



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**  
MAESTRÍA EN CIENCIAS (FÍSICA)  
INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN MATERIALES

RENORMALIZACIÓN MATRICIAL APLICADA A LA FÓRMULA DE KUBO-  
GREENWOOD

TESIS  
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:  
MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:  
FÍS. NAHUM CALDERÓN CHÁVEZ

DR. CHUMIN WANG CHEN  
INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN MATERIALES

DRA. VICENTA SÁNCHEZ MORALES  
FACULTAD DE CIENCIAS

DR. RAÚL PATRICIO ESQUIVEL SIRVENT  
INSTITUTO DE FÍSICA

MÉXICO, D. F. NOVIEMBRE 2014



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



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

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

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

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

# Resumen

Esta tesis presenta un estudio del transporte electrónico usando un nuevo método de renormalización matricial en el espacio real para la fórmula de Kubo-Greenwood y la densidad de estados en sistemas cuasiperiódicos con multigrado de libertad por celda dentro del modelo de amarre fuerte. Dicho método es una extensión del método de renormalización escalar para un solo grado de libertad por sitio [Sánchez, 2004]. Esta extensión se basa en la idea de matriz de matrices, así como en la conmutabilidad de la traza de un producto de matrices. Como ejemplo, se estudian los nanoalambres cuasiperiódicos de longitud macroscópica y diferentes tamaños de sección transversal.

Con el fin de verificar la validez del método matricial, se calculan tanto la conductancia electrónica  $dc$  como la densidad de estados en algunos sistemas mediante dos maneras: el método de renormalización escalar más el teorema de convolución y el método de renormalización matricial desarrollado por primera vez en esta tesis. Como ejemplo, se presentan los resultados obtenidos en nanoalambres con integrales de salto que varían en diferentes planos perpendiculares a la corriente eléctrica. Cabe mencionar que dichos nanoalambres no pueden ser tratados con el método de renormalización escalar. Los resultados de su conductancia muestran la existencia de una amplia región de energía, donde la conductancia eléctrica tiene un valor mínimo independiente de los valores de integrales de salto en diferentes planos transversales. Este fenómeno fue analizado mediante una prueba analítica a través de una transformación unitaria al hamiltoniano convirtiendo el nanoalambre a canales independientes de conducción y se encontró que algunos de estos canales tienen un transporte balístico independiente del desorden entre las integrales de salto en diferentes planos transversales.

Por último, el nuevo método de renormalización matricial presentado en esta tesis permite estudiar el transporte electrónico en sistemas macroscópicos con desorden estructural y multigrado de libertad por celda a través de la fórmula de Kubo-Greenwood sin introducir aproximaciones adicionales. En particular, dicho método podría ser útil para el estudio de nanoalambres con ramificaciones, así como sólidos no cristalinos con múltiples bandas electrónicas.

# Contenido

<b>Introducción</b>	1
<b>Capítulo 1 Orden Atómico en Sólidos</b>	3
1.1. Arreglo Cristalino	3
1.1.1. Teorema de Bloch	5
1.1.2. Densidad de Estados	5
1.2. Desorden Estructural	7
1.2.1. Localización de Anderson	7
1.2.2. Teoría de Mott	10
1.3. Cuasicristales	11
1.3.1. Aleaciones Cuasicristalinas	12
1.3.2. Superredes Cuasiperiódicas	12
1.4. Redes de Fibonacci	13
1.4.1. Definición de la Cuasiperiodicidad	13
1.4.2. Métodos de Construcción	14
<b>Capítulo 2 Transporte Electrónico</b>	18
2.1. Modelo de Amarre Fuerte	18
2.2. Modelo de Drude	19
2.2.1. Conductividad Eléctrica <i>dc</i> para Metales	20
2.2.2. Conductividad Eléctrica <i>ac</i> para Metales	20
2.3. Ecuación de Boltzmann	21
2.4. Conductancia de Landauer	23
2.5. Fórmula de Kubo-Greenwood	24
<b>Capítulo 3 Método de Renormalización Matricial</b>	28
3.1. Ideas Fundamentales	28
3.2. Formulación para la Densidad de Estados	31
3.3. Formulación para la Fórmula de Kubo-Greenwood	35
<b>Capítulo 4 Conductancia de Nanoalambres Cuasiperiódicos</b>	42
4.1. Sección Transversal Cuadrática	43
4.2. Sección Transversal Rectangular	49
4.3. Nanoalambres con Ramificaciones	57
<b>Conclusiones</b>	61
<b>Apéndice A Función de Green</b>	62
<b>Apéndice B Método de Renormalización Escalar</b>	64
<b>Apéndice C Teorema de Convolución</b>	71
<b>Apéndice D Canales Independientes de Conducción</b>	74
<b>Referencias</b>	77

# Introducción

La física estudia las reglas fundamentales de la naturaleza y en particular, la física del estado sólido actual basada en la mecánica cuántica es capaz de predecir propiedades físicas de materiales. Hoy en día, los avances en esta rama de la física ha modificado la convivencia de nuestra sociedad. Por ejemplo, los dispositivos electrónicos actuales se basan directamente en nuestro conocimiento de la física del estado sólido.

Los sólidos cristalinos están constituidos por un arreglo periódico de átomos, el cual se describe a través de celda unitaria y una red cristalina de puntos que indica la posición espacial. La celda unitaria primitiva de la red recíproca se conoce como la primera zona de Brillouin [Kittel, 1996]. Esta zona contiene todos los estados cuánticos y en consecuencia cualquier fenómeno físico del sistema puede ser analizado únicamente en dicha zona.

Por otro lado, existen los materiales amorfos cuyo ordenamiento atómico es desordenado pudiendo ser estructural o sustitucional; en el primero la posición de los átomos es aleatoria persistiendo únicamente el orden de corto alcance, mientras que en el segundo los átomos de diferente naturaleza son colocados aleatoriamente en una red periódica.

Una de las consecuencias más importantes del desorden estructural es la localización de las excitaciones elementales en sólidos. Existen diversas formas de cuantificar el grado de localización en un sistema desordenado, por ejemplo mediante el coeficiente de Lyapunov, la razón de participación y la estadística de niveles [Salazar, 2003].

En 1982, Dan Shechtman observó el primer cuasicristal reportando dos años después [Shechtman, 1984] sus patrones de difracción con una simetría icosaedra tridimensional prohibida por la cristalografía tradicional. Este descubrimiento fue reconocido con el Premio Nobel de Química 2011.

Para los matemáticos, las funciones cuasiperiódicas han sido estudiadas desde 50 años antes de la primera observación experimental [Besicovitch, 1932]. Una de las redes cuasiperiódicas más estudiada es la de Fibonacci, en la cual se puede variar la naturaleza de sus átomos, la interacción entre ellos o ambas, es decir, el problema de sitios, de enlaces o mixto. Una de las características más importantes de los cuasicristales es su orden orientacional de largo alcance en lugar de la traslacional en un sólido cristalino.

En estos sistemas la cuasiperiodicidad invalida el teorema de Bloch y la utilización del espacio recíproco; por lo cual, se requieren nuevos métodos para estudiar los sistemas cuasiperiódicos. Además, estos sistemas son particularmente sensibles a las condiciones de frontera ficticias, tales como cíclicas o truncadas. Las primeras introducen estados espurios mientras que las segundas localizan los estados en los extremos de cada minibanda. Cabe mencionar que los sistemas cuasiperiódicos poseen espectros de energía singularmente continuos con medida de Lebesgue igual a cero [Sütő, 1989]; en otras palabras, dichos espectros están constituidos de un número infinito de minibandas cuyos extremos son particularmente sensibles a las condiciones de frontera ficticias.

Uno de los métodos capaces de abordar sistemas cuasiperiódicos de tamaño macroscópico es el de renormalización en el espacio real. Dicho método tiene la virtud de tener un tiempo computacional que crece en forma logarítmica con el tamaño del sistema sin introducir aproximaciones adicionales a los cálculos, en comparación con el método de diagonalización exacta cuyo tiempo de cómputo crece en forma cúbica con el tamaño del sistema. En consecuencia, usando la capacidad de cómputo actual se puede estudiar únicamente sistemas menores que  $10^5$  átomos.

En esta tesis se presenta el método de renormalización matricial que es una extensión del método de renormalización escalar. Este nuevo método es útil para el estudio de los sistemas con multigrados de libertad por celda, así como su aplicación a nanoalambres cuasiperiódicos con ramificaciones de tamaño macroscópico. Como ejemplo, las propiedades físicas, tales como la densidad de estado (DOS) y la conductividad eléctrica ( $\sigma$ ), fueron calculadas usando el método de renormalización matricial y los programas computacionales fueron desarrollados en el lenguaje de programación Fortran 90.

La presente tesis está organizada en cuatro capítulos. En la primera se inicia con un breve repaso de la teoría de sólidos cristalinos y se continúa con materiales desordenados así como sistemas cuasiperiódicos poniendo particular atención en la red de Fibonacci que constituye el ejemplo más estudiado de los sistemas cuasiperiódicos.

En el segundo capítulo se presentan el modelo de amarre fuerte basado en las funciones de Wannier y los modelos de la conductividad eléctrica desde el de Drude hasta la fórmula de Kubo-Greenwood basada en la función de Green.

En el tercer capítulo se introduce la idea de renormalización matricial en el espacio real utilizando como ejemplo a dos átomos por sitio. Además, empleando dicho método matricial se deducen en detalle el desarrollo algebraico para la densidad de estados  $[DOS(E)]$  y conductividad eléctrica  $[\sigma(E,\omega,T)]$  a partir de la fórmula de Kubo-Greenwood para nanoalambres cuasiperiódicos.

En el cuarto capítulo se presentan los espectros de  $DOS(\mu)$  y de la conductancia eléctrica  $dc$   $[g(\mu)]$  en función del potencial químico ( $\mu$ ) obtenidos mediante el método de renormalización matricial en el espacio real para nanoalambres cuasiperiódicos tipo Fibonacci con longitud macroscópica y una sección transversal cuadrada o rectangular de pocos átomos. Así mismo, se aplica el método de renormalización matricial para el estudio de nanoalambres con ramificaciones.

Por último, la tesis contiene una sección de apéndices, los cuales detallan el método de renormalización escalar y el teorema de convolución. En particular, el Apéndice A presenta la función de Green, el Apéndice B introduce el método de renormalización escalar, el Apéndice C se discute el teorema de convolución y su utilización en las propiedades físicas presentadas en esta tesis y en el Apéndice D se introduce la obtención de los canales independientes en un nanoalambre.

# Capítulo 1 Orden Atómico en Sólidos

Los sólidos macroscópicos son sistemas complejos que tienen  $10^{23}$  grados de libertad, cuyas propiedades están íntimamente ligadas con el ordenamiento atómico en éstos. Para inicios del siglo veinte, los estudios de la difracción de rayos X revelan la existencia de una relación estrecha entre el orden atómico y las propiedades macroscópicas de un sólido. Por ejemplo, el diamante y el grafito son variedades alotrópicas del carbono, es decir, ambos sólidos están constituidos por átomos de carbono y tienen propiedades muy distintas debido al ordenamiento de los mismos como se muestra en la Tabla 1.1.

Tabla 1.1 Algunas propiedades físicas del diamante y del grafito.

Alótropos	Orden Atómico	Hibridación	Densidad	Resistividad Eléctrica	Conductividad Térmica	Módulo de Young
Diamante	Tetraédrico	$sp^3$	$3.52 \text{ g/cm}^3$	$10^{11}-10^{14} \Omega\cdot\text{m}$	$2000 \text{ W/m}\cdot\text{K}$	$1220 \text{ GPa}$
Grafito	Hexagonal	$sp^2$	$2.16 \text{ g/cm}^3$	$10^{-5}-10^{-6} \Omega\cdot\text{m}$	$80-250 \text{ W/m}\cdot\text{K}$	$34 \text{ GPa}$

En este capítulo, se presentan los diferentes tipos de ordenamiento atómico que se han encontrado en los sólidos, tales como cristales, amorfos y cuasicristales. En estos últimos, existe un orden intrínseco derivado de la proyección con pendiente irracional a partir de una red periódica en un espacio de mayor dimensión.

## 1.1. Arreglo Cristalino

Los sólidos cristalinos se distinguen de los demás sólidos por su arreglo periódico de átomos, el cual se describe a través de una red cristalina de puntos que indica la posición espacial de la celda unitaria. Existen únicamente 14 formas periódicas diferentes de arreglar átomos idénticos en el espacio tridimensional, las cuales se denominan las redes de Bravais [Kittel, 1996].

En un espacio tridimensional, la posición de las celdas unitarias puede expresarse como

$$\mathbf{R}_l = l_1\mathbf{a}_1 + l_2\mathbf{a}_2 + l_3\mathbf{a}_3, \quad (1.1)$$

donde  $l_1$ ,  $l_2$  y  $l_3$  son números enteros mientras que  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  y  $\mathbf{a}_3$  son los vectores base de la red cristalina. La celda unitaria que tiene el mínimo volumen posible se denomina celda unitaria primitiva. Una de las formas de obtener las primitivas es el método de Wigner-Seitz, como se muestra en la Figura 1.1 para una red hexagonal bidimensional.

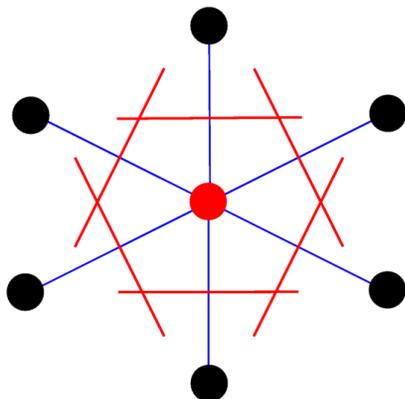


Figura 1.1 Construcción de una celda de Wigner-Seitz para una red hexagonal bidimensional.

A partir de la red cristalina, se puede definir una red recíproca mediante la introducción de sus vectores base  $\mathbf{b}_1$ ,  $\mathbf{b}_2$  y  $\mathbf{b}_3$  de la siguiente forma,

$$\mathbf{b}_1 \equiv 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}, \quad \mathbf{b}_2 \equiv 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} \quad \text{y} \quad \mathbf{b}_3 \equiv 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} \quad (1.2)$$

De modo que  $\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$  y los vectores de la red recíproca puede escribirse como

$$\mathbf{G}_h = h_1 \mathbf{b}_1 + h_2 \mathbf{b}_2 + h_3 \mathbf{b}_3 \quad (1.3)$$

donde  $h_1$ ,  $h_2$  y  $h_3$  son números enteros. La celda unitaria primitiva de la red recíproca se denomina como la primera zona de Brillouin [Kittel, 1996].

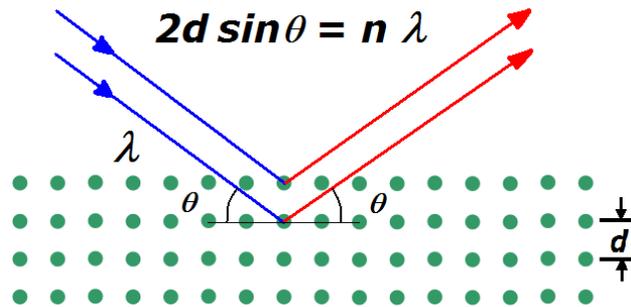


Figura 1.2 Dibujo esquemático de la difracción mediante interferencias constructivas en la ley de Bragg.

Una de las formas tradicionales para determinar las posiciones atómicas en un sólido es la difracción usando rayos X o electrones, como se muestra en la Figura 1.2, donde la longitud de onda ( $\lambda$ ) es la misma durante la difracción y la interferencia constructiva se obtiene para los ángulos ( $\theta$ ) que satisfacen la ley de Bragg [Kittel, 1996],

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (1.4)$$

siendo  $d$  la distancia interplanar y  $n$  el orden de difracción. La condición de difracción (1.4) puede expresarse alternativamente a través de las ecuaciones de von Laue [Kittel, 1996],

$$\mathbf{k} - \mathbf{k}_0 = \mathbf{G}_h \quad (1.5)$$

donde  $\mathbf{k}_0$  y  $\mathbf{k}$  son los vectores de onda del haz incidente y haz difractado, respectivamente.

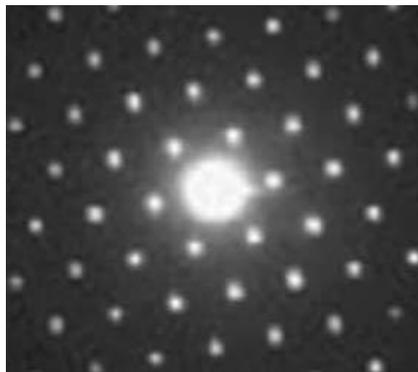


Figura 1.3 Patrón de difracción de electrones en la dirección [111] para un cristal de  $\text{Ca}_3\text{Cr}_2(\text{SiO}_4)_3$  [Zou, 2008].

En la Figura 1.3 se muestra un típico patrón de difracción obtenido de un cristal mediante la microscopía electrónica de transmisión (TEM). Cabe mencionar que a partir del patrón de

difracción se obtienen los vectores de onda  $\mathbf{k}$  difractada y conociendo el  $\mathbf{k}_0$  incidente se puede determinar  $\mathbf{G}_h$  mediante la ecuación (1.5). Analizando una serie de vectores  $\mathbf{G}_h$  distintos se puede obtener los vectores base de la red recíproca  $\mathbf{b}_1$ ,  $\mathbf{b}_2$  y  $\mathbf{b}_3$ . Finalmente, se determina los vectores de la red cristalina  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  y  $\mathbf{a}_3$  mediante una transformación inversa de la ecuación (1.2).

### 1.1.1. Teorema de Bloch

El electrón en un sólido tiene una masa efectiva generalmente diferente a su masa en el vacío, debido a su interacción con la red cristalina. La dinámica de dicho electrón en la posición  $\mathbf{r}$  está determinada por el siguiente hamiltoniano dentro de la aproximación de campo medio [Ashcroft, 1976],

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}), \quad (1.6)$$

donde  $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})$  es una función periódica siendo  $\mathbf{R}$  un vector de la red cristalina. La solución de la ecuación de Schrödinger estacionaria correspondiente al hamiltoniano (1.6) está dada por el teorema de Bloch [Ashcroft, 1976], es decir, su función de onda ( $\Psi$ ) siempre tiene la siguiente forma,

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.7)$$

Siendo  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$  una función periódica con el mismo período de la red cristalina. Esta función de onda no es generalmente periódica en el espacio real, ya que  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  puede tener un período inconmensurado con el de la red cristalina. Sin embargo, dicha función sí es periódica en el espacio recíproco [Ibach, 2009], es decir,

$$\Psi_{\mathbf{k} + \mathbf{G}}(\mathbf{r}) = \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.8)$$

donde  $\mathbf{G}$  es un vector de la red recíproca. En consecuencia, la energía del electrón o el eigenvalor de la ecuación de Schrödinger estacionaria también es una función periódica en el espacio recíproco,

$$E(\mathbf{k} + \mathbf{G}) = E(\mathbf{k}). \quad (1.9)$$

Esto conduce a que la primera zona de Brillouin contiene todos los estados cuánticos del sistema y que cualquier fenómeno físico puede ser analizado estudiando únicamente los estados de dicha zona. Cabe mencionar que el cuadrado de la función de la onda  $|\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2$  siempre es una función periódica, en otras palabras, la probabilidad de encontrar el electrón es la misma en todas las celdas unitarias cuya función de onda se denomina *extendida*.

### 1.1.2. Densidad de Estados

Basado en la hipótesis ergódica de Boltzmann que asume la igualdad entre el promedio temporal  $\langle A \rangle_{\text{tiempo}}$  y el promedio sobre el ensamble  $\langle A \rangle_{\text{ensamble}}$ , las mediciones experimentales pueden calcularse a través del siguiente promedio estadístico,

$$\langle A \rangle_{tiempo} = \langle A \rangle_{ensamble} = \iiint A(\mathbf{k}) f(E_{\mathbf{k}}) d\mathbf{k}, \quad (1.10)$$

siendo  $A$  cualquier cantidad física y  $f(E_{\mathbf{k}})$  es la función de distribución que puede ser de Maxwell-Boltzmann, Bose-Einstein o Fermi-Dirac, dependiendo de la naturaleza del sistema. Para el caso de que  $A(\mathbf{k}) = A(E_{\mathbf{k}})$ , el promedio de la ecuación (1.10) puede reescribirse como

$$\langle A \rangle_{ensamble} = \int A(E) f(E) g(E) dE, \quad (1.11)$$

donde

$$g(E) dE = \iint_E d\mathbf{k} \quad (1.12)$$

y la doble integral se efectúa sobre superficies de energía constante. La función  $g(E)$  se denomina la densidad de estados (DOS) del sistema que contiene toda la información estructural del mismo, ya que  $A(E)$  no depende del sistema y  $f(E)$  depende únicamente de la naturaleza de las partículas constituyentes. Por lo tanto, para predecir mediciones de cantidades físicas tales como el calor específico y la conductividad, se requiere únicamente conocer la DOS de cada sistema bajo estudio.

A continuación, se ejemplifica el uso de la DOS analizando el calor específico electrónico  $C_{el}$ . La energía disponible en un sistema es

$$U = \int_0^{\infty} E f(E) g(E) dE, \quad (1.13)$$

siendo  $f(E) = 1/\left[ e^{(E-E_F)/k_B T} + 1 \right]$  la distribución de Fermi-Dirac con  $E_F$  la energía de Fermi; de modo que

$$C_{el} = \frac{\partial U}{\partial T} = \int_0^{\infty} E \frac{\partial f}{\partial T} g(E) dE \quad (1.14)$$

y

$$\frac{\partial f}{\partial T} = \frac{E - E_F}{k_B T^2} \frac{e^{(E-E_F)/k_B T}}{\left[ e^{(E-E_F)/k_B T} + 1 \right]^2}. \quad (1.15)$$

Por otro lado, el número total de electrones será

$$N = \int_0^{\infty} f(E) g(E) dE \Rightarrow 0 = E_F \frac{\partial N}{\partial T} = \int_0^{\infty} E_F f(E) g(E) dE; \quad (1.16)$$

usando el resultado anterior, se puede reescribir el calor específico electrónico como

$$C_{el} = \int_0^{\infty} (E - E_F) \frac{\partial f}{\partial T} g(E) dE \approx g(E_F) \int_0^{\infty} (E - E_F) \frac{\partial f}{\partial T} dE, \quad (1.17)$$

se hace el cambio de variable  $x \equiv (E - E_F)/k_B T$ , teniendo

$$C_{el} = g(E_F) k_B^2 T \int_{-E_F/k_B T}^{\infty} \frac{x^2 e^x}{\left[ e^x + 1 \right]^2} dx. \quad (1.18)$$

Para el caso de bajas temperaturas

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^2 e^x}{\left[ e^x + 1 \right]^2} dx = \frac{\pi^2}{3}. \quad (1.19)$$

Por lo cual,

$$C_{el} = \frac{\pi^2}{3} g(E_F) k_B^2 T, \quad (1.20)$$

para un gas de electrones libres  $g(E_F) = 3N/2E_F = 3N/2k_B T_F$ , entonces

$$C_{el} = \frac{\pi^2}{2} N k_B \frac{T}{T_F}. \quad (1.21)$$

En resumen, se ha calculado la capacidad calorífica electrónica para un sólido, encontrando que  $C_{el} \sim T$  a bajas temperaturas.

## 1.2. Desorden Estructural

En un sólido pueden existir diversos tipos de desorden, por ejemplo, el desorden estructural donde la posición de los átomos es casi aleatoria persistiendo únicamente el orden de corto alcance entre los vecinos más cercanos. Otro ejemplo del desorden es el sustitucional donde átomos distintos colocados arbitrariamente forman una red cristalina. En la Figura 1.4 se compara una estructura cristalina con una estructura desordenada. Nótese que en este arreglo cristalino existen sólo anillos de 6 átomos, mientras que en el amorfo coexisten anillos de 5, 6 y 7 átomos.

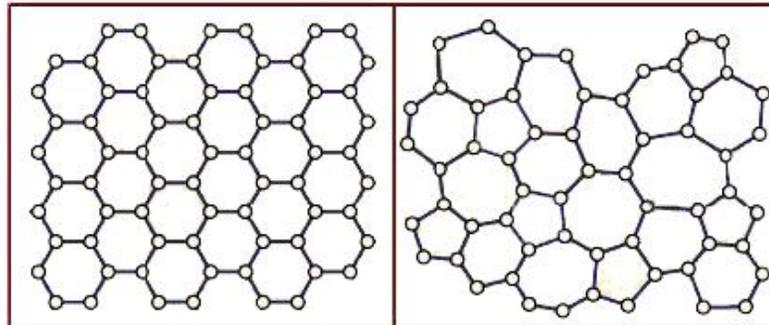


Figura 1.4 Arreglo atómico de un sólido cristalino (izquierda) y amorfo (derecha).

El desorden estructural puede cuantificarse mediante las funciones de distribución atómica. En particular, la función de distribución de pares [ $g(1,2) = g(\mathbf{R}_{12})$ ] contiene información importante del arreglo atómico; más aún, la función de distribución radial [ $g(\mathbf{R}_{12}) = g(R)$ ] proporciona una forma simple y eficaz de cuantificar el grado de desorden de un arreglo atómico, omitiendo la posible anisotropía [Ziman, 1979].

### 1.2.1. Localización de Anderson

En 1958, Philip W. Anderson propuso que las eigenfunciones de un sistema desordenado pueden ser localizadas, es decir, la amplitud de la función de onda se concentra en una región reducida del sistema [Anderson, 1958]. Para esto, se partió del siguiente hamiltoniano

$$\hat{H} = \sum_n \varepsilon_n |n\rangle \langle n| + V \sum_{n,m} |n\rangle \langle m|, \quad (1.22)$$

donde  $|n\rangle$  es la función de Wannier centrada en el sitio  $n$ ,  $\varepsilon_n \in [-W/2, W/2]$  es su autoenergía y  $V$  es la integral de salto entre sitios más cercanos. Además, se asume que  $\varepsilon_n$  son estadísticamente independientes teniendo la distribución  $P(\varepsilon_n)$  constante dentro del intervalo de ancho  $W$ ,

$$P(\varepsilon_n) = \begin{cases} 1/W, & \text{si } |\varepsilon_n| < W/2 \\ 0, & \text{otros casos} \end{cases} \quad (1.23)$$

Por lo que los eigenestados se vuelven localizados si el cociente  $\delta = W/V$  es suficientemente grande. El valor crítico de  $\delta$  aumenta con el número de coordinación que es el número de vecinos más cercanos.

En la Figura 1.5 se muestra la densidad de estados  $N(E)$  obtenida de un potencial tipo Kronig-Penney [Ashcroft, 1976] para (a) una estructura cristalina y (b) una estructura amorfa con profundidades de pozo aleatorias. Obsérvese que en general la  $N(E)$  tiene bordes bien definidos para el caso (a) cristalino y bordes suaves para el caso (b) amorfo. Esta última característica junto con la localización exponencial de la función de onda son las consecuencias más importantes del potencial tipo Kronig-Penney con pozos de profundidad aleatorios.

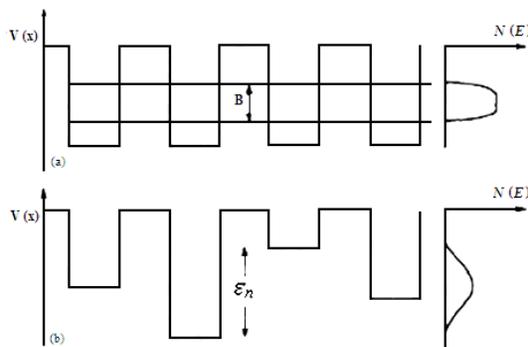


Figura 1.5 Densidad de estados  $N(E)$  obtenida del potencial tipo Kronig-Penney para (a) una estructura cristalina y (b) una estructura amorfa.

Dado que los sistemas desordenados generalmente carecen de soluciones analíticas, éstos pueden considerarse como un sistema con muchas impurezas. A continuación, como ejemplo, se analiza la localización en una cadena periódica infinita de átomos de masa  $m$  y constantes de interacción entre vecinos más cercanos  $\alpha$ . Dicha cadena contiene una sola impureza de masa  $M$  en el sitio  $j = 0$ , como se muestra en la Figura 1.6.

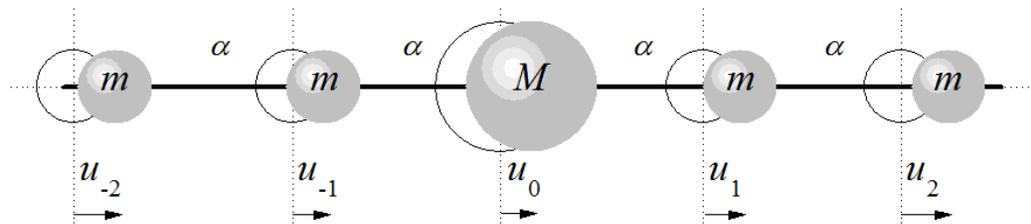


Figura 1.6 Cadena periódica de átomos con una impureza de masa  $M$  en el sitio  $0$   $j = 0$ .

Las ecuaciones de movimiento para los desplazamientos de los átomos  $u_j$  con respecto a sus posiciones de equilibrio alrededor de la impureza son

$$\begin{cases} m\ddot{u}_{-1} = \alpha(u_0 + u_{-2} - 2u_{-1}) \\ M\ddot{u}_0 = \alpha(u_1 + u_{-1} - 2u_0) \\ m\ddot{u}_1 = \alpha(u_0 + u_2 - 2u_1) \end{cases} \quad (1.24)$$

Se propone una solución o un modo vibracional debido a la impureza de la siguiente forma

$$u_j = u_0 e^{-k|j| - i\omega t} \quad (1.25)$$

Al sustituir en las ecuaciones (1.24), se tiene

$$\begin{cases} -m\omega^2 = \alpha(e^k + e^{-k} - 2) \\ -M\omega^2 = \alpha(e^{-k} + e^{-k} - 2) \\ -m\omega^2 = \alpha(e^k + e^{-k} - 2) \end{cases} \quad (1.26)$$

por lo que

$$k = \ln\left(1 - \frac{2m}{M}\right) \quad (1.27)$$

y

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\alpha}{m}} \sqrt{\frac{m/M}{2 - M/m}} \quad (1.28)$$

En resumen, la presencia de una impureza conduce a un modo vibracional que se localiza exponencialmente en el espacio. Para el caso de  $N_{imp}$  impurezas, el cual es mucho menor que el número total de átomos en la cadena, existen  $N_{imp}$  estados localizados.

En general, una forma de estudiar localización es por medio de la llamada probabilidad de retorno  $P(\mathbf{r})$  definida por [Tiggelen, 1999]

$$P(\mathbf{r}) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \left| \langle \mathbf{r} | \exp(-i\hat{H}t) | \mathbf{r} \rangle \right|^2, \quad (1.29)$$

que da la densidad de probabilidad para una partícula que deja la posición  $\mathbf{r}$  para que finalmente regrese al mismo sitio. Se espera que esta cantidad sea casi cero para estados extendidos y sea distinto de cero para estados localizados, ya que en ausencia de difusión la probabilidad no se diluye en el sistema. Usando la descomposición espectral

$$\exp(-i\hat{H}t) = \sum_n \exp(-iE_n t) |\phi_n\rangle \langle \phi_n| \quad (1.30)$$

donde  $\hat{H}|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$ . Entonces,

$$P(\mathbf{r}) = \sum_n |\phi_n(\mathbf{r})|^4. \quad (1.31)$$

Para el caso de excitaciones eléctricas, se puede definir la razón de participación inversa (**IPR**) como

$$IPR(E_n) \equiv \sum_i |c_i(n)|^4, \quad (1.32)$$

siendo  $|\phi_n\rangle = \sum_i c_i(n)|i\rangle$  e  $|i\rangle$  es la función de Wannier centrada en el sitio  $i$ .

Otra forma de estudiar localización en un sistema desordenado es a través del coeficiente de Lyapunov ( $\gamma$ ) que representa la tasa de decrecimiento de la función de onda relacionada con el inverso de la longitud de localización. En el caso de excitaciones electrónicas,

$$\gamma(N, E) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2N} \ln \left[ (\tilde{\tau}_{1,1})^2 + (\tilde{\tau}_{1,2})^2 + (\tilde{\tau}_{2,1})^2 + (\tilde{\tau}_{2,2})^2 \right] \quad (1.33)$$

donde  $\tilde{\tau}_{1,1}$ ,  $\tilde{\tau}_{1,2}$ ,  $\tilde{\tau}_{2,1}$  y  $\tilde{\tau}_{2,2}$  son los elementos de matriz de transferencia  $\tilde{\mathbf{T}}$ .

### 1.2.2. Teoría de Mott

En la década de los sesenta, Nevill Mott introdujo el concepto del borde de movilidad separando los estados extendidos de los estados localizados en sistemas de 3 dimensionesl. Estos últimos aparecen en los bordes de la banda cuando la intensidad de desorden  $\delta \equiv W/V$  es pequeña tal que  $\delta < 1$ . Los bordes de movilidad se mueven gradualmente hacia el centro de la banda cuando aumenta  $\delta$ , como puede verse en la Figura 1.7. Nótese que la zona de estados extendidos se reduce al aumentar el valor de  $\delta$ . Existe un valor crítico  $\delta_c$  y para  $\delta > \delta_c$  solamente existe estados localizados [Mott, 1990].

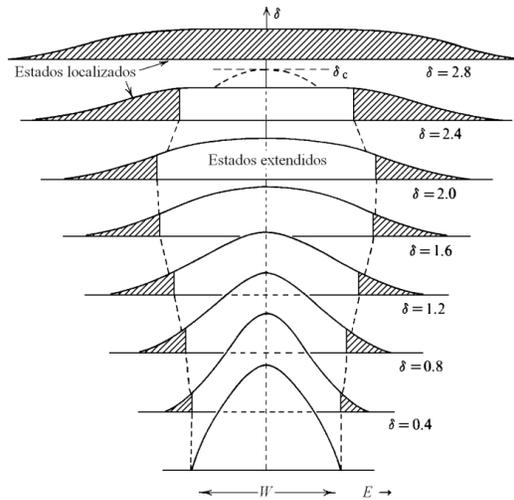


Figura 1.7 El parámetro de desorden  $\delta$ , donde los estados localizados están indicados por las áreas sombreadas y son separados de los estados extendidos por los bordes de movilidad.

En 1979, E. Abrahams y colaboradores demostraron analíticamente dentro de la teoría de escalamiento que todos los estados son localizados en sistemas con desorden aleatorio de uno y dos dimensiones, mientras que en tres dimensiones existe un valor crítico de desorden [Abrahams, 1979]. Recientemente, se ha observado que sistemas desordenados bidimensionales pueden exhibir fuerte decaimiento en la resistencia eléctrica cuando la temperatura tiende a cero Kelvin, el cual sugiere un estado base metálico en dichos sistemas [Abrahams, 2001] [Kravchenko, 2004] [Clarke, 2008].

En esta sección se han visto algunas formas del desorden estructural que se puede presentar en un sólido, así como su caracterización y las consecuencias en el comportamiento de las excitaciones electrónicas. En la siguiente sección, se discutirá un tipo de desorden estructural cuasiperiódico y sus consecuencias en las propiedades de los cuasicristales.

### 1.3. Cuasicristales

En 1984, Dan Shechtman observó el primer cuasicristal en aleaciones de aluminio y manganeso solidificadas por enfriamiento rápido, reportando patrones de difracción electrónica que consistían en puntos bien definidos con una simetría icosaedra tridimensional prohibida por la cristalografía tradicional [Shechtman, 1984]. Posteriormente D. Levine y P. Steinhardt encontraron que las estructuras icosaedrales tienen una transformada de Fourier que coincide con el patrón de difracción observado y explicaron como la simetría icosaedra puede coexistir con el orden de largo alcance [Levine, 1984]. En la actualidad una de las características más importantes de los cuasicristales es que tienen un orden orientacional de largo alcance, pero no una simetría traslacional.

Las aleaciones cuasicristalinas se pueden dividir principalmente en dos grandes grupos: icosaedrales y decagonales. Éste último está formado por un arreglo periódico en una dirección y cuasiperiódico en las dos direcciones restantes. Este arreglo cuasiperiódico bidimensional puede ser descrito por la red de Penrose, la cual está constituida de dos tipos de rombos equiláteros con uno de sus ángulos  $36^\circ$  y  $72^\circ$  respectivamente. Además, la red de Penrose se construye embonando los rombos equiláteros cuyos lados marcados con flechas negras y blancas tienen el mismo símbolo y sentido, como se muestra en la Figura 1.8. En este arreglo todos los enlaces se orientan en diez direcciones, por lo que tienen un orden direccional de largo alcance. Además la razón dorada [ $\tau \equiv (\sqrt{5} + 1)/2$ ] está presente en el cociente de las áreas entre ambos rombos, así como en el cociente del número total de dichos rombos cuando la red es infinita.

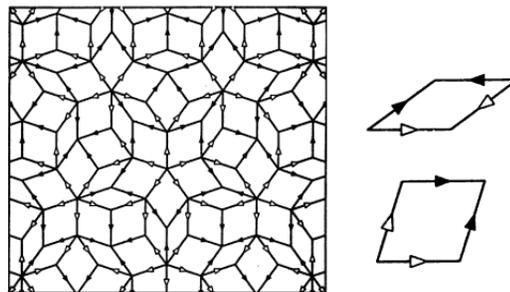


Figura 1.8 Red de Penrose y los dos rombos constituyentes con lados marcados por flechas blancas y negras para generar dicha red.

Históricamente la razón dorada fue introducida a través de los números de Fibonacci. Además, la red de Penrose es una extensión bidimensional directa de la secuencia de Fibonacci mediante los triángulos de Robinson [Naumis, 1994], es decir, se puede obtener la red de Penrose uniendo los triángulos -mitades de los rombos en la Figura 1.8- mediante la regla de adición que se presentará en la sección 1.4.2.

En la actualidad, la investigación de los cuasicristales podría clasificarse en dos grandes líneas: (1) las aleaciones cuasicristalinas con la cuasiperiodicidad a escala atómica; (2) las estructuras cuasiperiódicas artificialmente construidas o superredes cuasiperiódicas. Estas últimas presentan cuasiperiodicidad en muy diferentes escalas que varían desde nanómetros hasta centímetros. Estas dos líneas de investigación serán discutidas en las próximas subsecciones.

### 1.3.1. Aleaciones Cuasicristalinas

Las aleaciones cuasicristales pueden presentarse en forma metaestable o termodinámicamente estable. Éstas de acuerdo a su simetría estructural pueden ser icosaedrales, decagonales, entre otras. El primer cuasicristal producido por solidificación rápida es un ejemplo claro de una aleación icosaedrales metaestable. En 1986, Bancel y Heiney sintetizaron diversas aleaciones cuasicristalinas icosaedrales adicionando silicio o rutenio y lograron una mayor estabilidad de la fase cuasicristalina. Sus resultados indican que las pseudobrechas energéticas en la estructura de bandas electrónica toman un papel importante en la estabilización de la fase icosaedrales [Bancel, 1986].

Una aleación cuasicristal termodinámicamente estable es un material que puede sufrir tratamientos térmicos para su elaboración sin modificar su orden estructural cuasiperiódico. El primer cuasicristal estable fue la aleación  $Al_{2.5}Li_{1.2}Cu_{0.7}Mg_{0.1}$  [Ball, 1985], en donde el litio estabiliza la aleación debido a su tamaño atómico. La segunda generación de cuasicristales icosaedrales estables fue encontrada en los sistemas  $Zn-Mg-RE$ , donde  $RE$  son tierras raras [Luo, 1993]. Estos cuasicristales tienen una excelente calidad estructural y poseen momentos magnéticos debido a los electrones  $4f$  localizados en los átomos  $RE$ , en los cuales se puede estudiar el magnetismo en redes cuasiperiódicas. El primer cuasicristal decagonal está reportado en la aleación  $Al-Mn$  junto con metales de transición ( $Fe$ ,  $Cr$  y  $Rh$ ) mostrando un aparente eje de simetría 10 junto con un orden orientacional de largo alcance y simetría traslacional unidimensional [Bendersky, 1985].

Una forma de explicar la existencia de aleaciones cuasicristalinas estables es por el mecanismo empírico de Hume-Rothery, el cual sugiere que la estabilización de un material ocurre cuando su superficie de Fermi se intercepta o se encuentra muy cercana a la frontera de la zona de Brillouin. Otro parámetro importante para la formación preferencial de una estructura cuasicristalina es la razón electrón-por-átomo ( $e/a$ ) [Matsuda, 2010]. En 1994, A. Tsai encontró una regla empírica para los cuasicristales icosaedrales estables de base- $Al$ , es decir,  $Al-Tm$  con  $e/a \approx 1.75$  y  $Zn-Mn-Al$  con  $e/a \approx 2.1$ . Esto sugiere que los cuasicristales icosaedrales estables son aleaciones de Hume-Rothery.

### 1.3.2. Superredes Cuasiperiódicas

Existen diferentes tipos de superredes construidas artificialmente en el laboratorio, por ejemplo, las superredes hechas de dos semiconductores donde la brecha energética de uno es significativamente menor que la brecha del otro. También existen superredes con más de dos materiales, así como superredes con diferentes tipos de dopaje alternando periódicamente semiconductores de tipo  $n$  y tipo  $p$  [Yu, 2005].

Puede existir superredes aperiódicas siguiendo una secuencia específica. Un ejemplo de superred cuasiperiódica es la de Fibonacci constituida por un orden cuasiperiódico en una dirección y un orden periódico en el plano perpendicular a esta dirección. Estos sistemas presentan propiedades no observadas en las estructuras periódicas o amorfas, por ejemplo, R.

Merlin y colaboradores usaron por primera vez una superred de Fibonacci hecha de  $GaAs$  y  $AlAs$  para estudiar el patrón de dispersión Raman y de rayos X [Merlin, 1985] mostrando un espectro denso de picos que se pueden caracterizar por los índices de la red cuadrada, de la cual fue construida la red de Fibonacci [Todd, 1986]. Asimismo, el espectro Raman muestra características cuasiperiódicas de las excitaciones fonónicas que pueden ser predichas por la teoría microscópica basada en el modelo de Born-von Karman y las funciones de Green [Wang, 1988].

## 1.4. Redes de Fibonacci

La red cuasiperiódica más estudiada es quizás la de Fibonacci; dicha red puede variar en la naturaleza de los átomos y/o la interacción entre ellos, es decir, el problema de sitios, de enlace y mixto, como se muestra en la Figura 1.9.

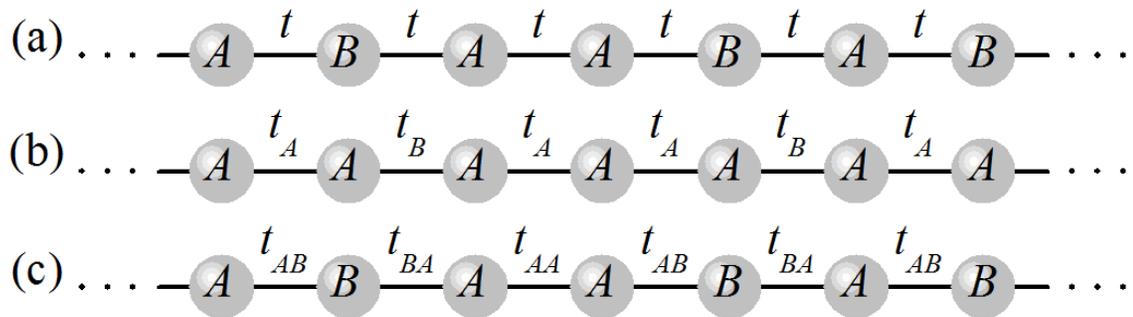


Figura 1.9 Redes de Fibonacci variando (a) el tipo de átomo en el problema de sitios, (b) la constante de interacción interatómica  $t$  en el problema de enlaces y (c) ambos en el problema mixto.

En particular, la red de Fibonacci electrónica estudiada en esta tesis tiene variaciones en los parámetros de las integrales de salto ( $t_{ij}$ ) entre los átomos vecinos más cercanos  $i$  y  $j$ . En la Figura 1.9(a) se tiene el problema de sitios, donde la cadena tiene los átomos distintos  $A$  y  $B$ , siguiendo la secuencia de Fibonacci con una única constante de integral de salto  $t$  entre vecinos más cercanos. La Figura 1.9(b) muestra el problema de enlaces, en el cual el arreglo de la cadena está constituida de átomos iguales  $A$  pero con constantes de integrales de salto tomando los valores  $t_A$  y  $t_B$  siguiendo la secuencia de Fibonacci; mientras que en la Figura 1.9(c) se ilustra el problema mixto siendo una generalización del problema de sitios excepto que las constantes de integrales de salto dependen de la naturaleza de los átomos vecino.

### 1.4.1. Definición de la cuasiperiodicidad

Las funciones cuasiperiódicas han sido estudiadas con anterioridad por los matemáticos [Besicovitch, 1932] y se definen a continuación. Sea  $f(x)$  una función real o compleja cuyo dominio son los números reales ( $x \in \mathfrak{R}$ ), ésta es cuasiperiódica si y sólo si para todo  $\varepsilon > 0$  existe un  $\tau \in \mathfrak{R}$ , tal que para todo  $x$

$$|f(x+\tau) - f(x)| < \varepsilon; \quad (1.34)$$

en otras palabras, existe un cuasiperíodo  $\tau$ , para el cual  $f(x+\tau)$  se aproxima a  $f(x)$  y la diferencia relativa entre estas dos es menor que  $\varepsilon$ . La desigualdad (1.34) tiene similitud con la de funciones uniformemente continuas, excepto que para las funciones cuasiperiódicas si  $\varepsilon$  decrece, el valor de  $\tau$  se incrementa o tiende al infinito cuando  $\varepsilon$  es cero.

Una propiedad importante de las funciones cuasiperiódicas es su expansión en serie de Fourier de la siguiente forma

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n e^{i r_n q_n x}, \quad (1.35)$$

donde  $r_n$  son números racionales y  $q_n$  son números reales linealmente independientes, es decir, si  $r_1 q_1 + r_2 q_2 + \dots + r_n q_n = 0$  entonces  $r_1 = r_2 = \dots = r_n = 0$ .

Por otro lado, se puede introducir una función generadora  $F(x_1, x_2, \dots)$  periódica en todas las variables  $x_i$ . Usando el teorema de Fourier, se tiene

$$F(x_1, x_2, \dots) \equiv \sum_{n=1}^{\infty} A_n e^{i r_n q_n x_n}; \quad (1.36)$$

por lo tanto, la función cuasiperiódica  $f(x)$  es la diagonal de  $F(x_1, x_2, \dots)$ ,

$$f(x) = \text{diag}[F(x_1, x_2, \dots)] = F(x, x, \dots). \quad (1.37)$$

En resumen, cualquier función cuasiperiódica puede siempre expresarse como la parte diagonal de una función generadora  $F(x_1, x_2, \dots)$  periódica para cada una de sus variables con períodos posiblemente inconmensurados entre sí [Besicovitch, 1932].

## 1.4.2. Métodos de construcción

Existen tres métodos para construir la red de Fibonacci, ellos son:

**(1) Método de adición.** La secuencia de Fibonacci ( $F_n$ ) de la generación  $n$  es una cadena de elementos  $A$  y  $B$  de acuerdo a la siguiente regla,

$$F_n = F_{n-1} \oplus F_{n-2}, \quad (1.38)$$

donde el símbolo  $\oplus$  es la suma directa denotando la unión de las cadenas de generación  $n-1$  y  $n-2$ . Las condiciones iniciales son  $F_1 = A$  y  $F_2 = AB$ . Se definen los números de Fibonacci [ $N_F(n)$ ] como el número de elementos de la secuencia de Fibonacci en la generación  $n$ . De la ecuación (1.38) se tiene que

$$N_F(n) = N_F(n-1) + N_F(n-2), \quad (1.39)$$

siendo  $N_F(1) = 1$  y  $N_F(2) = 2$ . Entonces, los números de Fibonacci constituyen una sucesión cuya razón de estos números  $N_F(n+1)/N_F(n)$  converge a la razón dorada  $\tau = (\sqrt{5} + 1)/2$ , ya que para  $n \rightarrow \infty$  se tiene

$$x \equiv \frac{N_F(n+1)}{N_F(n)} = \frac{N_F(n) + N_F(n-1)}{N_F(n)} = 1 + \frac{1}{x}, \quad (1.40)$$

es decir,

$$x^2 - x - 1 = 0 \Rightarrow x = \frac{\sqrt{5} + 1}{2} \equiv \tau \quad (1.41)$$

es la solución positiva.

**(2) Método de sustitución.** La secuencia de Fibonacci  $F_{n+1}$  se puede obtener de  $F_n$  aplicando las siguientes reglas de sustitución

$$A \rightarrow AB \quad \text{y} \quad B \rightarrow A. \quad (1.42)$$

De acuerdo con estas reglas se puede obtener la secuencia de Fibonacci mostrada en la Tabla 1.2.

Tabla 1.2 Secuencias de Fibonacci por el método de adición y el de sustitución.

Generación	Método de adición	Método de sustitución
1	$F_1 = A$	$F_1 = A$
2	$F_2 = AB$	$F_2 = AB$
3	$F_3 = AB \oplus A = ABA$	$F_3 = (AB)(A) = ABA$
4	$F_4 = ABA \oplus AB = ABAAB$	$F_4 = (AB)(A)(AB) = ABAAB$
5	$F_5 = ABAAB \oplus ABA = ABAABABA$	$F_5 = (AB)(A)(AB)(AB)(A) = ABAABABA$
6	$F_6 = ABAABABA \oplus ABAAB = \dots$	$F_6 = (AB)(A)(AB)(AB)(A)(AB)(A)(AB) = \dots$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

Se puede probar analíticamente que la secuencia de Fibonacci generada por los dos métodos anteriores son equivalentes definiendo un operador lineal  $\mathcal{G}$ , tal que

$$\mathcal{G}(xy) = \mathcal{G}(x) \oplus \mathcal{G}(y) \quad (1.43)$$

donde  $\mathcal{G}^1(B) = A$  y  $\mathcal{G}^1(A) = AB$ . Aplicando el operador  $\mathcal{G}$  sucesivamente se tiene

$$\begin{aligned} F_1 &= \mathcal{G}^1(B) = A \\ F_2 &= \mathcal{G}^2(B) = \mathcal{G}^1(\mathcal{G}^1(B)) = \mathcal{G}^1(A) = AB \\ F_3 &= \mathcal{G}^3(B) = \mathcal{G}^2(\mathcal{G}^1(B)) = \mathcal{G}^2(A) = \mathcal{G}^1(\mathcal{G}^1(A)) = \mathcal{G}^1(AB) = \mathcal{G}^1(A) \oplus \mathcal{G}^1(B) = ABA, \\ &\vdots \\ F_n &= \mathcal{G}^n(B) = \mathcal{G}^{n-1}(\mathcal{G}^1(B)) = \mathcal{G}^{n-1}(A) = \mathcal{G}^{n-2}(\mathcal{G}^1(A)) = \mathcal{G}^{n-2}(AB) \\ &= \mathcal{G}^{n-2}(A) \oplus \mathcal{G}^{n-2}(B) = \mathcal{G}^{n-2}(\mathcal{G}^1(B)) \oplus \mathcal{G}^{n-2}(B) = \mathcal{G}^{n-1}(B) \oplus \mathcal{G}^{n-2}(B) \end{aligned} \quad (1.44)$$

es decir,  $F_n = F_{n-1} \oplus F_{n-2}$ . Por lo tanto, se tiene que el método de sustitución conduce al de adición.

**(3) Método de proyección.** La red de Fibonacci se puede construir a partir de la proyección de una red rectangular sobre una línea recta [Janot, 1994] cuyo tangente del ángulo  $\theta$  respecto al eje horizontal es igual a la razón dorada  $\tau$ . Una forma equivalente para la construcción de la red de Fibonacci es mediante la proyección de una red rectangular de lados  $l$  y  $l\tau$  sobre una línea recta cuyo tangente del ángulo es igual a uno como se muestra en la Figura 1.10.

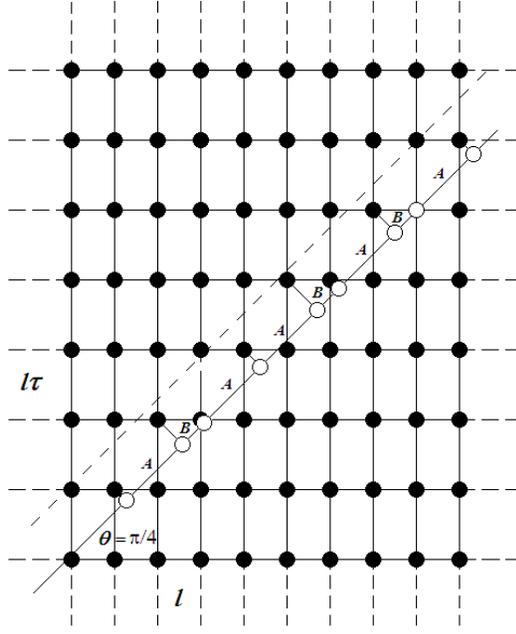


Figura 1.10 Método de proyección, cuando  $\tan(\theta) = 1$  se obtiene la secuencia de Fibonacci.

Los puntos de la red rectangular están determinados por los vectores posición  $\vec{R} = l\hat{x} + m\hat{y}$  donde  $l$  y  $m$  son números enteros,  $\hat{x}$  y  $\hat{y}$  son los vectores unitarios de la red rectangular. Definiendo el operador  $\hat{P}$  que proyecta los puntos de la red hacia la recta de pendiente  $\tau$ , es decir,

$$\hat{P}\hat{x} = \cos(\theta) = \frac{1}{\sqrt{1+\tau^2}} \quad \text{y} \quad \hat{P}\hat{y} = \sin(\theta) = \frac{\tau}{\sqrt{1+\tau^2}}. \quad (1.45)$$

Los puntos dentro de la banda con ancho vertical uno dentro de la línea punteada de la Figura 1.10 satisfacen la condición  $m = \lceil l\tau \rceil$  donde  $\lceil x \rceil$  es la función del entero mayor, es decir, si  $x = 3.2 \Rightarrow \lceil x \rceil = 4$ . Entonces, los puntos proyectados sobre la recta que se encuentran en la banda tienen la forma siguiente

$$R_l = \hat{P}\vec{R} = l\cos(\theta) + \lceil l\tau \rceil \sin(\theta) = \frac{l}{\sqrt{1+\tau^2}} + \frac{\tau \lceil l\tau \rceil}{\sqrt{1+\tau^2}}. \quad (1.46)$$

Definiendo un segmento largo  $A \equiv \cos(\theta) + 2\sin(\theta)$  y un segmento corto  $B \equiv \cos(\theta) + \sin(\theta)$ , las distancias ( $\Delta R_l$ ) entre los puntos proyectados ( $R_l$ ) se muestran en la Tabla 1.3.

Tabla 1.3 La red de Fibonacci generada por el método de proyección.

$L$	$R_l$	$\Delta R_l$	Segmento
1	$\cos(\theta) + 2\sin(\theta)$		
2	$2\cos(\theta) + 4\sin(\theta)$	$\cos(\theta) + 2\sin(\theta)$	$A$
3	$3\cos(\theta) + 5\sin(\theta)$	$\cos(\theta) + \sin(\theta)$	$B$
4	$4\cos(\theta) + 7\sin(\theta)$	$\cos(\theta) + 2\sin(\theta)$	$A$
5	$5\cos(\theta) + 9\sin(\theta)$	$\cos(\theta) + 2\sin(\theta)$	$A$
6	$6\cos(\theta) + 10\sin(\theta)$	$\cos(\theta) + \sin(\theta)$	$B$
7	$7\cos(\theta) + 12\sin(\theta)$	$\cos(\theta) + 2\sin(\theta)$	$A$
8	$8\cos(\theta) + 13\sin(\theta)$	$\cos(\theta) + \sin(\theta)$	$B$
9	$9\cos(\theta) + 15\sin(\theta)$	$\cos(\theta) + 2\sin(\theta)$	$A$
10	$10\cos(\theta) + 17\sin(\theta)$	$\cos(\theta) + 2\sin(\theta)$	$A$
11	$11\cos(\theta) + 18\sin(\theta)$	$\cos(\theta) + \sin(\theta)$	$B$
12	$12\cos(\theta) + 20\sin(\theta)$	$\cos(\theta) + 2\sin(\theta)$	$A$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

Nótese que el método de proyección es una aplicación de la ecuación (1.37) donde la función generadora correspondiente es  $F(x, y)$  y tiene dos períodos, uno de valor unitario y el otro con valor de la razón dorada  $\tau$ .

## Capítulo 2 Transporte Electrónico

La conducción de electrones en sólidos no cristalinos es uno de los grandes retos de la física de materia condensada, ya que combina tanto los fenómenos fuera de equilibrio como el desorden estructural. El transporte electrónico puede ser modelado en distintos niveles de complejidad, desde el modelo de Drude que estudia la conducción electrónica en materiales tales como los metales donde el transporte se fundamenta sobre las ecuaciones dinámicas como las de Newton o de Schrödinger sin ser suficientes para describir el transporte, independiente de que sea clásico o cuántico, debido a que las ecuaciones dinámicas son reversibles mientras que los procesos de transporte son disipativos e irreversibles. La fórmula de Boltzmann que es una aproximación semi-clásica a la función de distribución fuera de equilibrio y el sistema trata de regresar al equilibrio mediante interacciones entre partículas; el formalismo de Landauer donde se introduce el carácter irreversible del fenómeno de transporte expresando la conductancia en términos de las propiedades estáticas de dispersión, donde el sistema está conectado con dos reservorios de electrones que siempre están en equilibrio térmico y finalmente la fórmula de Kubo, la cual se basa en las funciones de correlación temporal corriente-corriente para obtener el tensor de conductividad eléctrica dentro de la aproximación de respuesta lineal en donde se desprecian los efectos del cuadrado del campo eléctrico aplicado cuando dicho campo es mucho menor que el campo interno dentro del sólido.

En general, las propiedades de transporte dependen de los procesos de dispersión microscópicos. Una clasificación de los diferentes regímenes de transporte de acuerdo a sus escalas de longitud típicas son:

*Régimen difusivo.* La definición estándar de este régimen de transporte es  $\lambda_F \ll l \ll L \ll \xi$ , donde  $\lambda_F = h/\sqrt{2m^*E_F}$  es la longitud de onda de Fermi,  $l$  es el camino libre medio,  $L$  es el tamaño del sistema y  $\xi$  es la longitud de localización. En este régimen casi todos los estados son extendidos y la conductancia  $g \propto L^{d-2}$ , donde  $d$  es la dimensión.

*Régimen localizado.* El tamaño del sistema excede la longitud de localización  $L \gg \xi$ . En este régimen la conductancia  $g \ll 1$  y decae exponencialmente con el tamaño del sistema,  $g \propto \exp(-L/\xi)$ , además crece exponencialmente con la temperatura,  $g \propto \exp[-(\Delta/k_B T)^{1/2}]$ , es decir, la existencia de una energía de activación ( $\Delta$ ) y la conducción es por saltos [Ziman, 1979].

*Régimen balístico.* El tamaño del sistema es más pequeño que el camino libre medio  $L < l$ . En consecuencia, los efectos de la interferencia cuántica son particularmente importantes.

En las siguientes secciones se discutirá los diferentes modelos en el transporte electrónico.

### 2.1. Modelo de Amarre Fuerte

Este modelo se basa en las funciones de Wannier, las cuales son transformadas de Fourier de las funciones de Bloch. Las funciones de Wannier son localizadas en las posiciones atómicas

formando un conjunto de funciones ortonormales entre sí. El hamiltoniano de amarre fuerte en la aproximación de vecinos cercanos tiene la siguiente forma,

$$\hat{H} = \sum_j \{ \varepsilon_j |j\rangle \langle j| + t_{j,j+1} |j\rangle \langle j+1| + t_{j,j-1} |j\rangle \langle j-1| \} \quad (2.1)$$

donde la autoenergía  $\varepsilon_j = \langle j | \hat{H} | j \rangle$  del sitio  $j$  es la energía necesaria para colocar un electrón en dicho sitio y  $t_{i,j} = \langle i | \hat{H} | j \rangle$  es la amplitud de probabilidad de salto entre los estados  $|i\rangle$  y  $|j\rangle$ , siendo  $|j\rangle$  la función de Wannier asociada al sitio  $j$ .

Este modelo tiene la virtud de poder incluir el desorden estructural de forma natural a través de variaciones en los parámetros de autoenergía e integrales de salto siguiendo por ejemplo una secuencia cuasiperiódica.

El problema descrito por el hamiltoniano (2.1) puede ser abordado de diversas formas, por ejemplo, mediante diagonalización directa [Sutton, 1994] expresando la función de onda como

$$|\Psi\rangle = \sum_{j=1}^N c_j |j\rangle \quad (2.2)$$

donde  $N$  es el número total de átomos. Usando el hamiltoniano de amarre fuerte, la ecuación de Schrödinger estacionaria tiene la forma

$$[E\mathbf{I} - \mathbf{H}]|\Psi\rangle = 0 \quad (2.3)$$

donde  $\mathbf{H}$  es el hamiltoniano de amarre fuerte escrito en forma matricial sobre las funciones de Wannier,  $\mathbf{I}$  es la matriz identidad de tamaño  $N \times N$  y  $|\Psi\rangle$  es la función de onda cuyas componentes son los coeficientes  $c_j$ .

El problema cuántico definido por el hamiltoniano (2.1) puede estudiarse usando la función de Green [Economou, 2006], mediante la ecuación de Dyson

$$[z\mathbf{I} - \mathbf{H}]\mathbf{G}(z) = \mathbf{I}, \quad (2.4)$$

donde  $z = E + i\eta$ ,  $\mathbf{G}(z)$  es la matriz para la función de Green dada por

$$G_{l,k}(z) = \sum_{\alpha} \frac{\langle l | \alpha \rangle \langle \alpha | k \rangle}{z - E_{\alpha}} \quad (2.5)$$

y  $\hat{H}|\alpha\rangle = E_{\alpha}|\alpha\rangle$  y  $|l\rangle, |k\rangle$  son las funciones de Wannier de los sitios  $l$  y  $k$ , respectivamente.

## 2.2. Modelo de Drude

El modelo de Drude proporciona una descripción del fenómeno de conducción eléctrica en metales dentro de la mecánica clásica. Este modelo considera a un conjunto de electrones con carga eléctrica ( $-e$ ), masa inercial ( $m$ ) y densidad ( $n$ ). Las suposiciones básicas del modelo son [Ashcroft, 1976]:

- 1) Se desprecian las interacciones de electrón-electrón y electrón-ión.
- 2) Las colisiones entre electrones son instantáneas y cambian abruptamente la velocidad de los mismos, es decir, ellos no tienen interacción antes ni después de la colisión.

- 3) La existencia de un tiempo de relajación ( $\tau$ ), el cual está relacionado con el tiempo promedio entre dos colisiones consecutivas.
- 4) Se asume que los electrones alcanzan un equilibrio térmico con sus alrededores a través de las colisiones.

De acuerdo a estas suposiciones Drude desarrolló la primera teoría del transporte electrónico para los metales.

### 2.2.1. Conductividad eléctrica *dc* para metales

En un conductor metálico, si existe  $n$  electrones por unidad de volumen moviéndose a una velocidad promedio ( $\mathbf{v}$ ), la densidad de corriente ( $\mathbf{J}$ ) estará dada por

$$\mathbf{J} = -nev\mathbf{v}. \quad (2.6)$$

En general, los electrones se mueven constantemente en diferentes direcciones con distintas energías cinéticas. En ausencia de campo eléctrico externo, la velocidad promedio es cero y no se espera que exista flujo de corriente neto. En cambio, cuando se aplica un campo eléctrico ( $\mathbf{E}$ ) los electrones se aceleran a partir de cero durante un tiempo típicamente  $\tau$ , ya que las colisiones son instantáneas y sin memoria. Por lo tanto, en sólidos isotrópicos la velocidad promedio de los electrones es

$$\mathbf{v} = -\frac{e}{m}\tau\mathbf{E}. \quad (2.7)$$

De esta manera se deduce la ley de Ohm dentro del modelo de Drude, es decir,

$$\mathbf{J} = \frac{ne^2\tau}{m}\mathbf{E} = \sigma_0\mathbf{E}, \quad (2.8)$$

donde la conductividad eléctrica *dc* ( $\sigma_0$ ) está dada por

$$\sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m}. \quad (2.9)$$

A continuación se discute la conductividad eléctrica *ac* cuando el campo eléctrico aplicado es dependiente del tiempo.

### 2.2.2. Conductividad eléctrica *ac* para metales

En la presencia de un campo eléctrico uniforme en el espacio y dependiente del tiempo  $\mathbf{E}(t) = \text{Re}[\mathbf{E}(\omega)e^{-i\omega t}]$ , el momento promedio de un electrón  $\mathbf{p}(t) = m\mathbf{v} = \text{Re}[\mathbf{p}(\omega)e^{-i\omega t}]$  obedece la siguiente ecuación de movimiento, considerando las colisiones como una fuente de fricción [Ashcroft, 1976],

$$\frac{d\mathbf{p}(t)}{dt} = -\frac{\mathbf{p}(t)}{\tau} - e\mathbf{E}(t). \quad (2.10)$$

La transformada de Fourier de la ecuación (2.10) es

$$-i\omega\mathbf{p}(\omega) = -\frac{\mathbf{p}(\omega)}{\tau} - e\mathbf{E}(\omega). \quad (2.11)$$

De la ecuación (2.6) se sabe que la densidad de corriente  $\mathbf{J} = -ne\mathbf{p}/m$  y en este caso  $\mathbf{J}(t) = \text{Re}[\mathbf{J}(\omega)e^{-i\omega t}]$ , entonces,

$$\mathbf{J}(\omega) = \frac{(ne^2/m)\mathbf{E}(\omega)}{1/\tau - i\omega} = \sigma(\omega)\mathbf{E}(\omega), \quad (2.12)$$

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

$$\sigma(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 - i\omega\tau}, \quad (2.13)$$

siendo  $\sigma_0$  la conductividad eléctrica *dc*,  $\tau$  el tiempo de relajación y  $\omega$  la frecuencia del campo eléctrico aplicado. Cabe mencionar que las expresiones (2.9) y (2.13) siguen usándose ampliamente hoy en día debido a la introducción del tiempo de relajación ( $\tau$ ), el cual contiene toda la información de dispersión múltiple y procesos fuera de equilibrio.

En general, la dinámica y la disipación están entrelazadas en el fenómeno de transporte y para una descripción cuantitativa se requiere de la ecuación de Boltzmann para determinar la función de distribución de probabilidad fuera de equilibrio.

### 2.3. Ecuación de Boltzmann

La función de distribución de Boltzmann fuera de equilibrio,  $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ , determina la probabilidad de encontrar un electrón en la posición  $\mathbf{r}$ , con momento cristalino  $\mathbf{k}$  y en un tiempo  $t$ , cuya derivada total respecto del tiempo es

$$\frac{df}{dt} = \left. \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \right|_{\text{trasl}} + \left. \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \right|_{\text{col}} + \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t}, \quad (2.14)$$

donde  $(\partial f/\partial t)|_{\text{trasl}}$  y  $(\partial f/\partial t)|_{\text{col}}$  son las evoluciones de la función de distribución debido a la traslación en el espacio fase y a las colisiones, respectivamente. La primera derivada parcial en la ecuación (2.14) puede escribirse de la siguiente forma [Ashcroft, 1976]

$$\left. \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \right|_{\text{trasl}} = -\mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) - \frac{d\mathbf{k}}{dt} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t). \quad (2.15)$$

Dado que la interacción electromagnética es la más importante a esta escala de tamaño, la segunda ley de Newton combinada con la fuerza de Lorentz es

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e[\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c} \mathbf{v}(\mathbf{k}) \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t)]. \quad (2.16)$$

Ésta en ausencia del campo magnético se convierte en  $\hbar d\mathbf{k}/dt = -e\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ . La ecuación (2.15) puede expresarse como

$$\left. \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \right|_{\text{trasl}} = -\mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) + \frac{e\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{\hbar} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t). \quad (2.17)$$

La derivada parcial debido a colisiones en la ecuación (2.14) se puede escribir como

$$\left. \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \right|_{col} = \sum_{\mathbf{p}'} \{W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) f(\mathbf{p}') [1 - f(\mathbf{p})] - W(\mathbf{p}, \mathbf{p}') f(\mathbf{p}) [1 - f(\mathbf{p}')] \} \quad (2.18)$$

donde  $W(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$  es la probabilidad de transición entre el estado  $\mathbf{p}$  y el  $\mathbf{p}'$ . El primer término de la suma en la ecuación (2.18) describe los procesos de dispersión en los cuales el electrón sale del estado  $\mathbf{p}$ , mientras que el segundo describe el proceso donde el electrón llega al estado  $\mathbf{p}$  de los otros estados  $\mathbf{p}'$ . El factor  $[1 - f(\mathbf{p})]$  se debe al principio de exclusión de Pauli. Por lo tanto, la ecuación de Boltzmann es una ecuación integro-diferencial y es sumamente difícil de resolver en forma general. Usualmente, se introduce la aproximación del tiempo de relajación ( $\tau$ ), en la ecuación (2.18), es decir

$$\left. \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \right|_{col} = -\frac{f - f_0}{\tau}, \quad (2.19)$$

donde  $f_0$  es la función de distribución del sistema en equilibrio y en general  $\tau$  es función del momento cristalino,  $\tau(\mathbf{k})$ . En dicha aproximación, las colisiones llevan al sistema hacia un equilibrio local termodinámico.

Para el estado estacionario debe cumplirse que  $df/dt = 0$ , si además  $f$  no depende explícitamente del tiempo  $\partial f/\partial t = 0$ . Usando las ecuaciones (2.17) y (2.19), la ecuación (2.14) puede reescribirse como

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) - \frac{e \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{\hbar} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) + \frac{f - f_0}{\tau} = 0. \quad (2.20)$$

En particular, para el análisis de la conductividad eléctrica se parte de un sistema homogéneo, es decir,  $\nabla_{\mathbf{r}} f = 0$ , entonces

$$f = f_0 + \tau \frac{e \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{\hbar} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t). \quad (2.21)$$

La ecuación (2.21) es una ecuación diferencial para  $f$  cuya solución no es sencilla, sin embargo puede visualizarse como una ecuación recursiva, entonces

$$f = f_0 + \tau \frac{e \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{\hbar} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \left( f_0 + \tau \frac{e \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{\hbar} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \right), \quad (2.22)$$

si sólo se conserva términos lineales de campo eléctrico, la ecuación (2.22) puede aproximarse de la siguiente manera

$$f \simeq f_0 + \tau \frac{e \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{\hbar} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f_0. \quad (2.23)$$

Por otra parte, el gradiente de  $f_0$  en  $\mathbf{k}$  puede reescribirse como

$$\nabla_{\mathbf{k}} f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial E} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) = \frac{\partial f_0}{\partial E} \hbar \mathbf{v}(\mathbf{k}). \quad (2.24)$$

Sustituyendo el resultado de la ecuación (2.24) en la ecuación (2.23) se tiene

$$f \simeq f_0 + \tau \left( \frac{\partial f_0}{\partial E} \right) e \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{k}). \quad (2.25)$$

En general, se puede expresar la densidad de corriente eléctrica  $\mathbf{J}$  como [Ashcroft, 1976]

$$\mathbf{J} = -\frac{2}{(2\pi)^3} \int e \mathbf{v} f d^3k. \quad (2.26)$$

Sustituyendo la ecuación (2.25) en la ecuación (2.26), se obtiene

$$\mathbf{J} = -\frac{2e^2}{(2\pi)^3} \int \tau (\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}) \mathbf{E} \left( \frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \frac{dS}{|\nabla_{\mathbf{k}} E|} dE \quad (2.27)$$

donde  $d^3k = dE dS / |\nabla_{\mathbf{k}} E|$ ,  $\int \mathbf{v} f_0 d^3k = 0$  y  $f_0 = \{\exp[(E - E_F) / k_B T] + 1\}^{-1}$ , ya que  $f_0$  es una función par y  $\mathbf{v}$  es una función impar en el espacio  $k$ .

La derivada parcial de  $f_0$  con respecto a la energía  $E$  es aproximadamente una función delta de Dirac, es decir,  $\partial f_0 / \partial E \approx -\delta(E - E_F)$  para  $T \ll T_F$ . Así, la última integral doble se efectúa sobre la superficie de Fermi del sistema y la ecuación (2.27) se reescribe como

$$\mathbf{J} = \frac{2e^2}{(2\pi)^3} \int_{S_F} \tau (\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}) \mathbf{E} \frac{dS}{|\nabla_{\mathbf{k}} E|}. \quad (2.28)$$

Para materiales isotrópicos, si el campo eléctrico aplicado está en la dirección  $x$ ,  $\mathbf{E} = E_x \hat{x}$ , entonces se tiene

$$J_x = \frac{2e^2}{(2\pi)^3} \int_{S_F} \tau v_x^2 \frac{dS}{|\nabla_{\mathbf{k}} E|} E_x = \sigma E_x, \quad (2.29)$$

donde la conductividad eléctrica está dada por

$$\sigma = \frac{2e^2}{(2\pi)^3} \int_{S_F} \tau v_x^2 \frac{dS}{|\nabla_{\mathbf{k}} E|}, \quad (2.30)$$

y para el caso de electrones libres la ecuación (2.30) se reduce a  $\sigma = n e^2 \tau(E_F) / m$ , siendo  $\tau(E_F)$  el tiempo de relajación evaluado sobre nivel de Fermi.

## 2.4. Conductancia de Landauer

La conductancia ( $G$ ) de un sistema tridimensional se relaciona con la conductividad eléctrica ( $\sigma$ ) mediante

$$G = \sigma \frac{W}{L}, \quad (2.31)$$

donde  $L$  es la longitud y  $W$  es el área de la sección transversal del sistema. Para un conductor conectado a dos reservorios su conductancia puede escribirse como [Landauer, 1992]

$$G = \frac{2e^2}{h} M T, \quad (2.32)$$

siendo  $M$  el número de canales transversales y  $T$  la transmitancia, es decir, la probabilidad de que un electrón inyectado por un reservorio sea transmitido al otro. La ecuación (2.32) puede deducirse partiendo de un conductor ideal, es decir, sin colisiones ( $\tau \rightarrow \infty$ ). Si adicionalmente el sistema es homogéneo, la ecuación (2.20) conduce a que la función de distribución es una constante que puede normalizarse como uno ( $f=1$ ). Para un solo canal de conducción la corriente puede calcularse partiendo de la ecuación (2.26) como

$$I = -\frac{2}{2\pi} \int e v f dk = -\frac{e}{\pi} \int \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} dk = -\frac{e}{\pi \hbar} \int_{\mu_1}^{\mu_2} dE = -\frac{e(\mu_2 - \mu_1)}{\pi \hbar}, \quad (2.33)$$

donde  $\mu_1$  y  $\mu_2$  son los potenciales químicos de los reservorios que se conectan al conductor. Ya que  $\mu_2 - \mu_1 = -eV$  siendo  $V$  la diferencia de voltaje aplicado se tiene

$$G = \frac{I}{V} = \frac{2e^2}{h}. \quad (2.34)$$

Si además, el canal tiene obstáculos, el cual transmite electrones con una probabilidad  $T$ , la conductancia se reduce a

$$G = \frac{2e^2}{h} T. \quad (2.35)$$

Si el conductor tiene  $M$  canales transversales, la conductancia del sistema está dada por la ecuación (2.32).

Cabe mencionar que en el formalismo de Landauer la distribución del potencial es una consecuencia del flujo de electrones en el conductor, contrario a lo convencional donde se considera a la corriente como una consecuencia del voltaje aplicado. Ahora, si el potencial se promedia sobre una región suficientemente grande para remover las oscilaciones debido a interferencias, la transmitancia ( $T$ ) en la ecuación (2.32) se remplaza por  $T/(1-T)$  [Imry, 1999], esto es,

$$G = \frac{2e^2}{h} M \frac{T}{1-T} \quad (2.36)$$

La principal diferencia entre las ecuaciones (2.32) y (2.36) radica en el tipo de saturadores que se conectan al sistema. Si éstos son fuentes de corriente entonces se debe de usar la ecuación (2.36). En cambio, si ellos son conductores perfectos entonces la ecuación (2.32) debe ser utilizada [Economou, 2006]. También, se cree que la ecuación (2.36) determina únicamente la conductancia del sistema, mientras que la ecuación (2.32) evalúa la conductancia del sistema junto con sus contactos [Datta, 1995]. En suma, dentro del formalismo de Landauer la conductancia eléctrica es proporcional a la transmitancia del sistema.

## 2.5. Fórmula de Kubo-Greenwood

A mediados de los cincuenta del siglo pasado aparecieron las primeras teorías totalmente cuánticas de la conducción electrónica en sólidos, dentro de las cuales la formulación de Kubo ha sido particularmente importante y ampliamente aceptada. Dicha formulación se basa en la

teoría de respuesta lineal y el teorema de fluctuación-disipación que relaciona los procesos disipativos fuera de equilibrio con las fluctuaciones térmicas en equilibrio [Datta, 1995].

La presencia de un campo eléctrico  $\mathbf{E}$  en un sistema induce una densidad de corriente  $\mathbf{J}$ . La conductividad eléctrica se define como el coeficiente de la parte lineal (en  $\mathbf{E}$ ) de  $\mathbf{J}$  [Economou, 2006]

$$J_\alpha(\mathbf{r}, t) = \int_0^\infty dt' \int d^3r' \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t') E_\beta(\mathbf{r}', t-t') \quad (2.37)$$

donde  $\sigma_{\alpha\beta}$  es el tensor de conductividad eléctrica, los subíndices  $\alpha$  y  $\beta$  denotan las coordenadas cartesianas y una suma está implícita sobre el índice repetido  $\beta$ .

Para materiales isotrópicos suponiendo que  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{J}$  están a lo largo de la dirección  $x$ , entonces se necesita considerar sólo el término  $\sigma_{xx}$  en la conductividad eléctrica, por simplicidad se omiten los subíndices. Usualmente  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{J}$  varían lentamente en distancias del orden de  $l_0$ , donde  $l_0$  está determinado por la condición  $\sigma \approx 0$  para  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \gg l_0$ . En este caso se puede realizar la integración sobre  $\mathbf{r}'$  y un promedio sobre  $\mathbf{r}$  para obtener

$$J(t) = \int_0^\infty dt' \sigma(t') E(t-t'), \quad (2.38)$$

donde

$$\sigma(t') = \frac{1}{\Omega} \int \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t'), \quad (2.39)$$

siendo  $\Omega$  el volumen del sistema. Considerando la transformada de Fourier de (2.39), se tiene

$$\sigma(\omega) = \int_0^\infty dt' \sigma(t') e^{i\omega t'}. \quad (2.40)$$

Si  $E(t)$  está dada por

$$E(t) = F e^{-i\omega t} + F^* e^{i\omega t}, \quad (2.41)$$

se tiene de las ecuaciones (2.38) y (2.39) que

$$J(t) = \sigma(\omega) F e^{-i\omega t} + \sigma(-\omega) F^* e^{i\omega t}. \quad (2.42)$$

Para que  $J(t)$  sea real se necesita que  $\sigma(-\omega) = \sigma^*(-\omega)$ , donde se sigue que la parte real (imaginaria),  $\sigma_1$  ( $\sigma_2$ ), de  $\sigma$  es una función par (impar) de  $\omega$ , las cuales son mutuamente dependientes a través de las relaciones del tipo Kramers-Kronig [Economou, 2006].

A continuación, se procede a obtener una expresión cuántica para la parte real de la conductividad  $\sigma_1(\omega)$  dentro de la aproximación partícula independiente y para  $\omega \neq 0$ . El promedio temporal de la potencia consumida por el sistema es

$$P = \frac{\Omega}{\Theta} \int_0^\Theta dt E(t) J(t), \quad (2.43)$$

donde  $\Theta$  es el periodo del campo eléctrico externo  $E(t)$ . Usando las ecuaciones (2.41) y (2.42) se tiene

$$P = \Omega |F|^2 [\sigma(\omega) + \sigma(-\omega)] = 2\Omega |F|^2 \sigma_1(\omega). \quad (2.44)$$

Por otro lado, la potencia promedio  $P$  puede calcularse multiplicando la energía [ $\varepsilon_{\alpha\beta} \equiv \hbar\omega_{\alpha\beta} = E_\beta - E_\alpha > 0$ ] que absorbe el sistema durante la transición  $|\alpha\rangle \rightarrow |\beta\rangle$  por la razón de transición  $p_{\alpha\beta}$ , y sumando sobre todas las posibilidades ( $|\alpha\rangle \neq |\beta\rangle$ )

$$P = \sum_{\alpha,\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} p_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} (p_{\alpha\beta} - p_{\beta\alpha}). \quad (2.45)$$

La probabilidad por unidad de tiempo  $p_{\alpha\beta}$  es

$$p_{\alpha\beta} = f_\alpha (1 - f_\beta) W_{\alpha\beta}, \quad (2.46)$$

donde  $f_\alpha = f(\varepsilon_\alpha)$  es la distribución de Fermi-Dirac y  $W_{\alpha\beta}$  es la probabilidad de transición, la cual puede ser obtenida por la regla de oro de Fermi [Sakuari, 1994]. Considerando la perturbación  $\hat{H}' = e E(t)x$  y la ecuación (2.41), entonces

$$W_{\alpha\beta} = \frac{2\pi e^2}{\hbar} |F|^2 |\langle \alpha | x | \beta \rangle|^2 \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_{\alpha\beta}). \quad (2.47)$$

Combinando las ecuaciones (2.45)-(2.47) y comparando con la ecuación (2.44) se obtiene

$$\sigma_1(\omega) = \frac{2\pi e^2}{\Omega} \sum_{\alpha,\beta} |\langle \alpha | x | \beta \rangle|^2 \omega_{\alpha\beta} (f_\alpha - f_\beta) \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_{\alpha\beta}) \quad (2.48)$$

donde se introduce explícitamente un factor de 2 debido al espín de los electrones [Kubo, 1956][Greenwood, 1958]. Se puede expresar la ecuación (2.48) en términos de los elementos de matriz del operador,

$$\hat{p}_x = m \frac{dx}{dt} = \frac{im}{\hbar} [\hat{H}x - x\hat{H}], \quad (2.49)$$

es decir,

$$\langle \alpha | \hat{p}_x | \beta \rangle = im \omega_{\alpha\beta} \langle \alpha | x | \beta \rangle. \quad (2.50)$$

Por lo tanto, al sustituir la ecuación (2.50) en (2.48) se tiene

$$\sigma_1(\omega) = \frac{2\pi e^2}{\Omega m^2} \sum_{\alpha,\beta} |\langle \alpha | \hat{p}_x | \beta \rangle|^2 \frac{(f_\alpha - f_\beta)}{\omega_{\alpha\beta}} \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_{\alpha\beta}) \quad (2.51)$$

Con el objetivo de expresar la conductividad en términos de la función de Green, se reescribe la ecuación (2.51) como

$$\sigma_1(\omega) = \frac{2\pi e^2}{\Omega m^2} \sum_{\alpha,\beta} |\langle \alpha | \hat{p}_x | \beta \rangle|^2 \frac{[f(E_\alpha) - f(E_\beta)]}{\omega_{\alpha\beta}} \delta(\hbar\omega - E_\beta + E_\alpha). \quad (2.52)$$

Utilizando las propiedades de la función delta  $\delta(x)$ , se tiene

$$\sigma_1(\omega) = \frac{2\pi e^2}{\Omega m^2} \int_{-\infty}^{\infty} dE \sum_{\alpha,\beta} \langle \alpha | \hat{p}_x | \beta \rangle \langle \beta | \hat{p}_x | \alpha \rangle \frac{[f(E_\alpha) - f(E_\beta)]}{\omega_{\alpha\beta}} \delta(E - E_\alpha) \delta(E + \hbar\omega - E_\beta). \quad (2.53)$$

Expresando la suma de la integral en (2.53) de la forma

$$\begin{aligned}
\sum_{\alpha,\beta} [\dots] &= \sum_{\alpha,\beta,\gamma} \langle \beta | \gamma \rangle \langle \gamma | \hat{p}_x | \alpha \rangle \frac{[f(E_\alpha) - f(E_\beta)]}{\omega_{\alpha\beta}} \delta(E - E_\alpha) \langle \alpha | \hat{p}_x | \beta \rangle \delta(E + \hbar\omega - E_\beta) \\
&= \sum_{\alpha,\beta,\gamma} \frac{[f(E_\alpha) - f(E_\beta)]}{\omega_{\alpha\beta}} \langle \gamma | \hat{p}_x | \alpha \rangle \delta(E - E_\alpha) \langle \alpha | \hat{p}_x | \beta \rangle \delta(E + \hbar\omega - E_\beta) \langle \beta | \gamma \rangle
\end{aligned} \tag{2.54}$$

y utilizando la propiedad (A.11) de la función de Green [Economou, 2006], se reescribe la ecuación (2.53) con  $z = E + i\eta$  como

$$\sigma_1(\mu, \omega, T) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{2e^2 \hbar}{\pi \Omega m^2} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{f(E) - f(E + \hbar\omega)}{\hbar\omega} \text{Tr}[\hat{p}_x \text{Im} G^+(z + \hbar\omega) \hat{p}_x \text{Im} G^+(z)]. \tag{2.55}$$

Esta última expresión se conoce como la fórmula de Kubo-Greenwood, donde la información del sistema se introduce a través de la función de Green.

En el límite de  $\omega \rightarrow 0$ , la conductividad es directa (*dc*) y la ecuación (2.55) toma la forma

$$\sigma(\mu, 0, T) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{2e^2 \hbar}{\pi \Omega m^2} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left( -\frac{\partial f}{\partial E} \right) \text{Tr}[\hat{p}_x \text{Im} G^+(z) \hat{p}_x \text{Im} G^+(z)]. \tag{2.56}$$

Para el caso de  $T \rightarrow 0$ , la derivada parcial de  $f$  con respecto a la energía  $E$  es aproximadamente una función delta de Dirac, es decir,  $\partial f / \partial E \approx -\delta(E - \mu)$  y la ecuación (2.56) será

$$\sigma(\mu, 0, 0) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{2e^2 \hbar}{\pi \Omega m^2} \text{Tr}[\hat{p}_x \text{Im} G^+(\mu + i\eta) \hat{p}_x \text{Im} G^+(\mu + i\eta)]. \tag{2.57}$$

donde  $\Omega$  es el volumen del sistema. Esta fórmula, para el caso de multigrado de libertad por sitio, es el punto de partida del análisis de la conductividad electrónica *dc* en los nanoalambres cuasiperiódicos que se discute con detalle en el capítulo 4.1.

En el límite de  $\omega \rightarrow 0$  y  $\mu = 0$ , la conductividad *dc* dentro de la banda permitida de energías para una cadena periódica es [Sánchez, 2001]

$$\sigma_p = \frac{e^2 a}{\pi \hbar} (N - 1) \tag{2.58}$$

la cual conduce una conductancia finita  $\mathfrak{g}_0 \equiv \sigma_p / (N - 1)a = 2e^2 / h$  que fue confirmada experimentalmente [De Picciotto, 2001].

## Capítulo 3 Método de Renormalización Matricial

Como se vio en el Capítulo 1, la secuencia de Fibonacci es un ejemplo representativo de los sistemas cuasiperiódicos y se sabe que su espectro electrónico es un conjunto de cantor con medida de Lebesgue cero [Kohmoto, 1984] con sus correspondientes estados propios siendo críticos. Así pues, no se espera que la conducción electrónica sea balística, como en los sistemas periódicos, ni difusiva como en los aleatoriamente desordenados. El transporte electrónico en redes cuasiperiódicas es un problema abierto y de gran interés. Además, los sistemas cuasiperiódicos son muy sensibles a defectos locales, por lo que, es importante estudiar sistemas de tamaño macroscópico para minimizar los efectos de frontera. Por lo cual, la técnica más apropiada para estudiar los sistemas cuasiperiódicos a gran escala es el grupo de renormalización en el espacio real debido a la ausencia de un teorema general de tipo Bloch para estos casos. En esta tesis se ha desarrollado el método del grupo de renormalización matricial tanto para la densidad de estados  $[DOS(E)]$  como para la conductividad eléctrica  $[\sigma(E)]$  a través de la fórmula de Kubo-Greenwood en un nanoalambre de Fibonacci dentro del problema de enlaces.

### 3.1. Ideas Fundamentales

La idea de renormalización fue introducida originalmente por Leo P. Kadanoff a través de bloques, es decir, agrupar un número de átomos que forma un bloque y después juntar un número de bloques para formar un nuevo bloque; así sucesivamente hasta poder abordar un sistema macroscópico de átomos [Kadanoff, 1967]. Posteriormente esta idea fue generalizada por Kenneth Wilson para analizar los fenómenos críticos [Wilson, 1971], siendo galardonado por ello con el Premio Nobel de Física en 1982.

Tabla 3.1 Número de enlaces para una cadena de Fibonacci.

Generación	No. Enlaces	Generación	No. Enlaces
1	1	19	6765
2	2	20	10946
3	3	21	17711
4	5	22	28657
5	8	23	46368
6	13	24	75025
7	21	25	121393
8	34	26	196418
9	55	27	317811
10	89	28	514229
11	144	29	832040
12	233	30	1346269
13	377	31	2178309
14	610	32	3524578
15	987	33	5702887
16	1597	34	9227465
17	2584	35	14930352
18	4181	36	24157817

En general, el método de renormalización en el espacio real consiste en reducir el número de grados de libertad de un sistema conservando la información física contenida en él para poder describir sus propiedades macroscópicas. En la Tabla 3.1 se resume el número de enlaces para las primeras 36 generaciones del problema de enlaces, donde el número de átomos es siempre el número de enlaces más uno.

A continuación se discute en detalle el proceso de renormalización en el espacio real para la generación 2 de un nanoalambre de Fibonacci con 2 átomos por plano, con un total de 6 átomos que interactúan entre sí a primeros vecinos como se muestra en la Figura 3.1, eliminando las coordenadas de los átomos interiores de la ecuación de Dyson.

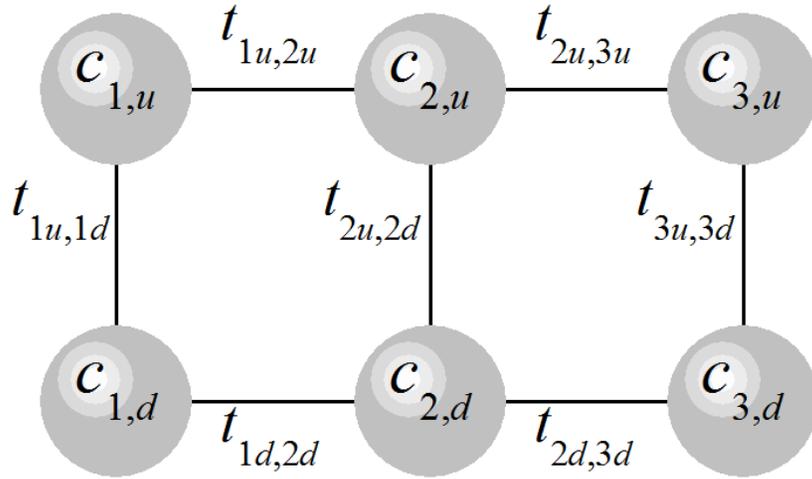


Figura 3.1 Representación esquemática de una red tipo escalera de 6 átomos, donde las cadenas superior e inferior se identifican, respectivamente, por  $u$  y  $d$ .

La función de Green en forma matricial para este sistema puede escribirse como

$$\mathbf{G}(z) = \begin{pmatrix} G_{1u,1u}^{(2)}(z) & G_{1u,1d}^{(2)}(z) & G_{1u,2u}^{(2)}(z) & G_{1u,2d}^{(2)}(z) & G_{1u,3u}^{(2)}(z) & G_{1u,3d}^{(2)}(z) \\ G_{1d,1u}^{(2)}(z) & G_{1d,1d}^{(2)}(z) & G_{1d,2u}^{(2)}(z) & G_{1d,2d}^{(2)}(z) & G_{1d,3u}^{(2)}(z) & G_{1d,3d}^{(2)}(z) \\ G_{2u,1u}^{(2)}(z) & G_{2u,1d}^{(2)}(z) & G_{2u,2u}^{(2)}(z) & G_{2u,2d}^{(2)}(z) & G_{2u,3u}^{(2)}(z) & G_{2u,3d}^{(2)}(z) \\ G_{2d,1u}^{(2)}(z) & G_{2d,1d}^{(2)}(z) & G_{2d,2u}^{(2)}(z) & G_{2d,2d}^{(2)}(z) & G_{2d,3u}^{(2)}(z) & G_{2d,3d}^{(2)}(z) \\ G_{3u,1u}^{(2)}(z) & G_{3u,1d}^{(2)}(z) & G_{3u,2u}^{(2)}(z) & G_{3u,2d}^{(2)}(z) & G_{3u,3u}^{(2)}(z) & G_{3u,3d}^{(2)}(z) \\ G_{3d,1u}^{(2)}(z) & G_{3d,1d}^{(2)}(z) & G_{3d,2u}^{(2)}(z) & G_{3d,2d}^{(2)}(z) & G_{3d,3u}^{(2)}(z) & G_{3d,3d}^{(2)}(z) \end{pmatrix}, \quad (3.1)$$

$$= \begin{pmatrix} \mathbf{g}_{1,1}^{(2)}(z) & \mathbf{g}_{1,2}^{(2)}(z) & \mathbf{g}_{1,3}^{(2)}(z) \\ \mathbf{g}_{2,1}^{(2)}(z) & \mathbf{g}_{2,2}^{(2)}(z) & \mathbf{g}_{2,1}^{(2)}(z) \\ \mathbf{g}_{3,1}^{(2)}(z) & \mathbf{g}_{3,2}^{(2)}(z) & \mathbf{g}_{3,3}^{(2)}(z) \end{pmatrix}$$

donde el superíndice entre paréntesis indica la generación de Fibonacci, en el subíndice de  $G_{iu,jd}^{(2)}(z)$   $i$  y  $j$  representan las celdas mientras que  $u$  (*up*) y  $d$  (*down*) señala la posición atómica dentro de las celdas y  $z = E + i\eta$ . Asimismo, la matriz  $\mathbf{G}(z)$  puede expresarse como una matriz de las submatrices

$$\mathbf{g}_{i,j}^{(2)}(z) \equiv \begin{pmatrix} G_{iu,ju}^{(2)}(z) & G_{iu,jd}^{(2)}(z) \\ G_{id,ju}^{(2)}(z) & G_{id,jd}^{(2)}(z) \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

Por otro lado, el hamiltoniano en forma matricial es

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{1u} & t_{1u,1d} & t_{1u,2u} & t_{1u,2d} & 0 & 0 \\ t_{1d,1u} & \varepsilon_{1d} & t_{1d,2u} & t_{1d,2d} & 0 & 0 \\ t_{2u,1u} & t_{2u,1d} & \varepsilon_{2u} & t_{2u,2d} & t_{2u,3u} & t_{2u,3d} \\ t_{2d,1u} & t_{2d,1d} & t_{2d,2u} & \varepsilon_{2d} & t_{2d,3u} & t_{2d,3d} \\ 0 & 0 & t_{3u,2u} & t_{3u,2d} & \varepsilon_{3u} & t_{3u,3d} \\ 0 & 0 & t_{3d,2u} & t_{3d,2d} & t_{3d,3u} & \varepsilon_{3d} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\varepsilon}_1 & \mathbf{t}_{1,2} & \mathbf{0} \\ \mathbf{t}_{2,1} & \boldsymbol{\varepsilon}_2 & \mathbf{t}_{2,3} \\ \mathbf{0} & \mathbf{t}_{3,2} & \boldsymbol{\varepsilon}_3 \end{pmatrix}, \quad (3.3)$$

donde las autoenergías y las interacciones matriciales están dadas por

$$\boldsymbol{\varepsilon}_j \equiv \begin{pmatrix} \varepsilon_{ju} & t_{ju,jd} \\ t_{jd,ju} & \varepsilon_{jd} \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \mathbf{t}_{i,j} \equiv \begin{pmatrix} t_{iu,ju} & t_{iu,jd} \\ t_{id,ju} & t_{id,jd} \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

En particular para el caso electrónico  $\varepsilon_{ju} = \varepsilon_{jd} = 0$ . Entonces, la ecuación de Dyson en esta forma de submatrices es

$$(z\mathbf{I} - \mathbf{H})\mathbf{G}(z) = \begin{pmatrix} z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_1 & -\mathbf{t}_{1,2} & \mathbf{0} \\ -\mathbf{t}_{2,1} & z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_2 & -\mathbf{t}_{2,3} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{t}_{3,2} & z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{g}_{1,1}^{(2)}(z) & \mathbf{g}_{1,2}^{(2)}(z) & \mathbf{g}_{1,3}^{(2)}(z) \\ \mathbf{g}_{2,1}^{(2)}(z) & \mathbf{g}_{2,2}^{(2)}(z) & \mathbf{g}_{2,3}^{(2)}(z) \\ \mathbf{g}_{3,1}^{(2)}(z) & \mathbf{g}_{3,2}^{(2)}(z) & \mathbf{g}_{3,3}^{(2)}(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

donde  $\mathbf{t}_{j,i} = [\mathbf{t}_{i,j}]^T$  se deriva de la simetría del hamiltoniano.

Al desarrollar la multiplicación de las matrices en la ecuación (3.5), se obtiene las siguientes 9 ecuaciones matriciales

$$(z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_1)\mathbf{g}_{1,l}^{(2)}(z) - \mathbf{t}_{1,2}\mathbf{g}_{2,l}^{(2)}(z) = \delta_{1,l}\mathbf{I}, \quad (3.6)$$

$$(z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_2)\mathbf{g}_{2,l}^{(2)}(z) - \mathbf{t}_{2,1}\mathbf{g}_{1,l}^{(2)}(z) - \mathbf{t}_{2,3}\mathbf{g}_{3,l}^{(2)}(z) = \delta_{2,l}\mathbf{I}, \quad (3.7)$$

$$(z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_3)\mathbf{g}_{3,l}^{(2)}(z) - \mathbf{t}_{3,2}\mathbf{g}_{2,l}^{(2)}(z) = \delta_{3,l}\mathbf{I}, \quad (3.8)$$

donde  $l = 1, 2$  ó  $3$  y  $\delta_{i,j}$  es la delta de Kronecker. Al sustituir la ecuación (3.7) en las ecuaciones (3.6) y (3.8) se obtienen

$$[z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_1 - \mathbf{t}_{1,2}(z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_2)^{-1}\mathbf{t}_{2,1}]\mathbf{g}_{1,l}^{(2)}(z) - \mathbf{t}_{1,2}(z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_2)^{-1}\mathbf{t}_{2,3}\mathbf{g}_{3,l}^{(2)}(z) = \delta_{1,l}\mathbf{I} + \mathbf{t}_{1,2}(z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_2)^{-1}\delta_{2,l}\mathbf{I}, \quad (3.9)$$

$$[z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_3 - \mathbf{t}_{3,2}(z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_2)^{-1}\mathbf{t}_{2,3}]\mathbf{g}_{3,l}^{(2)}(z) - \mathbf{t}_{3,2}(z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_2)^{-1}\mathbf{t}_{2,1}\mathbf{g}_{1,l}^{(2)}(z) = \delta_{3,l}\mathbf{I} + \mathbf{t}_{3,2}(z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_2)^{-1}\delta_{2,l}\mathbf{I}, \quad (3.10)$$

donde  $l$  puede ser únicamente 1 o 3 y por lo que  $\delta_{2,l} = 0$ . De esta forma, la ecuación (3.5) se puede reescribir como

$$\begin{pmatrix} z\mathbf{I} - \mathbf{E}_L(2) & -\mathbf{t}_{1,3}(2) \\ -\mathbf{t}_{3,1}(2) & z\mathbf{I} - \mathbf{E}_R(2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{g}_{1,1}^{(2)}(z) & \mathbf{g}_{1,3}^{(2)}(z) \\ \mathbf{g}_{3,1}^{(2)}(z) & \mathbf{g}_{3,3}^{(2)}(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix}, \quad (3.11)$$

donde las submatrices son

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_L(2) &= \boldsymbol{\varepsilon}_1 + \mathbf{t}_{1,2}(z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_2)^{-1}\mathbf{t}_{2,1}, & \mathbf{E}_R(2) &= \boldsymbol{\varepsilon}_3 + \mathbf{t}_{3,2}(z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_2)^{-1}\mathbf{t}_{2,3}, \\ \mathbf{t}_{1,3}(2) &= \mathbf{t}_{1,2}(z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_2)^{-1}\mathbf{t}_{2,3} & \text{y} & \quad \mathbf{t}_{3,1}(2) = \mathbf{t}_{3,2}(z\mathbf{I} - \boldsymbol{\varepsilon}_2)^{-1}\mathbf{t}_{2,1}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Así pues se eliminaron las coordenadas de los átomos ubicados en el plano interior, quedando expresados a través de las nuevas coordenadas extremo en la ecuación de Dyson (3.11). En general, este proceso se puede realizar para la generación  $n$  de un nanoalambre de Fibonacci con  $l$  átomos por celda.

### 3.2. Formulación para la Densidad de Estados

Para los sistemas no cristalinos el concepto del espacio recíproco carece de utilidad, ya que no existe simetría traslacional. En consecuencia, una de las formas de estudiar dichos sistemas es a través de la densidad de estados como función de la energía [DOS( $E$ )], la cual es una medida de la degeneración en cada energía. Usando la ecuación (A.13), DOS( $E$ ) se relaciona con la función de Green de la forma

$$\text{DOS}(E, n) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left[ \text{Im Tr } \mathbf{G}^{(n)}(z) \right] = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left[ \text{Im} \sum_j G_{j,j}^{(n)}(E + i\eta) \right], \quad (3.13)$$

donde  $G_{j,j}^{(n)}(z)$  son los elementos diagonales de la función de Green. Para el caso de un nanoalambre con  $N_{\perp} \times N_{\perp}$  átomos por celda,  $\text{Tr } \mathbf{G}^{(n)}(z)$  tiene la forma

$$\text{Tr } \mathbf{G}^{(n)}(z) = \sum_{j,\alpha} G_{j\alpha,j\alpha}^{(n)}(z) = \sum_j \text{Tr } \mathbf{g}_{j,j}^{(n)}(z) = \text{Tr} \sum_j \mathbf{g}_{j,j}^{(n)}(z) \quad (3.14)$$

En la ecuación (3.14) el índice  $j$  es la celda y  $\alpha$  indica la posición atómica dentro de la celda. En general, se tiene

$$\text{Tr} \sum_j \mathbf{g}_{j,j}^{(n)}(z) = \text{Tr} [\mathbf{A}(z, n) \mathbf{g}_{LL}^{(n)}(z) + \mathbf{B}(z, n) \mathbf{g}_{RR}^{(n)}(z) + \mathbf{C}(z, n) \mathbf{g}_{LR}^{(n)}(z) + \mathbf{D}(z, n) \mathbf{g}_{RL}^{(n)}(z) + \mathbf{F}(z, n)] \quad (3.15)$$

siendo  $\mathbf{g}_{j,j}^{(n)}(z)$ ,  $\mathbf{A}(z, n)$ ,  $\mathbf{B}(z, n)$ ,  $\mathbf{C}(z, n)$ ,  $\mathbf{D}(z, n)$  y  $\mathbf{F}(z, n)$  matrices de  $N_{\perp} \times N_{\perp}$  elementos. En particular, para el problema de enlaces se tiene

$$\sum_j \mathbf{g}_{j,j}^{(n)}(z) = \sum_j \mathbf{g}_{j,j}^{(n-1)}(z) + \sum_j \mathbf{g}_{j,j}^{(n-2)}(z) - \mathbf{g}_{M,M}^{(n)}(z) \quad (3.16)$$

donde

$$\begin{aligned} \sum_j \mathbf{g}_{j,j}^{(n-1)}(z) &= \mathbf{A}(z, n-1) \mathbf{g}_{LL}^{(n-1)}(z) + \mathbf{B}(z, n-1) \mathbf{g}_{RR}^{(n-1)}(z) + \mathbf{C}(z, n-1) \mathbf{g}_{LR}^{(n-1)}(z) + \mathbf{D}(z, n-1) \mathbf{g}_{RL}^{(n-1)}(z) + \mathbf{F}(z, n-1) \\ &= \mathbf{A}(z, n-1) \mathbf{g}_{LL}^{(n)}(z) + \mathbf{B}(z, n-1) \mathbf{g}_{MM}^{(n)}(z) + \mathbf{C}(z, n-1) \mathbf{g}_{LM}^{(n)}(z) + \mathbf{D}(z, n-1) \mathbf{g}_{ML}^{(n)}(z) + \mathbf{F}(z, n-1), \end{aligned} \quad (3.17)$$

$$\begin{aligned} \sum_j \mathbf{g}_{j,j}^{(n-2)}(z) &= \mathbf{A}(z, n-2) \mathbf{g}_{LL}^{(n-2)}(z) + \mathbf{B}(z, n-2) \mathbf{g}_{RR}^{(n-2)}(z) + \mathbf{C}(z, n-2) \mathbf{g}_{LR}^{(n-2)}(z) + \mathbf{D}(z, n-2) \mathbf{g}_{RL}^{(n-2)}(z) + \mathbf{F}(z, n-2) \\ &= \mathbf{A}(z, n-2) \mathbf{g}_{MM}^{(n)}(z) + \mathbf{B}(z, n-2) \mathbf{g}_{RR}^{(n)}(z) + \mathbf{C}(z, n-2) \mathbf{g}_{MR}^{(n)}(z) + \mathbf{D}(z, n-2) \mathbf{g}_{RM}^{(n)}(z) + \mathbf{F}(z, n-2). \end{aligned} \quad (3.18)$$

La ecuación de Dyson,  $(z\mathbf{I} - \mathbf{H})\mathbf{G}^{(n)}(z) = \mathbf{I}$ , para la generación  $n$  es

$$\begin{pmatrix} z\mathbf{I}-\mathbf{E}_L(z,n-1) & -\mathbf{t}(z,n-1) & \mathbf{0} \\ -[\mathbf{t}(z,n-1)]^T & z\mathbf{I}-\mathbf{E}_M(z,n) & -\mathbf{t}(z,n-2) \\ \mathbf{0} & -[\mathbf{t}(z,n-2)]^T & z\mathbf{I}-\mathbf{E}_R(z,n-2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z) & \mathbf{g}_{L,M}^{(n)}(z) & \mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z) \\ \mathbf{g}_{M,L}^{(n)}(z) & \mathbf{g}_{M,M}^{(n)}(z) & \mathbf{g}_{M,R}^{(n)}(z) \\ \mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z) & \mathbf{g}_{R,M}^{(n)}(z) & \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z) \end{pmatrix} = \mathbf{I}. \quad (3.19)$$

La ecuación (3.19) puede reescribirse como

$$[z\mathbf{I}-\mathbf{E}_L(z,n-1)]\mathbf{g}_{L,l}^{(n)}(z) - \mathbf{t}(z,n-1)\mathbf{g}_{M,l}^{(n)}(z) = \delta_{L,l}\mathbf{I}, \quad (3.20)$$

$$[z\mathbf{I}-\mathbf{E}_M(z,n)]\mathbf{g}_{M,l}^{(n)}(z) - [\mathbf{t}(z,n-1)]^T\mathbf{g}_{L,l}^{(n)}(z) - \mathbf{t}(z,n-2)\mathbf{g}_{R,l}^{(n)}(z) = \delta_{M,l}\mathbf{I}, \quad (3.21)$$

$$[z\mathbf{I}-\mathbf{E}_R(z,n-2)]\mathbf{g}_{R,l}^{(n)}(z) - [\mathbf{t}(z,n-2)]^T\mathbf{g}_{M,l}^{(n)}(z) = \delta_{R,l}\mathbf{I} \quad (3.22)$$

donde  $l = L, R$  o  $M$  y la autoenergía del sitio medio proveniente de las renormalizaciones de las generaciones  $n-1$  y  $n-2$  es

$$\mathbf{E}_M(z,n) = \mathbf{E}_R(z,n-1) + \mathbf{E}_L(z,n-2). \quad (3.23)$$

Las tres ecuaciones de (3.21) útiles para la renormalización son

$$[z\mathbf{I}-\mathbf{E}_M(z,n)]\mathbf{g}_{M,L}^{(n)}(z) - [\mathbf{t}(z,n-1)]^T\mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z) - \mathbf{t}(z,n-2)\mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z) = \mathbf{0}, \quad (3.24)$$

$$[z\mathbf{I}-\mathbf{E}_M(z,n)]\mathbf{g}_{M,M}^{(n)}(z) - [\mathbf{t}(z,n-1)]^T\mathbf{g}_{L,M}^{(n)}(z) - \mathbf{t}(z,n-2)\mathbf{g}_{R,M}^{(n)}(z) = \mathbf{I}, \quad (3.25)$$

$$[z\mathbf{I}-\mathbf{E}_M(z,n)]\mathbf{g}_{M,R}^{(n)}(z) - [\mathbf{t}(z,n-1)]^T\mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z) - \mathbf{t}(z,n-2)\mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z) = \mathbf{0}. \quad (3.26)$$

En particular, las ecuaciones (3.24) y (3.26) se pueden reescribir como

$$\mathbf{g}_{M,L}^{(n)}(z) = \boldsymbol{\theta}_1(z,n)\mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z) + \boldsymbol{\theta}_2(z,n)\mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z), \quad (3.27)$$

$$\mathbf{g}_{M,R}^{(n)}(z) = \boldsymbol{\theta}_1(z,n)\mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z) + \boldsymbol{\theta}_2(z,n)\mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z), \quad (3.28)$$

donde  $\boldsymbol{\theta}_1(z,n) \equiv \boldsymbol{\theta}_0(z,n)[\mathbf{t}(z,n-1)]^T$ ,  $\boldsymbol{\theta}_2(z,n) \equiv \boldsymbol{\theta}_0(z,n)\mathbf{t}(z,n-2)$  y  $\boldsymbol{\theta}_0(z,n) \equiv [z\mathbf{I}-\mathbf{E}_M(z,n)]^{-1}$ . Dado que  $\mathbf{H}$  y  $\mathbf{G}^{(n)}(z)$  son matrices simétricas como se muestra en el Apéndice A, sus submatrices tienen la siguiente propiedad de simetría

$$\mathbf{t}_{j,i} = [\mathbf{t}_{i,j}]^T \quad \text{y} \quad \mathbf{g}_{i,j}^{(n)}(z) = [\mathbf{g}_{j,i}^{(n)}(z)]^T, \quad (3.29)$$

es decir,  $\mathbf{g}_{L,M}^{(n)}(z) = [\mathbf{g}_{M,L}^{(n)}(z)]^T$ ,  $\mathbf{g}_{R,M}^{(n)}(z) = [\mathbf{g}_{M,R}^{(n)}(z)]^T$  y  $\mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z) = [\mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z)]^T$ . Así

$$\mathbf{g}_{L,M}^{(n)}(z) = [\mathbf{g}_{M,L}^{(n)}(z)]^T = \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z)[\boldsymbol{\theta}_1(z,n)]^T + \mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z)[\boldsymbol{\theta}_2(z,n)]^T, \quad (3.30)$$

$$\mathbf{g}_{R,M}^{(n)}(z) = [\mathbf{g}_{M,R}^{(n)}(z)]^T = \mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z)[\boldsymbol{\theta}_1(z,n)]^T + \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z)[\boldsymbol{\theta}_2(z,n)]^T. \quad (3.31)$$

Al sustituir estas ecuaciones en (3.25) se tiene que

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_{M,M}^{(n)}(z) &= \boldsymbol{\theta}_1(z,n)\mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z)[\boldsymbol{\theta}_1(z,n)]^T + \boldsymbol{\theta}_1(z,n)\mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z)[\boldsymbol{\theta}_2(z,n)]^T + \boldsymbol{\theta}_2(z,n)\mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z)[\boldsymbol{\theta}_1(z,n)]^T \\ &\quad + \boldsymbol{\theta}_2(z,n)\mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z)[\boldsymbol{\theta}_2(z,n)]^T + \boldsymbol{\theta}_0(z,n). \end{aligned} \quad (3.32)$$

Sustituyendo las ecuaciones (3.27)-(3.32) en (3.17) y (3.18), el resultado a su vez en (3.16) se obtiene la siguiente ecuación,

$$\begin{aligned}
\sum_j \mathbf{g}_{j,j}^{(n)}(z) = & \mathbf{\Theta}(z,n) \{ \boldsymbol{\theta}_1(z,n) \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z) [\boldsymbol{\theta}_1(z,n)]^T + \boldsymbol{\theta}_1(z,n) \mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z) [\boldsymbol{\theta}_2(z,n)]^T + \boldsymbol{\theta}_0(z,n) \\
& + \boldsymbol{\theta}_2(z,n) \mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z) [\boldsymbol{\theta}_1(z,n)]^T + \boldsymbol{\theta}_2(z,n) \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z) [\boldsymbol{\theta}_2(z,n)]^T \} + \mathbf{A}(z,n-1) \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z) \\
& + \mathbf{B}(z,n-2) \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z) + \mathbf{C}(z,n-1) \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z) [\boldsymbol{\theta}_1(z,n)]^T + \mathbf{C}(z,n-1) \mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z) [\boldsymbol{\theta}_2(z,n)]^T \\
& + \mathbf{C}(z,n-2) \boldsymbol{\theta}_1(z,n) \mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z) + \mathbf{C}(z,n-2) \boldsymbol{\theta}_2(z,n) \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z) + \mathbf{D}(z,n-1) \boldsymbol{\theta}_1(z,n) \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z) \\
& + \mathbf{D}(z,n-1) \boldsymbol{\theta}_2(z,n) \mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z) + \mathbf{D}(z,n-2) \mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z) [\boldsymbol{\theta}_1(z,n)]^T \\
& + \mathbf{D}(z,n-2) \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z) [\boldsymbol{\theta}_2(z,n)]^T + \mathbf{F}(z,n-1) + \mathbf{F}(z,n-2).
\end{aligned} \tag{3.33}$$

donde  $\mathbf{\Theta}(z,n) \equiv \mathbf{A}(z,n-2) + \mathbf{B}(z,n-1) - \mathbf{I}$ . Dado que nos interesa  $\text{Tr} \sum_j \mathbf{g}_{j,j}^{(n)}(z)$  y como  $\text{Tr}(\mathbf{RS}) = \text{Tr}(\mathbf{SR})$  para cualquier matriz  $\mathbf{R}$  y  $\mathbf{S}$  cuadrada [Meyer, 2000],

$$\begin{aligned}
\text{Tr} \sum_j \mathbf{g}_{j,j}^{(n)}(z) = & \text{Tr} \{ \mathbf{\Theta}(z,n) \boldsymbol{\theta}_0(z,n) + [\boldsymbol{\theta}_1(z,n)]^T \mathbf{\Theta}(z,n) \boldsymbol{\theta}_1(z,n) \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z) \\
& + [\boldsymbol{\theta}_2(z,n)]^T \mathbf{\Theta}(z,n) \boldsymbol{\theta}_1(z,n) \mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z) + [\boldsymbol{\theta}_1(z,n)]^T \mathbf{\Theta}(z,n) \boldsymbol{\theta}_2(z,n) \mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z) \\
& + [\boldsymbol{\theta}_2(z,n)]^T \mathbf{\Theta}(z,n) \boldsymbol{\theta}_2(z,n) \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z) + \mathbf{A}(z,n-1) \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z) + \mathbf{B}(z,n-2) \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z) \\
& + [\boldsymbol{\theta}_1(z,n)]^T \mathbf{C}(z,n-1) \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z) + [\boldsymbol{\theta}_2(z,n)]^T \mathbf{C}(z,n-1) \mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z) + \mathbf{F}(z,n-1) \\
& + \mathbf{C}(z,n-2) \boldsymbol{\theta}_1(z,n) \mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z) + \mathbf{C}(z,n-2) \boldsymbol{\theta}_2(z,n) \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z) \\
& + \mathbf{D}(z,n-1) \boldsymbol{\theta}_1(z,n) \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z) + \mathbf{D}(z,n-1) \boldsymbol{\theta}_2(z,n) \mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z) \\
& + [\boldsymbol{\theta}_1(z,n)]^T \mathbf{D}(z,n-2) \mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z) + [\boldsymbol{\theta}_2(z,n)]^T \mathbf{D}(z,n-2) \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z) + \mathbf{F}(z,n-2) \}.
\end{aligned} \tag{3.34}$$

Comparando (3.34) con (3.15) se obtienen las siguientes relaciones de recurrencia

$$\mathbf{A}(z,n) = \mathbf{A}(z,n-1) + \mathbf{D}(z,n-1) \boldsymbol{\theta}_1(z,n) + [\boldsymbol{\theta}_1(z,n)]^T \mathbf{C}(z,n-1) + [\boldsymbol{\theta}_1(z,n)]^T \mathbf{\Theta}(z,n) \boldsymbol{\theta}_1(z,n), \tag{3.35}$$

$$\mathbf{B}(z,n) = \mathbf{B}(z,n-2) + \mathbf{C}(z,n-2) \boldsymbol{\theta}_2(z,n) + [\boldsymbol{\theta}_2(z,n)]^T \mathbf{D}(z,n-2) + [\boldsymbol{\theta}_2(z,n)]^T \mathbf{\Theta}(z,n) \boldsymbol{\theta}_2(z,n), \tag{3.36}$$

$$\mathbf{C}(z,n) = \mathbf{C}(z,n-2) \boldsymbol{\theta}_1(z,n) + [\boldsymbol{\theta}_2(z,n)]^T \mathbf{C}(z,n-1) + [\boldsymbol{\theta}_2(z,n)]^T \mathbf{\Theta}(z,n) \boldsymbol{\theta}_1(z,n), \tag{3.37}$$

$$\mathbf{D}(z,n) = \mathbf{D}(z,n-1) \boldsymbol{\theta}_2(z,n) + [\boldsymbol{\theta}_1(z,n)]^T \mathbf{D}(z,n-2) + [\boldsymbol{\theta}_1(z,n)]^T \mathbf{\Theta}(z,n) \boldsymbol{\theta}_2(z,n), \tag{3.38}$$

$$\mathbf{F}(z,n) = \mathbf{\Theta}(z,n) \boldsymbol{\theta}_0(z,n) + \mathbf{F}(z,n-1) + \mathbf{F}(z,n-2). \tag{3.39}$$

Por otro lado, las funciones de Green para la generación  $n$  se pueden obtener a partir de la ecuación (3.19) o específicamente se sustituye la ecuación (3.21) en (3.20) y (3.22), esto es,

$$\begin{aligned}
\mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z) = & \{ z\mathbf{I} - \mathbf{E}_L(z,n-1) - \mathbf{t}(z,n-1) \boldsymbol{\theta}_1(z,n) - \mathbf{t}(z,n-1) \boldsymbol{\theta}_2(z,n) \\
& \times [z\mathbf{I} - \mathbf{E}_R(z,n-2) - [\mathbf{t}(z,n-2)]^T \boldsymbol{\theta}_2(z,n)]^{-1} [\mathbf{t}(z,n-2)]^T \boldsymbol{\theta}_1(z,n) \}^{-1},
\end{aligned} \tag{3.40}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z) = & \{ z\mathbf{I} - \mathbf{E}_R(z,n-2) - [\mathbf{t}(z,n-2)]^T \boldsymbol{\theta}_2(z,n) - [\mathbf{t}(z,n-2)]^T \boldsymbol{\theta}_1(z,n) \\
& \times [z\mathbf{I} - \mathbf{E}_L(z,n-1) - \mathbf{t}(z,n-1) \boldsymbol{\theta}_1(z,n)]^{-1} \mathbf{t}(z,n-1) \boldsymbol{\theta}_2(z,n) \}^{-1},
\end{aligned} \tag{3.41}$$

$$\mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z) = [z\mathbf{I} - \mathbf{E}_R(z,n-2) - [\mathbf{t}(z,n-2)]^T \boldsymbol{\theta}_2(z,n)]^{-1} [\mathbf{t}(z,n-2)]^T \boldsymbol{\theta}_1(z,n) \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z), \tag{3.42}$$

$$\mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z) = [z\mathbf{I} - \mathbf{E}_L(z,n-1) - \mathbf{t}(z,n-1) \boldsymbol{\theta}_1(z,n)]^{-1} \mathbf{t}(z,n-1) \boldsymbol{\theta}_2(z,n) \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z). \tag{3.43}$$

En general, este proceso se puede realizar para la generación  $n$  de un nanoalambre de Fibonacci con  $N_{\perp}$  átomos por celda, en el cual la densidad de estados  $\text{DOS}(E)$  tiene la siguiente expresión

$$\text{DOS}(E, n) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left[ \text{ImTr}[\mathbf{A}(z, n) \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z) + \mathbf{B}(z, n) \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z) + \mathbf{C}(z, n) \mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z) + \mathbf{D}(z, n) \mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z) + \mathbf{F}(z, n)] \right] \quad (3.44)$$

donde las relaciones de recurrencia están dadas por (3.35)-(3.39) y las funciones de Green por (3.40)-(3.43). Cabe mencionar que la ecuación (3.44) será utilizada para obtener los resultados numéricos del siguiente capítulo.

Asimismo, sustituyendo la ecuación (3.21) en (3.20) y (3.22), se obtienen las submatrices de interacción y de autoenergía para la generación  $n$ , las cuales se determinan mediante las siguientes relaciones de recurrencia

$$\mathbf{t}(z, n) = \mathbf{t}(z, n-1) [z\mathbf{I} - \mathbf{E}_M(z, n)]^{-1} \mathbf{t}(z, n-2), \quad (3.45)$$

$$\mathbf{E}_L(z, n) = \mathbf{E}_L(z, n-1) + \mathbf{t}(z, n-1) [z\mathbf{I} - \mathbf{E}_M(z, n)]^{-1} [\mathbf{t}(z, n-1)]^T \quad (3.46)$$

$$\mathbf{E}_R(z, n) = \mathbf{E}_R(z, n-2) + [\mathbf{t}(z, n-2)]^T [z\mathbf{I} - \mathbf{E}_M(z, n)]^{-1} \mathbf{t}(z, n-2). \quad (3.47)$$

Por último, las condiciones iniciales para el cálculo de DOS son

$$\mathbf{A}(z, 1) = \mathbf{B}(z, 1) = \mathbf{I}, \quad \mathbf{C}(z, 1) = \mathbf{D}(z, 1) = \mathbf{F}(z, 1) = \mathbf{0}, \quad (3.48)$$

$$\mathbf{A}(z, 2) = \mathbf{I} + [\boldsymbol{\theta}_1(z, 2)]^T \boldsymbol{\theta}_1(z, 2), \quad \mathbf{B}(z, 2) = \mathbf{I} + [\boldsymbol{\theta}_2(z, 2)]^T \boldsymbol{\theta}_2(z, 2), \quad (3.49)$$

$$\mathbf{C}(z, 2) = [\boldsymbol{\theta}_2(z, 2)]^T \boldsymbol{\theta}_1(z, 2), \quad \mathbf{D}(z, 2) = [\boldsymbol{\theta}_1(z, 2)]^T \boldsymbol{\theta}_2(z, 2), \quad \mathbf{F}(z, 2) = \boldsymbol{\theta}_0(z, 2). \quad (3.50)$$

Como ejemplo, para el caso de dos cadenas de Fibonacci en forma de escalera con integrales de salto  $t_A$  o  $t_B$ , en las cadenas unidas por los enlaces caracterizados a través de la integral de salto  $t_y$ , las condiciones iniciales para la excitación electrónica son

$$\mathbf{t}(z, 1) = \begin{pmatrix} t_A & 0 \\ 0 & t_A \end{pmatrix}, \quad \mathbf{E}_L(z, 1) = \mathbf{E}_R(z, 1) = \begin{pmatrix} 0 & t_y \\ t_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.51)$$

$$\mathbf{t}(z, 2) = t_A t_B \begin{pmatrix} z & -t_y \\ -t_y & z \end{pmatrix}^{-1}, \quad \mathbf{E}_L(z, 2) = t_A^2 \begin{pmatrix} z & -t_y \\ -t_y & z \end{pmatrix}^{-1}, \quad \mathbf{E}_R(z, 2) = t_B^2 \begin{pmatrix} z & -t_y \\ -t_y & z \end{pmatrix}^{-1}. \quad (3.52)$$

En resumen, en esta sección se ha desarrollado una extensión del método de renormalización para multigrados de libertad por sitio. Como ejemplo, se aplica esta extensión para una doble cadena de Fibonacci con interacción a primeros vecinos para electrones.

En general, el método de renormalización no es eficiente para sistemas multidimensionales, ya que todos los sitios de la frontera entre subsistemas deben considerarse explícitamente con el fin de preservar todas las posibles trayectorias de correlación. Así, un sistema de  $d$  dimensiones al ser renormalizado se reduce a una de  $d-1$  dimensiones, en donde el número de grados de libertad diverge cuando el sistema original diverge, excepto para  $d=1$ . Una opción para estudiar estos sistemas multidimensionales es aplicar el método de renormalización junto con el teorema de convolución si el hamiltoniano del sistema es separable [Sánchez, 2004].

### 3.3. Formulación para la Fórmula de Kubo-Greenwood

Dentro del formalismo de Kubo-Greenwood para estudiar un nanoalambre cuasiperiódico con  $N_{\perp}$  átomos en la sección transversal o celda, la conductividad eléctrica ( $\sigma$ ) en la dirección  $x$  está dada por la ecuación (2.55) escrita en su forma matricial como

$$\sigma(\mu, \omega, T) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{2e^2 \hbar}{\pi \Omega m^2} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{f(E) - f(E + \hbar\omega)}{\hbar\omega} \text{Tr}[\hat{\mathbf{p}}_x \text{Im} \mathbf{G}(z + \hbar\omega) \hat{\mathbf{p}}_x \text{Im} \mathbf{G}(z)] \quad (3.53)$$

donde  $\mathbf{G}(z)$  es la función de Green retardada,  $z = E + i\eta$  con  $\eta \geq 0$ ,  $\Omega$  es el volumen del sistema,  $\omega$  es la frecuencia angular del campo eléctrico externo  $\mathbf{E}$ ,  $f(E) = \{1 + \exp[(E - \mu)/k_B T]\}^{-1}$  es la función de distribución de Fermi-Dirac con el potencial químico  $\mu$  y la temperatura  $T$ .

Se puede expresar al operador de momento como [Sakurai, 1994]

$$\hat{\mathbf{p}}_x = \frac{ima}{\hbar} [\hat{\mathbf{H}}, \hat{x}], \quad (3.54)$$

siendo  $\hat{\mathbf{H}}$  el hamiltoniano del sistema. Dentro del formalismo de amarre fuerte, el hamiltoniano (2.1) puede reescribirse en forma matricial como

$$\hat{\mathbf{H}} = \sum_j \boldsymbol{\varepsilon}_{j,j} |j\rangle \langle j| + \mathbf{t}_{j,j+1} |j\rangle \langle j+1| + \mathbf{t}_{j-1,j} |j\rangle \langle j-1| \quad (3.55)$$

en donde  $\boldsymbol{\varepsilon}_{j,j}$  es la matriz de autoenergía de la celda  $j$  y  $\mathbf{t}_{j,k}$  son las matrices de las integrales de salto entre las celdas  $j$  y  $k$ . Dichas matrices son de  $N_{\perp} \times N_{\perp}$  elementos. Considerando la forma del operador de posición  $\hat{x} = \sum_j x_j |j\rangle \langle j|$ , con  $x_j$  la coordenada del plano  $j$ , el operador de momento matricial es

$$\hat{\mathbf{p}}_x = \frac{im}{\hbar} [\hat{\mathbf{H}}, \hat{x}] = \frac{ima}{\hbar} \sum_j [\mathbf{t}_{j,j+1} |j\rangle \langle j+1| - \mathbf{t}_{j-1,j} |j\rangle \langle j-1|], \quad (3.56)$$

donde se ha supuesto por simplicidad que los planos están separados por una distancia fija  $a$  y la información de la aperiodicidad estructural se encuentra en las matrices de integrales de salto  $\mathbf{t}_{j,j+1}$ .

Para un sistema cuyos planos siguen la secuencia de Fibonacci y su número de planos es  $N(n)$  con  $z_{\omega} \equiv z + \hbar\omega$  y usando la ecuación (3.56), la traza de (3.53) está dada por

$$\begin{aligned} \text{Tr}[\hat{\mathbf{p}}_x \text{Im} \mathbf{G}(z_{\omega}) \hat{\mathbf{p}}_x \text{Im} \mathbf{G}(z)] = & \left( \frac{ima}{\hbar} \right)^2 \sum_{j,l=1}^{N(n)-1} \text{Tr} \left[ \mathbf{t}_{j,j+1} \text{Im} \mathbf{g}_{j+1,l}^{(n)}(z_{\omega}) \mathbf{t}_{l,l+1} \text{Im} \mathbf{g}_{l+1,j}^{(n)}(z) \right. \\ & - \mathbf{t}_{j,j+1} \text{Im} \mathbf{g}_{j+1,l+1}^{(n)}(z_{\omega}) \mathbf{t}_{l,l+1} \text{Im} \mathbf{g}_{l,j}^{(n)}(z) + \mathbf{t}_{j,j+1} \text{Im} \mathbf{g}_{j,l+1}^{(n)}(z_{\omega}) \mathbf{t}_{l,l+1} \text{Im} \mathbf{g}_{l,j+1}^{(n)}(z), \\ & \left. - \mathbf{t}_{j,j+1} \text{Im} \mathbf{g}_{j,l}^{(n)}(z_{\omega}) \mathbf{t}_{l,l+1} \text{Im} \mathbf{g}_{l+1,j+1}^{(n)}(z) \right] \end{aligned} \quad (3.57)$$

siendo  $\mathbf{g}_{j,l}^{(n)}(z)$  matriz de tamaño  $N_{\perp} \times N_{\perp}$ . Al utilizar la propiedad  $\text{Im} \mathbf{g}(z) = [\mathbf{g}(z^+) - \mathbf{g}(z^-)]/2i$  siendo  $z^{\pm} \equiv E \pm i\eta$  [Economou, 2006], la ecuación (3.57) se reescribe como

$$\text{Tr}[\hat{\mathbf{p}}_x \text{Im} \mathbf{G}^+(z_\omega) \hat{\mathbf{p}}_x \text{Im} \mathbf{G}^+(z)] = \left( \frac{ma}{2\hbar} \right)^2 [S(z_\omega^+, z^+, n) - S(z_\omega^+, z^-, n) + S(z_\omega^-, z^-, n) - S(z_\omega^-, z^+, n)] \quad (3.58)$$

donde

$$S(z_\omega^\nu, z^\kappa, n) = \sum_{j,l=1}^{N(n)-1} \text{Tr} \left[ \mathbf{t}_{j,j+1} \mathbf{g}_{j,l+1}^{(n)}(z_\omega^\nu) \mathbf{t}_{l,l+1} \mathbf{g}_{l,j+1}^{(n)}(z^\kappa) - \mathbf{t}_{j,j+1} \mathbf{g}_{j,l}^{(n)}(z_\omega^\nu) \mathbf{t}_{l,l+1} \mathbf{g}_{l+1,j+1}^{(n)}(z^\kappa) \right. \\ \left. + \mathbf{t}_{j,j+1} \mathbf{g}_{j+1,l}^{(n)}(z_\omega^\nu) \mathbf{t}_{l,l+1} \mathbf{g}_{l+1,j}^{(n)}(z^\kappa) - \mathbf{t}_{j,j+1} \mathbf{g}_{j+1,l+1}^{(n)}(z_\omega^\nu) \mathbf{t}_{l,l+1} \mathbf{g}_{l,j}^{(n)}(z^\kappa) \right] \quad (3.59)$$

siendo  $z_\omega^\pm = E + \hbar\omega \pm i\eta$ ,  $\nu, \kappa$  pueden tomar los signos + o - . Así pues, la ecuación (3.53) se convierte a

$$\sigma(\mu, \omega, T) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{2e^2 \hbar}{\pi \Omega m^2} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{f(E) - f(E + \hbar\omega)}{\hbar\omega} [S(z_\omega^+, z^+, n) - S(z_\omega^+, z^-, n) + S(z_\omega^-, z^-, n) - S(z_\omega^-, z^+, n)]. \quad (3.60)$$

Usando las ideas del método de renormalización matricial, la suma en la ecuación (3.59) puede expresarse en términos de un polinomio cuadrático en la función de Green de los sitios extremos de la cadena de Fibonacci, izquierdo ( $L$ ) y derecho ( $R$ ), dada por

$$S(z_\omega^\nu, z^\kappa, n) = \text{Tr} \left[ \mathbf{Z}(z_\omega^\nu, z^\kappa, n) + \mathbf{J}(z_\omega^\nu, z^\kappa, n) \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z_\omega^\nu) + \mathbf{J}(z^\kappa, z_\omega^\nu, n) \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z^\kappa) \right. \\ + \mathbf{L}(z_\omega^\nu, z^\kappa, n) \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z_\omega^\nu) + \mathbf{L}(z^\kappa, z_\omega^\nu, n) \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z^\kappa) + \mathbf{K}(z_\omega^\nu, z^\kappa, n) \mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z_\omega^\nu) + \mathbf{K}(z^\kappa, z_\omega^\nu, n) \mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z^\kappa) \\ + \mathbf{F}(z_\omega^\nu, z^\kappa, n) \mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z_\omega^\nu) + \mathbf{F}(z^\kappa, z_\omega^\nu, n) \mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z^\kappa) + \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z_\omega^\nu) \mathbf{A}(z_\omega^\nu, z^\kappa, n) \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z^\kappa) \mathbf{A}(z^\kappa, z_\omega^\nu, n) \\ + \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z_\omega^\nu) \mathbf{B}(z_\omega^\nu, z^\kappa, n) \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z^\kappa) \mathbf{B}(z^\kappa, z_\omega^\nu, n) + \mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z_\omega^\nu) \mathbf{C}(z_\omega^\nu, z^\kappa, n) \mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z^\kappa) \mathbf{C}(z^\kappa, z_\omega^\nu, n) \\ + \mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z_\omega^\nu) \mathbf{D}(z_\omega^\nu, z^\kappa, n) \mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z^\kappa) \mathbf{D}(z^\kappa, z_\omega^\nu, n) + \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z_\omega^\nu) \mathbf{A}(z_\omega^\nu, z^\kappa, n) \mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z^\kappa) \mathbf{D}(z^\kappa, z_\omega^\nu, n) \\ + \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z_\omega^\nu) \mathbf{C}(z_\omega^\nu, z^\kappa, n) \mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z^\kappa) \mathbf{A}(z^\kappa, z_\omega^\nu, n) + \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z_\omega^\nu) \mathbf{C}(z_\omega^\nu, z^\kappa, n) \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z^\kappa) \mathbf{D}(z^\kappa, z_\omega^\nu, n) \\ + \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z_\omega^\nu) \mathbf{B}(z_\omega^\nu, z^\kappa, n) \mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z^\kappa) \mathbf{C}(z^\kappa, z_\omega^\nu, n) + \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z_\omega^\nu) \mathbf{D}(z_\omega^\nu, z^\kappa, n) \mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z^\kappa) \mathbf{B}(z^\kappa, z_\omega^\nu, n) \\ + \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z_\omega^\nu) \mathbf{D}(z_\omega^\nu, z^\kappa, n) \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z^\kappa) \mathbf{C}(z^\kappa, z_\omega^\nu, n) + \mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z_\omega^\nu) \mathbf{B}(z_\omega^\nu, z^\kappa, n) \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z^\kappa) \mathbf{A}(z^\kappa, z_\omega^\nu, n) \\ + \mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z_\omega^\nu) \mathbf{B}(z_\omega^\nu, z^\kappa, n) \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z^\kappa) \mathbf{D}(z^\kappa, z_\omega^\nu, n) + \mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z_\omega^\nu) \mathbf{D}(z_\omega^\nu, z^\kappa, n) \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z^\kappa) \mathbf{A}(z^\kappa, z_\omega^\nu, n) \\ + \mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z_\omega^\nu) \mathbf{A}(z_\omega^\nu, z^\kappa, n) \mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z^\kappa) \mathbf{B}(z^\kappa, z_\omega^\nu, n) + \mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z_\omega^\nu) \mathbf{A}(z_\omega^\nu, z^\kappa, n) \mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z^\kappa) \mathbf{C}(z^\kappa, z_\omega^\nu, n) \\ \left. + \mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z_\omega^\nu) \mathbf{C}(z_\omega^\nu, z^\kappa, n) \mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z^\kappa) \mathbf{B}(z^\kappa, z_\omega^\nu, n) \right] \quad (3.61)$$

Los coeficientes matriciales  $\mathbf{A}(z_\omega^\nu, z^\kappa, n)$ ,  $\mathbf{B}(z_\omega^\nu, z^\kappa, n)$ ,  $\dots$ ,  $\mathbf{Z}(z_\omega^\nu, z^\kappa, n)$  de tamaño  $N_\perp \times N_\perp$  pueden obtenerse iterativamente de los coeficientes correspondientes a las generaciones anteriores  $n-1$  y  $n-2$ .

Como ejemplo de la obtención de los coeficientes de la ecuación (3.61), se calcula explícitamente el coeficiente  $\mathbf{A}(z_\omega^\nu, z^\kappa, n)$ . Primero, se define la suma parcial matricial en el índice  $l$ , tomando el primer término de la ecuación (3.59), es decir,

$$\mathbf{S}_C(z_\omega^\nu, z^\kappa, n, j, j+1) \equiv \sum_{l=1}^{N(n)-1} \mathbf{g}_{j,l+1}^{(n)}(z_\omega^\nu) \mathbf{t}_{l,l+1} \mathbf{g}_{l,j+1}^{(n)}(z^\kappa). \quad (3.62)$$

De igual manera que la ecuación (3.61), la ecuación (3.62) puede ser escrita como un polinomio cuadrático de la función de Green dada por

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_C(z_\omega^V, z^K, n, j, j+1) &= \mathbf{g}_{j,1}^{(n)}(z_\omega^V) \mathbf{A}_C(z_\omega^V, z^K, n) \mathbf{g}_{1,j+1}^{(n)}(z^K) + \mathbf{g}_{j,N(n)}^{(n)}(z_\omega^V) \mathbf{B}_C(z_\omega^V, z^K, n) \mathbf{g}_{N(n),j+1}^{(n)}(z^K) \\ &+ \mathbf{g}_{j,1}^{(n)}(z_\omega^V) \mathbf{C}_C(z_\omega^V, z^K, n) \mathbf{g}_{N(n),j+1}^{(n)}(z^K) + \mathbf{g}_{j,N(n)}^{(n)}(z_\omega^V) \mathbf{D}_C(z_\omega^V, z^K, n) \mathbf{g}_{1,j+1}^{(n)}(z^K) \end{aligned} \quad (3.63)$$

donde  $\mathbf{A}_C(z_\omega^V, z^K, n), \dots, \mathbf{D}_C(z_\omega^V, z^K, n)$  son los coeficientes matriciales del producto de dos funciones de Green que satisfacen la ecuación homogénea de Dyson. La contribución de los términos inhomogéneos se consideran en los coeficientes  $\mathbf{J}(z_\omega^V, z^K, n), \dots, \mathbf{Z}(z_\omega^V, z^K, n)$ .

La regla de construcción de Fibonacci para el problema de enlaces establece que

$$\mathbf{S}_C(z_\omega^V, z^K, n, j, j+1) = \mathbf{S}_C(z_\omega^V, z^K, n-1, j, j+1) + \mathbf{S}_C(z_\omega^V, z^K, n-2, j, j+1) \quad (3.64)$$

donde

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_C(z_\omega^V, z^K, n-1, j, j+1) &= \mathbf{g}_{j,1}^{(n-1)}(z_\omega^V) \mathbf{A}_C(z_\omega^V, z^K, n-1) \mathbf{g}_{1,j+1}^{(n-1)}(z^K) + \mathbf{g}_{j,N(n-1)}^{(n-1)}(z_\omega^V) \mathbf{B}_C(z_\omega^V, z^K, n-1) \mathbf{g}_{N(n-1),j+1}^{(n-1)}(z^K) \\ &+ \mathbf{g}_{j,1}^{(n-1)}(z_\omega^V) \mathbf{C}_C(z_\omega^V, z^K, n-1) \mathbf{g}_{N(n-1),j+1}^{(n-1)}(z^K) + \mathbf{g}_{j,N(n-1)}^{(n-1)}(z_\omega^V) \mathbf{D}_C(z_\omega^V, z^K, n-1) \mathbf{g}_{1,j+1}^{(n-1)}(z^K) \end{aligned} \quad (3.65)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_C(z_\omega^V, z^K, n-2, j, j+1) &= \mathbf{g}_{j,1}^{(n-2)}(z_\omega^V) \mathbf{A}_C(z_\omega^V, z^K, n-2) \mathbf{g}_{1,j+1}^{(n-2)}(z^K) + \mathbf{g}_{j,N(n-2)}^{(n-2)}(z_\omega^V) \mathbf{B}_C(z_\omega^V, z^K, n-2) \mathbf{g}_{N(n-2),j+1}^{(n-2)}(z^K) \\ &+ \mathbf{g}_{j,1}^{(n-2)}(z_\omega^V) \mathbf{C}_C(z_\omega^V, z^K, n-2) \mathbf{g}_{N(n-2),j+1}^{(n-2)}(z^K) + \mathbf{g}_{j,N(n-2)}^{(n-2)}(z_\omega^V) \mathbf{D}_C(z_\omega^V, z^K, n-2) \mathbf{g}_{1,j+1}^{(n-2)}(z^K) \end{aligned} \quad (3.66)$$

Al sustituir las ecuaciones (3.27)-(3.32) en (3.65) y (3.66), y a su vez éstos en (3.64) el resultado se puede comparar con la ecuación (3.63) obteniendo los coeficientes matriciales

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_C(z_\omega^V, z^K, n) &= \mathbf{A}_C(z_\omega^V, z^K, n-1) + [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \boldsymbol{\Delta}(z_\omega^V, z^K, n) \boldsymbol{\theta}_1(z^K, n) + [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{D}_C(z_\omega^V, z^K, n-1) \\ &+ \mathbf{C}_C(z_\omega^V, z^K, n-1) \boldsymbol{\theta}_1(z^K, z) \end{aligned} \quad (3.67)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_C(z_\omega^V, z^K, n) &= \mathbf{B}_C(z_\omega^V, z^K, n-2) + [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \boldsymbol{\Delta}(z_\omega^V, z^K, n) \boldsymbol{\theta}_2(z^K, n) + [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{C}_C(z_\omega^V, z^K, n-2) \\ &+ \mathbf{D}_C(z_\omega^V, z^K, n-2) \boldsymbol{\theta}_2(z^K, n) \end{aligned} \quad (3.68)$$

$$\mathbf{C}_C(z_\omega^V, z^K, n) = [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \boldsymbol{\Delta}(z_\omega^V, z^K, n) \boldsymbol{\theta}_2(z^K, n) + [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{C}_C(z_\omega^V, z^K, n-2) + \mathbf{C}_C(z_\omega^V, z^K, n-1) \boldsymbol{\theta}_2(z^K, n) \quad (3.69)$$

$$\mathbf{D}_C(z_\omega^V, z^K, n) = [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \boldsymbol{\Delta}(z_\omega^V, z^K, n) \boldsymbol{\theta}_1(z^K, n) + [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{D}_C(z_\omega^V, z^K, n-1) + \mathbf{D}_C(z_\omega^V, z^K, n-2) \boldsymbol{\theta}_1(z^K, n) \quad (3.70)$$

donde  $\boldsymbol{\Delta}(z_\omega^V, z^K, n) \equiv \mathbf{A}_C(z_\omega^V, z^K, n-2) + \mathbf{B}_C(z_\omega^V, z^K, n-1)$  y se usó la propiedad del producto de matrices  $\text{Tr}(\mathbf{RS}) = \text{Tr}(\mathbf{SR})$  para cualquier matriz cuadrada  $\mathbf{R}$  y  $\mathbf{S}$  [Meyer, 2000],

También se puede definir una suma parcial matricial en el índice  $l$  del tercer término de la ecuación (3.59), es decir,

$$\mathbf{S}_C(z_\omega^V, z^K, n, j+1, j) \equiv \sum_{l=1}^{N(n)-1} \mathbf{g}_{j+1,l}^{(n)}(z_\omega^V) \mathbf{t}_{l,j+1} \mathbf{g}_{l+1,j}^{(n)}(z^K). \quad (3.71)$$

La ecuación (3.71) puede expresarse como la ecuación (3.63) de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_C(z_\omega^V, z^K, n, j+1, j) &= \mathbf{g}_{j+1,1}^{(n)}(z_\omega^V) \mathbf{A}_C(z_\omega^V, z^K, n) \mathbf{g}_{1,j}^{(n)}(z^K) + \mathbf{g}_{j+1,N(n)}^{(n)}(z_\omega^V) \mathbf{B}_C(z_\omega^V, z^K, n) \mathbf{g}_{N(n),j}^{(n)}(z^K) \\ &+ \mathbf{g}_{j+1,N(n)}^{(n)}(z_\omega^V) \mathbf{C}_C(z_\omega^V, z^K, n) \mathbf{g}_{1,j}^{(n)}(z^K) + \mathbf{g}_{j+1,1}^{(n)}(z_\omega^V) \mathbf{D}_C(z_\omega^V, z^K, n) \mathbf{g}_{N(n),j}^{(n)}(z^K) \end{aligned} \quad (3.72)$$

De forma similar al procedimiento realizado para la obtención de  $\mathbf{A}_C(z_\omega^V, z^K, n), \dots, \mathbf{D}_C(z_\omega^V, z^K, n)$  en la ecuación (3.66), los coeficientes matriciales para (3.72) son

$$\mathbf{A}_C(z^K, z_\omega^V, n) = \mathbf{A}_C(z^K, z_\omega^V, n-1) + [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \boldsymbol{\Delta}(z^K, z_\omega^V, n) \boldsymbol{\theta}_1(z^K, n) + [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{C}_C(z^K, z_\omega^V, n-1) + \mathbf{D}_C(z^K, z_\omega^V, n-1) \boldsymbol{\theta}_1(z^K, n) \quad (3.73)$$

$$\mathbf{B}_C(z^K, z_\omega^V, n) = \mathbf{B}_C(z^K, z_\omega^V, n-2) + [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \boldsymbol{\Delta}(z^K, z_\omega^V, n) \boldsymbol{\theta}_2(z^K, n) + [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{D}_C(z^K, z_\omega^V, n-2) + \mathbf{C}_C(z^K, z_\omega^V, n-2) \boldsymbol{\theta}_2(z^K, n) \quad (3.74)$$

$$\mathbf{C}_C(z^K, z_\omega^V, n) = [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \boldsymbol{\Delta}(z^K, z_\omega^V, n) \boldsymbol{\theta}_1(z^K, n) + [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{C}_C(z^K, z_\omega^V, n-1) + \mathbf{C}_C(z^K, z_\omega^V, n-2) \boldsymbol{\theta}_1(z^K, n) \quad (3.75)$$

$$\mathbf{D}_C(z^K, z_\omega^V, n) = [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \boldsymbol{\Delta}(z^K, z_\omega^V, n) \boldsymbol{\theta}_2(z^K, n) + [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{D}_C(z^K, z_\omega^V, n-2) + \mathbf{D}_C(z^K, z_\omega^V, n-1) \boldsymbol{\theta}_2(z^K, n) \quad (3.76)$$

A continuación, se reescribe la ecuación (3.59), usando las definiciones de las sumas parciales matriciales en (3.62) y (3.71), como

$$S(z_\omega^V, z^K, n) = \sum_{j=1}^{N(n)-1} \text{Tr} \left[ \mathbf{t}_{j,j+1} \mathbf{S}_C(z_\omega^V, z^K, n, j, j+1) - \mathbf{t}_{j,j+1} \mathbf{S}_C(z^K, z_\omega^V, n, j, j+1) + \mathbf{t}_{j,j+1} \mathbf{S}_C(z_\omega^V, z^K, n, j+1, j) - \mathbf{t}_{j,j+1} \mathbf{S}_C(z^K, z_\omega^V, n, j+1, j) \right] \quad (3.77)$$

Considerando únicamente el coeficiente  $\mathbf{A}_C(z_\omega^V, z^K, n)$  en cada suma parcial matricial  $\mathbf{S}_C$ , se tiene

$$S_A(z_\omega^V, z^K, n) = \sum_{j=1}^{N(n)-1} \text{Tr} \left[ \mathbf{t}_{j,j+1} \mathbf{g}_{j,1}^{(n)}(z_\omega^V) \mathbf{A}_C(z_\omega^V, z^K, n) \mathbf{g}_{1,j+1}^{(n)}(z^K) - \mathbf{t}_{j,j+1} \mathbf{g}_{j,1}^{(n)}(z_\omega^V) \mathbf{A}_C(z^K, z_\omega^V, n) \mathbf{g}_{1,j+1}^{(n)}(z^K) + \mathbf{t}_{j,j+1} \mathbf{g}_{j+1,1}^{(n)}(z_\omega^V) \mathbf{A}_C(z^K, z_\omega^V, n) \mathbf{g}_{1,j}^{(n)}(z^K) - \mathbf{t}_{j,j+1} \mathbf{g}_{j+1,1}^{(n)}(z_\omega^V) \mathbf{A}_C(z_\omega^V, z^K, n) \mathbf{g}_{1,j}^{(n)}(z^K) + \dots \right] \quad (3.78)$$

Al utilizar la propiedad de la traza en matrices  $\text{Tr}(\mathbf{RS}) = \text{Tr}(\mathbf{SR})$  en la ecuación (3.78), la cual se reescribe como

$$S_A(z_\omega^V, z^K, n) = \sum_{j=1}^{N(n)-1} \text{Tr} \left[ \mathbf{A}_C(z_\omega^V, z^K, n) \mathbf{g}_{1,j+1}^{(n)}(z^K) \mathbf{t}_{j,j+1} \mathbf{g}_{j,1}^{(n)}(z_\omega^V) - \mathbf{A}_C(z^K, z_\omega^V, n) \mathbf{g}_{1,j+1}^{(n)}(z^K) \mathbf{t}_{j,j+1} \mathbf{g}_{j,1}^{(n)}(z_\omega^V) + \mathbf{A}_C(z^K, z_\omega^V, n) \mathbf{g}_{1,j}^{(n)}(z^K) \mathbf{t}_{j,j+1} \mathbf{g}_{j+1,1}^{(n)}(z_\omega^V) - \mathbf{A}_C(z_\omega^V, z^K, n) \mathbf{g}_{1,j}^{(n)}(z^K) \mathbf{t}_{j,j+1} \mathbf{g}_{j+1,1}^{(n)}(z_\omega^V) + \dots \right] \quad (3.79)$$

agrupando términos, la ecuación (3.79) se escribe como

$$S_A(z_\omega^V, z^K, n) = \sum_{j=1}^{N(n)-1} \text{Tr} \left\{ [\mathbf{A}_C(z_\omega^V, z^K, n) - \mathbf{A}_C(z^K, z_\omega^V, n)] [\mathbf{g}_{1,j+1}^{(n)}(z^K) \mathbf{t}_{j,j+1} \mathbf{g}_{j,1}^{(n)}(z_\omega^V) - \mathbf{g}_{1,j}^{(n)}(z^K) \mathbf{t}_{j,j+1} \mathbf{g}_{j+1,1}^{(n)}(z_\omega^V)] + \dots \right\} \quad (3.80)$$

Al sustituir sólo el término  $\mathbf{A}_C(z_\omega^V, z^K, n)$  de los polinomios cuadráticos de la función de Green de las sumas parciales matriciales de las ecuaciones (3.63) y (3.72) en (3.80), ésta se reescribe como

$$S_A(z_\omega^V, z^K, n) = \text{Tr} \left\{ [\mathbf{A}_C(z_\omega^V, z^K, n) - \mathbf{A}_C(z^K, z_\omega^V, n)] \times [\mathbf{g}_{1,1}^{(n)}(z^K) \mathbf{A}_C(z^K, z_\omega^V, n) \mathbf{g}_{1,1}^{(n)}(z_\omega^V) - \mathbf{g}_{1,1}^{(n)}(z^K) \mathbf{A}_C(z_\omega^V, z^K, n) \mathbf{g}_{1,1}^{(n)}(z_\omega^V)] + \dots \right\} \quad (3.81)$$

simplificando la ecuación (3.81) junto con la propiedad de la traza de matrices, se tiene

$$S_A(z_\omega^V, z^K, n) = \text{Tr} \left\{ \mathbf{g}_{1,1}^{(n)}(z_\omega^V) [\mathbf{A}_C(z_\omega^V, z^K, n) - \mathbf{A}_C(z^K, z_\omega^V, n)] \mathbf{g}_{1,1}^{(n)}(z^K) [\mathbf{A}_C(z^K, z_\omega^V, n) - \mathbf{A}_C(z_\omega^V, z^K, n)] + \dots \right\} \quad (3.82)$$

donde  $\mathbf{g}_{1,1}^{(n)}(z)$  corresponde a  $\mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z)$ . Así pues, comparando las ecuaciones (3.82) y (3.61), los coeficientes matriciales tienen las siguientes relaciones

$$\mathbf{A}(z_\omega^V, z^K, n) = \mathbf{A}_C(z_\omega^V, z^K, n) - \mathbf{A}_C(z^K, z_\omega^V, n) \quad \text{y} \quad \mathbf{A}(z^K, z_\omega^V, n) = \mathbf{A}_C(z^K, z_\omega^V, n) - \mathbf{A}_C(z_\omega^V, z^K, n). \quad (3.83)$$

Los demás coeficientes matriciales serán

$$\mathbf{B}(z_\omega^V, z^K, n) = \mathbf{B}_C(z_\omega^V, z^K, n) - \mathbf{B}_C(z^K, z_\omega^V, n), \quad \mathbf{B}(z^K, z_\omega^V, n) = \mathbf{B}_C(z^K, z_\omega^V, n) - \mathbf{B}_C(z_\omega^V, z^K, n), \quad (3.84)$$

$$\mathbf{C}(z_\omega^V, z^K, n) = \mathbf{C}_C(z_\omega^V, z^K, n) - \mathbf{D}_C(z^K, z_\omega^V, n), \quad \mathbf{C}(z^K, z_\omega^V, n) = \mathbf{C}_C(z^K, z_\omega^V, n) - \mathbf{D}_C(z_\omega^V, z^K, n), \quad (3.85)$$

$$\mathbf{D}(z_\omega^V, z^K, n) = \mathbf{D}_C(z_\omega^V, z^K, n) - \mathbf{C}_C(z^K, z_\omega^V, n), \quad \mathbf{D}(z^K, z_\omega^V, n) = \mathbf{D}_C(z^K, z_\omega^V, n) - \mathbf{C}_C(z_\omega^V, z^K, n) \quad (3.86)$$

Los coeficientes matriciales de las funciones de Green lineales en la ecuación (3.61) son

$$\begin{aligned} \mathbf{J}(z_\omega^V, z^K, n) = & \mathbf{J}(z_\omega^V, z^K, n-1) + [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{B}(z_\omega^V, z^K, n-1) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{B}(z^K, z_\omega^V, n-1) \boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n) \\ & + [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{A}(z_\omega^V, z^K, n-2) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{A}(z^K, z_\omega^V, n-2) \boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n) + \mathbf{F}(z_\omega^V, z^K, n-1) \boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n) \\ & + \mathbf{C}(z_\omega^V, z^K, n-1) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{B}(z^K, z_\omega^V, n-1) \boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n) + \mathbf{C}(z_\omega^V, z^K, n-1) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{D}(z^K, z_\omega^V, n-1) \\ & + [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{B}(z_\omega^V, z^K, n-1) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{D}(z^K, z_\omega^V, n-1) + [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{L}(z_\omega^V, z^K, n-1) \boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n) \\ & + [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{J}(z_\omega^V, z^K, n-2) \boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n) + [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{A}(z_\omega^V, z^K, n-2) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{D}(z^K, z_\omega^V, n-1) \\ & + [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{B}(z_\omega^V, z^K, n-1) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{A}(z^K, z_\omega^V, n-2) \boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n) + [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{K}(z_\omega^V, z^K, n-1) \\ & + [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{A}(z_\omega^V, z^K, n-2) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{B}(z^K, z_\omega^V, n-1) \boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n) \\ & + \mathbf{C}(z_\omega^V, z^K, n-1) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{A}(z^K, z_\omega^V, n-2) \boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n) \end{aligned} \quad (3.87)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{L}(z_\omega^V, z^K, n) = & \mathbf{L}(z_\omega^V, z^K, n-2) + [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{B}(z_\omega^V, z^K, n-1) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{B}(z^K, z_\omega^V, n-1) \boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n) \\ & + [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{A}(z_\omega^V, z^K, n-2) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{A}(z^K, z_\omega^V, n-2) \boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n) + \mathbf{K}(z_\omega^V, z^K, n-2) \boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n) \\ & + \mathbf{D}(z_\omega^V, z^K, n-2) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{A}(z^K, z_\omega^V, n-2) \boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n) + \mathbf{D}(z_\omega^V, z^K, n-2) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{C}(z_\omega^V, z^K, n-2) \\ & + [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{A}(z_\omega^V, z^K, n-2) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{C}(z^K, z_\omega^V, n-2) + [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{J}(z_\omega^V, z^K, n-2) \boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n) \\ & + \mathbf{D}(z_\omega^V, z^K, n-2) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{B}(z^K, z_\omega^V, n-1) \boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n) + [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{L}(z_\omega^V, z^K, n-1) \boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n) \\ & + [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{B}(z_\omega^V, z^K, n-1) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{A}(z^K, z_\omega^V, n-2) \boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n) + [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{F}(z_\omega^V, z^K, n-2) \\ & + [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{A}(z_\omega^V, z^K, n-2) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{B}(z^K, z_\omega^V, n-1) \boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n) \\ & + [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{B}(z_\omega^V, z^K, n-1) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{C}(z^K, z_\omega^V, n-2) \end{aligned} \quad (3.88)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{K}(z_\omega^V, z^K, n) = & [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{B}(z_\omega^V, z^K, n-1) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{B}(z^K, z_\omega^V, n-1) \boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n) + [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{K}(z_\omega^V, z^K, n-1) \\ & + [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{A}(z_\omega^V, z^K, n-2) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{A}(z^K, z_\omega^V, n-2) \boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n) + \mathbf{K}(z_\omega^V, z^K, n-2) \boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n) \\ & + \mathbf{D}(z_\omega^V, z^K, n-2) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{A}(z^K, z_\omega^V, n-2) \boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n) + \mathbf{D}(z_\omega^V, z^K, n-2) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{D}(z^K, z_\omega^V, n-1) \\ & + [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{B}(z_\omega^V, z^K, n-1) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{D}(z^K, z_\omega^V, n-1) + [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{L}(z_\omega^V, z^K, n-1) \boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n) \\ & + [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{A}(z_\omega^V, z^K, n-2) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{D}(z^K, z_\omega^V, n-1) + [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{J}(z_\omega^V, z^K, n-2) \boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n) \\ & + [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{A}(z_\omega^V, z^K, n-2) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{B}(z^K, z_\omega^V, n-1) \boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n) \\ & + [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{B}(z_\omega^V, z^K, n-1) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{A}(z^K, z_\omega^V, n-2) \boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n) \\ & + \mathbf{D}(z_\omega^V, z^K, n-2) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{B}(z^K, z_\omega^V, n-1) \boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n) \end{aligned} \quad (3.89)$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{F}(z_\omega^V, z^K, n) &= [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{B}(z_\omega^V, z^K, n-1) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{B}(z^K, z_\omega^V, n-1) \boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n) + \mathbf{F}(z_\omega^V, z^K, n-1) \boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n) \\
&+ [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{A}(z_\omega^V, z^K, n-2) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{A}(z^K, z_\omega^V, n-2) \boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n) + [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{F}(z_\omega^V, z^K, n-2) \\
&+ \mathbf{C}(z_\omega^V, z^K, n-1) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{B}(z^K, z_\omega^V, n-1) \boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n) + [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{J}(z_\omega^V, z^K, n-2) \boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n) \\
&+ [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{A}(z_\omega^V, z^K, n-2) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{C}(z^K, z_\omega^V, n-2) + [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{L}(z_\omega^V, z^K, n-1) \boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n) \\
&+ \mathbf{C}(z_\omega^V, z^K, n-1) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{A}(z^K, z_\omega^V, n-2) \boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n) + \mathbf{C}(z_\omega^V, z^K, n-1) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{C}(z^K, z_\omega^V, n-2) \\
&+ [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{B}(z_\omega^V, z^K, n-1) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{A}(z^K, z_\omega^V, n-2) \boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n) \\
&+ [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{A}(z_\omega^V, z^K, n-2) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{B}(z^K, z_\omega^V, n-1) \boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n) \\
&+ [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{B}(z_\omega^V, z^K, n-1) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{C}(z^K, z_\omega^V, n-2)
\end{aligned} \tag{3.90}$$

y

$$\begin{aligned}
\mathbf{Z}(z_\omega^V, z^K, n) &= \mathbf{Z}(z_\omega^V, z^K, n-1) + \mathbf{Z}(z_\omega^V, z^K, n-2) + \boldsymbol{\theta}_3(z_\omega^V, n) \mathbf{B}(z_\omega^V, z^K, n-1) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{B}(z^K, z_\omega^V, n-1) \\
&+ \boldsymbol{\theta}_3(z_\omega^V, n) \mathbf{A}(z_\omega^V, z^K, n-2) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{A}(z^K, z_\omega^V, n-2) + \mathbf{L}(z_\omega^V, z^K, n-1) \boldsymbol{\theta}_3(z_\omega^V, n) \\
&+ \boldsymbol{\theta}_3(z_\omega^V, n) \mathbf{B}(z_\omega^V, z^K, n-1) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{A}(z^K, z_\omega^V, n-2) + \mathbf{L}(z^K, z_\omega^V, n-1) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \\
&+ \boldsymbol{\theta}_3(z_\omega^V, n) \mathbf{A}(z_\omega^V, z^K, n-2) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{B}(z^K, z_\omega^V, n-1) + \mathbf{J}(z_\omega^V, z^K, n-2) \boldsymbol{\theta}_3(z_\omega^V, n) \\
&+ \mathbf{J}(z^K, z_\omega^V, n-2) \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n)
\end{aligned} \tag{3.91}$$

Las funciones de Green  $\mathbf{g}_{L,L}^{(n)}(z)$ ,  $\mathbf{g}_{R,R}^{(n)}(z_\omega^V)$ ,  $\mathbf{g}_{L,R}^{(n)}(z_\omega^V)$  y  $\mathbf{g}_{R,L}^{(n)}(z_\omega^V)$  están determinadas por las ecuaciones (3.40)-(3.43). Por último, las condiciones iniciales para el cálculo de la conductividad eléctrica a través de la fórmula de Kubo-Greenwood son

$$\mathbf{A}_C(z_\omega^V, z^K, 1) = \mathbf{B}_C(z_\omega^V, z^K, 1) = \mathbf{C}_C(z_\omega^V, z^K, 1) = \mathbf{0} \quad \text{y} \quad \mathbf{D}_C(z_\omega^V, z^K, 1) = \mathbf{t}_A \tag{3.92}$$

$$\mathbf{A}(z_\omega^V, z^K, 1) = \mathbf{A}(z^K, z_\omega^V, 1) = \mathbf{B}(z_\omega^V, z^K, 1) = \mathbf{B}(z^K, z_\omega^V, 1) = \mathbf{J}(z_\omega^V, z^K, 1) = \mathbf{J}(z^K, z_\omega^V, 1) = \mathbf{L}(z_\omega^V, z^K, 1) = \mathbf{0} \tag{3.93}$$

$$\mathbf{L}(z^K, z_\omega^V, 1) = \mathbf{K}(z_\omega^V, z^K, 1) = \mathbf{K}(z^K, z_\omega^V, 1) = \mathbf{F}(z_\omega^V, z^K, 1) = \mathbf{F}(z^K, z_\omega^V, 1) = \mathbf{Z}(z_\omega^V, z^K, 1) = \mathbf{Z}(z^K, z_\omega^V, 1) = \mathbf{0}$$

$$\mathbf{C}(z_\omega^V, z^K, 1) = \mathbf{C}(z^K, z_\omega^V, 1) = -\mathbf{D}(z_\omega^V, z^K, 1) = -\mathbf{D}(z^K, z_\omega^V, 1) = -\mathbf{t}_A \tag{3.94}$$

y

$$\mathbf{A}_C(z_\omega^V, z^K, 2) = [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{t}_A, \quad \mathbf{B}_C(z_\omega^V, z^K, 2) = \mathbf{t}_B \boldsymbol{\theta}_2(z^K, n), \quad \mathbf{C}_C(z_\omega^V, z^K, 2) = \mathbf{0}, \tag{3.95}$$

$$\mathbf{D}_C(z_\omega^V, z^K, 2) = [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{t}_A + \mathbf{t}_B \boldsymbol{\theta}_1(z^K, n)$$

$$\mathbf{A}_C(z^K, z_\omega^V, 2) = \mathbf{t}_A \boldsymbol{\theta}_1(z^K, n), \quad \mathbf{B}_C(z^K, z_\omega^V, 2) = [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{t}_B, \quad \mathbf{C}_C(z^K, z_\omega^V, 2) = \mathbf{0}, \tag{3.96}$$

$$\mathbf{D}_C(z^K, z_\omega^V, 2) = \mathbf{t}_A \boldsymbol{\theta}_2(z^K, n) + [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{t}_B$$

$$\mathbf{A}(z_\omega^V, z^K, 2) = [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{t}_A - \mathbf{t}_A \boldsymbol{\theta}_1(z^K, n), \quad \mathbf{B}(z_\omega^V, z^K, 2) = \mathbf{t}_B \boldsymbol{\theta}_2(z^K, n) - [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{t}_B \tag{3.97}$$

$$\mathbf{C}(z_\omega^V, z^K, 2) = -[\mathbf{t}_A \boldsymbol{\theta}_2(z^K, n) + [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{t}_B], \quad \mathbf{D}(z_\omega^V, z^K, 2) = [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{t}_A + \mathbf{t}_B \boldsymbol{\theta}_1(z^K, n) \tag{3.98}$$

$$\mathbf{A}(z^K, z_\omega^V, 2) = \mathbf{t}_A \boldsymbol{\theta}_1(z^K, n) - [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{t}_A, \quad \mathbf{B}(z^K, z_\omega^V, 2) = [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{t}_B - \mathbf{t}_B \boldsymbol{\theta}_2(z^K, n) \tag{3.99}$$

$$\mathbf{C}(z^K, z_\omega^V, 2) = -[\mathbf{t}_B \boldsymbol{\theta}_1(z^K, n) + [\boldsymbol{\theta}_2(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{t}_A], \quad \mathbf{D}(z^K, z_\omega^V, 2) = \mathbf{t}_A \boldsymbol{\theta}_2(z^K, n) + [\boldsymbol{\theta}_1(z_\omega^V, n)]^T \mathbf{t}_B \tag{3.100}$$

$$\mathbf{J}(z_\omega^V, z^K, 2) = -\mathbf{t}_A \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{t}_A, \quad \mathbf{J}(z^K, z_\omega^V, 2) = -\mathbf{t}_A \boldsymbol{\theta}_3(z_\omega^V, n) \mathbf{t}_A, \quad \mathbf{L}(z_\omega^V, z^K, 2) = -\mathbf{t}_B \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{t}_B \tag{3.101}$$

$$\mathbf{L}(z^K, z_\omega^V, 2) = -\mathbf{t}_B \boldsymbol{\theta}_3(z_\omega^V, n) \mathbf{t}_B, \quad \mathbf{K}(z_\omega^V, z^K, 2) = \mathbf{t}_B \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{t}_A, \quad \mathbf{K}(z^K, z_\omega^V, 2) = \mathbf{t}_B \boldsymbol{\theta}_3(z_\omega^V, n) \mathbf{t}_A \tag{3.102}$$

$$\mathbf{F}(z_\omega^V, z^K, 2) = \mathbf{t}_A \boldsymbol{\theta}_3(z^K, n) \mathbf{t}_B, \quad \mathbf{F}(z^K, z_\omega^V, 2) = \mathbf{t}_A \boldsymbol{\theta}_3(z_\omega^V, n) \mathbf{t}_B, \quad \mathbf{Z}(z_\omega^V, z^K, 2) = \mathbf{Z}(z^K, z_\omega^V, 2) = \mathbf{0} \tag{3.103}$$

Para los nanoalambres cuasiperiódicos con sección transversal de  $N_{\perp}$  átomos, el método de renormalización matricial en el espacio real permite calcular la conductividad electrónica mediante la fórmula de Kubo-Greenwood sin introducir aproximaciones adicionales. En comparación con el método de inversión, cuyo tiempo de cómputo crece en forma cúbica con el tamaño del sistema, el método de renormalización escalar crece logarítmicamente [Sánchez, 2004] y el método de renormalización matricial crece también de forma logarítmica con una traslación como se muestra en la Figura 3.2.

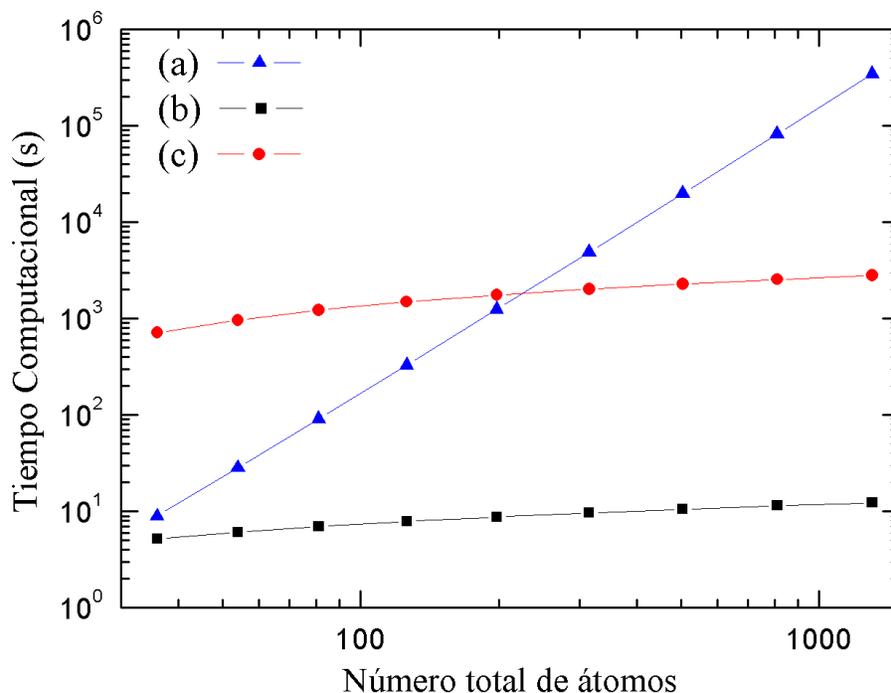


Figura 3.2 Tiempo de cómputo versus el número total de átomos para evaluar la fórmula de Kubo-Greenwood de un nanoalambre tipo Fibonacci de sección transversal  $3 \times 3$  átomos mediante los métodos de (a) inversión directa, (b) de renormalización escalar más convolución y (c) de renormalización matricial. El cálculo numérico se realizó en una estación de trabajo con 2 procesadores Intel Xeon E5-2620.

## Capítulo 4 Conductancia de Nanoalambres Cuasiperiódicos

La conductancia  $[g(\mu)]$  eléctrica  $dc$  puede ser obtenida a través del formalismo de Kubo-Greenwood (2.55) como

$$g(\mu, \omega, T) = \sigma(\mu, \omega, T) \Omega_{\perp} / \Omega_{\parallel} \quad (4.1)$$

donde  $\Omega_{\perp}$  es el tamaño de la sección transversal o área,  $\Omega_{\parallel}$  es la longitud del sistema y  $\sigma(\mu, \omega, T)$  es la conductividad eléctrica. Cabe mencionar que el método de renormalización matricial desarrollado en el Capítulo 3 es para cualquier temperatura ( $T$ ) y frecuencia de oscilación ( $\omega$ ) del campo eléctrico ( $\mathbf{E}$ ) aplicado. Como ejemplo, en este Capítulo se analiza la conductancia eléctrica  $dc$  de nanoalambres a partir de la ecuación (2.57) en la forma matricial detallada en Sección 3.3 para los límites de  $\omega \rightarrow 0$  y  $T \rightarrow 0$ .

Los nanoalambres considerados en esta tesis van a tener secciones transversales de  $2 \times 2$ ,  $2 \times 3$ ,  $3 \times 3$ ,  $3 \times 4$  y  $4 \times 4$  átomos. Además, en la dirección longitudinal, el tamaño del sistema puede variar desde 4 hasta  $10^8$  átomos. Se considera el problema de enlaces, es decir, el ordenamiento de las integrales de salto ( $\mathbf{t}_{A,\perp}$ ,  $\mathbf{t}_{B,\perp}$ ,  $\mathbf{t}_{A,\parallel}$  y  $\mathbf{t}_{B,\parallel}$ ) sigue la secuencia de Fibonacci. En particular, los planos transversales con  $\mathbf{t}_{B,\perp}$  se encuentran al lado de las integrales de salto  $\mathbf{t}_{B,\parallel}$  y en consecuencia, el número de estos planos transversales es igual al número de  $\mathbf{t}_{B,\parallel}$  en cada canal de conducción longitudinal. Un ejemplo de estos nanoalambres se muestra esquemáticamente en la Figura 4.1. Nótese que matemáticamente las integrales de salto  $\mathbf{t}_{A,\perp}$ ,  $\mathbf{t}_{B,\perp}$ ,  $\mathbf{t}_{A,\parallel}$  y  $\mathbf{t}_{B,\parallel}$  se establecen en forma matricial.

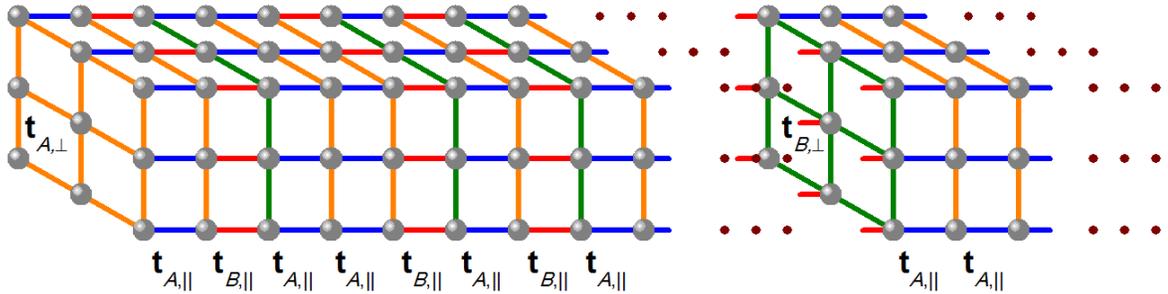


Figura 4.1 Dibujo esquemático de un nanoalambre con sección transversal  $3 \times 3$  átomos (bolas grises) enlazados por las matrices de integrales de salto  $\mathbf{t}_{A,\perp}$  (líneas naranjas),  $\mathbf{t}_{B,\perp}$  (líneas verdes),  $\mathbf{t}_{A,\parallel}$  (líneas azules) y  $\mathbf{t}_{B,\parallel}$  (líneas rojas) que siguen el ordenamiento de la secuencia de Fibonacci a lo largo del nanoalambre.

Se introducen dos parámetros que caracterizan la intensidad de desorden estructural o cuasiperiodicidad en el sistema dados por  $\gamma_{\perp} \equiv t_{A,\perp} / t_{B,\perp}$  y  $\gamma_{\parallel} \equiv t_{A,\parallel} / t_{B,\parallel}$  donde  $t_{l,\alpha}$  son integrales de salto que constituyen los elementos de las matrices  $\mathbf{t}_{l,\alpha}$  siendo  $l = A$  o  $B$  y  $\alpha = \perp$  o  $\parallel$ . Existe un cuanto de conductividad eléctrica dado por  $\mathbf{g}_0 = 2e^2/h$  donde  $e$  es la carga del electrón y  $h$  es la constante de Planck. Por lo que un análisis adimensional de la conductancia eléctrica  $dc$   $[g(\mu)]$  se realiza estudiando a  $g(\mu)/\mathbf{g}_0$ . Además, los nanoalambres estudiados en esta tesis están unidos

en los extremos a dos saturadores nanoalámbricos periódicos semi-infinitos con integral de salto  $t$  en todos sus enlaces.

En esta tesis, los cálculos numéricos de  $g(\mu)$  tienen una parte imaginaria de  $\eta=10^{-11}|t|$ , mientras la densidad de estados  $[\text{DOS}(\mu)]$  de  $\eta=10^{-3}|t|$ . Las Figuras de este Capítulo tienen una partición en la energía de 300 puntos por unidad de  $|t|$ .

#### 4.1. Sección Transversal Cuadrática

En las Figuras 4.2(a-c) se muestran los espectros de la conductancia eléctrica  $dc$  [ $g(\mu)$ ] versus el potencial químico ( $\mu$ ) calculada mediante la ecuación (4.1) de los nanoalambres tipo Fibonacci con sección transversal de  $N_{\perp}=3\times 3$  átomos y una longitud que corresponde a la generación  $n=40$  de  $N_{\parallel}=165580142$  planos, dando un total de  $N_T = N_{\perp}N_{\parallel} = 1490221278$  átomos, con  $\gamma_{\parallel}=1.0$  y (a)  $\gamma_{\perp}=0.9$ , (b)  $\gamma_{\perp}=0.8$  y (c)  $\gamma_{\perp}=0.7$ . En esas Figuras, las líneas grises indican  $g(\mu)$  de un nanoalambre totalmente periódico. En las Figuras 4.2(d-f) se presentan los espectros de la densidad de estados  $[\text{DOS}(\mu)]$  en función del potencial químico ( $\mu$ ) calculada mediante la ecuación (3.44), normalizada por  $N_T$ , para los mismos sistemas de las Figuras 4.2(a-c), respectivamente.

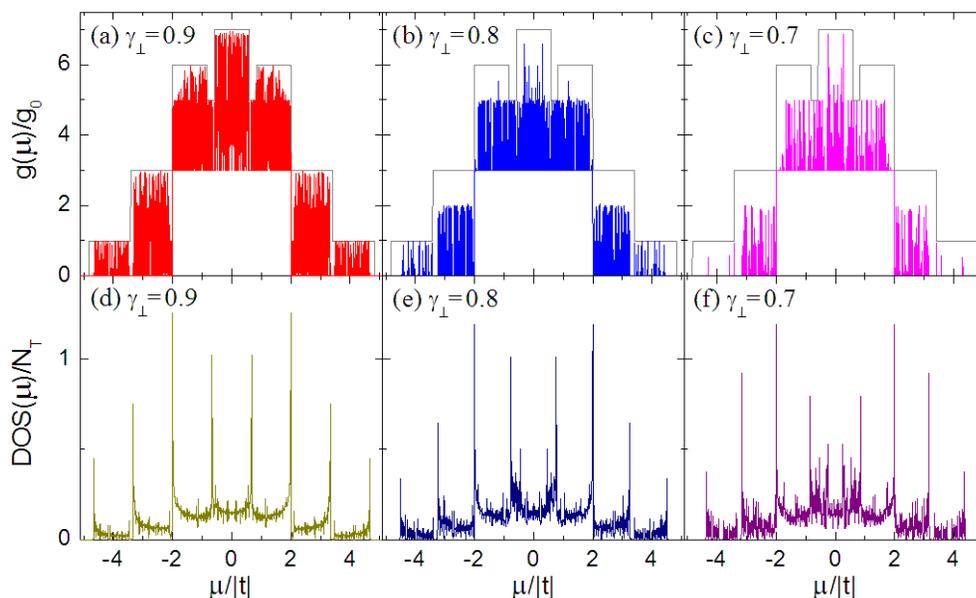


Figura 4.2 Conductancia electrónica  $dc$  [ $g(\mu)$ ] de los nanoalambres con sección transversal  $3\times 3$  átomos con  $\gamma_{\parallel}=1.0$  y  $\gamma_{\perp}$  igual a (a) 0.9, (b) 0.8 y (c) 0.7; comparadas con  $\text{DOS}(\mu)$  para los mismos nanoalambres con  $\gamma_{\parallel}=1.0$  y  $\gamma_{\perp}$  igual a (d) 0.9, (e) 0.8 y (f) 0.7.

Nótese que existe una brecha energética prohibida en  $3.33 < |\mu/t| < 3.47$  para  $g(\mu)$  en la Figura 4.2(a) con  $\gamma_{\perp}=0.9$ , la cual se verifica en  $\text{DOS}(\mu)$  de la Figura 4.2(d). Para los casos  $\gamma_{\perp}=0.8$  y  $\gamma_{\perp}=0.7$  el número de brechas energéticas aumenta para  $|\mu/t| > 2 + \sqrt{2}$ . La existencia de estas brechas se debe a que para  $|\mu/t| > 2 + \sqrt{2}$  el transporte electrónico ocurre en un sólo

canal independiente de conducción con autoenergía efectiva de  $2\sqrt{2}t$  como se discute en el Apéndice D.

Además, se puede observar en las Figuras 4.2(a-c) que los nanoalambres con potencial químico ubicado en  $-2 < \mu/|t| < 2$  siempre tienen una conductancia mayor que  $3g_0$ . Esto se puede entender utilizando la transformación unitaria discutida en el Apéndice D. En particular, para una sección transversal  $N_{\perp} = 3 \times 3$  átomos, el nanoalambre se puede visualizar como nueve canales independientes de conducción, cuyas autoenergías del sitio  $l$  son  $\{-2\sqrt{2}t_{l,\perp}, -\sqrt{2}t_{l,\perp}, -\sqrt{2}t_{l,\perp}, 0, 0, 0, \sqrt{2}t_{l,\perp}, \sqrt{2}t_{l,\perp}, 2\sqrt{2}t_{l,\perp}\}$ , respectivamente. En general, los planos  $l$  podrían ser de tipo  $A$  o  $B$ , por lo que, los canales independientes de conducción tienen autoenergías variantes a lo largo de éstos, excepto para los tres canales con autoenergías nulas. Estos últimos son canales totalmente periódicos con un transporte balístico de electrones aportando una conductancia de  $g_0$  por cada uno de estos canales. De esta forma se prueba analíticamente la existencia de dicha región del potencial químico  $-2 < \mu/|t| < 2$  con la conductancia eléctrica  $dc$   $[g(\mu)]$  mínima  $3g_0$ .

A continuación se presentan los resultados con  $\gamma_{\parallel}$  diferente de unidad, es decir, las integrales de salto a lo largo del nanoalambre varían siguiendo la secuencias de Fibonacci. En las Figuras 4.3(a-c) se ilustran los espectros de  $g(\mu)$ , normalizado por  $g_0$ , como una función del potencial químico ( $\mu$ ) para los mismos sistemas en las Figuras 4.2(a-c), excepto  $\gamma_{\parallel} = 0.9$ , (a)  $\gamma_{\perp} = 1.0$ , (b)  $\gamma_{\perp} = 0.9$  y (c)  $\gamma_{\perp} = 0.8$ .

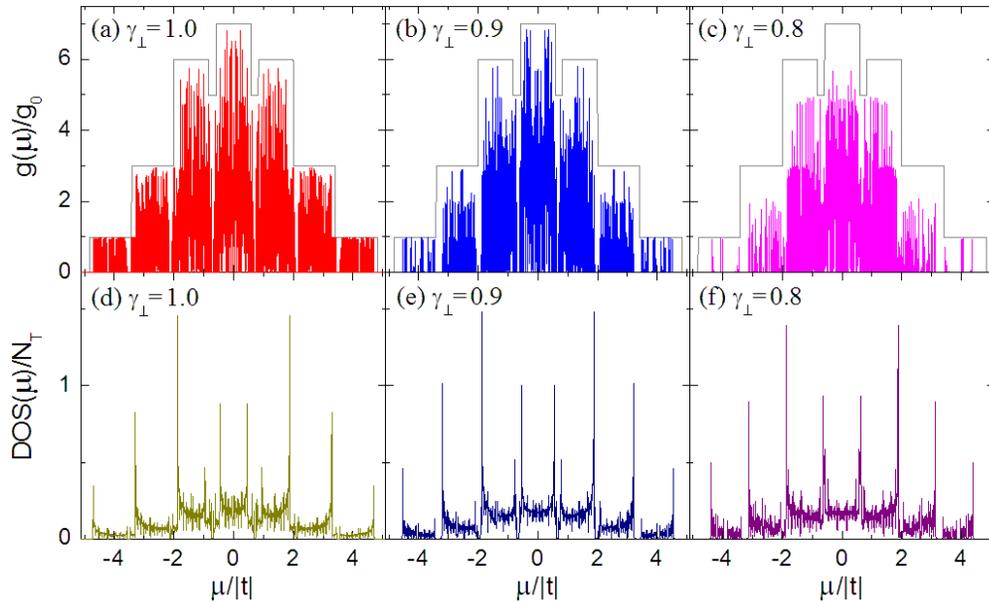


Figura 4.3 Conductancia electrónica  $dc$   $[g(\mu)]$  de los nanoalambres con sección transversal  $3 \times 3$  átomos con  $\gamma_{\parallel} = 0.9$  y  $\gamma_{\perp}$  igual a (a) 1.0, (b) 0.9 y (c) 0.8; comparadas con  $DOS(\mu)$  para  $\gamma_{\parallel} = 0.9$  y  $\gamma_{\perp}$  igual a (d) 1.0, (e) 0.9 y (f) 0.8.

En las Figuras 4.3(a-c), las líneas grises indican  $g(\mu)$  de un nanoalambre totalmente periódico. En las Figuras 4.3(d-f) se muestran los espectros de  $DOS(\mu)$  dependientes del potencial químico ( $\mu$ ), normalizado por  $N_T$ , para los mismos sistemas de las Figuras 4.3(a-c), respectivamente. Contrario a lo que se observa en las Figuras 4.2(a-c), las Figuras 4.3(a-c) muestran  $g(\mu)$  con brechas energéticas prohibidas en la región de potencial químico  $-2 < \mu/t < 2$ ; por ejemplo, la Figura 4.3(a) tiene una en el intervalo  $0.67 < |\mu/t| < 0.74$  confirmada mediante  $DOS(\mu)$  mostrada en la Figura 4.3(d). Esto es consecuencia de que los canales independientes con autoenergías nulas no son periódicos debido a que sus integrales de salto varían a lo largo del canal.

Cabe mencionar que tanto la conductancia eléctrica  $dc$  [ $g(\mu)$ ] como la densidad de estados [ $DOS(\mu)$ ] pueden ser estudiadas mediante el método de renormalización escalar más el teorema de convolución cuando el hamiltoniano total del sistema es separable (C.1). A continuación, se analiza el sistema de la Figura 4.3(a) con  $\gamma_{\perp} = 1.0$  empleando el método escalar más el teorema de convolución detallados en los Apéndices B y C, respectivamente.

En las Figuras 4.4(a-c) se ejemplifican los espectros de  $g(\mu)$  como función del potencial químico ( $\mu$ ), normalizado por  $g_0 = 2e^2/h$ , obtenida mediante la ecuación (C.22) para los nanoalambres de las Figuras 4.2(a-c) excepto  $\gamma_{\perp} = 1.0$  y (a)  $\gamma_{\parallel} = 0.9$ , (b)  $\gamma_{\parallel} = 0.8$  y (c)  $\gamma_{\parallel} = 0.7$ .

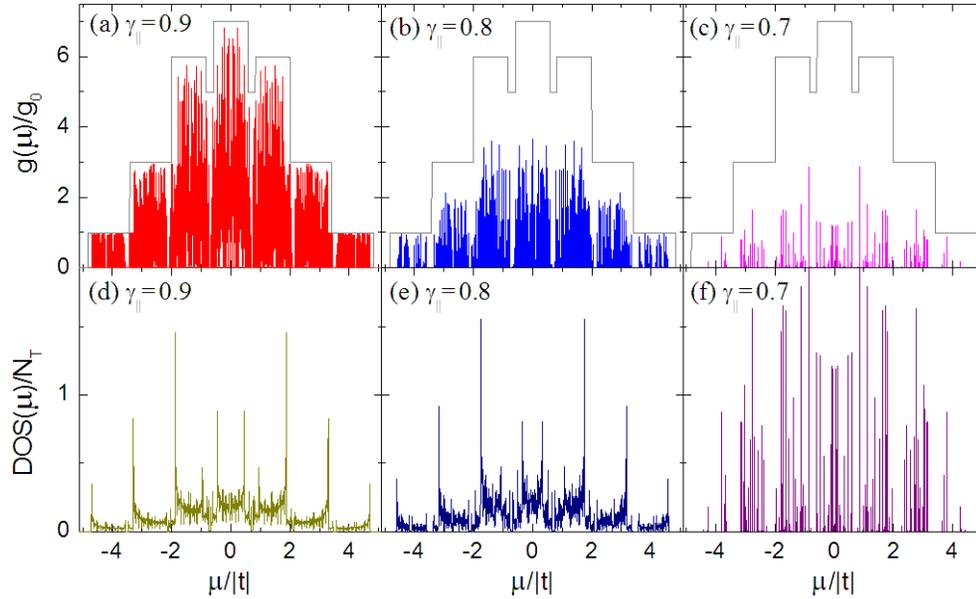


Figura 4.4 Conductancia electrónica  $dc$  [ $g(\mu)$ ] de los nanoalambres con sección transversal  $3 \times 3$  átomos con  $\gamma_{\perp} = 1.0$  y  $\gamma_{\parallel}$  igual a (a) 0.9, (b) 0.8 y (c) 0.7; comparadas con  $DOS(\mu)$  para  $\gamma_{\perp} = 1.0$  y  $\gamma_{\parallel}$  igual a (d) 0.9, (e) 0.8 y (f) 0.7, obtenidas usando el teorema de convolución.

En las Figuras 4.4(a-c), las líneas grises indican  $g(\mu)$  de un nanoalambre totalmente periódico. En las Figuras 4.4(d-f) se enseñan los espectros de  $DOS(\mu)$  versus el potencial químico ( $\mu$ ) calculada mediante la ecuación (C.10), normalizada por  $N_T$ , para el mismo tamaño de sistema de las Figuras 4.4(a-c), respectivamente. Nótese que tanto las Figuras 4.3(a) como

4.4(a) muestran el mismo espectro de  $g(\mu)$ , ésto confirma la validez del método de renormalización matricial para el caso cuando el parámetro de cuasiperiodicidad es  $\gamma_{\perp} = 1.0$ . De igual manera, los espectros de  $DOS(\mu)$  en las Figuras 4.3(d) y 4.4(d) coinciden entre ellos. Además, observe que el desorden estructural a lo largo del nanoalambre destruye fuertemente tanto los espectros de  $g(\mu)$  como de  $DOS(\mu)$ .

En las Figuras 4.5 se muestran los espectros de  $g(\mu)$  en función del potencial químico ( $\mu$ ), normalizado por  $g_0 = 2e^2/h$ , de los nanoalambres de las Figuras 4.2(a-c), excepto (a)  $\gamma_{\perp} = 0.6$ , (b)  $\gamma_{\perp} = 0.5$ , (c)  $\gamma_{\perp} = 0.4$  y (d)  $\gamma_{\perp} = 0.3$ . En estas Figuras, las líneas grises indican  $g(\mu)$  de un nanoalambre totalmente periódico. Observe en las Figuras 4.5 que  $g(\mu)$  en el intervalo de potencial químico  $-2 < \mu/|t| < 2$  conserva la característica del valor mínimo de  $3g_0$  visto en las Figuras 4.2(a-c) aunque el valor  $\gamma_{\perp}$  sea pequeño ya que los canales independientes con autoenergías nulas de los nanoalambres mantienen aún el transporte balístico.

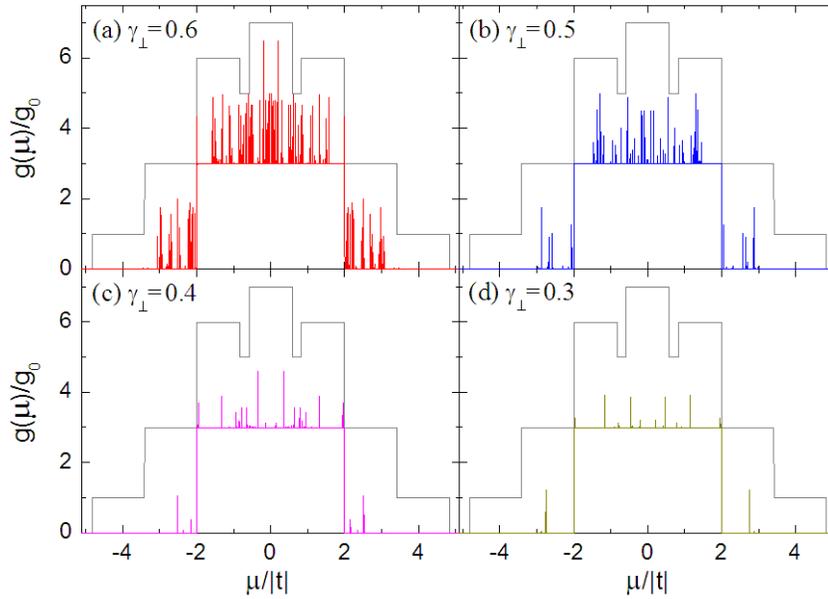


Figura 4.5 Conductancia electrónica  $dc$  [ $g(\mu)$ ] de los nanoalambres con sección transversal  $3 \times 3$  átomos con  $\gamma_{\parallel} = 1.0$  y  $\gamma_{\perp}$  igual a (a) 0.6, (b) 0.5, (c) 0.4 y (d) 0.3.

En las Figuras 4.6 se ejemplifican los espectros de  $g(\mu)$  versus el potencial químico ( $\mu$ ), normalizado por  $g_0$ , de los nanoalambres de las Figuras 4.3 excepto (a)  $\gamma_{\perp} = 0.7$ , (b)  $\gamma_{\perp} = 0.6$ , (c)  $\gamma_{\perp} = 0.5$  y (d)  $\gamma_{\perp} = 0.4$ . En estas Figuras, las líneas grises indican  $g(\mu)$  de un nanoalambre totalmente periódico. Nótese que al reducir  $\gamma_{\perp}$  el valor en  $g(\mu)$  también disminuye; sin embargo dentro del intervalo del potencial químico ( $\mu$ )  $-2 < \mu/|t| < 2$  la conductancia eléctrica  $dc$  es mayor para  $\gamma_{\perp}$  pequeños respecto al  $\mu$  fuera del intervalo pues el transporte eléctrico ocurre mayoritariamente en los canales independientes con autoenergías nulas e integrales de salto correspondiente para  $\gamma_{\parallel} \equiv t_{A,\parallel}/t_{B,\parallel} = 0.9$ . Los demás canales independientes tienen una

fluctuación de autoenergías crece al disminuir  $\gamma_{\perp}$ , lo cual conduce a una conductancia casi nula de esos canales.

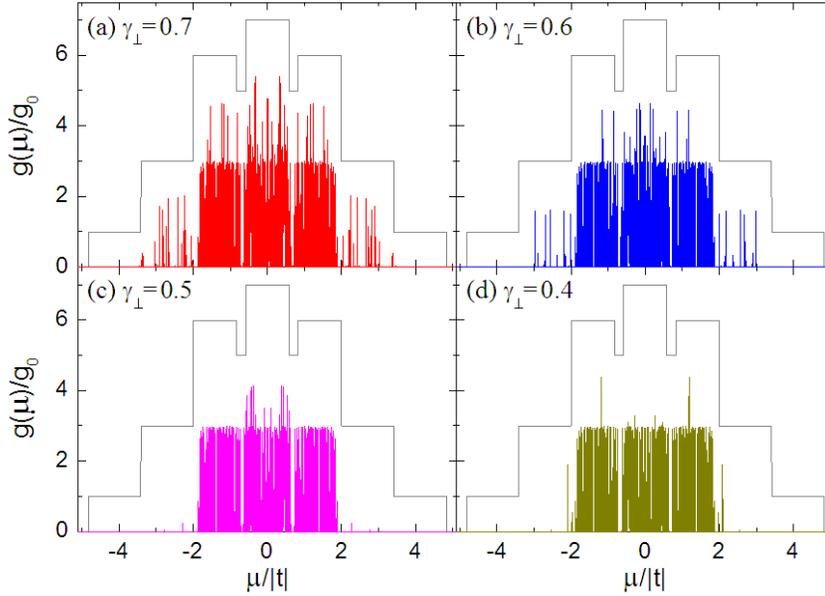


Figura 4.6 Conductancia electrónica  $dc$  [ $g(\mu)$ ] de los nanoalambres con sección transversal  $3 \times 3$  átomos con  $\gamma_{\parallel} = 0.9$  y  $\gamma_{\perp}$  igual a (a) 0.7, (b) 0.6, (c) 0.5 y (d) 0.4.

A continuación, se estudia a la conductancia eléctrica  $dc$  [ $g(\mu)$ ] cuando cambia la sección longitudinal del nanoalambre tipo Fibonacci. En las Figuras 4.7 se presentan los espectros de  $g(\mu)$  dependientes del potencial químico ( $\mu$ ), normalizado por  $g_0$ , para un nanoalambre de sección transversal  $N_{\perp} = 3 \times 3$  átomos con  $\gamma_{\parallel} = 1.0$  y  $\gamma_{\perp} = 0.9$  variando la sección longitudinal (a)  $N_{\parallel} = 165580142$  planos correspondiente a la generación de Fibonacci  $n = 40$  dando un número total en el sistema de  $N_T = 1490221278$  átomos, (b)  $N_{\parallel} = 63245987$  planos ( $n = 38$ ) y  $N_T = 569213883$  átomos, (c)  $N_{\parallel} = 24157818$  planos ( $n = 36$ ) y  $N_T = 217420362$  átomos, (d)  $N_{\parallel} = 9227466$  planos ( $n = 34$ ) y  $N_T = 83047194$  átomos, (e)  $N_{\parallel} = 3524579$  planos ( $n = 32$ ) y  $N_T = 31721211$  átomos, (f)  $N_{\parallel} = 1346270$  planos ( $n = 30$ ) y  $N_T = 12116430$  átomos. En estas Figuras, las líneas grises indican  $g(\mu)$  de un nanoalambre totalmente periódico. Véase que  $g(\mu)$  mantenga su valor mínimo de  $3g_0$  a lo largo de los diferentes tamaños del nanoalambre para el intervalo del potencial químico  $-2 < \mu/|t| < 2$ . En general, aunque visualmente los espectros se parecen, las ampliificaciones de dichos espectros muestran que la definición de las estructuras finas es proporcional al tamaño del sistema.

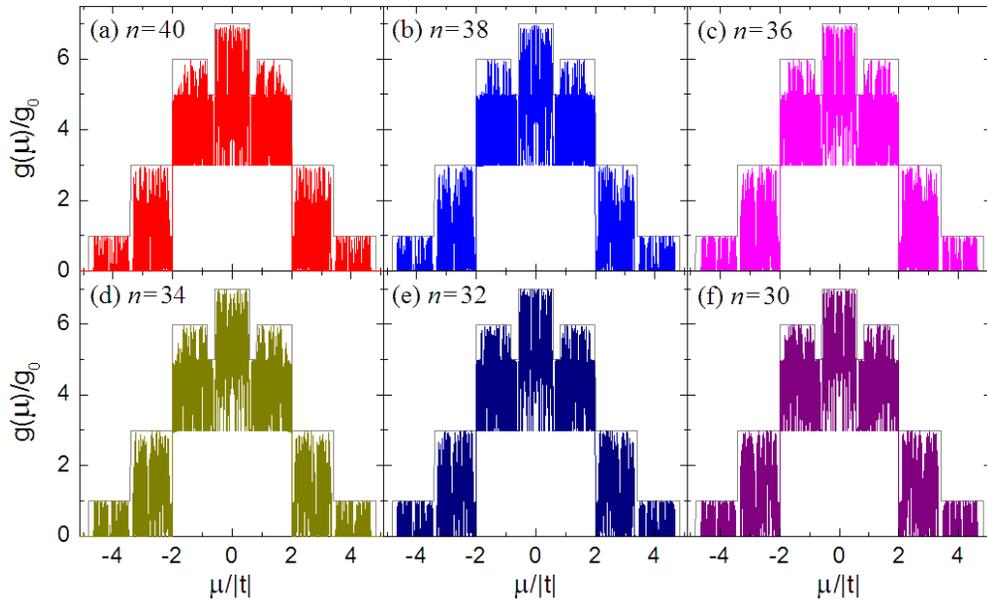


Figura 4.7 Conductancia electrónica  $dc$   $[g(\mu)]$  de los nanoalambres con sección transversal  $3 \times 3$  átomos con  $\gamma_{\parallel}=1.0$  y de  $\gamma_{\perp}=0.9$  para la generación  $n$  igual a (a) 40, (b) 38, (c) 36, (d) 34, (e) 32 y (f) 30.

En las Figuras 4.8 se ilustran los espectros de la conductancia eléctrica  $dc$   $[g(\mu)]$  como función del potencial químico ( $\mu$ ), normalizado por  $g_0 = 2e^2/h$ , para los nanoalambres de las Figuras 4.7, excepto  $\gamma_{\parallel}=0.9$  y  $\gamma_{\perp}=1.0$ . En estas Figuras, las líneas grises indican  $g(\mu)$  de un nanoalambre totalmente periódico. En general, se observa una estructura de bandas y gaps similares en las Figuras 4.8, sin embargo, el espectro de  $n=40$  es más denso en comparación con el de  $n=30$ .

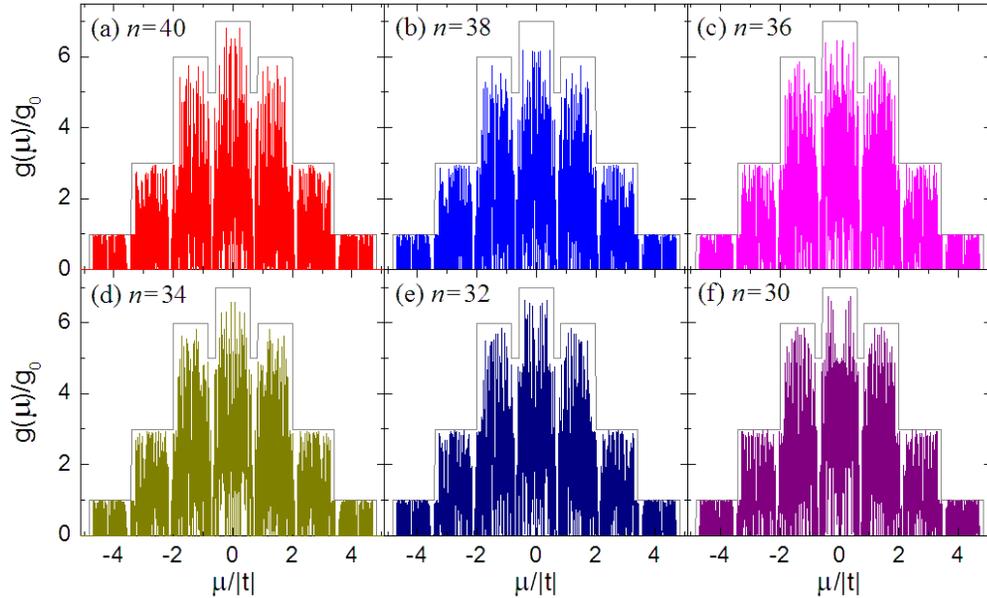


Figura 4.8 Conductancia electrónica  $dc$   $[g(\mu)]$  de los nanoalambres con sección transversal  $3 \times 3$  átomos con  $\gamma_{\parallel}=0.9$  y de  $\gamma_{\perp}=1.0$  para la generación  $n$  igual a (a) 40, (b) 38, (c) 36, (d) 34, (e) 32 y (f) 30.

## 4.2. Sección Transversal Rectangular

Hasta aquí, hemos analizado nanoalambres con sección transversal cuadrática. A continuación se presentan la conductancia eléctrica  $dc$  [ $g(\mu)$ ] y la densidad de estados [ $DOS(\mu)$ ] de nanoalambres con sección transversal de  $N_{\perp} = 3 \times 4$  átomos mostrado en la Figura 4.9.

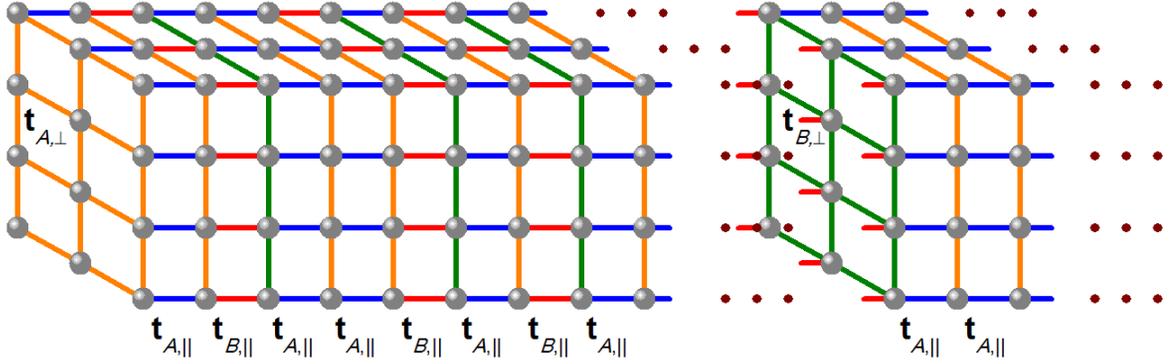


Figura 4.9 Dibujo esquemático de un nanoalambre con sección transversal  $3 \times 4$  átomos (bolas grises) enlazados por las matrices de integrales de salto  $t_{A,\perp}$  (líneas naranjas),  $t_{B,\perp}$  (líneas verdes),  $t_{A,\parallel}$  (líneas azules) y  $t_{B,\parallel}$  (líneas rojas) que siguen el ordenamiento de la secuencia de Fibonacci a lo largo del nanoalambre

En las Figuras 4.10(a-c) se ejemplifican los espectros de  $g(\mu)$  con respecto al potencial químico ( $\mu$ ), normalizado por  $g_0 = 2e^2/h$ , en los nanoalambres con sección transversal  $N_{\perp} = 3 \times 4$  átomos calculada mediante la ecuación (4.1) y una longitud correspondiente a la generación  $n=40$  de  $N_{\parallel} = 165580142$  planos con un número total  $N_T = N_{\perp} N_{\parallel} = 1986961704$  átomos con  $\gamma_{\parallel} = 1.0$  y (a)  $\gamma_{\perp} = 0.9$ , (b)  $\gamma_{\perp} = 0.8$  y (c)  $\gamma_{\perp} = 0.7$ .

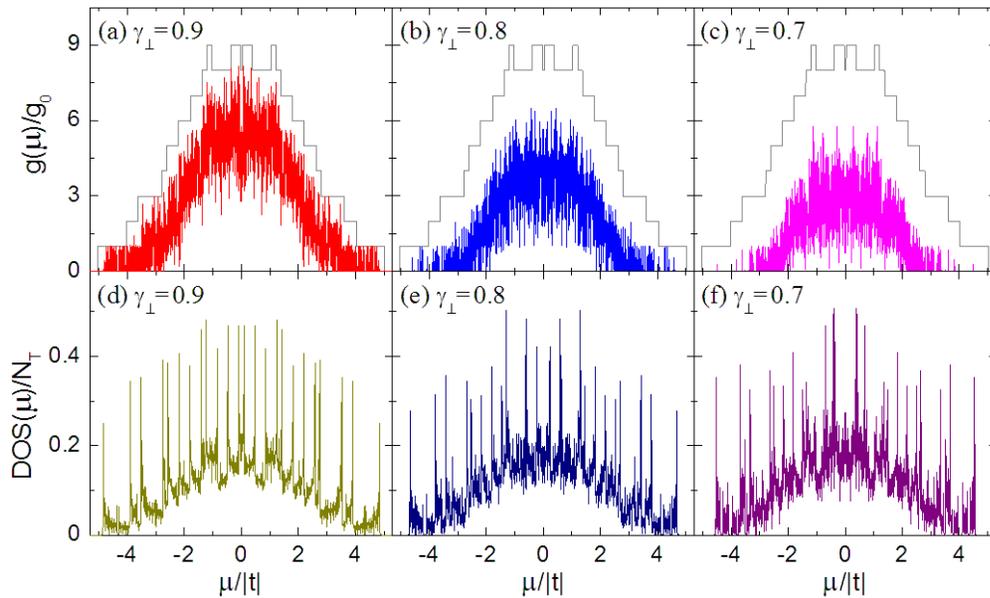


Figura 4.10 Conductancia electrónica  $dc$  [ $g(\mu)$ ] de los nanoalambres con sección transversal  $3 \times 4$  átomos con  $\gamma_{\parallel} = 1.0$  y  $\gamma_{\perp}$  igual a (a) 0.9, (b) 0.8 y (c) 0.7; comparadas con  $DOS(\mu)$  para  $\gamma_{\parallel} = 1.0$  y  $\gamma_{\perp}$  igual a (d) 0.9, (e) 0.8 y (f) 0.7.

En esas Figuras, las líneas grises indican  $g(\mu)$  de un nanoalambre totalmente periódico. En las Figuras 4.10(d-f) se muestran los espectros de DOS( $\mu$ ) en función del potencial químico ( $\mu$ ) calculada mediante la ecuación (3.44), normalizada por  $N_T$ , para los mismos sistemas de las Figuras 4.10(a-c), respectivamente. Nótese en las Figuras 4.10(a-c) la ausencia de la región bien definida con una  $g(\mu)$  mínima contrario a lo observado en las Figuras 4.2, esto se debe a la ausencia de canales independiente de conducción con autoenergías nulas en nanoalambres con sección transversal  $N_{\perp} = 3 \times 4$  átomos. Específicamente, para nanoalambres con  $N_{\perp} = 3 \times 4$  átomos se tienen doce canales independientes de conducción, cuyas autoenergías son aproximadamente

$$\left\{ -3.0322t_{l,\perp}, -2.0322t_{l,\perp}, -1.61803t_{l,\perp}, -0.7961t_{l,\perp}, -0.61803t_{l,\perp}, -0.2038t_{l,\perp}, \right. \\ \left. 0.2038t_{l,\perp}, 0.61803t_{l,\perp}, 0.7961t_{l,\perp}, 1.61803t_{l,\perp}, 2.0322t_{l,\perp}, 3.0322t_{l,\perp} \right\}, \quad (4.2)$$

respectivamente.

A continuación se presentan los resultados con  $\gamma_{\parallel}$  diferente de unidad, es decir, las integrales de salto a lo largo del nanoalambre varían siguiendo la secuencias de Fibonacci. En las Figuras 4.11(a-c) se ilustran los espectros de la conductancia eléctrica  $dc$  [ $g(\mu)$ ] versus el potencial químico ( $\mu$ ), normalizado por  $g_0$ , para los nanoalambres de las Figuras 4.10(a-c), excepto  $\gamma_{\parallel} = 0.9$  y (a)  $\gamma_{\perp} = 1.0$ , (b)  $\gamma_{\perp} = 0.9$  y (c)  $\gamma_{\perp} = 0.8$ . En esas Figuras, las líneas grises indican  $g(\mu)$  de un nanoalambre totalmente periódico. En las Figuras 4.11(d-f) se enseñan los espectros de la densidad de estados [DOS( $\mu$ )] dependientes del potencial químico ( $\mu$ ), normalizada por  $N_T$ , para los mismos sistemas de las Figuras 4.11(a-c), respectivamente.

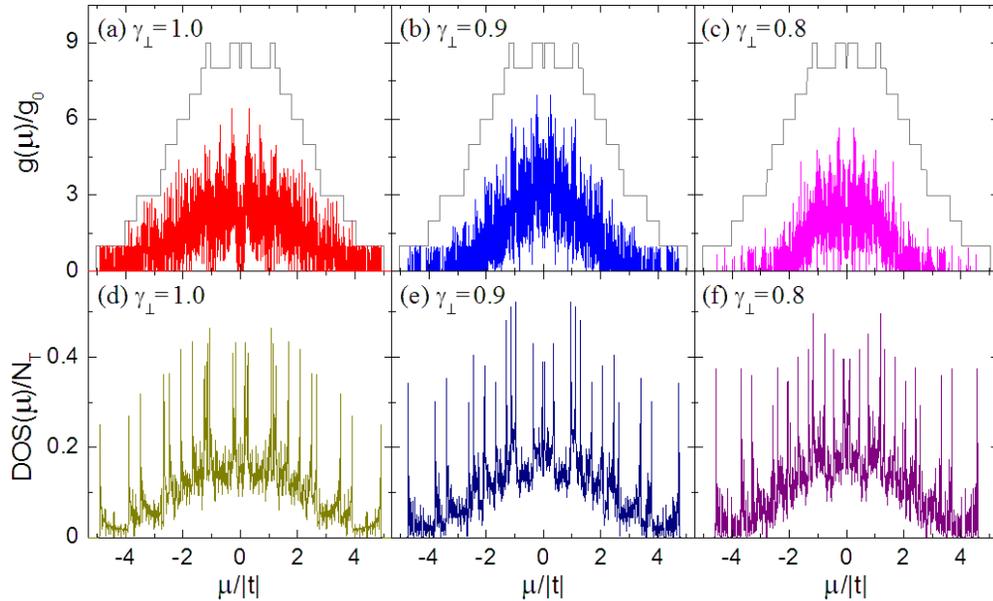


Figura 4.11 Conductancia electrónica  $dc$  [ $g(\mu)$ ] de los nanoalambres con sección transversal  $3 \times 4$  átomos con  $\gamma_{\parallel} = 0.9$  y  $\gamma_{\perp}$  igual a (a) 1.0, (b) 0.9 y (c) 0.8; comparadas con DOS( $\mu$ ) para  $\gamma_{\parallel} = 0.9$  y  $\gamma_{\perp}$  igual a (d) 1.0, (e) 0.9 y (f) 0.8.

De igual manera que en las Figuras 4.3(a-c), al romper la periodicidad de las integrales de salto tanto en la sección transversal  $\gamma_{\perp} \equiv t_{A,\perp}/t_{B,\perp}$  como en la longitudinal  $\gamma_{\parallel} \equiv t_{A,\parallel}/t_{B,\parallel}$ , la conductancia eléctrica  $dc$  presenta pseudobrechas y brechas energéticas a lo largo de los espectros en las Figuras 4.11(a-c).

A continuación, de la misma forma que la conductancia eléctrica  $dc$  [ $g(\mu)$ ] y la densidad de estados [DOS( $\mu$ )] fueron estudiadas mediante el método de renormalización escalar más el teorema de convolución en los nanoalambres cuadráticos. Se estudia el mismo sistema con sección transversal  $N_{\perp} = 3 \times 4$  átomos de la Figuras 4.11(a) con  $\gamma_{\perp} = 1.0$  utilizando el método escalar más el teorema de convolución detallados en los Apéndice B y C, respectivamente.

En las Figuras 4.12(a-c) se presentan los espectros de  $g(\mu)$  como función del potencial químico ( $\mu$ ) obtenida por la ecuación (C.22), normalizado por  $g_0 = 2e^2/h$ , en los nanoalambres de las Figuras 4.10(a-c), excepto  $\gamma_{\perp} = 1.0$  y (a)  $\gamma_{\parallel} = 0.9$ , (b)  $\gamma_{\parallel} = 0.8$  y (c)  $\gamma_{\parallel} = 0.7$ . En esas Figuras, las líneas grises indican  $g(\mu)$  de un nanoalambre totalmente periódico. En las Figuras 4.12(d-f) se ejemplifican los espectros de DOS( $\mu$ ) con respecto del potencial químico ( $\mu$ ) calculada mediante la ecuación (C.10), normalizada por  $N_T$ , para los mismos sistemas de las Figuras 4.12(a-c), respectivamente.

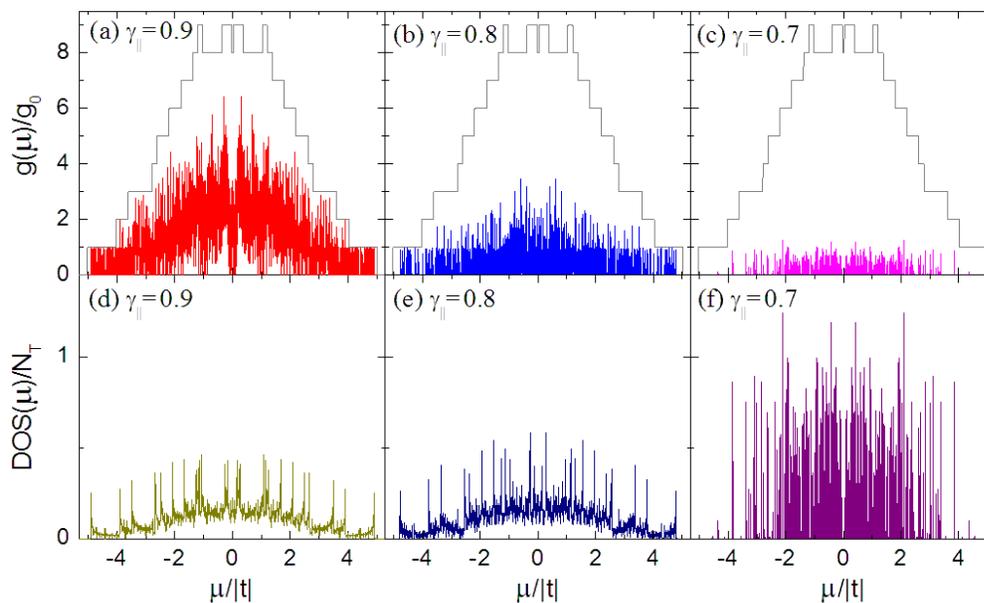


Figura 4.12 Conductancia electrónica  $dc$  [ $g(\mu)$ ] de los nanoalambres con sección transversal  $3 \times 4$  átomos con  $\gamma_{\perp} = 1.0$  y  $\gamma_{\parallel}$  igual a (a) 0.9, (b) 0.8 y (c) 0.7; comparadas con DOS( $\mu$ ) para  $\gamma_{\perp} = 1.0$  y  $\gamma_{\parallel}$  igual a (d) 0.9, (e) 0.8 y (f) 0.7, obtenidas usando el teorema de convolución.

Véase que los espectros de  $g(\mu)$  de las Figuras 4.11(a) y 4.12(a) coinciden entre ellos; de igual manera los espectros de DOS( $\mu$ ) de las Figuras 4.11(d) y 4.12(d) son similares, excepto por una diferencia de escala. Ésto valida nuevamente el método de renormalización matricial para el caso cuando el parámetro de cuasiperiodicidad es  $\gamma_{\perp} = 1.0$  en los nanoalambres con sección

transversal  $N_{\perp} = 3 \times 4$  átomos. Además, observe que la cuasiperiodicidad destruye fuertemente tanto los espectros de  $g(\mu)$  como de  $DOS(\mu)$ .

En las Figuras 4.13 se muestran los espectros de  $g(\mu)$  versus el potencial químico ( $\mu$ ), normalizado por  $g_0$ , para los nanoalambres de las Figuras 4.10(a-c), excepto (a)  $\gamma_{\perp} = 0.6$ , (b)  $\gamma_{\perp} = 0.5$ , (c)  $\gamma_{\perp} = 0.4$  y (d)  $\gamma_{\perp} = 0.3$ . En estas Figuras, las líneas grises indican  $g(\mu)$  de un nanoalambre totalmente periódico.

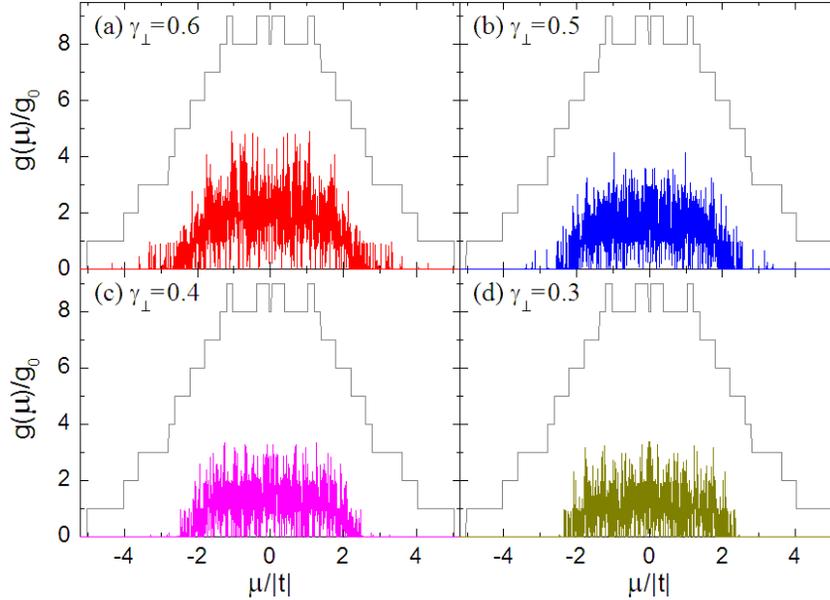


Figura 4.13 Conductancia electrónica  $dc$  [ $g(\mu)$ ] de los nanoalambres con sección transversal  $3 \times 4$  átomos con  $\gamma_{\parallel} = 1.0$  y  $\gamma_{\perp}$  igual a (a) 0.6, (b) 0.5, (c) 0.4 y (d) 0.3.

Nótese en las Figuras 4.13 que la conductancia eléctrica  $dc$  dentro del intervalo en el potencial químico  $-3 < \mu/|t| < 3$  tiene primordialmente pseudobrechas energéticas en comparación del potencial fuera de dicha región aunque el parámetro de cuasiperiodicidad  $\gamma_{\perp}$  sea pequeño como en la Figura 4.13(d).

En las Figuras 4.14 se ilustran los espectros de la conductancia eléctrica  $dc$  [ $g(\mu)$ ] como función del potencial químico ( $\mu$ ), normalizado por  $g_0 = 2e^2/h$ , en los nanoalambres de las Figuras 4.10(a-c), excepto  $\gamma_{\parallel} = 0.9$  y (a)  $\gamma_{\perp} = 0.7$ , (b)  $\gamma_{\perp} = 0.6$ , (c)  $\gamma_{\perp} = 0.5$  y (d)  $\gamma_{\perp} = 0.4$ . En estas Figuras, las líneas grises indican  $g(\mu)$  de un nanoalambre totalmente periódico. Observe que a pesar de que estos nanoalambres no son cuadráticos para  $g(\mu)$  dentro del intervalo en el potencial químico  $-3 < \mu/|t| < 3$  aparecen principalmente pseudobrechas energéticas para los valores de cuasiperiodicidad  $\gamma_{\parallel} = 0.9$  y  $\gamma_{\perp}$  pequeño como se muestra en la Figura 4.14(d).

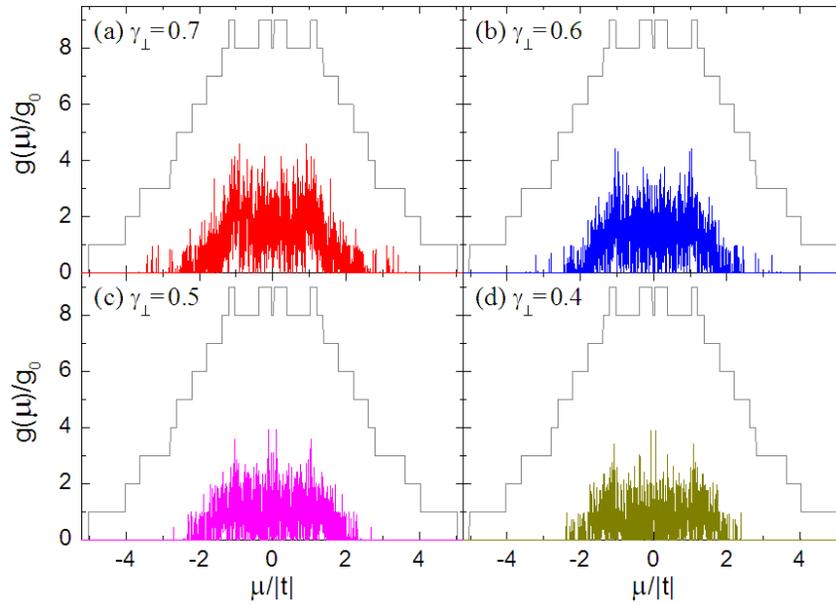


Figura 4.14 Conductancia electrónica  $dc$  [ $g(\mu)$ ] de los nanoalambres con sección transversal  $3 \times 4$  átomos con  $\gamma_{\parallel} = 0.9$  y  $\gamma_{\perp}$  igual a (a) 0.7, (b) 0.6, (c) 0.5 y (d) 0.4.

A continuación, se estudia a la conductancia eléctrica  $dc$  [ $g(\mu)$ ] cuando cambia la longitud de los nanoalambres tipo Fibonacci con sección transversal  $N_{\perp} = 3 \times 4$  átomos. En las Figuras 4.15 se enseñan los espectros de  $g(\mu)$  como función del potencial químico ( $\mu$ ), normalizado por  $g_0 = 2e^2/h$ , para los nanoalambres con sección transversal  $N_{\perp} = 3 \times 4$  átomos con  $\gamma_{\parallel} = 1.0$  y  $\gamma_{\perp} = 0.9$  variando la longitud (a)  $N_{\parallel} = 165580142$  planos correspondiente a la generación  $n = 40$ , dando un número total en el sistema de  $N_T = 1986961704$  átomos, (b)  $N_{\parallel} = 63245987$  planos ( $n = 38$ ) y  $N_T = 758951844$  átomos, (c)  $N_{\parallel} = 24157818$  planos ( $n = 36$ ) y  $N_T = 289893816$  átomos, (d)  $N_{\parallel} = 9227466$  planos ( $n = 34$ ) y  $N_T = 110729592$  átomos, (e)  $N_{\parallel} = 3524579$  planos ( $n = 32$ ) y  $N_T = 42294948$  átomos, (f)  $N_{\parallel} = 1346270$  planos ( $n = 30$ ) y  $N_T = 16155240$  átomos. En estas Figuras, las líneas grises indican  $g(\mu)$  de un nanoalambre totalmente periódico.

A diferencia de la región definida en el potencial químico para la conductancia eléctrica  $dc$  [ $g(\mu)$ ] de las Figuras 4.7 para los nanoalambres con sección transversal  $N_{\perp} = 3 \times 3$  átomos, véase en las Figuras 4.15 que los espectros son similares y no tienen dicha región definida para los distintos tamaños longitudinales del sistema con sección transversal  $N_{\perp} = 3 \times 4$  átomos. Además los espectros de  $g(\mu)$  no presentan brechas energéticas dentro del intervalo del potencial químico  $-3 < \mu/|t| < 3$  para la cuasiperiodicidad en la sección transversal  $\gamma_{\perp} = 0.9$  y longitudinal periódico, es decir,  $\gamma_{\parallel} = 1.0$ .

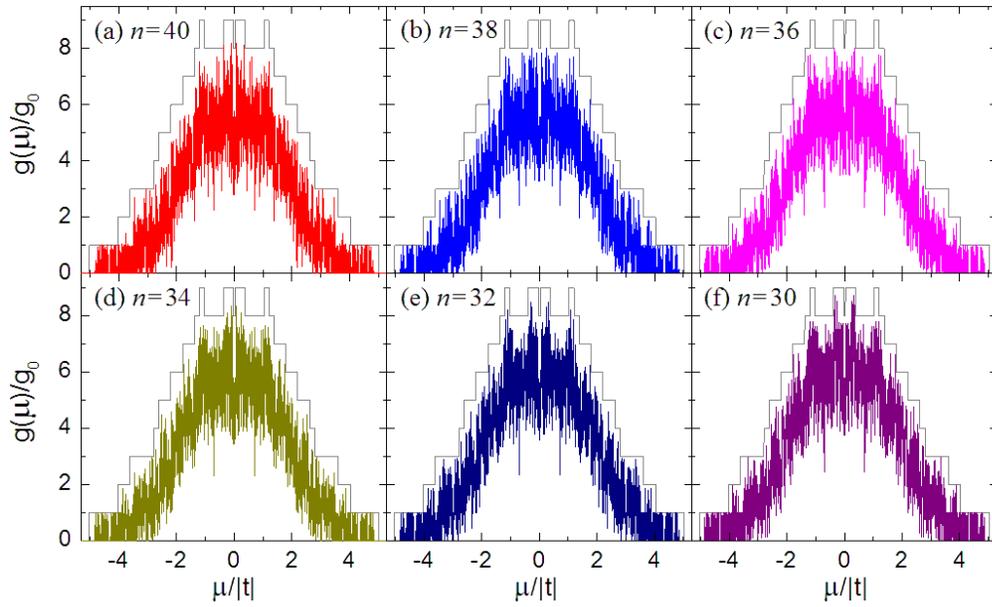


Figura 4.15 Conductancia electrónica  $dc$  [ $g(\mu)$ ] de los nanoalambres con sección transversal  $3 \times 4$  átomos con  $\gamma_{\parallel} = 1.0$  y  $\gamma_{\perp} = 0.9$  para la generación  $n$  igual a (a) 40, (b) 38, (c) 36, (d) 34, (e) 32 y (f) 30.

En las Figuras 4.16 se presentan los espectros de  $g(\mu)$  versus el potencial químico ( $\mu$ ), normalizado por  $g_0 = 2e^2/h$ , en los nanoalambres de las Figuras 4.15, excepto  $\gamma_{\parallel} = 0.9$  y de  $\gamma_{\perp} = 1.0$ . En estas Figuras, las líneas grises indican  $g(\mu)$  de un nanoalambre totalmente periódico.

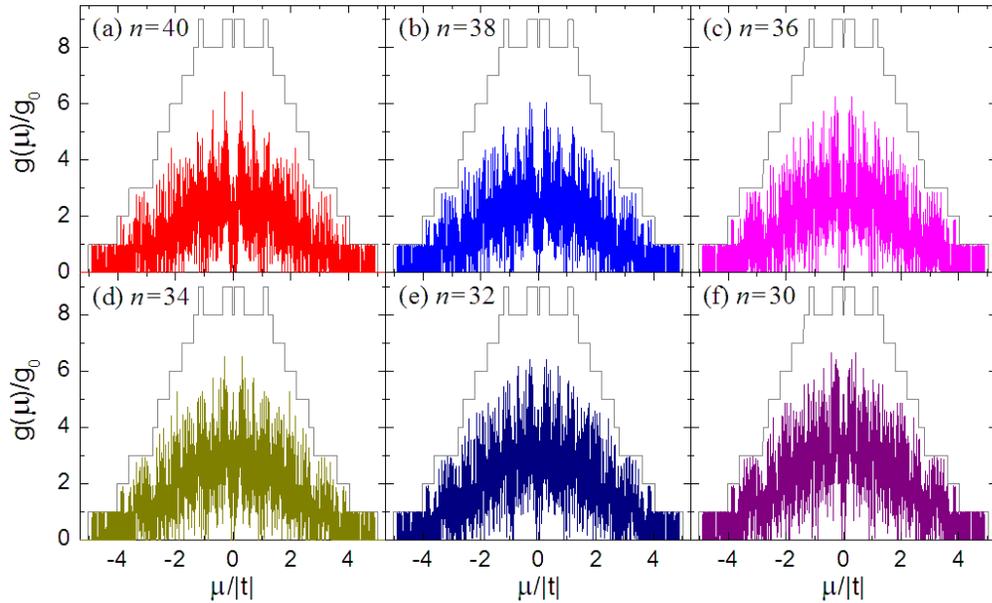


Figura 4.16 Conductancia electrónica  $dc$  [ $g(\mu)$ ] de los nanoalambres con sección transversal  $3 \times 4$  átomos con  $\gamma_{\parallel} = 0.9$  y de  $\gamma_{\perp} = 1.0$  para la generación  $n$  igual a (a) 40, (b) 38, (c) 36, (d) 34, (e) 32 y (f) 30.

Nótese que los espectros de  $g(\mu)$  en las Figuras 4.16 son similares y a diferencia de las Figuras 4.15, éstos presentan pseudobrechas y brechas energéticas dentro del intervalo en el

potencial químico  $-3 < \mu/|t| < 3$  para los distintos tamaños de los nanoalambres con integrales de salto periódicas en la sección transversal, es decir  $\gamma_{\perp} = 1.0$ , y cuasiperiódicas en la longitud del sistema con  $\gamma_{\parallel} = 0.9$ .

Hasta ahora, se analizaron las propiedades de conductancia eléctrica  $dc$  [ $g(\mu)$ ] y densidad de estados [DOS( $\mu$ )] en los nanoalambres tipo Fibonacci con sección transversal  $N_{\perp} = 3 \times 3$  átomos y  $N_{\perp} = 3 \times 4$  átomos. En el primero se ha encontrado una región definida de  $g(\mu)$  en el intervalo del potencial químico  $-2 < \mu/|t| < 2$  donde  $g(\mu)$  tiene un valor mínimo de  $3g_0$  para los parámetros de cuasiperiodicidad  $\gamma_{\parallel} = 1.0$  y cualesquiera  $\gamma_{\perp}$ . Este valor mínimo de la conductancia eléctrica  $dc$  es justificable a través del uso de una transformación unitaria en el sistema convirtiendo al nanoalambre a nueve canales independientes cuyos valores de autoenergía, siendo  $l = A \circ B$ , corresponden a las eigenenergías  $\{-2\sqrt{2}t_{l,\perp}, -\sqrt{2}t_{l,\perp}, -\sqrt{2}t_{l,\perp}, 0, 0, 0, \sqrt{2}t_{l,\perp}, \sqrt{2}t_{l,\perp}, 2\sqrt{2}t_{l,\perp}\}$ , respectivamente. En los tres canales independientes con autoenergías nulas sucede el transporte balístico.

Para los nanoalambres con sección transversal  $N_{\perp} = 3 \times 4$  átomos esta región no existe pues utilizando la transformación unitaria correspondiente se obtienen doce canales independientes cuyos autoenergías corresponden a las eigenenergías (4.2), respectivamente. Todos estos canales independientes dependen de las integrales de salto en la sección transversal  $\gamma_{\perp} \equiv t_{A,\perp}/t_{B,\perp}$  y en la longitud  $\gamma_{\parallel} \equiv t_{A,\parallel}/t_{B,\parallel}$  por lo cual ninguno de ellos tiene transporte balístico.

A continuación se utiliza el método de renormalización matricial para ilustrar a  $g(\mu)$  para los nanoalambre tipo Fibonacci con las secciones transversales  $N_{\perp} = 2 \times 2$  átomos y  $N_{\perp} = 2 \times 3$  átomos.

En las Figuras 4.17(a,c,e) se ejemplifican los espectros  $g(\mu)$  con respecto al potencial químico ( $\mu$ ), normalizado por  $g_0 = 2e^2/h$ , para los nanoalambres con sección transversal  $N_{\perp} = 2 \times 2$  átomos y una longitud correspondiente para la generación  $n = 40$  de  $N_{\parallel} = 165580142$  planos con un total de  $N_T = 662320568$  átomos con (a)  $\gamma_{\parallel} = 1.0$ ,  $\gamma_{\perp} = 0.9$ , (c)  $\gamma_{\parallel} = 0.9$  y  $\gamma_{\perp} = 1.0$  utilizando el método de renormalización matricial y (e) el método escalar más el teorema de convolución para los mismos parámetros en (c). En las Figuras, las líneas grises indican  $g(\mu)$  de un nanoalambre totalmente periódico.

En las Figuras 4.17(b,d,f) se muestran los espectros  $g(\mu)$  versus al potencial químico ( $\mu$ ), normalizado por  $g_0$ , para los nanoalambres con sección transversal  $N_{\perp} = 2 \times 3$  átomos y de longitud igual a la Figura 4.17(a) con un total de  $N_T = 993480852$  átomos con  $(\gamma_{\parallel}, \gamma_{\perp})$  como (b) la Figura 4.17(a), (d) la Figura 4.17(c) usando el método matricial y (f) el escalar más el teorema de convolución para los mismos parámetros en (c).

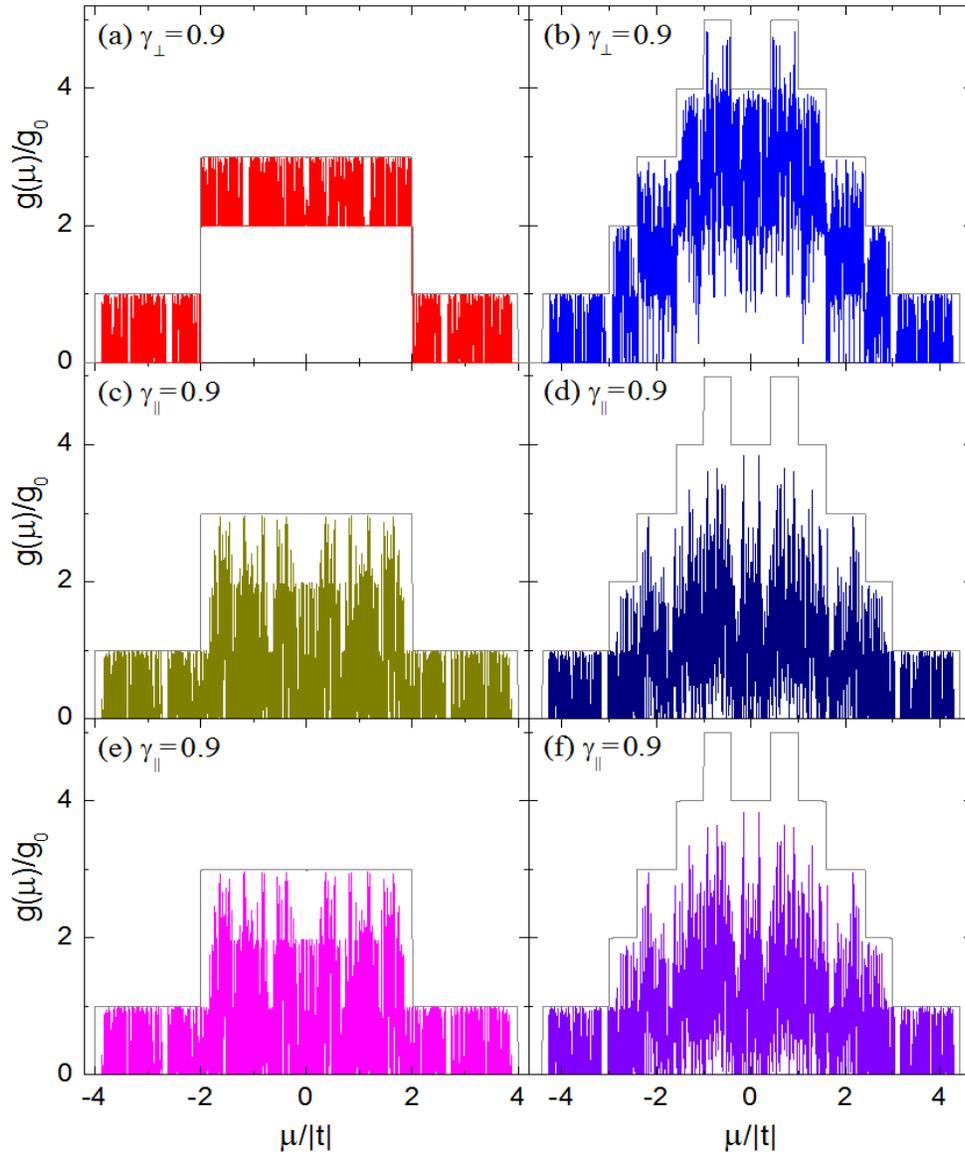


Figura 4.17 Conductancia electrónica  $dc$  [ $g(\mu)$ ] de los nanoalambres con sección transversal  $2 \times 2$  átomos con (a)  $\gamma_{\perp}=1.0$ ,  $\gamma_{\perp}=0.9$  (c)  $\gamma_{\parallel}=0.9$  y de  $\gamma_{\perp}=1.0$  usando renormalización matricial y (e) escalar más convolución igual que en (c). Y  $g(\mu)$  de los nanoalambres con sección transversal  $2 \times 3$  átomos con (b) igual a (a), (d) igual a (c) y (f) igual a (d).

Observe que la región en el intervalo del potencial químico  $-2 < \mu/|t| < 2$  encontrada en las Figuras 4.2(a-c) donde  $g(\mu)$  se puede localizar en la Figura 4.17(a) con un valor mínimo de  $2g_0$  para el nanoalambre con sección transversal  $N_{\perp}=2 \times 2$  átomos pues utilizando la transformación unitaria del Apéndice D se obtienen cuatro canales independientes cuyas autoenergías, siendo  $l=A$  o  $B$ , corresponden a las eigenenergías  $\{-2t_{l,\perp}, 0, 0, 2t_{l,\perp}\}$ , respectivamente. En los dos canales independientes con autoenergías nulas sucede el transporte balístico. Además, nótese que las Figuras 4.17(c,e) y 4.17(d,f) coinciden entre ellas confirmando, para el parámetro de cuasiperiodicidad  $\gamma_{\perp}=1.0$ , nuevamente el método de renormalización matricial con el escalar más el teorema de convolución de los Apéndices B y C, respectivamente.

A continuación, se introducirá algunos posibles estudios en los nanoalambres que se pueden realizar utilizando el método de renormalización matricial desarrollado en esta tesis, en específico para el caso de los nanoalambres con ramificaciones.

### 4.3. Nanoalambres con Ramificaciones

Los nanoalambres ramificados constituyen una clase única de materiales en los que pequeñas ramificaciones crecen de un nanoalambre más grande de igual o diferente funcionalidad como se muestra en la Figura 4.18. Las nanoestructuras más pequeñas pueden ser estabilizadas mediante el anclaje de ellos en una estructura más grande creando la posibilidad de un nanodispositivo de una sola componente multifuncional. Por ejemplo, los nanoalambres de ZnO con ramificaciones  $Zn_3P_2$  exhiben características fotodetectoras altamente eficientes, [Gautam, 2008].

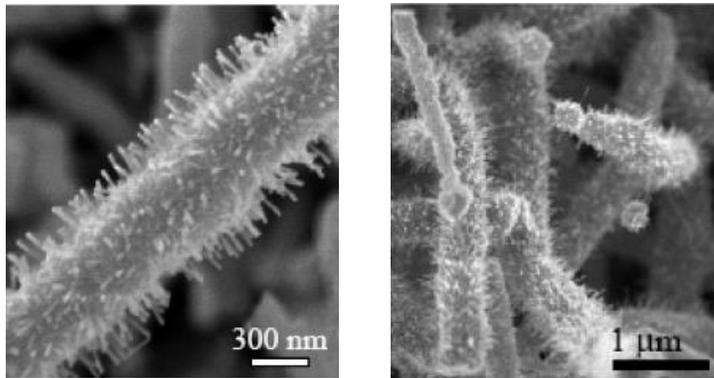


Figura 4.18 Imagen de microscopio electrónico de barrido (SEM) de nanoalambres ramificados de ZnO a diferentes magnificaciones.

Consideremos un nanoalambre con ramificación en las esquinas de la sección transversal  $N_{\perp} = 4 \times 4$  átomos como se muestra en la Figura 4.19, donde los átomos de las esquinas del nanoalambre están enlazados con los átomos de ramificación mediante una integral de salto diferente (líneas negras) a las de la sección transversal tipo A (líneas naranjas) y tipo B (líneas verdes).

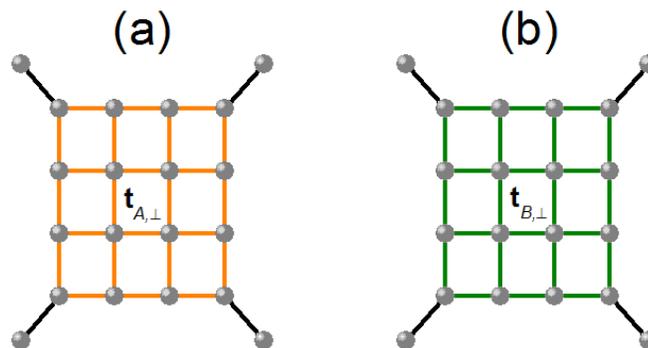


Figura 4.19 Dibujo esquemático de la sección transversal de (a) tipo A con integrales de salto  $t_{A,\perp}$  (líneas naranjas) y (b) tipo B con  $t_{B,\perp}$  (líneas verdes), ambas contiene  $4 \times 4$  átomos (bolas grises) y ramificaciones con una integral de salto diferente (líneas negras).

En las Figuras 4.20(a-b) se ilustran los espectros de la conductancia eléctrica  $dc$  [ $g(\mu)$ ] versus el potencial químico ( $\mu$ ) calculada mediante la ecuación (4.1), normalizada por  $g_0 = 2e^2/h$ . Los nanoalambres tipo Fibonacci ramificados considerados en las Figuras 4.20 tienen una longitud de  $N_{\parallel} = 832041$  planos, la cual corresponde a la generación  $n = 29$ , y un número total de  $N_T = N_{\perp}N_{\parallel} = 16640820$  átomos con  $\gamma_{\perp} = 1.0$  y (a)  $\gamma_{\parallel} = 1.0$ , (b)  $\gamma_{\parallel} = 0.9$ . La integral de salto de las ramificaciones es la unidad de  $|t|$ . En esas Figuras, las líneas grises indican  $g(\mu)$  de un nanoalambre totalmente periódico sin ramificaciones. En las Figuras 4.20(c-d) se enseñan los espectros de la densidad de estados [DOS( $\mu$ )] en función del potencial químico ( $\mu$ ) calculada mediante la ecuación (3.44), normalizada por  $N_T$ , para los mismos sistemas de las Figuras 4.20(a-b), respectivamente.

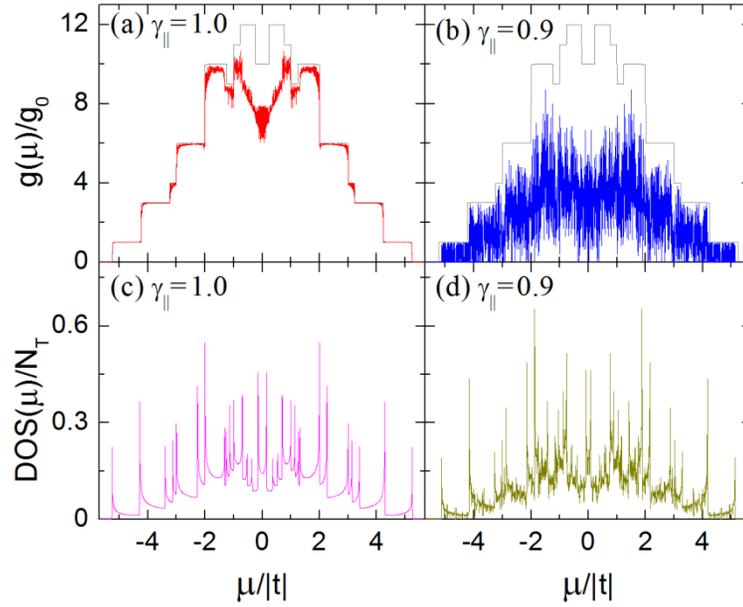


Figura 4.20 Conductancia eléctrica  $dc$  [ $g(\mu)$ ] de los nanoalambres con ramificaciones cuyas secciones transversales se muestran en las Figuras 4.19 con  $\gamma_{\perp} = 1.0$  y  $\gamma_{\parallel}$  igual a (a) 1.0 y (b) 0.9; comparadas con DOS( $\mu$ ) para  $\gamma_{\perp} = 1.0$  y  $\gamma_{\parallel}$  igual a (c) 1.0 y (d) 0.9.

Se observa en la Figura 4.20(a) la existencia de un mínimo de conductancia cuando el potencial químico ( $\mu$ ) se encuentra en el centro del espectro para nanoalambres periódicos ramificados. En cambio, para  $\mu$  lejos del centro la conductancia eléctrica se comporta como si no existieran las ramificaciones. En la Figura 4.20(b) se observa un espectro denso ya que el nanoalambre tiene un desorden cuasiperiódico longitudinal, a pesar de que  $\gamma_{\parallel} \equiv t_{A,\parallel}/t_{B,\parallel} = 0.9$ .

Como se observa en la Figura 4.18, esos nanoalambres están constituidos de un gran número de ramificaciones. Así pues, utilizando el método de renormalización matricial se puede estudiar a los nanoalambres con la configuración de la Figura 4.21 donde los átomos de la superficie del nanoalambres están enlazados con átomos de ramificaciones mediante una integral de salto diferente (líneas negras) a las de la sección transversal tipo  $A$  (líneas naranjas) y tipo  $B$  (líneas verdes).

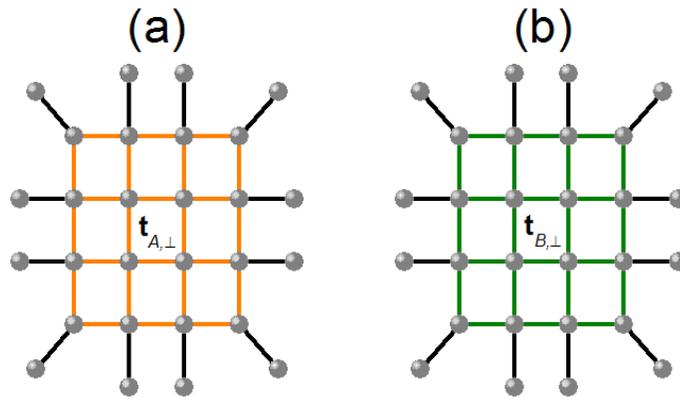


Figura 4.21 Dibujo esquemático de la sección transversal de (a) tipo  $A$  con integrales de salto  $t_{A,\perp}$  (líneas naranjas) y (b) tipo  $B$  con  $t_{B,\perp}$  (líneas verdes), ambas contiene  $4 \times 4$  átomos (bolas grises) y ramificaciones sobre toda la superficie del nanoalambre con una integral de salto diferente (líneas negras).

En las Figuras 4.22(a-b) se presentan los espectros de  $g(\mu)$  dependientes del potencial químico ( $\mu$ ), normalizada por  $g_0$ , en los nanoalambres ramificados de las Figuras 4.20, excepto  $N_T = 23297148$  para  $\gamma_{\parallel} = 1.0$  y (a)  $\gamma_{\perp} = 1.0$ , (b)  $\gamma_{\perp} = 0.9$ . En esas Figuras, las líneas grises indican  $g(\mu)$  de un nanoalambre totalmente periódico sin ramificaciones. En las Figuras 4.22(c-d) se ejemplifican los espectros de  $DOS(\mu)$  en función del potencial químico ( $\mu$ ) calculada mediante la ecuación (3.44), normalizada por  $N_T$ , para los mismos sistemas de las Figuras 4.22(a-b), respectivamente.

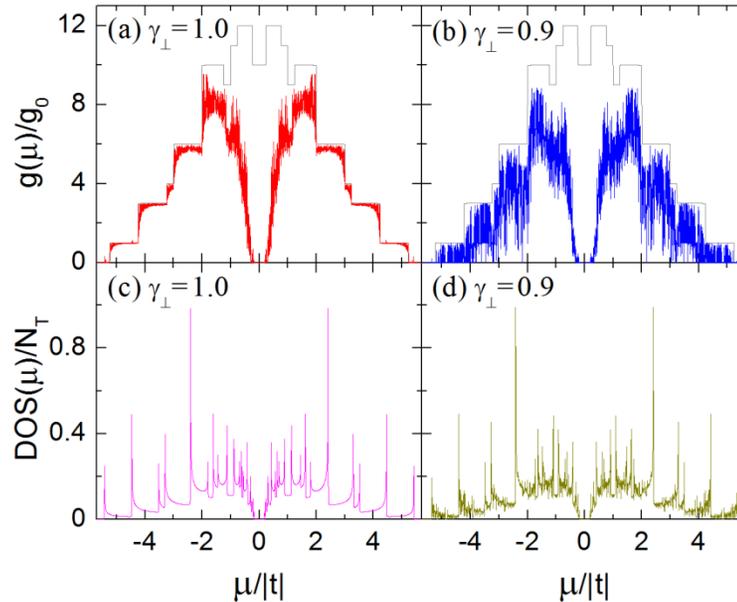


Figura 4.22 Conductancia electrónica  $dc$  [ $g(\mu)$ ] de los nanoalambres con ramificaciones para las secciones transversales de las Figuras 4.21 con  $\gamma_{\perp} = 1.0$  y  $\gamma_{\parallel}$  igual a (a) 1.0 y (b) 0.9; comparadas con  $DOS(\mu)$  para  $\gamma_{\parallel} = 1.0$  y  $\gamma_{\perp}$  igual a (c) 1.0 y (d) 0.9.

Para los nanoalambres de la Figura 4.21, se observa en la Figura 4.22(a) la presencia de una brecha energética prohibida en el intervalo del potencial químico  $-0.18 < \mu/|t| < 0.18$  para

$g(\mu)$  y  $DOS(\mu)$  en la Figura 4.22(c). En la Figura 4.22(b), la brecha energética aún existe con un ancho de  $-0.19 < \mu/|t| < 0.19$ .

Cabe mencionar para los nanoalambres ramificados no existen canales independientes con autoenergías nulas ya que al aplicar la transformación unitaria detallada en el Apéndice D, dichos nuevos canales pueden tener interacciones efectivas entre ellos impidiendo obtener canales de conducción con transporte balístico pues dependen tanto de  $\gamma_{\perp}$  y  $\gamma_{\parallel}$ .

## Conclusiones

En esta tesis hemos presentado un nuevo método de renormalización matricial en el espacio real para la fórmula de Kubo-Greenwood y para la densidad de estados. Como ejemplo, se ha aplicado dicho método al transporte electrónico en nanoalambres con desorden estructural tipo Fibonacci dentro del formalismo de amarre fuerte a primeros vecinos y una longitud de  $N_{\parallel} = 165580142$  planos atómicos. También, se analizó los nanoalambres con ramificaciones de longitud macroscópica. Los principales resultados de esta tesis se resumen a continuación.

- 1.- Desarrollo de un nuevo método de renormalización matricial en el espacio real, como una extensión del método escalar para sistemas unidimensionales, basado en la consideración de matriz de matrices y la conmutabilidad de la traza de un producto de matrices.
- 2.- Aplicación del método de renormalización matricial a nanoalambres con desorden cuasiperiódico en el ordenamiento de dos tipos de planos con enlaces transversales diferentes siguiendo la secuencia de Fibonacci.
- 3.- Hallazgo de una región de energía con una mínima conductancia eléctrica  $dc$  independiente del ordenamiento de los dos tipos de planos, así como de las integrales de salto en dichos planos transversales.
- 4.- Prueba analítica de una mínima conductancia eléctrica  $dc$  en la región central del espectro para nanoalambres con sección transversal cuadrática, mediante una transformación unitaria al hamiltoniano del sistema convirtiendo el nanoalambre a un conjunto de canales de conducción independientes y encontrando el transporte balístico en dichos canales cuyo número siempre es igual a la cantidad de átomos en cada dirección de la sección transversal del nanoalambre.
- 5.- Existencia de una posible transición metal-aislante cuando el nanoalambre es totalmente cubierto por ramificaciones y el potencial químico se encuentra en el centro del espectro.

Cabe mencionar que existen esencialmente dos métodos capaces de abordar sistemas de tamaño macroscópico usando la capacidad de cómputo actual, ellos son el del espacio recíproco y el método de renormalización en el espacio real. La ausencia de periodicidad en materiales no cristalinos impide el uso del primero quedando el segundo como la única alternativa. Además, el método de renormalización en el espacio real introducido por Prof. Leo Kadanoff permite la existencia de superficies e interfaces en el sistema, lo cual puede ser utilizado para el diseño de los dispositivos electrónicos basado en modelos cuánticos.

Por último, el presente trabajo puede extenderse a las excitaciones fonónicas y estudiar otros fenómenos físicos, tales como la conductividad térmica, espectroscopia Raman e infrarroja, ya que éstas pueden expresarse en términos de la función de Green [Elliott, 1974].

## Apéndice A Función de Green

La función de Green se define como la solución de la ecuación diferencial no homogénea de Dyson [Economou, 2006]

$$[z - \hat{L}]G(z) = 1, \quad (\text{A.1})$$

con las condiciones de frontera apropiadas del problema,  $z$  es una variable compleja definida por  $z = E + i\eta$  y  $\hat{L}$  es un operador hermitiano, lineal e independiente del tiempo que posee un conjunto ortonormal y completo de eigenfunciones  $\{|n\rangle\}$  satisfaciendo las mismas condiciones de frontera que  $G(z)$ , es decir,

$$\hat{L}|\kappa\rangle = \lambda_\kappa |\kappa\rangle \quad \text{con} \quad \langle \kappa | \kappa' \rangle = \delta_{\kappa, \kappa'} \quad \text{y} \quad \sum_\kappa |\kappa\rangle \langle \kappa| = \mathbf{I}. \quad (\text{A.2})$$

En particular, para el caso de las excitaciones electrónicas la ecuación (A.1) puede escribirse en forma matricial de la forma

$$[z\mathbf{I} - \mathbf{H}]\mathbf{G}(z) = \mathbf{I} \quad (\text{A.3})$$

donde  $\mathbf{I}$ ,  $\mathbf{H}$  y  $\mathbf{G}$  son respectivamente las matrices identidad, hamiltoniano de amarre fuerte a primeros vecinos y de Green de tamaño  $3N \times 3N$ , siendo  $N$  el número total de átomos en el sistema.

Usando (A.2), la ecuación de Dyson (A.3) puede reescribirse como

$$\mathbf{G}(z) = \frac{\mathbf{I}}{z\mathbf{I} - \mathbf{H}} = \sum_\kappa \frac{|\kappa\rangle \langle \kappa|}{z - E_\kappa} \quad (\text{A.4})$$

siendo  $\mathbf{H}|\kappa\rangle = E_\kappa |\kappa\rangle$ .

Dado que el hamiltoniano  $\mathbf{H}$  es simétrico y real, la matriz  $z\mathbf{I} - \mathbf{H}$  es simétrica y en consecuencia la función de Green también es una matriz simétrica, ya que [Meyer, 2000]

$$\mathbf{G}^T = [(z\mathbf{I} - \mathbf{H})^{-1}]^T = [(z\mathbf{I} - \mathbf{H})^T]^{-1} = [z\mathbf{I} - \mathbf{H}]^{-1} = \mathbf{G}. \quad (\text{A.5})$$

Una forma alternativa para demostrar la simetría de la función de Green es haciendo una expansión en la ecuación (A.4), es decir,

$$\mathbf{G}(z) = \frac{\mathbf{I}}{z\mathbf{I} - \mathbf{H}} = \frac{1}{z} \frac{\mathbf{I}}{\mathbf{I} - \frac{\mathbf{H}}{z}} = \frac{1}{z} \sum_n \left( \frac{\mathbf{H}}{z} \right)^n \quad (\text{A.6})$$

Así pues,

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{i,j}^{\alpha,\beta}(z) &= \langle l\alpha | \mathbf{G}(z) | j\beta \rangle = \frac{1}{z} \langle l\alpha | \sum_n \left( \frac{\mathbf{H}}{z} \right)^n | j\beta \rangle \\ &= \frac{1}{z} \left[ \langle l\alpha | j\beta \rangle + \frac{1}{z} \langle l\alpha | \mathbf{H} | j\beta \rangle + \frac{1}{z^2} \sum_{k\gamma} \langle l\alpha | \mathbf{H} | k\gamma \rangle \langle k\gamma | \mathbf{H} | j\beta \rangle + \dots \right] \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Ya que el hamiltoniano es simétrico y real, se tiene

$$\begin{aligned}
\mathbf{G}_{l,j}^{\alpha,\beta}(z) &= \frac{1}{z} \left[ \langle j\beta | l\alpha \rangle + \frac{1}{z} \langle j\beta | \mathbf{H} | l\alpha \rangle + \frac{1}{z^2} \sum_{k\gamma} \langle k\gamma | \mathbf{H} | l\alpha \rangle \langle j\beta | \mathbf{H} | k\gamma \rangle + \dots \right] \\
&= \frac{1}{z} \left[ \langle j\beta | l\alpha \rangle + \langle j\beta | \frac{\mathbf{H}}{z} | l\alpha \rangle + \sum_{k\gamma} \langle j\beta | \left( \frac{\mathbf{H}}{z} \right)^2 | l\alpha \rangle + \dots \right] = \mathbf{G}_{j,l}^{\beta,\alpha}(z)
\end{aligned} \tag{A.8}$$

con lo cual la función de Green es simétrica.

Por otro lado, dada la siguiente identidad de variable compleja [Merzbacher, 1970]

$$\lim_{y \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm iy} = P\left(\frac{1}{x}\right) \mp i\pi\delta(x), \tag{A.9}$$

donde  $P$  indica la parte principal, la ecuación (A.4) se convierte en

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} \mathbf{G}^+(z) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \sum_{\kappa} \frac{|\kappa\rangle\langle\kappa|}{E + i\eta - E_{\kappa}} = \sum_{\kappa} |\kappa\rangle\langle\kappa| \left[ P\left(\frac{1}{E - E_{\kappa}}\right) - i\pi\delta(E - E_{\kappa}) \right]. \tag{A.10}$$

Así pues,

$$-\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} \mathbf{G}^+(z) = \sum_{\kappa} \delta(E - E_{\kappa}) |\kappa\rangle\langle\kappa|. \tag{A.11}$$

Entonces la traza de la función de Green es

$$\begin{aligned}
\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Tr}[\mathbf{G}^+(z)] &\equiv \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \sum_j \langle j | \mathbf{G}^+(z) | j \rangle = P\left(\sum_{\kappa,j} \frac{\langle j | \kappa \rangle \langle \kappa | j \rangle}{E - E_{\kappa}}\right) - i\pi \sum_{\kappa,j} \delta(E - E_{\kappa}) \langle j | \kappa \rangle \langle \kappa | j \rangle \\
&= P\left(\sum_{\kappa} \frac{\langle \kappa | \sum_j | j \rangle \langle j | | \kappa \rangle}{E - E_{\kappa}}\right) - i\pi \sum_{\kappa} \delta(E - E_{\kappa}) \langle \kappa | \sum_j | j \rangle \langle j | | \kappa \rangle \\
&= P\left(\sum_{\kappa} \frac{1}{E - E_{\kappa}}\right) - i\pi \sum_{\kappa} \delta(E - E_{\kappa})
\end{aligned} \tag{A.12}$$

donde  $\sum_{\kappa} \delta(E - E_{\kappa})$  es la densidad de estados (DOS), por lo que [Economou, 2006]

$$\text{DOS}(E) \equiv \sum_{\kappa} \delta(E - E_{\kappa}) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} \left\{ \text{Tr}[\mathbf{G}^+(E + i\eta)] \right\}, \tag{A.13}$$

ya que el término de la parte principal en la ecuación (A.12) es real.

En resumen, la densidad de estados se puede obtener a partir de la función de Green a través de la ecuación (A.13).

## Apéndice B Método de Renormalización Escalar

Considere una cadena de átomos cuyo ordenamiento de sus enlaces siguen la secuencia de Fibonacci, donde existen dos tipos de interacciones interatómicas parametrizadas por  $t_A$  y  $t_B$  para la dirección del desplazamiento atómico. La primera generación de la cadena de Fibonacci está formada por 2 átomos unidos por la interacción  $t_A$  y la segunda generación está formada por 3 átomos unidos por los enlaces  $t_A$  y  $t_B$ . Como se discutió en la sección 1.4.2., las generaciones sucesivas se construyen a partir de la relación de recurrencia (1.38) dada por  $F_n = F_{n-1} \oplus F_{n-2}$ , donde  $F_n$  es la secuencia de Fibonacci de la generación  $n$ . En la Tabla 3.1 se resume el número de enlaces para las primeras 36 generaciones del problema de enlaces, donde el número de átomos es siempre el número de enlaces más uno.

A continuación discutiré en detalle el proceso de renormalización en el espacio real eliminando las coordenadas del átomo interior de las ecuaciones de movimiento. Por ejemplo, la generación 2 tiene 3 átomos con interacciones a primeros vecinos, por lo que la ecuación de Dyson (A.3) asociada a este sistema es

$$(z\mathbf{I} - \mathbf{H})\mathbf{G}(z) = \begin{pmatrix} z & -t_A & 0 \\ -t_A & z & -t_B \\ 0 & -t_B & z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{1,1}^{(2)}(z) & G_{1,2}^{(2)}(z) & G_{1,3}^{(2)}(z) \\ G_{2,1}^{(2)}(z) & G_{2,2}^{(2)}(z) & G_{2,3}^{(2)}(z) \\ G_{3,1}^{(2)}(z) & G_{3,2}^{(2)}(z) & G_{3,3}^{(2)}(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.1})$$

donde  $G_{i,j}^{(2)}(z)$  representa el elemento de matriz  $i, j$  de la función de Green correspondiente a la generación 2 de la cadena de Fibonacci y  $z = E + i\eta$ .

Al desarrollar la multiplicación de las matrices, se obtienen las 9 ecuaciones que se pueden resumir de la forma siguiente

$$zG_{1,l}^{(2)}(z) - t_A G_{2,l}^{(2)}(z) = \delta_{1,l}, \quad (\text{B.2})$$

$$zG_{2,l}^{(2)}(z) - t_A G_{1,l}^{(2)}(z) - t_B G_{3,l}^{(2)}(z) = \delta_{2,l}, \quad (\text{B.3})$$

$$zG_{3,l}^{(2)}(z) - t_B G_{2,l}^{(2)}(z) = \delta_{3,l}, \quad (\text{B.4})$$

donde  $l=1, 2$  ó  $3$  y  $\delta_{i,j}$  es la delta de Kronecker. Al sustituir la ecuación (B.3) en las ecuaciones (B.2) y (B.4) se obtienen

$$zG_{1,l}^{(2)}(z) - \frac{t_A^2}{z} G_{1,l}^{(2)}(z) - \frac{t_A t_B}{z} G_{3,l}^{(2)}(z) = \delta_{1,l} + \frac{t_A}{z} \delta_{2,l}, \quad (\text{B.5})$$

$$zG_{3,l}^{(2)}(z) - \frac{t_B^2}{z} G_{3,l}^{(2)}(z) - \frac{t_A t_B}{z} G_{1,l}^{(2)}(z) = \delta_{3,l} + \frac{t_B}{z} \delta_{2,l}. \quad (\text{B.6})$$

De las ecuaciones anteriores se puede identificar  $t_A^2/z$  como la nueva autoenergía del sitio izquierdo  $E_L(z, 2)$ ,  $t_B^2/z$  como la del sitio derecho  $E_R(z, 2)$  y  $t_A t_B/z$  como la nueva constante de interacción  $t(z, 2)$  entre los sitios extremos. Además,  $l$  toma únicamente los valores 1 ó 3, por lo que  $\delta_{2,l} = 0$ . De esta forma, la ecuación (B.1) se puede reescribir como

$$\begin{pmatrix} z - E_L(z, 2) & -t(z, 2) \\ -t(z, 2) & z - E_R(z, 2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{1,1}^{(2)}(z) & G_{1,3}^{(2)}(z) \\ G_{1,3}^{(2)}(z) & G_{3,3}^{(2)}(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.7})$$

con  $E_L(z, 2) = t_A^2/z$ ,  $E_R(z, 2) = t_B^2/z$  y  $t(z, 2) = t_A t_B/z$ .

En general, la ecuación de Dyson para la generación  $n$  a partir de las generaciones  $n-1$  y  $n-2$  estará dada por

$$\begin{pmatrix} z - E_L(z, n-1) & -t(z, n-1) & 0 \\ -t(z, n-1) & z - E_M(z, n) & -t(z, n-2) \\ 0 & -t(z, n-2) & z - E_R(z, n-2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{L,L}^{(n)}(z) & G_{L,M}^{(n)}(z) & G_{L,R}^{(n)}(z) \\ G_{M,L}^{(n)}(z) & G_{M,M}^{(n)}(z) & G_{M,R}^{(n)}(z) \\ G_{R,L}^{(n)}(z) & G_{R,M}^{(n)}(z) & G_{R,R}^{(n)}(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.8})$$

donde  $E_M(z, n) = E_R(z, n-1) + E_L(z, n-2)$  representa la autoenergía del sitio medio para el problema de enlaces. Aplicando el mismo procedimiento como el caso de la generación 2, la ecuación de Dyson (B.8) se reescribe de la forma siguiente

$$\begin{pmatrix} z - E_L(z, n) & -t(z, n) \\ -t(z, n) & z - E_R(z, n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{L,L}^{(n)}(z) & G_{L,R}^{(n)}(z) \\ G_{R,L}^{(n)}(z) & G_{R,R}^{(n)}(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.9})$$

siendo

$$E_L(z, n) = E_L(z, n-1) + \frac{[t(z, n-1)]^2}{z - E_M(z, n)}, \quad (\text{B.10})$$

$$E_R(z, n) = E_R(z, n-2) + \frac{[t(z, n-2)]^2}{z - E_M(z, n)} \quad (\text{B.11})$$

y

$$t(z, n) = \frac{t(z, n-1)t(z, n-2)}{z - E_M(z, n)}. \quad (\text{B.12})$$

Las condiciones iniciales son  $E_L(z, 1) = E_R(z, 1) = 0$ ,  $t(z, 1) = t_A$ ,  $E_L(z, 2) = t_A^2/z$ ,  $E_R(z, 2) = t_B^2/z$  y  $t(z, 2) = t_A t_B/z$ .

## Densidad de Estados

Usando la ecuación (A.13), la DOS( $E$ ) se relaciona con la función de Green de la forma

$$\text{DOS}(E, n) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left[ \text{Im Tr } \mathbf{G}^{(n)}(z) \right] = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left[ \text{Im} \sum_j G_{j,j}^{(n)}(E + i\eta) \right], \quad (\text{B.13})$$

donde  $G_{j,j}^{(n)}(z)$  son los elementos diagonales de la función de Green. La ecuación (B.13) establece que DOS es proporcional a la traza de la función de Green,

$$\text{DOS}(E, n) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} \left[ \text{Tr } \mathbf{G}^{(n)}(z) \right], \quad (\text{B.14})$$

donde  $z \equiv E + i\eta$ . Dicha traza, siendo suma de los elementos diagonales de la función de Green, puede expresarse como una función de los sitios extremos  $L$  y  $R$ , es decir,

$$\text{Tr } \mathbf{G}^{(n)}(z) = A(z, n)G_{L,L}^{(n)}(z) + B(z, n)G_{R,R}^{(n)}(z) + C(z, n)G_{L,R}^{(n)}(z) + D(z, n). \quad (\text{B.15})$$

En particular, para el problema de enlaces se tiene

$$\text{Tr } \mathbf{G}^{(n)}(z) = \text{Tr } \mathbf{G}^{(n-1)}(z) + \text{Tr } \mathbf{G}^{(n-2)}(z) - G_{M,M}^{(n)}(z), \quad (\text{B.16})$$

donde las trazas de generaciones  $n-1$  y  $n-2$  pueden escribirse en términos de la función de Green de la generación  $n$ , esto es

$$\begin{aligned} \text{Tr } \mathbf{G}^{(n-1)}(z) &= A(z, n-1)G_{L,L}^{(n-1)}(z) + B(z, n-1)G_{R,R}^{(n-1)}(z) + C(z, n-1)G_{L,R}^{(n-1)}(z) + D(z, n-1) \\ &= A(z, n-1)G_{L,L}^{(n)}(z) + B(z, n-1)G_{M,M}^{(n)}(z) + C(z, n-1)G_{L,M}^{(n)}(z) + D(z, n-1), \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

$$\begin{aligned} \text{Tr } \mathbf{G}^{(n-2)}(z) &= A(z, n-2)G_{L,L}^{(n-2)}(z) + B(z, n-2)G_{R,R}^{(n-2)}(z) + C(z, n-2)G_{L,R}^{(n-2)}(z) + D(z, n-2) \\ &= A(z, n-2)G_{M,M}^{(n)}(z) + B(z, n-2)G_{R,R}^{(n)}(z) + C(z, n-2)G_{M,R}^{(n)}(z) + D(z, n-2). \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

Para la generación  $n$  las ecuaciones de Dyson similares a las ecuaciones (B.2)-(B.4) son

$$[z - E_L(z, n-1)]G_{L,l}^{(n)}(z) - t(z, n-1)G_{M,l}^{(n)}(z) = \delta_{L,l} \quad (\text{B.19})$$

$$[z - E_M(z, n)]G_{M,l}^{(n)}(z) - t(z, n-1)G_{L,l}^{(n)}(z) - t(z, n-2)G_{R,l}^{(n)}(z) = \delta_{M,l} \quad (\text{B.20})$$

$$[z - E_R(z, n-2)]G_{R,l}^{(n)}(z) - t(z, n-2)G_{M,l}^{(n)}(z) = \delta_{R,l} \quad (\text{B.21})$$

donde  $l = L, R$  o  $M$  y la autoenergía del sitio medio proveniente de los procesos de renormalización de las generaciones  $n-1$  y  $n-2$  es

$$E_M(z, n) = E_R(z, n-1) + E_L(z, n-2). \quad (\text{B.22})$$

Nótese que las ecuaciones (B.19) y (B.21) no deben usarse para la renormalización, ya que en éstas se podría agregar términos extras por las nuevas condiciones de frontera durante el proceso de adición. De esta forma, las tres ecuaciones de (B.20) útiles para la renormalización son

$$[z - E_M(z, n)]G_{M,L}^{(n)}(z) - t(z, n-1)G_{L,L}^{(n)}(z) - t(z, n-2)G_{R,L}^{(n)}(z) = 0, \quad (\text{B.23})$$

$$[z - E_M(z, n)]G_{M,M}^{(n)}(z) - t(z, n-1)G_{L,M}^{(n)}(z) - t(z, n-2)G_{R,M}^{(n)}(z) = 1, \quad (\text{B.24})$$

$$[z - E_M(z, n)]G_{M,R}^{(n)}(z) - t(z, n-1)G_{L,R}^{(n)}(z) - t(z, n-2)G_{R,R}^{(n)}(z) = 0. \quad (\text{B.25})$$

Dado que el hamiltoniano  $\mathbf{H}$  es simétrico y real, la matriz  $z\mathbf{I} - \mathbf{H}$  es simétrica y en consecuencia la función de Green también es una matriz simétrica como se muestra en el Apéndice A. Entonces  $G_{L,M}^{(n)}(z) = G_{M,L}^{(n)}(z)$ ,  $G_{R,M}^{(n)}(z) = G_{M,R}^{(n)}(z)$  y  $G_{R,L}^{(n)}(z) = G_{L,R}^{(n)}(z)$ . Sustituyendo las ecuaciones (B.23) y (B.25) en la ecuación (B.24) se tiene que

$$\begin{aligned} [z - E_M(z, n)]G_{M,M}^{(n)}(z) - t(z, n-1) \frac{t(z, n-1)G_{L,L}^{(n)}(z) + t(z, n-2)G_{L,R}^{(n)}(z)}{[z - E_M(z, n)]} \\ - t(z, n-2) \frac{t(z, n-1)G_{L,R}^{(n)}(z) + t(z, n-2)G_{R,R}^{(n)}(z)}{[z - E_M(z, n)]} = 1 \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

la cual puede reescribirse como

$$G_{M,M}^{(n)}(z) = \frac{[t(z,n-1)]^2 G_{L,L}^{(n)}(z)}{[z-E_M(z,n)]^2} + \frac{2t(z,n-2)\alpha(z,n-1)G_{L,R}^{(n)}(z)}{[z-E_M(z,n)]^2} + \frac{[t(z,n-2)]^2 G_{R,R}^{(n)}(z)}{[z-E_M(z,n)]^2} + \frac{1}{z-E_M(z,n)}. \quad (\text{B.27})$$

Sustituyendo (B.23), (B.25) y (B.27) en las ecuaciones (B.16) y (B.17), y el resultado a su vez en (B.15) se obtienen las siguientes relaciones de recurrencia

$$A(z,n) = A(z,n-1) + \Theta(z,n)[\theta_1(z,n)]^2 + C(z,n-1)\theta_1(z,n), \quad (\text{B.28})$$

$$B(z,n) = B(z,n-2) + \Theta(z,n)[\theta_2(z,n)]^2 + C(z,n-2)\theta_2(z,n), \quad (\text{B.29})$$

$$C(z,n) = C(z,n-1)\theta_2(z,n) + C(z,n-2)\theta_1(z,n) + 2\Theta(z,n)\theta_1(z,n)\theta_2(z,n), \quad (\text{B.30})$$

$$D(z,n) = D(z,n-1) + D(z,n-2) + \Theta(z,n)\theta_0(z,n) \quad (\text{B.31})$$

donde  $\theta_0(z,n) \equiv 1/[z-E_M(z,n)]$ ,  $\theta_1(z,n) \equiv t(z,n-1)\theta_0(z,n)$ ,  $\theta_2(z,n) \equiv t(z,n-2)\theta_0(z,n)$  y  $\Theta(z,n) \equiv A(z,n-2) + B(z,n-1) - 1$ .

Por otro lado, se sustituye la ecuación. (B.20) en (B.19) y (B.21) obteniendo

$$[z-E_L(z,n-1)-t(z,n-1)\theta_1(z,n)]G_{L,l}^{(n)}(z)-t(z,n-1)\theta_2(z,n)G_{R,l}^{(n)}(z) = \delta_{L,l} + \theta_1(z,n)\delta_{M,l} \quad (\text{B.32})$$

$$[z-E_R(z,n-2)-t(z,n-2)\theta_2(z,n)]G_{R,l}^{(n)}(z)-t(z,n-1)\theta_2(z,n)G_{L,l}^{(n)}(z) = \delta_{R,l} + \theta_2(z,n)\delta_{M,l} \quad (\text{B.33})$$

donde  $l = L, R$  o  $M$ . De estas ecuaciones, se pueden identificar las autoenergías e interacción efectivas como

$$E_L(z,n) = E_L(z,n-1) + t(z,n-1)\theta_1(z,n), \quad (\text{B.34})$$

$$E_R(z,n) = E_R(z,n-2) + t(z,n-2)\theta_2(z,n), \quad (\text{B.35})$$

$$t(z,n) = t(z,n-1)\theta_2(z,n). \quad (\text{B.36})$$

Resolviendo las cuatro ecuaciones (B.32) y (B.33) para la función de Green en los sitios extremos, se obtienen

$$G_{L,L}^{(n)}(z) = \frac{z - E_R(z,n)}{[z - E_L(z,n)][z - E_R(z,n)] - [t(z,n)]^2}, \quad (\text{B.37})$$

$$G_{R,R}^{(n)}(z) = \frac{z - E_L(z,n)}{[z - E_L(z,n)][z - E_R(z,n)] - [t(z,n)]^2}, \quad (\text{B.38})$$

$$G_{L,R}^{(n)}(z) = G_{R,L}^{(n)}(z) = \frac{t(z,n)}{[z - E_L(z,n)][z - E_R(z,n)] - [t(z,n)]^2}. \quad (\text{B.39})$$

Las condiciones iniciales son

$$E_L(z,1) = E_R(z,1) = 0, \quad t(z,1) = t_A, \quad A(z,1) = B(z,1) = 1, \quad C(z,1) = D(z,1) = 0, \quad (\text{B.40})$$

$$\begin{aligned} E_L(z,2) &= t_A^2/z, \quad E_R(z,2) = t_B^2/z, \quad t(z,2) = t_A t_B/z, \quad A(z,2) = 1 + t_A^2/z^2, \\ B(z,2) &= 1 + t_B^2/z^2, \quad C(z,2) = 2t_A t_B/z^2, \quad D(z,2) = 1/z. \end{aligned} \quad (\text{B.41})$$

## Fórmula de Kubo-Greenwood

Dado que en el formalismo de Kubo-Greenwood la conductividad está dada por

$$\sigma(\mu, \omega, T) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{2e^2 \hbar}{\pi \Omega m^2} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{f(E) - f(E + \hbar\omega)}{\hbar\omega} \text{Tr}[p_x \text{Im} G(z + \hbar\omega) p_x \text{Im} G(z)], \quad (\text{B.42})$$

con  $z = E + i\eta$ , se puede expresar al operador de momento como [Sakurai, 1994]

$$\hat{p} = \frac{ima}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}], \quad (\text{B.43})$$

utilizando la expresión del hamiltoniano de amarre fuerte dado por la ecuación (2.1) y tomando en cuenta la forma del operador de posición  $\hat{x} = \sum_j x_j |j\rangle\langle j|$ , donde  $x_j$  es la coordenada del sitio  $j$ , el operador de momento se reescribe como

$$\hat{p}_x = \frac{ima}{\hbar} \sum_j \{t_{j,j+1} |j\rangle\langle j+1| - t_{j,j-1} |j\rangle\langle j-1|\}. \quad (\text{B.44})$$

Se puede expresar la traza de la ecuación (B.42) con  $z_\omega = z + \hbar\omega$ , como

$$\text{Tr}[p_x \text{Im} G(z_\omega) p_x \text{Im} G(z)] = \frac{m^2 a^2}{\hbar^2} \sum_{j,k=1}^{N(n)-1} \left\{ t_{j,j+1} t_{k,k+1} \begin{bmatrix} 2 \text{Im} G_{j+1,k}^+(z_\omega, n) \text{Im} G_{k+1,j}^+(z, n) \\ - \text{Im} G_{j+1,k+1}^+(z_\omega, n) \text{Im} G_{k,j}^+(z, n) \\ - \text{Im} G_{j,k}^+(z_\omega, n) \text{Im} G_{k+1,j+1}^+(z, n) \end{bmatrix} \right\}, \quad (\text{B.45})$$

usando la propiedad  $\text{Im} G^+(z) = [G^+(z) - G^-(z)]/2i$ , se tiene

$$\text{Tr}[p_x \text{Im} G(z_\omega) p_x \text{Im} G(z)] = \frac{m^2 a^2}{4\hbar^2} \sum_{j,k=1}^{N(n)-1} [S(z_\omega^+, z^+, n) - S(z_\omega^+, z^-, n) - S(z_\omega^-, z^+, n) + S(z_\omega^-, z^-, n)], \quad (\text{B.46})$$

donde

$$S(z_\omega^\nu, z^\mu, n) = \sum_{j,k}^{N(n)-1} t_{j,j+1} t_{k,k+1} [2 \text{Im} G_{j+1,k}^\nu(z_\omega, n) \text{Im} G_{k+1,j}^\mu(z, n) - \text{Im} G_{j+1,k+1}^\nu(z_\omega, n) \text{Im} G_{k,j}^\mu(z, n) - \text{Im} G_{j,k}^\nu(z_\omega, n) \text{Im} G_{k+1,j+1}^\mu(z, n)] \quad (\text{B.47})$$

La suma en la ecuación (B.47) puede ser expresada en términos de las funciones de Green de los sitios externos de la cadena, izquierdo ( $L$ ) y derecho ( $R$ ) usando el método de renormalización, es decir,

$$\begin{aligned} S(z_\omega^\nu, z^\mu, n) = & A(z_\omega^\nu, z^\mu, n) G_{L,L}(z_\omega^\nu, n) G_{L,L}(z^\mu, n) + B(z_\omega^\nu, z^\mu, n) G_{L,R}(z_\omega^\nu, n) G_{L,R}(z^\mu, n) \\ & + C(z_\omega^\nu, z^\mu, n) G_{R,R}(z_\omega^\nu, n) G_{R,R}(z^\mu, n) + D(z_\omega^\nu, z^\mu, n) G_{L,L}(z_\omega^\nu, n) G_{L,R}(z^\mu, n) \\ & + D(z^\mu, z_\omega^\nu, n) G_{L,L}(z^\mu, n) G_{L,R}(z_\omega^\nu, n) + F(z_\omega^\nu, z^\mu, n) G_{L,L}(z_\omega^\nu, n) G_{R,R}(z^\mu, n) \\ & + F(z^\mu, z_\omega^\nu, n) G_{L,L}(z^\mu, n) G_{R,R}(z_\omega^\nu, n) + I(z_\omega^\nu, z^\mu, n) G_{L,R}(z_\omega^\nu, n) G_{R,R}(z^\mu, n) \\ & + I(z^\mu, z_\omega^\nu, n) G_{L,R}(z^\mu, n) G_{R,R}(z_\omega^\nu, n) + J(z_\omega^\nu, z^\mu, n) G_{L,L}(z_\omega^\nu, n) \\ & + J(z^\mu, z_\omega^\nu, n) G_{L,L}(z^\mu, n) + K(z_\omega^\nu, z^\mu, n) G_{L,R}(z_\omega^\nu, n) + K(z^\mu, z_\omega^\nu, n) G_{L,R}(z^\mu, n) \\ & + L(z_\omega^\nu, z^\mu, n) G_{R,R}(z_\omega^\nu, n) + L(z^\mu, z_\omega^\nu, n) G_{R,R}(z^\mu, n) + Z(z_\omega^\nu, z^\mu, n) \end{aligned} \quad (\text{B.48})$$

Los coeficientes  $A(z_\omega^\nu, z^\mu, n)$ ,  $B(z_\omega^\nu, z^\mu, n), \dots, Z(z_\omega^\nu, z^\mu, n)$  que dependen de  $z_\omega^\nu, z^\mu$  y  $n$ , pueden obtenerse iterativamente de los coeficientes correspondientes a las generaciones anteriores  $n-1$  y  $n-2$ . Dichos coeficientes se iteran de la siguiente manera:

$$A(z_\omega^\nu, z^\mu, n) = -[A_1(z_\omega^\nu, z^\mu, n) - A_1(z^\mu, z_\omega^\nu, n)]^2, \quad (\text{B.49})$$

$$B(z_\omega^\nu, z^\mu, n) = 2[A_1(z_\omega^\nu, z^\mu, n) - A_1(z^\mu, z_\omega^\nu, n)][B_1(z^\mu, z_\omega^\nu, n) - B_1(z_\omega^\nu, z^\mu, n)] \\ + 2[C_1(z_\omega^\nu, z^\mu, n) - D_1(z^\mu, z_\omega^\nu, n)][C_1(z^\mu, z_\omega^\nu, n) - D_1(z_\omega^\nu, z^\mu, n)], \quad (\text{B.50})$$

$$C(z_\omega^\nu, z^\mu, n) = -[B_1(z_\omega^\nu, z^\mu, n) - B_2(z^\mu, z_\omega^\nu, n)]^2, \quad (\text{B.51})$$

A continuación  $z_1, z_2$  pueden tomar los valores  $E_\omega^\nu, E^\mu$ , nunca al mismo tiempo

$$D(z_1, z_2, n) = 2[A_1(z_1, z_2, n) - A_1(z_2, z_1, n)][D_1(z_2, z_1, n) - C_1(z_1, z_2, n)], \quad (\text{B.52})$$

$$F(z_1, z_2, n) = -[C_1(z_1, z_2, n) - D_1(z_2, z_1, n)][D_1(z_2, z_1, n) - C_1(z_1, z_2, n)], \quad (\text{B.53})$$

$$I(z_1, z_2, n) = -[B_1(z_1, z_2, n) - B_1(z_2, z_1, n)][D_1(z_2, z_1, n) - C_1(z_1, z_2, n)], \quad (\text{B.54})$$

$$J(z_1, z_2, n) = J(z_1, z_2, n-1) + \theta_0(z_2, n)F(z_1, z_2, n-1) + \theta_1(z_1, n)K(z_1, z_2, n-1) \\ + \theta_1^2(z_1, n)\theta_0(z_2, n)[C(z_1, z_2, n-1) + A(z_1, z_2, n-2) + A_0(z_1, z_2, n)] \\ + \theta_1(z_1, n)\theta_0(z_2, n)[I(z_1, z_2, n-1) + B_0(z_1, z_2, n)] \\ + \theta_1^2(z_1, n)[L(z_1, z_2, n-1) + J(z_1, z_2, n-2)], \quad (\text{B.55})$$

$$K(z_1, z_2, n) = 2\theta_1(z_1, n)\theta_2(z_1, n)[L(z_1, z_2, n-1) + J(z_1, z_2, n-2)] + \theta_1(z_1, n)K(z_1, z_2, n-2) \\ + \theta_0(z_2, n)\theta_2(z_1, n)[I(z_1, z_2, n-1) + B_0(z_1, z_2, n)] + \theta_2(z_1, n)K(z_1, z_2, n-1) \\ + \theta_0(z_2, n)C_0(z_1, z_2, n) + \theta_0(z_2, n)\theta_1(z_1, n)[D(z_2, z_1, n-2) + D_0(z_2, z_1, n)] \\ + 2\theta_0(z_2, n)\theta_1(z_1, n)\theta_2(z_1, n)[C(z_1, z_2, n-1) + A(z_1, z_2, n-2) + A_0(z_1, z_2, n)], \quad (\text{B.56})$$

$$L(z_1, z_2, n) = L(z_1, z_2, n-2) + \theta_0(z_2, n)F(z_2, z_1, n-2) + \theta_2(z_1, n)K(z_1, z_2, n-2) \\ + \theta_2^2(z_1, n)\theta_0(z_2, n)[C(z_1, z_2, n-1) + A(z_1, z_2, n-2) + A_0(z_1, z_2, n)] \\ + \theta_2(z_1, n)\theta_0(z_2, n)[D(z_2, z_1, n-2) + D_0(z_2, z_1, n)] \\ + \theta_2^2(z_1, n)[L(z_1, z_2, n-1) + J(z_1, z_2, n-2)] \quad (\text{B.57})$$

y

$$Z(z_1, z_2, n) = Z(z_1, z_2, n-1) + Z(z_1, z_2, n-2) + \theta_0(z_1, n)[L(z_1, z_2, n-1) + J(z_1, z_2, n-2)] \\ + \theta_0(z_1, n)\theta_0(z_2, n)[C(z_1, z_2, n-1) + A(z_1, z_2, n-2) + A_0(z_1, z_2, n)] \\ + \theta_0(z_2, n)[L(z_2, z_1, n-1) + J(z_2, z_1, n-2)] \quad (\text{B.58})$$

donde

$$A_1(z_1, z_2, n) = A_1(z_1, z_2, n-1) + \theta_1(z_2, n)C_1(z_1, z_2, n-1) + \theta_1(z_1, n)D_1(z_1, z_2, n-1) \\ + \theta_1(z_1, n)\theta_1(z_2, n)[A_1(z_1, z_2, n-2) + B_1(z_1, z_2, n-1)], \quad (\text{B.59})$$

$$B_1(z_1, z_2, n) = B_1(z_1, z_2, n-2) + \theta_2(z_1, n)C_1(z_1, z_2, n-2) + \theta_2(z_2, n)D_1(z_1, z_2, n-2) \\ + \theta_2(z_1, n)\theta_2(z_2, n)[A_1(z_1, z_2, n-2) + B_1(z_1, z_2, n-1)], \quad (\text{B.60})$$

$$C_1(z_1, z_2, n) = \theta_1(z_1, n)\theta_2(z_2, n)[A_1(z_1, z_2, n-2) + B_1(z_1, z_2, n-1)] \\ + \theta_2(z_2, n)C_1(z_1, z_2, n-1) + \theta_1(z_1, n)C_1(z_1, z_2, n-2), \quad (\text{B.61})$$

$$D_1(z_1, z_2, n) = \theta_2(z_1, n)\theta_1(z_2, n)[A_1(z_1, z_2, n-2) + B_1(z_1, z_2, n-1)] \\ + \theta_2(z_1, n)D_1(z_1, z_2, n-1) + \theta_1(z_2, n)D_1(z_1, z_2, n-2), \quad (\text{B.62})$$

$$A_0(z_1, z_2, n) = 2[A_1(z_1, z_2, n-2) - A_1(z_2, z_1, n-2)][B_1(z_2, z_1, n-1) - B_1(z_1, z_2, n-1)], \quad (\text{B.63})$$

$$B_0(z_1, z_2, n) = 2[A_1(z_1, z_2, n-2) - A_1(z_2, z_1, n-2)][D_1(z_2, z_1, n-1) - C_1(z_1, z_2, n-1)], \quad (\text{B.64})$$

$$C_0(z_1, z_2, n) = 2[D_1(z_1, z_2, n-2) - C_1(z_2, z_1, n-2)][D_1(z_2, z_1, n-1) - C_1(z_1, z_2, n-1)] \quad (\text{B.65})$$

y

$$D_0(z_1, z_2, n) = 2[B_1(z_1, z_2, n-1) - B_1(z_2, z_1, n-1)][D_1(z_2, z_1, n-2) - C_1(z_1, z_2, n-2)]. \quad (\text{B.66})$$

Para la generación  $n$ , la integral de salto efectiva  $t(E, n)$  y las autoenergías efectivas de los sitios izquierdo  $E_L(E, n)$ , derecho  $E_R(E, n)$  y centro  $E_M(E, n)$  están dadas por las ecuaciones (B.22), (B.34)-(B.36). Para el caso de fronteras libres, las funciones de Green del sistema normalizado son las indicadas en las ecuaciones (B.37)-(B.39).

Las condiciones iniciales del proceso de iteración para la primera generación ( $n = 1$ ) son

$$E_L(z_1, 1) = E_R(z_1, 1) = 0, \quad t(z_1, 1) = t_A \quad (\text{B.67})$$

$$A_1(z_1, z_2, 1) = B_1(z_1, z_2, 1) = C_1(z_1, z_2, 1) = A(z_1, z_2, 1) = C(z_1, z_2, 1) = D(z_1, z_2, 1) = 0 \quad (\text{B.68})$$

$$D_1(z_1, z_2, 1) = t_A, \quad B(z_1, z_2, 1) = 2t_A^2 \quad \text{y} \quad F(z_1, z_2, 1) = -t_A^2 \quad (\text{B.69})$$

$$I(z_1, z_2, 1) = J(z_1, z_2, 1) = K(z_1, z_2, 1) = L(z_1, z_2, 1) = Z(z_1, z_2, 1) = 0 \quad (\text{B.70})$$

Las condiciones iniciales del proceso de iteración para la segunda generación ( $n = 2$ ) son

$$t(z_1, 2) = \frac{t_A t_B}{z_1}, \quad E_L(z_1, 2) = \frac{t_A^2}{z_1}, \quad E_R(z_1, 2) = \frac{t_B^2}{z_1} \quad (\text{B.71})$$

$$A_1(z_1, z_2, 2) = \frac{t_A^2}{z_1}, \quad B_1(z_1, z_2, 2) = \frac{t_B^2}{z_1}, \quad C_1(z_1, z_2, 2) = 0, \quad D_1(z_1, z_2, 2) = \frac{t_A t_B}{z_1} + \frac{t_A t_B}{z_2} \quad (\text{B.72})$$

$$A(z_1, z_2, 2) = -[t(z_1, 2) - t(z_2, 2)]^2 \frac{t_A^2}{t_B^2}, \quad B(z_1, z_2, 2) = 4[t^2(z_1, 2) + t^2(z_2, 2)] \quad (\text{B.73})$$

$$C(z_1, z_2, 2) = -[t(z_1, 2) - t(z_2, 2)]^2 \frac{t_B^2}{t_A^2}, \quad D(z_1, z_2, 2) = 2[t^2(z_1, 2) - t^2(z_2, 2)] \frac{t_A}{t_B} \quad (\text{B.74})$$

$$F(z_1, z_2, 2) = -[t(z_1, 2) + t(z_2, 2)]^2, \quad I(z_1, z_2, 2) = 2[t^2(z_2, 2) - t^2(z_1, 2)] \frac{t_B}{t_A} \quad (\text{B.75})$$

$$J(z_1, z_2, 2) = -t(z_2, 2) \frac{t_A}{t_B}, \quad K(z_1, z_2, 2) = 2t(z_2, 2), \quad K(z_1, z_2, 2) = 2t(z_2, 2), \quad (\text{B.76})$$

$$L(z_1, z_2, 1) = -t(z_2, 2) \frac{t_B}{t_A} \quad \text{y} \quad Z(z_1, z_2, 2) = 0 \quad (\text{B.77})$$

## Apéndice C Teorema de Convulación

En 1988 W.A y M.K. Schwalm, desarrollaron el formalismo de convolución [Schwalm, 1988], el cual afirma que si un hamiltoniano total es separable

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}^{\parallel} \otimes \mathbf{I}^{\perp} + \mathbf{H}^{\perp} \otimes \mathbf{I}^{\parallel}, \quad (\text{C.1})$$

donde el símbolo  $\otimes$  denota la operación de producto directo de matrices,  $\mathbf{H}^{\parallel}(\mathbf{I}^{\parallel})$  y  $\mathbf{H}^{\perp}(\mathbf{I}^{\perp})$  son respectivamente el hamiltoniano (identidad) en el subespacio paralelo y el hamiltoniano (identidad) en el espacio perpendicular.

Las eigenfunciones  $(|n\rangle)$  del hamiltoniano total  $\mathbf{H}$  son producto de las eigenfunciones de cada hamiltoniano que lo componen  $(\mathbf{H}^{\parallel}, \mathbf{H}^{\perp})$ , es decir,  $|n\rangle = |\alpha\rangle|\beta\rangle$  donde  $\mathbf{H}^{\parallel}|\alpha\rangle = E_{\alpha}|\alpha\rangle$ ,  $\mathbf{H}^{\perp}|\beta\rangle = E_{\beta}|\beta\rangle$  y  $|\alpha\rangle$  son funciones de Wannier. La ecuación de Schrödinger correspondiente tiene la forma

$$\begin{aligned} E|n\rangle = \mathbf{H}|n\rangle &= (\mathbf{H}^{\parallel}|\alpha\rangle \otimes \mathbf{I}^{\perp}|\beta\rangle + \mathbf{H}^{\perp}|\alpha\rangle \otimes \mathbf{I}^{\parallel}|\beta\rangle) \\ &= (E_{\alpha}\mathbf{I}_x \otimes \mathbf{I}_y + \mathbf{I}_x \otimes E_{\beta}\mathbf{I}_y)|\alpha\rangle|\beta\rangle \end{aligned}, \quad (\text{C.2})$$

y se tiene que  $E = E_{\alpha} + E_{\beta}$ . La función de Green asociada a la ecuación (C.1) es

$$G_{(r,j)(k,l)}(z) = \sum_{\alpha,\beta} \frac{\langle r|\alpha\rangle\langle\alpha|k\rangle\langle j|\beta\rangle\langle\beta|l\rangle}{z - (E_{\alpha} + E_{\beta})} \quad (\text{C.3})$$

donde  $z = E + i\eta$ , donde  $r$  y  $k$  son las coordenadas en el subespacio paralelo, mientras que  $j$  y  $l$  son las coordenadas en el subespacio perpendicular. Usando la propiedad siguiente de la delta de Dirac,

$$f(\zeta) = \int_{-\infty}^{\infty} d\chi f(\chi)\delta(\zeta - \chi), \quad (\text{C.4})$$

la ecuación (C.3) se reescribe como

$$\begin{aligned} G_{(r,j)(k,l)}(z) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \sum_{\alpha,\beta} \frac{\langle r|\alpha\rangle\langle\alpha|k\rangle\langle j|\beta\rangle\langle\beta|l\rangle}{z - (E_{\alpha} + \zeta)} \delta(\zeta - E_{\beta}) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \sum_{\alpha} \frac{\langle r|\alpha\rangle\langle\alpha|k\rangle}{z - (E_{\alpha} + \zeta)} \sum_{\beta} \langle j|\beta\rangle\langle\beta|l\rangle \delta(\zeta - E_{\beta}). \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

De la ecuación (A.11) se tiene

$$-\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} G_{j,l}^{\perp}(z) = \sum_{\beta} \langle j|\beta\rangle\langle\beta|l\rangle \delta(E - E_{\beta}), \quad (\text{C.6})$$

donde  $(E_{\beta}\mathbf{I} - \mathbf{H}^{\perp})\mathbf{G}^{\perp} = \mathbf{I}$ . Entonces la ecuación (C.5) se reescribe como

$$\begin{aligned}
G_{(r,j)(k,l)}(z) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \sum_{\alpha} \frac{\langle r|\alpha\rangle\langle\alpha|k\rangle}{z-(E_{\alpha}+\zeta)} \left[ -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta' \rightarrow 0^+} \text{Im} G_{j,l}^{\perp}(\zeta+i\eta') \right] \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta G_{r,k}^{\parallel}(z-\zeta) \left[ -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta' \rightarrow 0^+} \text{Im} G_{j,l}^{\perp}(\zeta+i\eta') \right],
\end{aligned} \tag{C.7}$$

además  $(E_{\alpha}\mathbf{I}-\mathbf{H}^{\parallel})\mathbf{G}^{\parallel}=\mathbf{I}$ . En particular, la DOS total se calcula por

$$\begin{aligned}
\text{DOS}(E) &= -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} \sum_{r,j} G_{(r,j)(r,j)}(z) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \left[ -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} \sum_r G_{r,r}^{\parallel}(z-\zeta) \right] \left[ -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta' \rightarrow 0^+} \text{Im} \sum_j G_{j,j}^{\perp}(\zeta+i\eta') \right] \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \text{DOS}^{\parallel}(E-\zeta) \text{DOS}^{\perp}(\zeta),
\end{aligned} \tag{C.8}$$

siendo

$$\text{DOS}^{\parallel}(E) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} \sum_r G_{r,r}^{\parallel}(z), \quad \text{DOS}^{\perp}(\zeta) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta' \rightarrow 0^+} \text{Im} \sum_j G_{j,j}^{\perp}(\zeta+i\eta'). \tag{C.9}$$

Usando la definición de DOS (A.13), la ecuación (C.8) puede reescribirse como

$$\text{DOS}(E) = \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \text{DOS}^{\parallel}(E-\zeta) \sum_{\beta} \delta(\zeta-E_{\beta}) = \sum_{\beta} \text{DOS}^{\parallel}(E-E_{\beta}). \tag{C.10}$$

A continuación, se utiliza el teorema de convolución para la conductancia electrónica a través de la fórmula de Kubo-Greenwood para cuando  $z \rightarrow z+\hbar\omega$  en la ecuación (C.5), es decir,

$$\begin{aligned}
G_{(r,j)(k,l)}(z+\hbar\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \sum_{\alpha} \frac{\langle r|\alpha\rangle\langle\alpha|k\rangle}{z+\hbar\omega-(E_{\alpha}+\zeta)} \sum_{\beta} \langle j|\beta\rangle\langle\beta|l\rangle \delta(\zeta-E_{\beta}) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta G_{r,k}^{\parallel}(z+\hbar\omega-\zeta) \sum_{\beta} \langle j|\beta\rangle\langle\beta|l\rangle \delta(\zeta-E_{\beta})
\end{aligned} \tag{C.11}$$

La traza de la ecuación (B.42) puede ser escrita con  $z_{\omega} = z+\hbar\omega$  como

$$\text{Tr}[\hat{p}\text{Im}G^+(z_{\omega})\hat{p}\text{Im}G^+(z)] = \sum_{r,j,k,l,f,s,v,w} \left\{ p_{(v,w),(r,j)} \text{Im}[G_{(r,j)(k,l)}(z_{\omega})] p_{(k,l),(f,s)} \text{Im}[G_{(f,s)(v,w)}(z)] \right\}. \tag{C.12}$$

Si se considera al operador de momento ( $\hat{p}$ ) en la dirección del campo eléctrico aplicado, se tiene que  $p_{(k,l),(f,s)} = p_{kf}^{\parallel} \delta_{ls}$  y la ecuación (C.12) se reescribe como

$$\text{Tr}[\hat{p}\text{Im}G^+(z_{\omega})\hat{p}\text{Im}G^+(z)] = \sum_{r,j,k,l,f,v} \left\{ p_{vr}^{\parallel} \text{Im}[G_{(r,j)(k,l)}(z_{\omega})] p_{kf}^{\parallel} \text{Im}[G_{(f,l)(v,j)}(z)] \right\}, \tag{C.13}$$

utilizando la ecuación (C.11), se tiene

$$\begin{aligned} \text{Tr}[\hat{p} \text{Im} G^+(z_\omega) \hat{p} \text{Im} G^+(z)] &= \sum_{\substack{r,j,k, \\ l,f,v,}} p_{vr}^{\parallel} \int_{-\infty}^{\infty} dx \text{Im}[G_{r,k}^{\parallel}(z_\omega - x)] \sum_{\beta} \langle j | \beta \rangle \langle \beta | l \rangle \delta(x - E_\beta) \\ &\quad \times p_{kf}^{\parallel} \int_{-\infty}^{\infty} dy \text{Im}[G_{f,v}^{\parallel}(z - y)] \sum_{\beta'} \langle l | \beta' \rangle \langle \beta' | j \rangle \delta(y - E_{\beta'}) \end{aligned} \quad . \quad (\text{C.14})$$

Se puede reescribir la ecuación (C.14) por

$$\begin{aligned} \text{Tr}[\hat{p} \text{Im} G^+(z_\omega) \hat{p} \text{Im} G^+(z)] &= \sum_{r,k,f,v,} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy p_{vr}^{\parallel} \text{Im}[G_{r,k}^{\parallel}(z_\omega - x)] p_{kf}^{\parallel} \text{Im}[G_{f,v}^{\parallel}(z - y)] \\ &\quad \times \sum_{l,j} \sum_{\beta} \langle j | \beta \rangle \langle \beta | l \rangle \delta(x - E_\beta) \sum_{\beta'} \langle l | \beta' \rangle \langle \beta' | j \rangle \delta(y - E_{\beta'}) \end{aligned} \quad . \quad (\text{C.15})$$

Las sumas en la ecuación (C.15) se pueden escribir como

$$\begin{aligned} &\sum_{l,j} \sum_{\beta} \langle j | \beta \rangle \langle \beta | l \rangle \delta(x - E_\beta) \sum_{\beta'} \langle l | \beta' \rangle \langle \beta' | j \rangle \delta(y - E_{\beta'}) \\ &= \sum_{l,j,\beta,\beta'} \langle j | \beta \rangle \langle \beta | l \rangle \langle l | \beta' \rangle \langle \beta' | j \rangle \delta(x - E_\beta) \delta(y - E_{\beta'}) = \sum_{\beta} \delta(x - E_\beta) \delta(y - E_\beta) \end{aligned} \quad , \quad (\text{C.16})$$

Sustituyendo este resultado en (C.15), se obtiene

$$\text{Tr}[\hat{p} \text{Im} G^+(z_\omega) \hat{p} \text{Im} G^+(z)] = \sum_{r,k,f,v} \int_{-\infty}^{\infty} dy p_{vr}^{\parallel} \text{Im}[G_{r,k}^{\parallel}(z_\omega - y)] p_{kf}^{\parallel} \text{Im}[G_{f,v}^{\parallel}(z - y)] \sum_{\beta} \delta(y - E_\beta) \quad . \quad (\text{C.17})$$

Considerando que  $\text{DOS}^\perp(y) = \sum_{\beta} \delta(y - E_\beta)$  se tiene

$$\text{Tr}[\hat{p} \text{Im} G^+(z_\omega) \hat{p} \text{Im} G^+(z)] = \sum_{r,k,f,v} \int_{-\infty}^{\infty} dy p_{vr}^{\parallel} \text{Im}[G_{r,k}^{\parallel}(z_\omega - y)] p_{kf}^{\parallel} \text{Im}[G_{f,v}^{\parallel}(z - y)] \text{DOS}^\perp(y) \quad . \quad (\text{C.18})$$

Sustituyendo la ecuación (C.18) en (B.42)

$$\sigma(\mu, \omega, T) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{2e^2 \hbar}{\pi \Omega m^2} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{f(E) - f(E + \hbar\omega)}{\hbar\omega} \sum_{\substack{r,k, \\ f,v,}} p_{vr}^{\parallel} \text{Im}[G_{r,k}^{\parallel}(z_\omega - y)] p_{kf}^{\parallel} \text{Im}[G_{f,v}^{\parallel}(z - y)] \text{DOS}^\perp(y) \quad , \quad (\text{C.19})$$

definiendo a la conductividad eléctrica en el sistema paralelo como

$$\sigma^\parallel(\mu, y, \omega, T) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{2e^2 \hbar}{\pi \Omega m^2} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{f(E) - f(E + \hbar\omega)}{\hbar\omega} \sum_{r,k,f,v} p_{vr}^{\parallel} \text{Im}[G_{r,k}^{\parallel}(z_\omega - y)] p_{kf}^{\parallel} \text{Im}[G_{f,v}^{\parallel}(z - y)] \quad , \quad (\text{C.20})$$

entonces

$$\sigma(\mu, \omega, T) = \frac{1}{\Omega^\perp} \int_{-\infty}^{\infty} dy \sigma^\parallel(\mu, y, \omega, T) \text{DOS}^\perp(y) \quad , \quad (\text{C.21})$$

para el caso discreto

$$\sigma(\mu, \omega, T) = \frac{1}{\Omega^\perp} \sum_{\beta} \sigma^\parallel(\mu, E_\beta, \omega, T) \quad (\text{C.22})$$

Las ecuaciones (C.10) y (C.22) se utilizan para el cálculo de la  $\text{DOS}(E)$  y la  $\sigma(\mu, \omega, T)$  en esta tesis para los nanoalambres cuasiperiódicos tipo Fibonacci con diferentes secciones transversales y longitud macroscópica.

## Apéndice D Canales Independientes de Conducción

Los nanoalambres cúbicamente estructurados se pueden abordar utilizando una transformación unitaria para convertir el sistema a un conjunto de canales de conducción independientes. Un caso particular para nanoalambres con autoenergías e integrales de salto iguales fue tratado por J. Heinrichs [Heinrichs, 2002]. En este Apéndice, se extenderá dicha transformación unitaria para sistemas con variaciones en las integrales de salto como muestra la Figura D.1 para un sistema de 12 átomos.

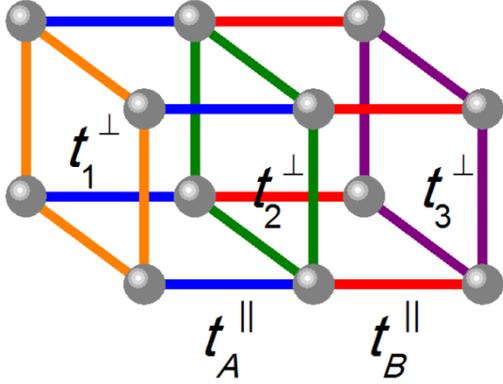


Figura D.1 Dibujo esquemático de un nanoalambre con sección transversal  $2 \times 2$  átomos (bolas grises) enlazados por las integrales de salto  $t_1^\perp$  (líneas naranjas),  $t_2^\perp$  (líneas verdes),  $t_3^\perp$  (líneas moradas),  $t_A^\parallel$  (líneas moradas) y  $t_B^\parallel$  (líneas rojas).

La ecuación de Schrödinger estacionaria,  $[E\mathbf{I} - \hat{\mathbf{H}}]\mathbf{c} = \mathbf{0}$ , para un nanoalambre con sección transversal  $N_\perp = 2 \times 2$ , tres planos transversales y autoenergías nulas puede escribirse como

$$\begin{pmatrix} E & -t_1^\perp & -t_1^\perp & 0 & -t_A^\parallel & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -t_1^\perp & E & 0 & -t_1^\perp & 0 & -t_A^\parallel & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -t_1^\perp & 0 & E & -t_1^\perp & 0 & 0 & -t_A^\parallel & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -t_1^\perp & -t_1^\perp & E & 0 & 0 & 0 & -t_A^\parallel & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -t_A^\parallel & 0 & 0 & 0 & E & -t_2^\perp & -t_2^\perp & 0 & -t_B^\parallel & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -t_A^\parallel & 0 & 0 & -t_2^\perp & E & 0 & -t_2^\perp & 0 & -t_B^\parallel & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -t_A^\parallel & 0 & -t_2^\perp & 0 & E & -t_2^\perp & 0 & 0 & -t_B^\parallel & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -t_A^\parallel & 0 & -t_2^\perp & -t_2^\perp & E & 0 & 0 & 0 & -t_B^\parallel \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -t_B^\parallel & 0 & 0 & 0 & E & -t_3^\perp & -t_3^\perp & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -t_B^\parallel & 0 & 0 & -t_3^\perp & E & 0 & -t_3^\perp \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -t_B^\parallel & 0 & -t_3^\perp & 0 & E & -t_3^\perp \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -t_B^\parallel & 0 & -t_3^\perp & -t_3^\perp & E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^1 \\ c_2^1 \\ c_3^1 \\ c_4^1 \\ c_1^2 \\ c_2^2 \\ c_3^2 \\ c_4^2 \\ c_1^3 \\ c_2^3 \\ c_3^3 \\ c_4^3 \end{pmatrix} = \mathbf{0}, \quad (\text{C.23})$$

siendo  $c_i^k$  la amplitud de la función de onda del sitio  $i$  en el plano transversal  $k$ ,  $t_k^\perp$  es la integral de salto entre los átomos dentro del plano,  $t_A^\parallel$  y  $t_B^\parallel$  son las integrales de salto entre planos 1-2 y 2-3, respectivamente.

En particular, la ecuación de Schrödinger para el plano transversal  $k$  tiene la forma

$$\begin{pmatrix} E & -t_k^\perp & -t_k^\perp & 0 \\ -t_k^\perp & E & 0 & -t_k^\perp \\ -t_k^\perp & 0 & E & -t_k^\perp \\ 0 & -t_k^\perp & -t_k^\perp & E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^k \\ c_2^k \\ c_3^k \\ c_4^k \end{pmatrix} = \mathbf{0}, \quad (\text{C.24})$$

la cual tiene los eigenvalores  $E = \{-2t_k^\perp, 0, 0, 2t_k^\perp\}$  y las correspondientes eigenfunciones. A partir de dichas eigenfunciones se puede construir una transformación unitaria dada por

$$\hat{\mathbf{U}}_k = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{C.25})$$

la cual diagonaliza el hamiltoniano de los planos transformando las amplitudes de la función de onda a través de  $\mathbf{c}^k = \hat{\mathbf{U}}_k \tilde{\mathbf{c}}^k$ . Para el sistema completo de tres planos transversales, la transformación unitaria puede escribirse como

$$\hat{\mathbf{U}} = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{U}}_1 & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \hat{\mathbf{U}}_2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \hat{\mathbf{U}}_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{C.26})$$

Al aplicar la transformación unitaria (C.26) a la ecuación de Schrödinger (C.23),  $\hat{\mathbf{U}}^\dagger [\mathbf{E}\mathbf{I} - \hat{\mathbf{H}}] \hat{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{c}} = \mathbf{0}$ , se tiene

$$\begin{pmatrix}
E+2t_1^\perp & 0 & 0 & 0 & -t_A^\parallel & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & E & 0 & 0 & 0 & -t_A^\parallel & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & E & 0 & 0 & 0 & -t_A^\parallel & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & E-2t_1^\perp & 0 & 0 & 0 & -t_A^\parallel & 0 & 0 & 0 & 0 \\
-t_A^\parallel & 0 & 0 & 0 & E+2t_2^\perp & 0 & 0 & 0 & -t_B^\parallel & 0 & 0 & 0 \\
0 & -t_A^\parallel & 0 & 0 & 0 & E & 0 & 0 & 0 & -t_B^\parallel & 0 & 0 \\
0 & 0 & -t_A^\parallel & 0 & 0 & 0 & E & 0 & 0 & 0 & -t_B^\parallel & 0 \\
0 & 0 & 0 & -t_A^\parallel & 0 & 0 & 0 & E-2t_2^\perp & 0 & 0 & 0 & -t_B^\parallel \\
0 & 0 & 0 & 0 & -t_B^\parallel & 0 & 0 & 0 & E+2t_3^\perp & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -t_B^\parallel & 0 & 0 & 0 & E & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -t_B^\parallel & 0 & 0 & 0 & E & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -t_B^\parallel & 0 & 0 & 0 & E-2t_3^\perp
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
\tilde{c}_1^1 \\
\tilde{c}_2^1 \\
\tilde{c}_3^1 \\
\tilde{c}_4^1 \\
\tilde{c}_1^2 \\
\tilde{c}_2^2 \\
\tilde{c}_3^2 \\
\tilde{c}_4^2 \\
\tilde{c}_1^3 \\
\tilde{c}_2^3 \\
\tilde{c}_3^3 \\
\tilde{c}_4^3
\end{pmatrix}
= \mathbf{0} \quad (\text{C.27})$$

Reordenando las amplitudes  $\tilde{c}_i^k$  en grupos de índice  $i$ , la ecuación (C.27) puede reescribirse como

$$\begin{pmatrix}
E+2t_1^\perp & -t_A^\parallel & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
-t_A^\parallel & E+2t_2^\perp & -t_B^\parallel & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & -t_B^\parallel & E+2t_3^\perp & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & E & -t_A^\parallel & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & -t_A^\parallel & E & -t_B^\parallel & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & -t_B^\parallel & E & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E & -t_A^\parallel & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -t_A^\parallel & E & -t_B^\parallel & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -t_B^\parallel & E & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E-2t_1^\perp & -t_A^\parallel & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -t_A^\parallel & E-2t_2^\perp & -t_B^\parallel \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -t_B^\parallel & E-2t_3^\perp
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
\tilde{c}_1^1 \\
\tilde{c}_1^2 \\
\tilde{c}_1^3 \\
\tilde{c}_2^1 \\
\tilde{c}_2^2 \\
\tilde{c}_2^3 \\
\tilde{c}_3^1 \\
\tilde{c}_3^2 \\
\tilde{c}_3^3 \\
\tilde{c}_4^1 \\
\tilde{c}_4^2 \\
\tilde{c}_4^3
\end{pmatrix}
= \mathbf{0} \quad (\text{C.28})$$

La ecuación (C.28) se puede interpretar como cuatro canales independientes con autoenergías correspondientes a los eigenvalores del hamiltoniano de cada plano transversal. Por lo que el problema de un nanoalambre cúbicamente estructurado puede ser tratado como canales independientes conectados a sus respectivos saturadores que son canales periódicos semi-infinitos con autoenergías  $E = \{-2t, 0, 0, 2t\}$  obtenidas por la misma transformación unitaria.

Cabe mencionar que esta transformación unitaria (C.26) puede generalizarse a cualquier tamaño en el plano transversal y cualquier longitud de nanoalambre.

## Referencias

- [Abrahams, 1979] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello y T.V. Ramakrishnan, Scaling Theory of Localization: Absence of Quantum Diffusion in Two Dimensions, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 673 (1979).
- [Abrahams, 2001] E. Abrahams, S.V. Kravchenko y M.P. Sarachik, Metallic Behavior and Related Phenomena in Two Dimensions, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 251 (2001).
- [Anderson, 1958] P.W. Anderson, Absence of Diffusion in Certain Random Lattices, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958).
- [Ashcroft, 1976] Neil W. Ashcroft y N. David Mermin, *Solid State Physics* (Harcourt, 1976).
- [Ball, 1985] M.D. Ball y D.J. Lloyd, Particles Apparently Exhibiting Five-Fold Symmetry In Al-Li-Cu-Mg Alloys, *Scr. Metall.* **19**, 1065 (1985).
- [Bancel, 1986] P.A. Bancel y P.A. Heiney, Icosahedral Aluminum-Transition-Metal Alloys, *Phys. Rev. B* **33**, 7917 (1986).
- [Bendersky, 1985] L. Bendersky, Quasicrystal with One-Dimensional Translational Symmetry and a Tensfold Rotation Axis, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 1461 (1985).
- [Besicovitch, 1932] A. S. Besicovitch, *Almost Periodic Functions*, (Cambridge University Press, 1932).
- [Clarke, 2008] W.R. Clarke, C.E. Yasin, A.R. Hamilton, A.P. Micolich, M.Y. Simmons, K. Muraki, Y. Hirayama, M. Pepper y D.A. Ritchie, Impact of Long- and Short-Range Disorder on the Metallic Behaviour of Two-Dimensional Systems, *Nature Physics* **4**, 55 (2008).
- [Datta, 1995] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic System*, (Cambridge University Press, London, 1995).
- [Economou, 2006] E.N. Economou, *Green's Function in Quantum Physics*, 3<sup>rd</sup> Ed. (Springer-Verlag, 2006).
- [Elliott, 1974] R.J. Elliott, J.A. Krumhansl y P.L. Leath, The Theory and Properties of Randomly Disordered Crystals and Related Physical Systems, *Rev. Mod. Phys.* **46**, 465 (1974).
- [Gautam, 2008] U.K. Gautam, *et al.*, Synthesis, Structure, and Multiply Enhanced Field-Emission Properties of Branched ZnS Nanotube-In Nanowire Core-Shell Heterostructures. *ACS Nano* **2**, 1015 (2008).
- [Greenwood, 1958] A.D. Greenwood, The Boltzmann Equation in the Theory of Electrical Conduction in Metals, *Proc. Phys. Soc.* **71**, 585 (1958).
- [Heinrichs, 2002] J. Heinrichs, Localization from Conductance in Few-Channel Disordered Wires, *Phys. Rev. B* **66**, 155434 (2002).
- [Ibach, 2009] H. Ibach y H. Lüth, *Solid-State Physics*, 4<sup>th</sup> Ed. (Springer-Verlag, 2009) p. 161.

- [Imry, 1999] Y. Imry y R. Landauer, Conductance Viewed as Transmission, *Rev. Mod. Phys.* **71**, S306 (1999).
- [Janot, 1994] C. Janot, *Quasicrystals*, a Premier, 2<sup>nd</sup> Ed. (Oxford University Press, 1994) p. 35.
- [Kadanoff, 1967] Leo P. Kadanoff, *et al.*, Static Phenomena Near Critical Points: Theory and Experiment, *Rev. Mod. Phys.* **39**, 395 (1967).
- [Kittel, 1996] Charles Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 7<sup>th</sup> Ed. (John Wiley, 1996).
- [Kohmoto, 1984] M. Kohmoto y Y. Oono, Cantor Spectrum for an Almost Periodic Schrödinger equation and a Dynamical Map, *Phys. Lett. A* **102**, 145 (1984).
- [Kravchenko, 2004] S.V. Kravchenko y M.P. Sarachik, Metal–Insulator Transition in Two-Dimensional Electron Systems, *Rep. Prog. Phys.* **67**, 1 (2004).
- [Kubo, 1957] R. Kubo, Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes, *J. Phys. Soc. Japan* **12**, 570 (1957).
- [Landauer, 1992] R. Landauer, Conductance from Transmission: Common Sense Points, *Physica Scripta* **T42**, 110 (1992).
- [Levine, 1984] D. Levine y P.J. Steinhardt, Quasicrystals: a New Class of Ordered Structures, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2477 (1984).
- [Luo, 1993] Z. Luo, S. Zhang, Y. Tang y D. Zhao, Quasicrystals In As-Cast Mg-Zn-RE Alloys, *Scr. Metall.* **28**, 1513 (1993).
- [Matsuda, 2010] I. Matsuda, *et al.*, Electron Compound Nature in a Surface Atomic Layer of a Two-Dimensional Hexagonal Lattice, *Phys. Rev. B* **82**, 165330 (2010).
- [Merlin, 1985] R. Merlin K. Bajema, Roy Clarke, F.-Y. Juang y P.K. Bhattacharya, Quasiperiodic GaAs-AlAs Heterostructures, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 1768 (1985).
- [Merzbacher, 1970] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, 3<sup>rd</sup> Ed. (John Wiley, 1970).
- [Meyer, 2000] C.D. Meyer, *Matrix Analysis and Applied Linear Algebra*, (Soc. Ind. Appl. Math., 2000) p.120.
- [Mott, 1990] Nevill F. Mott, *Metal-Insulator Transitions*, 2<sup>nd</sup> Ed. (Taylor & Francis, 1990) p.35.
- [Naumis, 1994] G.G. Naumis, R.A. Barrio y C. Wang, Effects of Frustration and Localization of States in the Penrose Lattice, *Phys. Rev. B* **50**, 9834 (1994).
- [De Picciotto, 2001] R. de Picciotto, H.L. Stormer, L.N. Pfeiffer, K.W. Baldwin y K.W. West, Four-Terminal Resistance of a Ballistic Quantum Wire, *Nature* **411**, 51 (2001).
- [Sakurai, 1994] J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics* (Addison-Wesley Publishing Company, 1994).

- [Sánchez, 2001] V. Sánchez, L.A. Pérez, R. Oviedo-Roa y C. Wang, Renormalization Approach to the Kubo Formula in Fibonacci Systems, *Phys. Rev. B* **64**, 174205 (2001).
- [Sánchez, 2004] V. Sánchez y C. Wang, Application of Renormalization and Convolution Methods to the Kubo-Greenwood Formula in Multidimensional Fibonacci Systems, *Phys. Rev. B* **70**, 144207 (2004).
- [Shechtman, 1984] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias y J.W. Cahn, Metallic Phase with Long-range Orientational Order and No Translational Symmetry, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1951 (1984).
- [Schwalm, 1988] W.A. Schwalm y M.K. Schwalm, Extension Theory for Lattice Green Functions, *Phys. Rev. B* **37**, 9524 (1988).
- [Sutton, 1994] A.P. Sutton, *Electronic Estructure of Materials* (Oxford University Press, 1994).
- [Sütő, 1989] A. Sütő, Singular Continuous Spectrum on a Cantor Set of Zero Lebesgue Measure for the Fibonacci Hamiltonian, *J. Stat. Phys.* **56**, 525 (1989).
- [Tiggelen, 1999] B. A. van Tiggelen, *Localization of Waves in Diffuse Waves in Complex Media* Ed. por J. P. Fouque (Kluwer Academic, 1999) p. 7.
- [Todd, 1986] J. Todd, R. Merlin, R. Clarke, K.M. Mohanty y J.D. Axe, Synchrotron X-Ray Study of a Fibonacci Superlattices, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1157 (1986).
- [Wang, 1988] C. Wang y R.A. Barrio, Theory of the Raman Response in Fibonacci Superlattices, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 191 (1988).
- [Wilson, 1971] Kenneth G. Wilson, Renormalization Group and Critical Phenomena. I. Renormalization Group and the Kadanoff Scaling Picture, *Phys. Rev. B* **4**, 3174 (1971).
- [Yu, 2005] P. Yu y M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors, Physics and Materials Properties* (Springer, 2005).
- [Ziman, 1979] John M. Ziman, *Models of Disorder: the Theoretical Physics of Homogeneously Disordered Systems*, 1<sup>st</sup> Ed. (Cambridge University Press, 1979).
- [Zou, 2008] X. Zou y S. Hovmöller, Electron Crystallography: Imaging and Single-Crystal Diffraction from Powders, *Acta Cryst.* **A64**, 149 (2008).