}_{12}^A & \mathbf{S}_{21}^A (\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{S}_{11}^A)^{-1} \mathbf{S}_{12}^B \\ \mathbf{S}_{21}^B (\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{S}_{11}^B)^{-1} \mathbf{S}_{12}^A & \mathbf{S}_{22}^B + \mathbf{S}_{21}^B (\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{S}_{11}^B)^{-1} \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{S}_{12}^B \end{pmatrix} \quad (2.39)$$

donde I es la matriz identidad. De esta manera, conociendo las matrices de dispersión de los subsistemas de C, podemos calcular la matriz de dispersión \mathbf{S}^C . Es importante mencionar que, como resultado de la fusión entre los

2.4.1. Bloques Básicos de construcción.

sistemas A y B, el sistema fusionado C tendrá las siguientes características [Medina,2018]:

- Las cadenas cuyos coeficientes se igualaron en (2.38) son removidas y los sitios en la frontera a los cuales están acoplados se superponen, sumando sus energías de sitio.
- Las integrales entre dos sitios con cadenas removidas se sumarán.
- Los sitios que no están directamente conectados a las cadenas removidas se mantendrán sin cambios, tanto en energías de sitio como en integrales de salto.

En conclusión, si conocemos la matriz de dispersión de dos sistemas de forma independiente podremos obtener la matriz de dispersión del sistema fusionado de una forma iterativa que nos resulta en un ahorro computacional importante. Esta es la base del funcionamiento del método recursivo de la matriz de dispersión.

2.4.1. Bloques Básicos de construcción.

Existen dos estructuras básicas a partir de las cuales puede calcularse la matriz de dispersión de estructuras generales, éstas son la estructura de *sitio* y la estructura de *enlace*. Ambas tienen matrices de dispersión analíticas, por lo que son un punto de partida para el uso del método recursivo de la matriz de dispersión [Medina,2018].

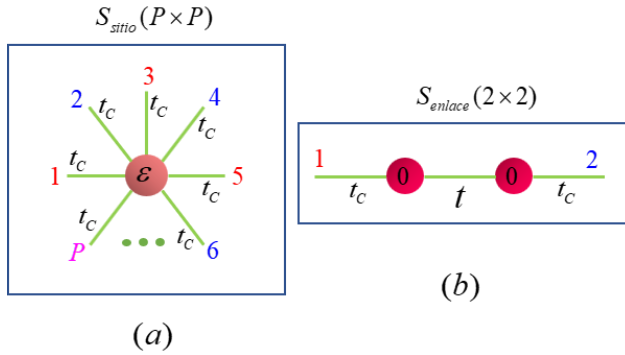


Fig.2.9. Bloques básicos para (a) estructura de sitio con P cadenas acopladas y (b) estructura de enlace la cual queda determinada por una matriz de (2×2)

La estructura de sitio (Fig.2.9.a) consiste en un único sitio con una energía ε y P cadenas acopladas a él, su matriz de dispersión tendrá una dimensión de $P \times P$ y sus respectivos componentes son [Ramírez,2017]

$$(\mathbf{S}_{\text{sitio}})_{nm} = \frac{2it_c \sin(k)}{\varepsilon - E + t_c e^{ik} P} - \delta_{nm}. \quad (2.40)$$

La estructura de sitio permite añadir o retirar cadenas acopladas una estructura. También sirve para cambiar las energías de los sitios con cadenas acopladas, lo cual resulta útil para crear estructuras más específicas, como las que se desarrollarán más adelante en este trabajo.

Por otro lado, la estructura de enlace consiste en dos sitios unidos mediante una integral de salto t cuya matriz de dispersión es [Ramírez,2017]

$$\mathbf{S}_{\text{enlace}} = \begin{pmatrix} r & \frac{t_c}{t} (e^{ik} + re^{-ik}) \\ \frac{t_c}{t} (e^{ik} + re^{-ik}) & r \end{pmatrix}, \quad (2.41)$$

2.4.2. Construcción de leads o saturadores.

donde $r = \frac{t^2 - t_c^2}{t^2 - t_c^2 e^{-2i\kappa}}$.

La estructura de enlace es útil para aumentar el número de sitios en un sistema o para unir sistemas más complejos con otros sin perder sitios. También permite modificar integrales de salto entre dos sitios en la frontera. Por otro lado, cabe mencionar que para ambas estructuras

$$\kappa = \cos^{-1}\left(\frac{E}{2t_c}\right) \in [0, \pi].$$

2.4.2. Construcción de leads o saturadores.

Es posible también usar el método recursivo para modelar estructuras con leads generales. Para ello se tiene que obtener la matriz de dispersión de una estructura de lead, como la que se muestra esquemáticamente en la Fig. 2.10, y donde se tiene estructura que se repite periódicamente hacia la izquierda conectada a cadenas acopladas. Estas cadenas acopladas pueden entonces usarse para fusionar los leads a una región de dispersión usando el método recursivo de la matriz de dispersión [Ramírez, 2018].

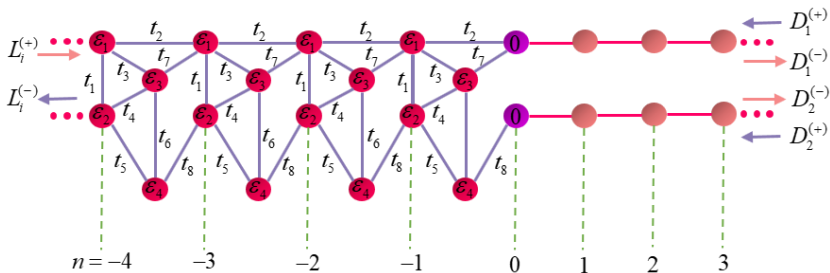


Fig.2.10. Representación esquemática de una estructura de lead.

La matriz de dispersión de la estructura del lead, \mathbf{S}^L , fue resuelta en [Ramírez,2018]. Aquí se presentan los pasos a seguir para su cálculo:

2.4.2. Construcción de leads o saturadores.

1. Identificar una estructura unitaria tal que si aplicáramos una y otra vez (infinitas veces) el método recursivo sobre ella, se obtenga la estructura del lead, como la que se muestra en la Fig. 2.11. Consideremos que la matriz de dispersión de esta estructura unitaria es

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(-)} \\ \mathbf{B}^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{11} & \mathbf{S}_{12} \\ \mathbf{S}_{21} & \mathbf{S}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(+)} \\ \mathbf{B}^{(+)} \end{pmatrix} \quad (2.42)$$

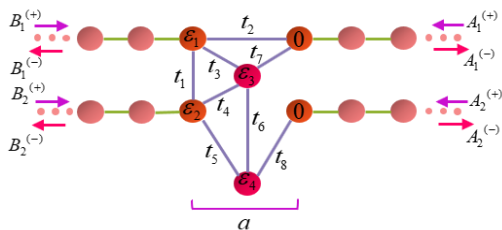


Fig.2.11 Estructura unitaria que sirve para obtener la estructura del lead de la Fig. 2.10.

2. Resolver la ecuación de eigenvalores generalizada

$$\begin{pmatrix} -\mathbf{S}_{11} & \mathbf{I} \\ -\mathbf{S}_{21} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(+)} \\ \mathbf{A}^{(-)} \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{S}_{12} \\ -\mathbf{I} & \mathbf{S}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(+)} \\ \mathbf{A}^{(-)} \end{pmatrix}. \quad (2.43)$$

Aquellos casos donde $|\lambda| = 1$ corresponden a ondas de Bloch del lead, los que cumplen que $|\lambda| < 1$ son ondas evanescentes a la izquierda. En el caso de ondas de Bloch, estas corresponderán a ondas que se desplazan a la derecha cuando

$$\mathbf{A}^{(-)\dagger} \mathbf{A}^{(-)} - \mathbf{A}^{(+)\dagger} \mathbf{A}^{(+)} > 0. \quad (2.44)$$

Los eigenvectores de ondas de Bloch que se desplazan a la derecha deben ser normalizadas de forma tal que

$$\mathbf{A}^{(-)\dagger} \mathbf{A}^{(-)} - \mathbf{A}^{(+)\dagger} \mathbf{A}^{(+)} = 1. \quad (2.45)$$

3. Se toman únicamente los eigenvalores de (2.43) correspondientes a ondas de Bloch que se desplazan a la derecha y ondas evanescentes a la izquierda,

$$\lambda_j = \begin{cases} e^{ik_j a} & \text{si } j = 1, 2, \dots, \tilde{Q} \\ e^{\kappa_j a} & \text{si } j = \tilde{Q} + 1, \dots, Q \end{cases} \quad (2.46)$$

donde \tilde{Q} es el número de ondas de Bloch, mientras que $Q - \tilde{Q}$ es el número de ondas evanescentes a la izquierda.

4. Se construyen las matrices

$$\mathbf{M}_1^{(\pm)} = \left(\mathbf{A}_1^{(\pm)} \mathbf{A}_2^{(\pm)} \dots \mathbf{A}_{\tilde{Q}}^{(\pm)} \right) \quad (2.47)$$

$$\mathbf{M}_2^{(\pm)} = \left(\mathbf{A}_1^{(m)} \mathbf{A}_2^{(m)} \dots \mathbf{A}_{\tilde{Q}}^{(m)} \right)^* \quad (2.48)$$

$$\mathbf{M}_3^{(\pm)} = \left(\mathbf{A}_{\tilde{Q}+1}^{(\pm)} \quad \mathbf{A}_{\tilde{Q}+2}^{(\pm)} \quad \dots \quad \mathbf{A}_Q^{(\pm)} \right) \quad (2.49)$$

5. Se calcula la matriz

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \mathbf{P}_{11} & \mathbf{P}_{12} \\ \mathbf{P}_{21} & \mathbf{P}_{22} \end{pmatrix} \quad (2.50)$$

donde

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{P}_{11} = \tilde{\mathbf{M}}_2^{(-)} \left[\tilde{\mathbf{M}}_2^{(+)} \right]^{-1} \\ \mathbf{P}_{12} = \left(\mathbf{M}_1^{(-)} - \tilde{\mathbf{M}}_2^{(-)} \left[\tilde{\mathbf{M}}_2^{(+)} \right]^{-1} \mathbf{M}_1^{(+)} \right) \\ \mathbf{P}_{21} = \left[\tilde{\mathbf{M}}_2^{(+)} \right]^{-1} \\ \mathbf{P}_{22} = - \left[\tilde{\mathbf{M}}_2^{(+)} \right]^{-1} \mathbf{M}_1^{(+)} \end{array} \right. \quad (2.51)$$

con $\tilde{\mathbf{M}}_2^{(\pm)} = (\mathbf{M}_2^{(\pm)} \mathbf{M}_3^{(\pm)})$.

6. Finalmente, la matriz de dispersión de la estructura de lead corresponde las primeras $Q + \tilde{Q}$ filas de la matriz P . Esta queda en la forma

$$\begin{pmatrix} \mathbf{D}^{(-)} \\ \mathbf{L}^{(-)} \end{pmatrix} = \mathbf{S}^L \begin{pmatrix} \mathbf{D}^{(+)} \\ \mathbf{L}^{(+)} \end{pmatrix} \quad (2.52)$$

Donde $\mathbf{D}^{(\pm)}$ contiene a los coeficientes de ondas entrantes y salientes en las cadenas acopladas, mientras que $\mathbf{L}^{(\pm)}$ contiene a los coeficientes de ondas entrantes y salientes en los leads.

3.Sistemas con Campo Magnético.

En esta sección se extenderá el método recursivo planteado en el capítulo anterior a sistemas con campos magnéticos, utilizando para ello las matrices de dispersión de sus estructuras básicas, así como de los leads. Los resultados fueron utilizados para expresar la transmitancia del sistema y compararlos con los resultados obtenidos mediante otros métodos reportados en la literatura.

3.1. Factor de fase de Peierls.

Ya que la trayectoria de las cargas puede ser alterada drásticamente cuando un campo magnético es aplicado externamente, tenemos un problema importante en la investigación del magnetotransporte coherente en el régimen mesoscópico, donde la interferencia cuántica se encuentra y se superpone con la noción de rutas orientadas [Morfonios,2017].

En presencia de un campo magnético, el potencial vectorial puede escribirse como [Griffiths, 2017]

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = A_x(\mathbf{r})\hat{x} + A_y(\mathbf{r})\hat{y} + A_z(\mathbf{r})\hat{z}, \quad (3.1)$$

de tal forma que $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$. Al aplicar un campo magnético externo los elementos fuera de la diagonal en el hamiltoniano del electrón que corresponden a las integrales de salto $t_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}$ se modifican por un factor de fase denominado *factor de fase de Peierls*. En este sentido, las integrales de salto quedan determinadas como [Peierls, 1932]

$$t_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} = t_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}^{(0)} e^{i\frac{e}{\hbar}\varphi(\mathbf{r},\mathbf{r}')}, \quad (3.2)$$

donde $t_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}^{(0)}$ representa la integral de salto sin presencia de campo magnético y

$$\varphi(\mathbf{r},\mathbf{r}') \equiv \int_{\mathbf{r}'}^{\mathbf{r}} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} . \quad (3.3)$$

Usando la regla del trapecio para la resolución de integrales, podemos llegar a la siguiente aproximación [Morfonios, 2017]

$$\varphi(\mathbf{r},\mathbf{r}') \approx \frac{1}{2}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \cdot (\mathbf{A}_{\mathbf{r}} - \mathbf{A}_{\mathbf{r}'}), \quad (3.4)$$

para dos sitios adyacentes en los puntos \mathbf{r} y \mathbf{r}' . Por lo tanto, para casos en los que existe campo magnético hay un factor a considerar que vuelve a la integral de salto t un número complejo, y que representa un cambio importante con respecto a los resultados sin campo, donde todas las integrales de salto eran números reales.

Debido a lo anterior, es importante mencionar que para este caso $t_{m,n} \neq t_{n,m}$, es decir, que las integrales de salto para dos sitios conectados de izquierda a derecha son diferentes que las integrales de salto de dos sitios conectados de derecha a izquierda, ya que $t_{m,n} = t_{n,m}^*$ por la ecuación (3.2).

Es importante mencionar que el método recursivo no es afectado por la presencia del Factor de Peierls. Sin embargo, es necesario recalcular la matriz de dispersión de la estructura de enlace de la Fig. 2.9(b), ya que es ahora t es un parámetro en los complejos. La demostración analítica de este resultado se realiza en el apéndice A, de tal forma que la ecuación (2.41) debe ser sustituida por

$$\mathbf{S}^{\text{enlace}} = \begin{pmatrix} r & \frac{t_c}{t} (e^{ik} + re^{-ik}) \\ \frac{t_c}{t^*} (e^{ik} + re^{-ik}) & r \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

$$\text{donde } r = \frac{|t|^2 - t_c^2}{|t|^2 - t_c^2 e^{-2i\kappa}} .$$

3.1.1. Campo magnético constante.

El caso en que el campo magnético es constante, $\mathbf{B} = B_0 \mathbf{e}_z$, el potencial puede escribirse como

$$\mathbf{A} = -B_0 y \mathbf{e}_x . \quad (3.6)$$

En este sentido, la aproximación en la ecuación (3.4) se vuelve exacta. Por lo tanto, la forma explícita de las integrales de salto puede simplificarse como sigue [Morfonios, 2017]

$$t_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} = t_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}^{(0)} e^{-i\frac{eB_0}{2\hbar}(x-x')(y-y')} . \quad (3.7)$$

donde $t_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}^{(0)}$ es la integral de salto entre sitios localizados en las coordenadas \mathbf{r} y \mathbf{r}' en ausencia de campo magnético.

3.1.2. Campo magnético lineal.

Para un campo magnético que varía linealmente, $\mathbf{B} = B_0 x \mathbf{e}_z$, el potencial vectorial puede escribirse como

$$\mathbf{A} = -B_0 xy \mathbf{e}_x . \quad (3.8)$$

Para este caso, la aproximación en (3.4) es también exacta. Las integrales de salto se modifican en la siguiente forma

$$t_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} = t_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}^{(0)} e^{-i\frac{eB}{2\hbar}(x-x')(xy-x'y')} . \quad (3.9)$$

3.2. Transmitancia un punto cuántico elipsoidal con red cuadrada y campo magnético.

En los siguientes ejemplos se validará el método recursivo de la matriz de dispersión en presencia de campo magnético, reproduciendo resultados reportados en la literatura.

3.2. Transmitancia un punto cuántico elipsoidal con red cuadrada y campo magnético.

Se modeló un punto cuántico elipsoidal en dos dimensiones con un campo magnético constante aplicado de forma perpendicular a la superficie del sistema. Este punto cuántico está conectado a *leads*, en los cuales el campo magnético decrece linealmente, como se muestra en la Fig. 3.1.

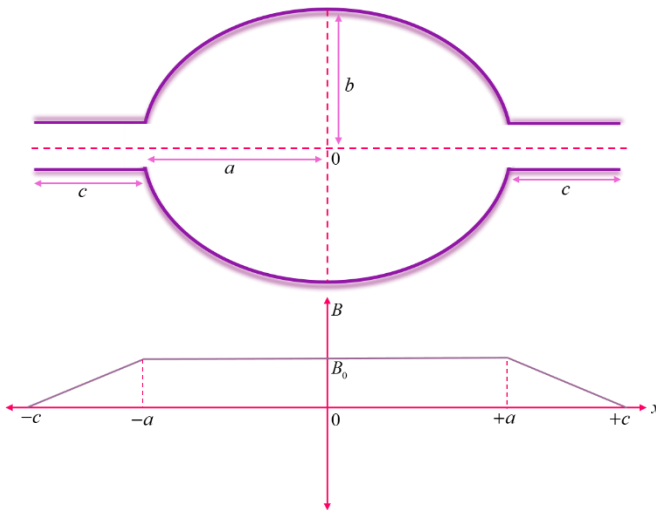


Fig.3.1. Esquema de un billar cuántico elipsoidal y representación gráfica del comportamiento del campo magnético aplicado en él. Con $(a, b, c) = (176, 132, 2) a_0$.

3.3. Construcción de la red cuadrada.

Para tratar el problema de forma numérica se realizó una discretización de éste, lo que significa que se seleccionó un conjunto discreto de puntos en una red cuadrada 2D con parámetro de red a_0 en la que se evalúa cualquier cantidad representada espacialmente. En el apéndice B se muestran los detalles de esta discretización, lo que nos permite modelar este sistema como un problema de amarre fuerte, donde las integrales de salto en ausencia de campo magnético entre primeros vecinos están dadas como [Morfonios,2017]

$$t_{\langle\mathbf{r},\mathbf{r}'\rangle}^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2}, \quad (3.10)$$

para todos los cálculos realizados en esta tesis, las unidades se ajustaron de forma que $a_0 = e = \hbar = 1$. Por otro lado, las energías de sitio son [Morfonios, 2017]

$$\varepsilon_{\mathbf{r}} = V(\mathbf{r}) + 4|t|. \quad (3.11)$$

3.3. Construcción de la red cuadrada.

Deseamos modelar un sistema que se componga de un billar cuántico elipsoidal dentro del cual el potencial es $V = 0$ y fuera de él es $V = \infty$. De esta forma, las partículas estarán confinadas a dispersarse dentro del billar a través de una red cuadrada de sitios inscritos en el sistema mostrado en la Fig. 3.1, el comportamiento de la transmitancia respecto al campo magnético aplicado para un rango de energías específico se muestra en la Fig. 3.2.

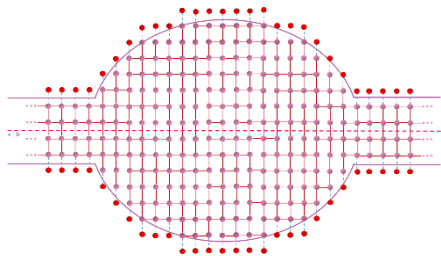


Fig.3.2. Representación de una red cuadrada periódica para un punto cuántico elipsoidal.

3.3. Construcción de la red cuadrada.

En la construcción iterativa de la red se descartarán de forma sistemática los sitios fuera del punto cuántico (sitios rojos en Fig. 3.2), ya que en su ubicación $V \rightarrow \infty$ y entonces la función de onda es nula.

La construcción detallada de la red se presenta en el apéndice C.

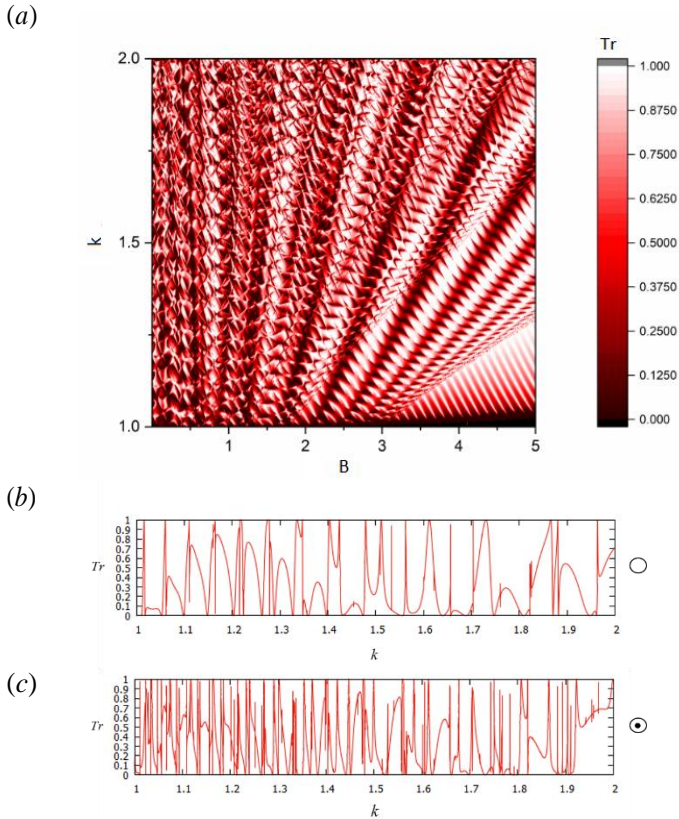


Fig.3.3. Transmisión a través del billar cuántico de forma elíptica para un campo magnético variable (a) con B en unidades de $10^{-3}B_0$ donde $B_0 = \hbar/ea_0^2$. También se muestran cortes a través del mapa de $T(B, \kappa)$ en (b) $B=0$ y (c) $B=0.63 \times 10^{-3}B_0$. Solo se muestra la región que comprende el caso donde hay un solo canal de conducción abierto en los leads.

3.3. Construcción de la red cuadrada.

En la Fig. 3.3.a se muestra la transmisión a través del billar como función de la energía E y el campo magnético B , siendo

$$k(E) = -\sqrt{\frac{3(E - E_i)}{(E_f - E_i) + 1}} + 3. \quad (3.12)$$

También se muestran los resultados con (b) $B = 0$ y (c) $B = 0.63 \times 10^{-3} T$. Estos resultados coinciden con los reportados por C. Morfonios y P. Schmelcher [Morfonios, 2014] que obtuvieron utilizando funciones de Green. Se observan estados transparentes para valores suficientemente grandes de B y pequeños de E (esquina inferior derecha en la Fig. 3.3.a). Este comportamiento se debe a las trayectorias de los electrones cuya forma se asemeja a la de un ciclotrón [Beenakker, 1991], permitiendo la transmisión si el radio del ciclotrón es lo suficientemente pequeño, lo cual ocurre cuando B es grande. En las otras regiones del espectro, se observan zonas de interferencia constructiva y destructiva que dependen fuertemente de los campos magnéticos aplicados y la energía de las partículas.

El ejemplo anterior valida el método recursivo de la matriz de dispersión para su aplicación en sistemas con presencia de campo magnético.

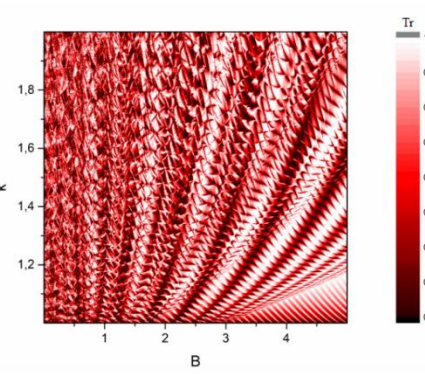
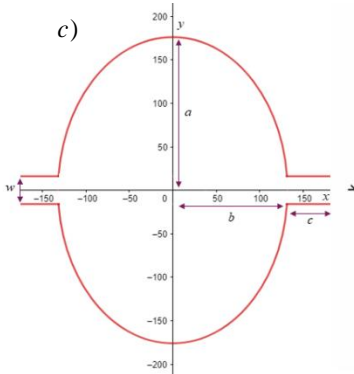
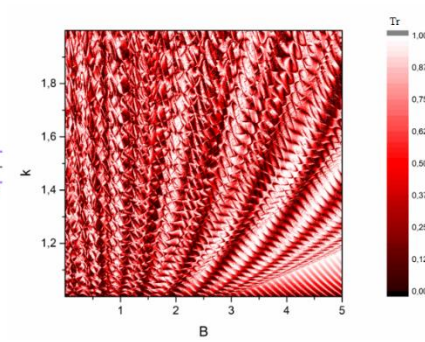
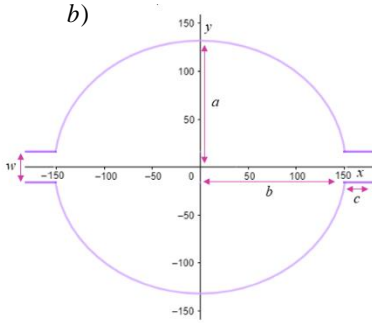
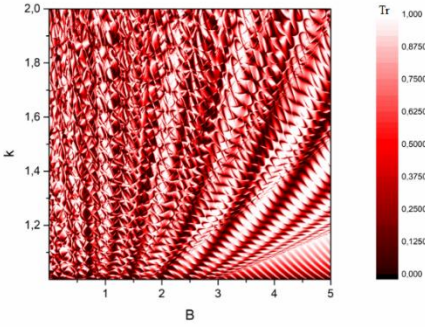
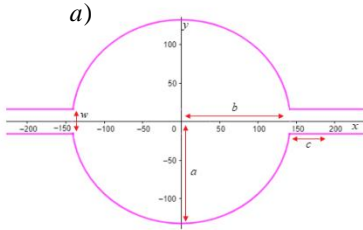
4.Aplicación en otros sistemas geométricos.

Considerando los resultados satisfactorios obtenidos en el capítulo 3, en esta sección se extrapolará la aplicación del método recursivo planteado, considerando un campo magnético en el sistema y realizando variaciones en la geometría que comprende el billar cuántico. Para ello se utilizarán las matrices de dispersión de sus estructuras básicas, así como de los leads, considerando la red cuadrada del capítulo 3. Los resultados serán utilizados para expresar la transmitancia del sistema respecto de la energía (E) de éste considerando un solo canal abierto.

4.1. Billares elipsoidales.

Resulta importante estudiar las variaciones de la excentricidad de la elipse para de esta forma poder comprender la modificación de la transmitancia como función de la energía provocado por ligeras modificaciones en los parámetros que comprenden la elipse que conforma el billar cuántico. Esto nos proporcionará información sobre la robustez de los resultados ante pequeñas deformaciones, lo cual es importante en experimentos donde el control sobre la geometría de un punto cuántico se puede convertir en un factor difícil de controlar. Los cambios que se plantean en esta sección radican principalmente en la variación del eje menor y mayor de la elipse, se estudian casos donde estos ejes varían respecto al punto cuántico planteado en el capítulo 3, manteniendo los mismos parámetros para el ancho de los leads y utilizando el esquema de red cuadrada usado anteriormente. En la Fig. 4.1 se incluye un resumen de estos resultados.

4.1. Billares elipsoidales.



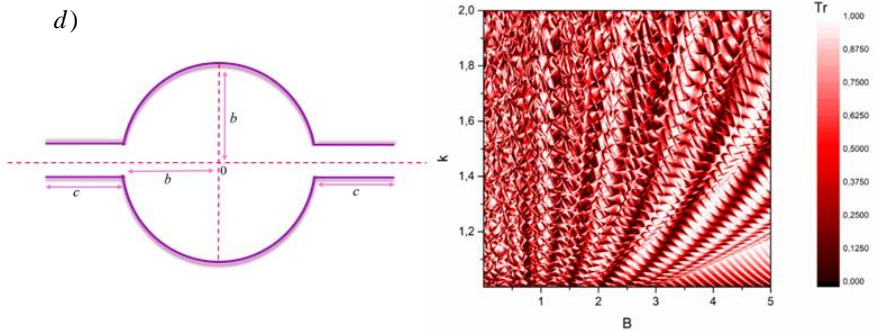


Fig.4.1. Variación de la transmitancia respecto a la energía para distintos valores del campo magnético aplicado para las configuraciones de la geometría elipsoidal cuyos parámetros son a) $(a,b,c,w)=(142,132,2,32) a_0$, b) $(a,b,c,w)=(152,132,2,32) a_0$, c) $(a,b,c,w)=(132,176,2,32) a_0$, d) $(b,c,w)=(84,2,32) a_0$. El rango de energías elegido es tal que el sistema solamente comprende el caso en el cual hay un solo canal de conducción abierto y el valor de k es el planteado en la ecuación 3.12. Las unidades del campo magnético son $10^{-3} B_0$.

En todos los casos planteados en la Figura 4.1, los cambios en el campo magnético no modifican notablemente la transmitancia del sistema. Para campos magnéticos bajos, se aprecia una reducción en los picos de alta transmitancia cuando el eje horizontal de la elipse disminuye. Fuera de esto, las características generales del espectro de transmitancia cambian muy poco entre las diferentes geometrías. De esta manera, esperaríamos que en una medición experimental sea posible obtener resultados similares, sin importar que haya pequeñas imperfecciones en la forma de la elipse.

Una pregunta interesante es saber que ocurre en casos extremos de esta geometría. Por ejemplo, al aumentar la elongación de la elipse, es decir, al disminuir su eje vertical, alcanzaríamos un caso donde la elipse representaría una perturbación pequeña aplicada a un alambre con sección transversal constante.

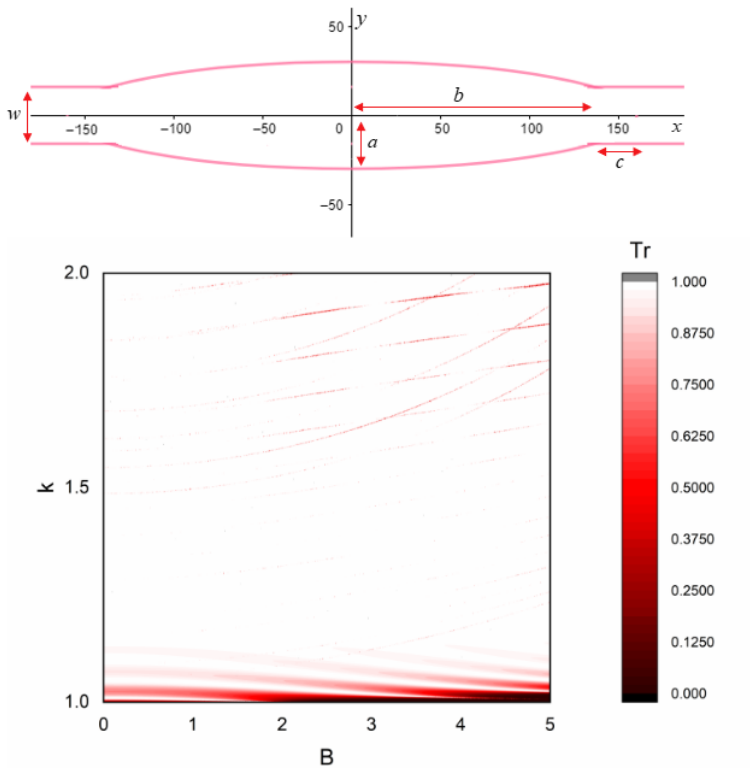


Fig.4.2. Variación de la transmitancia respecto a la energía para distintos valores del campo magnético aplicado en el caso de una elipse elongada con parámetros $(w,a,b,c)=(32,30,160,2)$ a_0 . El valor de k es el planteado en la ecuación 3.12.

En la Fig.4.2 se muestra el cambio notorio respecto a las figuras 4.1 a,b,c,d lo que nos indica la importancia del parámetro que corresponde al eje vertical de la elipse. En la Fig.4.2, este parámetro es muy cercano al parámetro que corresponde a la anchura del lead, entonces la transmitancia es prácticamente balística (es decir $T = 1$) para todas las energías, a excepción de distintas líneas

estrechas para casos en los que la energía es pequeña y una zona de baja transmitancia muy clara para el caso de energías bajas y campos magnéticos muy grandes (zona inferior derecha de la Fig.4.2). Para el caso límite de esta figura (cuando el parámetro $a \rightarrow w$) se esperaría transmitancia $T = 1$ en todas las energías desapareciendo por completo las zonas de baja transmitancia, lo que coincide con los resultados esperados para un alambre de sección transversal constante.

4.2. Doble Elipse.

Usando el método recursivo de la matriz de dispersión podemos también modelar otras estructuras más complejas. En la figura 4.4 se presenta el espectro de transmisión a través de una superficie de doble elipse, que se muestra en la Fig. 4.3.

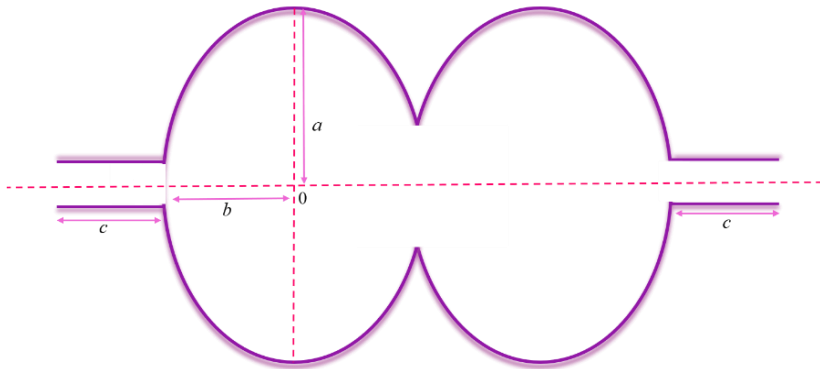


Fig.4.3. Punto cuántico elipsoidal compuesto por dos elipses unidas a través de su frontera. Los parámetros utilizados para este sistema son $(a,b,c,w) = (176,132,2,32) a_0$.

4.2. Doble Elipse.

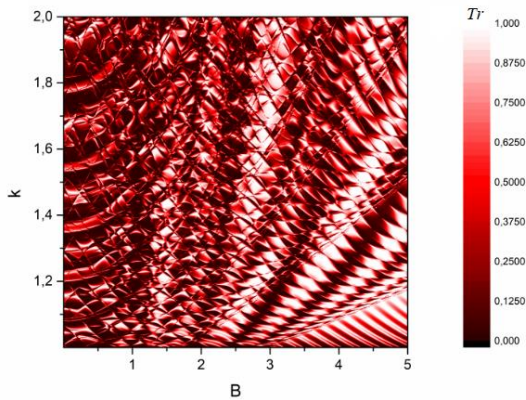


Fig.4.4. Variación de la transmitancia respecto a la energía aplicando distintos valores de campo magnético para el caso de una doble elipse con los parámetros descritos en la figura 4.3. El campo magnético aplicado tiene unidades de $10^{-3}B_0$ y los valores para k están descritos por la ecuación 3.12.

Observamos que en este caso se tiene una baja transmitancia para campos magnéticos bajos, la cual aumenta al incrementar el campo magnético. En la Fig. 4.5. se observa la transmitancia como función de la energía para dos campos magnéticos distintos.

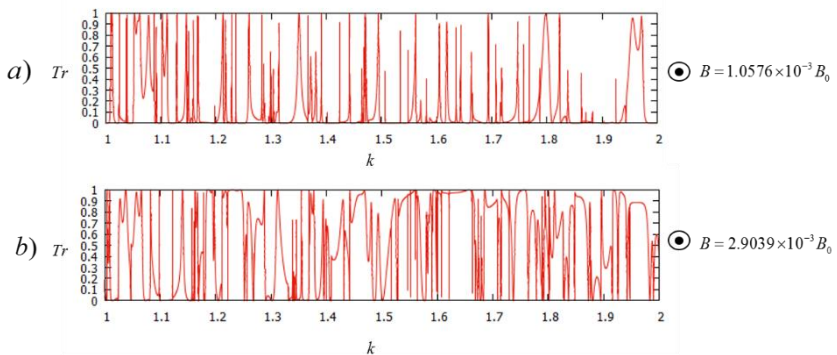


Fig.4.5. Cortes verticales para la variación de la transmitancia respecto a la energía para el caso de un billar cuántico de doble elipse con los parámetros descritos en la Fig. 4.3. para a) $B = 1.0576 \times 10^{-3} B_0$ y b) $B = 2.9039 \times 10^{-3} B_0$.

Al realizar cortes verticales de esta zona obtenemos las gráficas que se presentan en la Fig. 4.5 donde se aprecian cambios notorios de alta y baja transmitancia para dos valores distintos de campo magnético, este efecto puede ser de utilidad para la creación de un interruptor modulado por el campo magnético externo donde sea necesario crear efectos de baja o alta transmitancia para mismos intervalos de energía.

5.Conclusiones.

En esta tesis se propuso la aplicación de un método que nos permite encontrar de forma iterativa la matriz de dispersión de un sistema general de amarre fuerte aplicando al sistema un campo magnético externo. Este método nos permite estudiar la transmitancia y conductancia usando la fórmula de Landauer-Büttiker, resultados que son posibles de obtener a través de los elementos que comprenden la matriz de dispersión del sistema.

Los cambios correspondientes al aplicar el campo magnético al sistema son:

1. Un factor de fase denominado factor de fase de Peierls que resulta en un cambio en el hamiltoniano de amarre fuerte del sistema. Debido a esto la presencia de campos magnéticos hacen que las integrales de salto sean ahora parámetros en los complejos.
2. Una de las aportaciones de esta tesis fue la obtención analítica de la matriz de dispersión de la estructura de enlace, cuando la integral de salto incluye el factor de fase de Peierls. Esta estructura en conjunto con la estructura de sitio es de gran utilidad para modelar el transporte de cualquier arreglo de amarre fuerte en presencia de campo magnético.
3. Se realizó la validación del método recursivo de la matriz de dispersión en sistemas con campo magnético, recuperando los resultados vistos en la literatura para el magnetotransporte en un billar cuántico elíptico.
4. El espectro de transmisión a través de un billar cuántico elipsoidal es robusto ante pequeñas variaciones de los parámetros de la elipse.

-
5. El estudio de la estructura conformada por una doble elipse da indicios de su utilidad como interruptor modulador utilizando el campo magnético externo.

En conclusión, el método recursivo propuesto aplicando campo magnético nos permite modelar e investigar el transporte cuántico coherente con un enfoque más cercano a la realidad, donde los campos magnéticos juegan un papel importante en el transporte de las cargas. Un trabajo a futuro es modelar distintas geometrías en acomodos periódicos y aperiódicos, con el fin de analizar funcionalidades de estas estructuras que podrían ser moduladas por el campo magnético.

Apéndice A.

Supongamos un sistema compuesto por dos sitios con energía ε unidos mediante una integral de salto t , a su vez este sistema tiene una cadena acoplada con energía de sitio nula e integral de salto t_c . De acuerdo con lo expuesto en el capítulo 2, la función de onda para este sistema está determinada como [Ramírez,2017]

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_n |A_1\rangle + \sum_{n=0}^{\infty} D_n |A_2\rangle \quad (\text{A.1})$$

La ecuación (A.1) tiene como solución los coeficientes [Ramírez, 2017]

$$C_n = A^{(+)} e^{-ikna} + A^{(-)} e^{ikna}, \quad D_n = B^{(+)} e^{-ikna} + B^{(-)} e^{ikna} \quad (\text{A.2})$$

A su vez, el hamiltoniano correspondiente a dicho sistema es

$$\begin{aligned} \hat{H} = & t |A_1\rangle\langle A_2| + t^* |A_2\rangle\langle A_1| \\ & + \sum_{k=0}^{\infty} t_c \left[|A_{1,k}\rangle\langle A_{1,k+1}| + |A_{1,k+1}\rangle\langle A_{1,k}| + |A_{2,k}\rangle\langle A_{2,k+1}| + |A_{2,k+1}\rangle\langle A_{2,k}| \right] \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Donde t^* representa el complejo conjugado de la integral de salto t . Las ecuaciones que se deben de cumplir en torno al defecto de enlace resultan de hacer uso de la ecuación de Schrödinger, de donde resulta el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{cases} -ED_0 + tD_0 + t_c C_1 = 0 \\ -ED_0 + t^* C_0 + t_c D_1 = 0 \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

Al sustituir las soluciones de (A.2) se obtiene

$$\begin{aligned} & \begin{cases} -E(A^{(+)} + A^{(-)}) + t(B^{(+)} + B^{(-)}) + t_c(A^{(+)}e^{-ika} + A^{(-)}e^{ika}) = 0 \\ -E(B^{(+)} + B^{(-)}) + t^*(A^{(+)} + A^{(-)}) + t_c(B^{(+)}e^{-ika} + B^{(-)}e^{ika}) = 0 \end{cases} \\ & = \begin{cases} A^{(-)}(-E + t_c e^{ika}) + tB^{(-)} = A^{(+)}(E - t_c e^{-ika}) - tB^{(+)} \\ t^*A^{(-)} + B^{(-)}(-E + t_c e^{ika}) = -t^*A^{(+)} + B^{(+)}(E - t_c e^{-ika}) \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Para el caso de onda incidente por la cadena de coeficientes C_n , se tiene $B^{(+)} = 0$, de donde se obtiene el sistema

$$\begin{cases} tB^{(-)} + A^{(-)}(-E + t_c e^{ika}) = A^{(+)}(E - t_c e^{-ika}) \\ t^*A^{(-)} + B^{(-)}(-E + t_c e^{ika}) = -tA^{(+)} \end{cases} \quad (\text{A.6})$$

Al despejar $B^{(-)}$ de la segunda ecuación se obtiene

$$B^{(-)} = \frac{t^*}{E - t_c e^{ika}} (A^{(+)} + A^{(-)}) \quad (\text{A.7})$$

Sustituyendo (A.7) en (A.6) obtenemos

$$A^{(-)} = \left[\frac{|t|^2 - t_c^2}{|t|^2 - t_c^2 e^{-2ika}} \right] A^{(+)} \quad (\text{A.8})$$

Lo cual puede expresarse como $A^{(-)} = rA^{(+)}$ con $r = \left[\frac{|t|^2 - t_c^2}{|t|^2 - t_c^2 e^{-2ika}} \right]$

Ahora, aplicando el caso de onda incidente por la cadena de coeficientes C_n en la primera ecuación del sistema (A.6)

$$B^{(-)} = -\frac{t_c}{t} \left(A^{(+)} e^{-ika} + A^{(-)} e^{ika} \right) + \frac{E}{t} \left(A^{(+)} + A^{(-)} \right) \quad (\text{A.9})$$

Sustituyendo el resultado obtenido en (A.8)

$$B^{(-)} = \frac{t_c}{t} \left[e^{ika} + r e^{-ika} \right] A^{(+)} \quad (\text{A.10})$$

Al analizar el caso en el cual la onda es incidente por la cadena de coeficientes D_n , esto implica $A^{(+)} = 0$ de donde resulta un sistema análogo al obtenido en (A.4) de donde se obtiene

$$B^{(-)} = - \left[\frac{|t|^2 - t_c^2}{|t|^2 - t_c^2 e^{-2ika}} \right] B^{(+)} = r B^{(+)} \quad (\text{A.11})$$

De donde se sigue que

$$A^{(-)} = \frac{t_c}{t} \left(e^{ika} + r e^{-ika} \right) B^{(+)} \quad (\text{A.12})$$

A partir de las ecuaciones (A.8), (A.10), (A.11) y (A.12) podemos expresar la matriz de dispersión del sistema como

$$\mathbf{S}_{\text{enlace}} = \begin{pmatrix} r & \frac{t_c}{t} (e^{ik} + r e^{-ik}) \\ \frac{t_c}{t} (e^{ik} + r e^{-ik}) & r \end{pmatrix} \quad (\text{A.13})$$

$$\text{Con } r = \left[\frac{|t|^2 - t_c^2}{|t|^2 - t_c^2 e^{-2ika}} \right].$$

Apéndice B.

Consideremos la ecuación de Schrödinger en 2D independiente del tiempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(x, y) + V(x, y)\Psi(x, y) = E\Psi(x, y) \quad (\text{B.1})$$

La segunda derivada parcial respecto a x de una función arbitraria $f(x, y)$ puede aproximarse como [Morfonios, 2017]

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{\mathbf{r}=(x_\alpha, y)} = \frac{1}{a_0^2} [f(x_\alpha + a_0, y) + f(x_\alpha - a_0, y) - 2f(x_\alpha, y)] \quad (\text{B.2})$$

donde a_0 debe ser un número pequeño. Sustituyendo en la ecuación (B.1) se obtiene [Medina, 2018]

$$\nabla^2\Psi|_{(n,m)} = \frac{1}{a_0^2} [\Psi_{(n+1,m)} + \Psi_{(n-1,m)} + \Psi_{(n,m+1)} + \Psi_{(n,m-1)} - 4\Psi_{(n,m)}] \quad (\text{B.3})$$

donde $\Psi_{(n,m)} \equiv \Psi(na_0, ma_0)$. Sustituyendo (B.3) en (B.1)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{a_0^2} [\Psi_{(n+1,m)} + \Psi_{(n-1,m)} + \Psi_{(n,m+1)} + \Psi_{(n,m-1)} - 4\Psi_{(n,m)}] \right] + [V(x, y) - E]\Psi(x, y) = 0 \quad (\text{B.4})$$

Definiendo $t = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2}$ y $\varepsilon_{(n,m)} = 4|t| + V_{(n,m)}$, entonces

$$t \left[\Psi_{(n+1,m)} + \Psi_{(n-1,m)} + \Psi_{(n,m+1)} + \Psi_{(n,m-1)} \right] + \left[\varepsilon_{(n,m)} - E \right] \Psi(x, y) = 0 \quad (\text{B.5})$$

Lo que implica que la discretización de la ecuación de Schrödinger equivale a un modelo de amarre fuerte en una red bidimensional cuadrada.

Apéndice C.

Para la construcción computacional de la red cuadrada utilizada en los resultados de esta tesis se siguieron los pasos siguientes:

- (a) Se define una energía E para el sistema, un valor de las constantes B_0 , t_a y energías de los sitios $\varepsilon = 0$. Además, se definen las constantes que determinan la función de la elipse (Véase Fig. 3.1).
- (b) Se construye un sistema inicial que representa una columna de sitios con un sistema de enlaces; el número de enlaces se cuentan a partir de un punto inicial $(x, 0)$ al punto $(x, f(x))$, donde $f(x)$ representa la función de la elipse; eventualmente se duplican los sitios para poder cubrir una columna completa dentro de la elipse. A este sistema inicial se le nombra $\mathbf{S}_{(w \times w)}$, donde w es el número de sitios de la columna; las integrales de salto t estarán representadas mediante los valores de las ecuaciones (3.7), (3.9) y (3.10).
- (c) Se define otro sistema que represente una columna de sitios para el punto siguiente en la malla $(x+1, 0)$, el número de sitios w se cuentan a partir del origen al valor de la elipse en ese punto x , eventualmente se duplican, (sin tomar en cuenta el sitio del centro). La matriz de dispersión que representa esta columna se denomina \mathbf{Sa} y las integrales de salto t estarán representadas mediante los valores de las ecuaciones (3.9), (3.7) y (3.10).
- (d) Se construye un sistema de enlaces denominado \mathbf{Sb} , a partir de la figura básica de enlace; el número de enlaces será igual al número de enlaces a la derecha que posea el sistema \mathbf{Sa} , las integrales de salto t estarán representadas mediante los valores de las ecuaciones (3.9), (3.7) y (3.10).

- (e) Se realiza una comparación entre el sistema inicial \mathbf{S} y el sistema \mathbf{Sa} , para ver si el seguimiento del ensamblaje es lineal, creciente o decreciente; a partir de esta comparación se retiran los enlaces de la columna representada por \mathbf{Sa} de cada sitio que no vayan a unirse en la próxima iteración o cuyo sitio anterior no esté dentro de la elipse. Este proceso se consigue fusionando la estructura \mathbf{Sa} con una estructura de un solo sitio a dicha cadena. La estructura resultante se renombra \mathbf{Sa} .
- (f) Se fusionan los sistemas \mathbf{Sa} y \mathbf{S} para obtener el sistema \mathbf{Sc} .
- (g) Se fusiona el sistema \mathbf{Sc} con el sistema de enlaces \mathbf{Sb} para obtener un nuevo sistema final \mathbf{S} .
- (h) Se repite el proceso a partir del paso (c) en el punto subsecuente $(x+2,0)$ y se repite toda la iteración.
- (i) Una vez que se ha terminado de iterar a lo largo de toda la elipse, se fusiona la matriz \mathbf{S} final con la matriz que representa los leads \mathbf{S}_{lead} por la izquierda y por la derecha, la cual fue construida de forma análoga a los pasos (c)-(g), obteniendo la matriz final \mathbf{Sb} . La construcción de las matrices que representan los leads sigue la misma construcción que lo planteado en los pasos (c) a (h).
- (j) Se calcula la transmitancia y reflectancia del sistema final \mathbf{Sb} para dicha energía E , utilizando los elementos de dicha matriz.
- (k) Se repite el mismo procedimiento a partir del paso (a) para un rango de energías distintas.

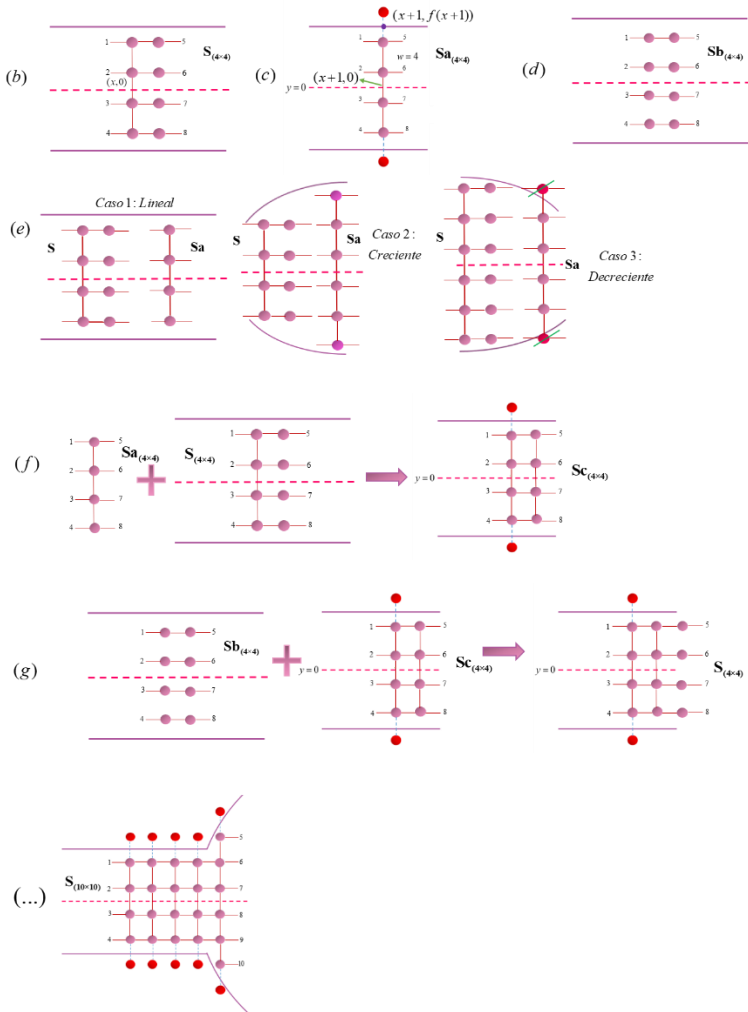


Fig. C.1. Representación esquemática de la construcción de la red cuadrada para los pasos más relevantes de su construcción. Los sitios de color rojo representan los sitios que no se toman en cuenta dentro de la elipse y que se van descartando de forma sucesiva, mientras que los sitios morados representan los que si se considerarán en la construcción.

Referencias.

[Atland,2010]

Atland, A., & Simons, B. (2010). *Condensed Matter Field Theory* (2° Ed.). New York, USA: Cambridge University Press.

[Ashcroft,1976]

Ashcroft, N. W., & Mermin, N. D. (1976). *Solid Stated Physics*. New York, Ithaca, USA: Harcourt College Publishers.

[Beenakker, 1991]

Beenakker, C. W. J., & van Houten H. (1991). *Solid State Physics*, New York, USA: H. Ehrenreich and D. Turnbull. Vol.44, p.1.

[Beiser,2003]

Beiser, A. (2003). *Concepts of Modern Physics* (6th ed.). New York, USA: McGraw-Hill.

[Bromley,2000]

Bromley, D. A., & Greiner, W. (2000). *Quantum Mechanics: An Introduction* (4th ed.). Frankfurt am Man, Germany: Springer Berlin Heidelberg.

[Cohen,1977]

Cohen-Tannoudji, C., Diu, B., & Laloë, F.
(1977). *Quantum mechanics*. Paris, France: Wiley.

[Datta,1997]

Datta, S. (1997). *Electronic Transport in mesoscopic systems*. New York, USA: Cambridge University Press.

[Griffiths,2017]

Griffiths, D. J. (2017). *Introduction to Electrodynamics* (4th ed.). New York, USA: Cambridge University Press.

[Griffiths,2018]

Griffiths, D. J., & Schroeter, D. F. (2018). *Introduction to Quantum Mechanics* (3rd ed.). New York, USA: Cambridge University Press.

[Harrison, 1989]

Harrison, W. A. (1989), *Electronic Structure and the Properties of Solids*, p.320

[Hoffman, 2015]

Hofmann, P. (2015). *Solid State Physics: An Introduction* (2nd ed.). Betz-Druck GmbH, Darmstadt, Germany: Wiley.

[Ibach,2009]

Ibach, H., & Lüth, H. (2009). *Solid-State Physics* (4th ed.). Forschungszentrum Jülich GmbH, Germany: Springer.

[Kittel,2005]

Kittel, C. (2005). *Introduction to Solid State Physics*. (8th es.) USA: Jon Wiley & Sons, Inc.

[Landauer,1999]

Landauer, R. & Imry, Y. (1999). *Conductance viewed as transmission*. Reviews of Modern Physics, Vol.71, No.2, p.S306.

[McKelvey,1996]

McKelvey, J. P. (1996). *Física del estado sólido y de semiconductores*. Ciudad de México, México: Limusa.

[Medina,2018]

Medina, L. A. (2018). *Estudio del transporte electrónico mediante la matriz de dispersión en hamiltonianos arbitrarios de amarre fuerte*. Ciudad de México, México: UNAM.

[Mervyn,2015]

Mervyn, R. (2015). *The Tight Binding Method*. England: University of Leicester.

[Morfonios, 2009]

Morfonios, C., Buchholz, D., & Schmelcher, P. (2009). *Magnetoconductance switching in an array of oval quantum dots*. Physical Review Letters, B (80).

[Morfonios,2014]

Morfonios, C., & Schmelcher, P. (2014). *Current Control by Resonance Decoupling and Magnetic Focusing in Soft-Wall Billiards*. Physical Review Letters, 113(8).

[Morfonios,2017]

Morfonios, C. V., & Schmelcher, P. (2017). *Control of Magnetotransport in Quantum Billiards. Lecture Notes in Physics, 927*. doi: 10.1007/978-3-319-39833-4

[Ramírez,2017]

Ramírez, C, & Medina-Amayo, L. (2017). *Scattering Matrix of arbitrary tight-binding Hamiltonians*. Annals of Physics.

[Ramírez,2017-2]

Ramírez, C. (2017). *Determining Transport Properties of complex multiterminal systems: S-Matrix of general tight-binding periodic leads*. Annalen der Physik.

[Ryndyk, 2016]

Ryndyk, D. A. (2016). *Theory of Quantum Transport at Nanoscale: An Introduction*. TU Dresden, Germany: Springer.

[Seitz,1949]

Seitz, F. (1949), *Modern Theory of Solids*, McGraw–Hill, p. 441–447.

[Simon,2013]

Simon, S. H. (2013). *The Oxford Solid State Basics*. Oxford, United Kingdom: OUP Oxford.

[Sivan,1989]

Sivan, U., Imry, Y., & Hartzstein C., (1989). *Aharonov-Bohm and quantum Hall effects in singly connected quantum dots*. Physical Review Letters, 39(2).

[Stangel,2013]

Stangel, A. (2013). *Wannier functions from Bloch orbitals in Solids*. Sweden: Upsala University.

[Tipler,2012]

Tipler, P. A., & Llewellyn, R. A. (2012). *Modern Physics* (6th ed.). New York, USA: W. H. Freeman and Company.

[Wang,2014]

Wang, G.-C., & Lu, T.-M. (2014). *RHEED Transmission Mod and Pole Figures: Thin Film and Nanostructure Texture Analysis*. New York: Springer-Verlag. doi: 10.1007/978-1-4614-9287-0

[Zettili,2009]

Zettili, N. (2009). *Quantum Mechanics: Concepts and Applications* (2nd ed.). Jacksonville, USA: Wiley