



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

Estudio del transporte electrónico
mediante la matriz de dispersión en
Hamiltonianos arbitrarios de amarre fuerte

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO
DE:
FÍSICO

P R E S E N T A :

LUIS ARTURO MEDINA AMAYO

DIRECTOR DE TESIS:
Dr. Carlos Ramírez Ramos



Ciudad Universitaria, Cd. Mx.

2018



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.

*A mis padres, Ángeles y Arturo
A mis hermanos, Alexia y Diego*

“Sometimes all you need is twenty seconds of insane courage, just literally twenty seconds of embarrassing bravery, and I promise you something great will come of it.”

- Benjamin Mee

Agradecimientos

Al *Dr. Carlos Ramírez Ramos*, por su infinita paciencia y su amistad brindada. Porque en los momentos en los que perdí el rumbo me ayudó a mantener los pies en la tierra mediante su consejo y orientación. Agradezco infinitamente su calidez y buena disposición, así como la confianza depositada en mí a lo largo de estos años.

A mis sinodales, *Dra. Renela, Dra. Vicenta, Dr. José Eduardo, Dr. Luis Pérez*, por su tiempo y su excelente disposición, así como por sus valiosas aportaciones y su interés en mi futuro académico.

A mis padres *Ángeles y Arturo*, quienes representan mi apoyo y mi refugio. Agradezco todos sus consejos y enseñanzas que se ven plasmadas en esta tesis y sin las cuales hoy no sería la persona que me enorgullezco de ser.

A mis hermanos *Alexia y Diego*, compañeros de aventura. Porque me ayudaron a relajarme cuando estaba a punto de quebrar y me enseñaron que no todo en la vida es estudio y trabajo.

A todos mis amigos de la facultad, entre los que puedo mencionar a *Fernando, Fernanda, Gaby, Jaime, Luis, Ana, Michelle, José, Danielle, Aura, Pancho*, etc. Lamento mucho no poder escribirlos a todos, sin embargo les agradezco por igual su apoyo y compañía en esta travesía. Porque muchas veces me vi en aprietos y siempre conté con su apoyo y ayuda incondicional, sin importar la circunstancia.

A *Olga*, quien me enseñó a mantener mi vista fija en mis sueños y a no dejarme vencer ante las adversidades.

A mis amigos y maestros del doblaje *Ángel, Tacha, Susana, Fany, Humberto, Emmanuel, Pepe, Polo, Aure* y muchos más, por enseñarme a perder el miedo y ayudarme a superarme.

Finalmente, a todos aquellos que no he tenido oportunidad de nombrar pero que se han visto involucrados directa o indirectamente en el desarrollo de esta tesis. Simplemente gracias.

A los proyectos UNAM-DGAPA-PAPIIT IA106617 y LANCAD-UNAM-DGTIC-329 por el apoyo otorgado.

ÍNDICE

Introducción	2
I. Estado Sólido	5
1.1 Cristales	6
1.2 Teorema de Bloch	9
1.3 Modelo de Amarre Fuerte	12
1.4 Teoría de Bandas	14
1.5 Defectos en Cristales	17
II. Conductancia Eléctrica	18
2.1 Fórmula de Landauer	19
2.2 Dispersión Cuántica	23
2.3 Sistemas Periódicos Infinitos	27
2.4 Sistemas Periódicos Semi-Infinitos	31
III. Sistemas con Defectos	32
3.1 Cadena con Defecto de Sitio	32
3.2 Cadena con Defecto Fano	33
3.3 Nanocintas de Sección Transversal Variable	35
3.4 Limitaciones del Método Directo	38
IV. Método Recursivo de la Matriz de Dispersión	39
4.1 Composición de Matrices de Dispersión	39
4.2 Bloques Básicos	42
4.3 Saturadores	43
4.4 Aplicación en Sistemas con Defectos	46
V. Conclusiones	58
Apéndice A	59
Apéndice B	61
Apéndice C	62
Apéndice D	63
Apéndice E	65
Apéndice F	66
Referencias	67

INTRODUCCIÓN

En nuestra época, la optimización de tecnologías se ha visto sujeta a dos condiciones fundamentales: el tamaño y la eficiencia del dispositivo. Siguiendo esta lógica, determinamos que un dispositivo óptimo corresponde a aquel que posee un alto rendimiento y que es fácilmente transportable. Como las propiedades de las componentes electrónicas macroscópicas ya habían sido hondamente estudiadas y eran bastante bien conocidas, la carrera por el desarrollo de nuevas tecnologías no presentó ningún obstáculo durante un tiempo. No obstante, con el paso de los años se observó que los sistemas considerablemente reducidos ya no obedecen las leyes establecidas por la física clásica, sino que ahora presentan un comportamiento inesperado que no se puede describir en el marco teórico correspondiente. Debido a esta acelerada miniaturización de los dispositivos, las componentes electrónicas ahora se ven sometidas a las leyes de la física cuántica, pues en sistemas con dimensiones nanométricas se hacen notorios efectos cuánticos que en sistemas macroscópicos no es necesario considerar [Pokropivny, 2007]. Un ejemplo de esto lo podemos encontrar en los transistores. En sus inicios los primeros circuitos integrados desarrollados (Intel 4004, Intel 4008) constaban de aproximadamente 10^3 transistores, cada uno de estos con dimensiones del orden de micrómetros. De acuerdo con la Ley de Moore, el número de estos transistores se duplica cada dos años por medio de una reducción en sus dimensiones física, que además conlleva una mejor eficiencia energética. Es así que actualmente los microprocesadores contienen hasta 10^{10} transistores, cada uno de estos con dimensiones de aproximadamente 10 nm. Esta miniaturización de estructuras generó una nueva serie de investigaciones cuyo objetivo es el de caracterizar las propiedades eléctricas en sistemas de pequeñas dimensiones con el fin de construir nanoestructuras en las cuales se produzcan efectos útiles para la mejora de dispositivos electrónicos. La rama de la física encargada de lo anterior corresponde a la nanociencia [Nazarov, 2009].

Una de las propiedades fundamentales para el desarrollo de nuevas tecnologías resulta ser la conductancia, la cual se define como la capacidad de que un flujo de electrones atraviese un sistema [Fink & Beaty, 2006]. Microscópicamente hablando, ésta depende de la facilidad con la que se transmiten los electrones bajo los efectos cuánticos presentes en una nanoestructura (transporte electrónico). Estos dos conceptos se relacionan algebraicamente por medio de la fórmula de Landauer [Ryndyk, 2016].

Adicionalmente, los materiales se pueden clasificar con base a su conductancia como conductores (metales), semiconductores y no conductores (aislantes). Aunque en la naturaleza los metales son los que presentan la mejor conductancia, su uso en la fabricación de componentes electrónicas no es apropiado ya que cuando se someten a temperaturas altas, su resistencia aumenta pues es directamente proporcional a la temperatura absoluta del

sistema [Mott, 1936]. En consecuencia, los dispositivos se construyen con base en materiales que no presenten este fenómeno: los semiconductores.

La conductancia en este tipo de sistemas depende directamente de la pureza del material con el que se trate. Si éste presenta impurezas en su estructura, se generará una región donde se produce un efecto de dispersión. Como en la naturaleza y en la fabricación de dispositivos es muy difícil encontrar un material totalmente puro, este fenómeno ocurre muy frecuentemente, por lo cual el análisis de la conductancia en una nanoestructura se reduce al cálculo de la función de transmisión correspondiente al sistema, la cual se relaciona directamente con la conductancia mediante la fórmula de Landauer.

A lo largo de los años se han desarrollado diversos métodos para la extracción de dicha función, todos distintos al cálculo directo. Por ejemplo, se puede obtener a través de su semejante, la matriz de dispersión o por medio de funciones de Green, las cuales son equivalentes al método de Landauer (matriz de dispersión) [Ryndyk, 2016]. Otra técnica conocida que podemos destacar es aquella que se basa en la renormalización de la fórmula de Kubo-Greenwood [Sánchez, 2004]. Si bien estos métodos significaron un gran avance en su momento y son efectivos bajo distintas condiciones, en general han presentado limitaciones en su empleo. Por ejemplo, la técnica de Landauer necesita almacenar matrices del tamaño de la región dispersora y requiere un gran esfuerzo computacional; los métodos de Kubo-Greenwood y funciones de Green se ven limitados a estructuras que no presenten múltiples variaciones en su sección transversal o múltiples defectos en general, pues en estos casos las técnicas requieren numerosos recursos computacionales y se vuelven insostenibles. Sintetizando, en la actualidad podemos estimar la conductancia asociada a un sistema nanométrico mediante diversos métodos, siempre y cuando ésta no sea de grandes dimensiones y no presente diversos defectos que produzcan dispersión electrónica.

En esta tesis se propone un método con el cual es posible calcular la conductancia de nanoestructuras con geometría compleja, así como la de algunos sistemas macroscópicos. El método se basa en la construcción de la estructura a través de la composición de subestructuras simples, y cuya matriz de dispersión asociada corresponde a la operación de las matrices de dispersión de los subsistemas integrantes.

A continuación, en el primer capítulo de esta tesis se precisan los teoremas y nociones básicas relacionadas al estado sólido como son: el concepto de sólido, el teorema de Bloch y el modelo de amarre fuerte, entre otros. El capítulo II se enfoca en desarrollar los conceptos necesarios para el cálculo de la conductancia en sistemas nanométricos. Comienza por definir las partes y las características de una nanoconexión, seguido a lo cual se deriva la fórmula de Landauer y posteriormente se establecen las ecuaciones que se deben cumplir en la región de dispersión de una nanoestructura. Finalmente, se plantea el comportamiento de la función de onda a lo largo de sistemas periódicos infinitos y semi-infinitos para que en el capítulo III se calcule la conductancia de sistemas con defectos utilizando el método directo. El capítulo

IV comprende el planteamiento del método propuesto, donde se describe a detalle la operación de matrices de dispersión de sistemas conectados, las condiciones bajo las cuales ocurre la unión de sistemas y las características del sistema resultante de la fusión. Establecemos la construcción de subestructuras base, como sus respectivas matrices de dispersión con el propósito de aplicar estos conceptos a diversos sistemas con defectos y comparar los resultados obtenidos con aquellos derivados del método directo. Además, aplicamos el método propuesto a sistemas de geometría compleja con el fin de ilustrar la operatividad de la técnica planteada. Finalmente, en el capítulo cinco se exhiben las conclusiones referentes a esta tesis.

I

ESTADO SÓLIDO

Es bien sabido que la eficiencia de los componentes está determinada por su utilidad y el espacio que éstos llegan a ocupar, de modo que un componente altamente eficiente resulta ser aquel portátil que preserva su buen rendimiento.

Durante muchos años se buscó modernizar los sistemas de manera que fueran más cómodos para su usuario, sin embargo, esta modernización ha llegado al límite en el cual los circuitos tienen dimensiones tan pequeñas que sus propiedades físicas (en particular las eléctricas) ya no se ven regidas por las leyes clásicas pues se hacen prominentes ciertos fenómenos que solamente pueden ser explicados en el marco de la física cuántica. Esto generó el nacimiento de una nueva rama de investigación dedicada al estudio y la descripción de dichos efectos.

Uno de los campos que logró el objetivo anterior fue la física del estado sólido, la cual se encarga de estudiar cómo se ven afectadas las propiedades macroscópicas de un sistema mediante el análisis de la estructura atómica del material. Sin embargo, antes de empezar a hablar de estado sólido es necesario definir qué es un sólido.

En su forma más general, un sólido es aquel material en el cual sus átomos constituyentes oscilan en torno a posiciones de equilibrio. Dependiendo de su estructura estos se clasifican en diferentes tipos. Así, si presentan un determinado patrón que se repite periódicamente a lo largo del espacio, se trata de un *crystal*, en caso contrario estamos hablando de un *sólido amorfo* o *vidrio* (véase Fig. 1.1). A aquellos sólidos que se encuentran de alguna manera ordenados pero que no presentan un patrón periódico se les conoce como *cuasicristales* [Gellings, 1997]. Debido a sus simetrías y periodicidad, el estudio de los fenómenos cuánticos se ve altamente simplificado en el caso de los cristales y por ello, de entre todos los sólidos han sido los más estudiados.

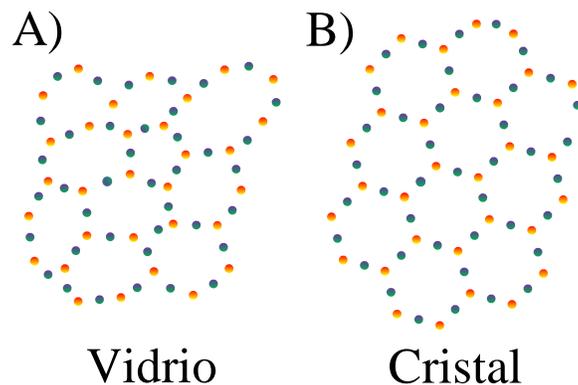


Figura 1.1. Estructura atómica de: (A) un vidrio y (B) un cristal

En la presente sección se empezará por caracterizar matemática y geoméricamente a los cristales. Se hablará del concepto de *red recíproca* y *zonas de Brillouin* con el fin de explicar posteriormente a detalle la aproximación de *amarre fuerte* y el *Teorema de Bloch*. Finalmente, se expondrá el origen de la *teoría de bandas* y se introducirá la noción de cristales con defectos.

1.1 Cristales

Como se mencionó, los sólidos cristalinos presentan periodicidad en su estructura microscópica, la cual se debe a que los átomos que lo conforman se encuentran ordenados en una cierta configuración que se repite a lo largo de todo el espacio. A partir de esta periodicidad, podemos definir la *celda unitaria* cuya principal característica es que, mediante la repetición de la misma se puede generar el sistema macroscópico.

A las partículas constitutivas que se localizan en cada punto de la celda se les conoce como *base*. Ésta varía dependiendo el tipo de cristal que se esté tratando. Por ejemplo, se puede encontrar un cristal cuya base esté compuesta por átomos, así como se puede tener un cristal cuya base conste de estructuras complejas, como es el caso de los cristales de protéicos [Hofmann, 2015]. En general nos referiremos a los elementos integrantes de la celda unitaria como *sitios* o *puntos de la red*.

Las celdas unitarias, en el caso tridimensional, se pueden establecer mediante tres vectores no coplanares \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 y \mathbf{a}_3 conocidos como *vectores base*. La elección de estos vectores no es única y por ello la determinación de esta celda para una configuración tampoco lo es, sin embargo es posible elegir una triada de vectores, \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 y \mathbf{a}_3 , tales que la celda correspondiente a estos contenga en su totalidad el volumen mínimo posible, un solo sitio de la red. A la celda resultante se le conoce como *celda unitaria primitiva* y a sus vectores correspondientes se les conoce como *vectores base primitivos*.

1.1.1 Celda primitiva de Wigner-Seitz

Debido a la no-unicidad de la celda unitaria primitiva existen diferentes métodos para elegir a los vectores base primitivos. Uno de estos consiste en el siguiente procedimiento

1. Primeramente se selecciona un sitio de la red.
2. Se dibujan las rectas que unan al átomo elegido con sus vecinos más cercanos.
3. Trazamos la mediatriz de cada una de las líneas anteriores.
4. Se unen los puntos donde las mediatrices se intersectan

Esta técnica es el *método de Wigner-Seitz* y su construcción se ilustra en la Fig. 1.2. A la celda generada se le llama *celda unitaria primitiva de Wigner-Seitz* y cuenta únicamente con

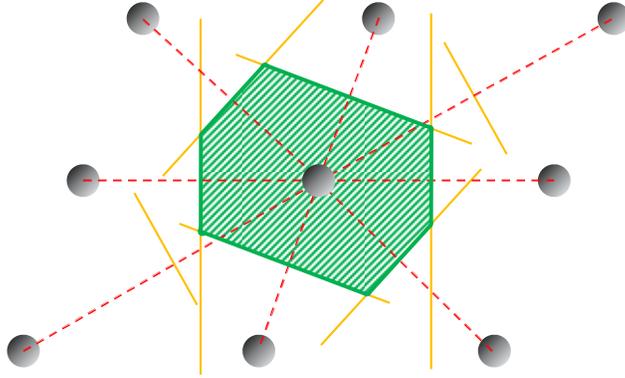


Figura 1.2. Ejemplo de celda unitaria primitiva de Wigner-Seitz para un arreglo en 2D.

un sitio de la red ubicado en su centro. Una de las propiedades más relevantes de esta celda es que presenta la misma simetría de la red [Ashcroft, 1976].

1.1.2 Redes de Bravais

Dependiendo de la norma de los vectores base y el ángulo que existe entre estos podemos definir siete tipos de celdas unitarias: Triclínica, Monoclínica, Ortorrómbica, Tetragonal, Cúbica, Trigonal y Hexagonal [Kittel, 2005]. En tres dimensiones es posible demostrar que estas celdas se clasifican en catorce categorías elementales conocidas como *redes de Bravais*, las cuales se muestran en la Fig. 1.3 [Hahn, 2002]. Situando el origen de nuestro sistema de coordenadas en alguno de los sitios integrantes de la celda de Bravais podemos determinar la posición del resto de los elementos usando un vector de la red real (\mathbf{R}) definido como

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 \quad \text{con } n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}. \quad (1.1)$$

A causa de la periodicidad de las celdas a lo largo del cristal, si nos fijamos en una posición \mathbf{r} dentro de una celda y nos trasladamos a cualquier otro punto $\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{R}$, la configuración de celda que veremos será la misma que en el punto \mathbf{r} , sucediendo así que las propiedades del sistema en \mathbf{r} son equivalentes a aquellas en \mathbf{r}' , es decir, también son periódicas.

1.1.3 Red recíproca

Ya vimos que las redes de Bravais se generan mediante tres vectores fundamentales no coplanares, \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 y \mathbf{a}_3 , denominados *vectores base*, cuyas características van a indicar cuál de las catorce posibles redes es la que define al cristal. Esto caracteriza a las estructuras cristalinas “directamente” en el espacio real de coordenadas. También pueden definirse de manera alternativa en el espacio recíproco mediante la transformada de Fourier de la red real [Guinier, 1963], [Kittel, 2005]. Análogo a dicho espacio, la red recíproca es generada mediante

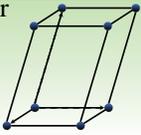
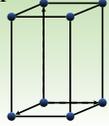
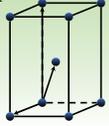
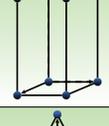
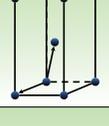
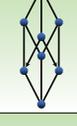
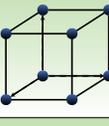
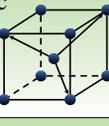
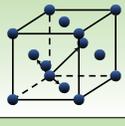
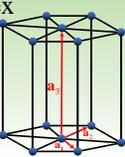
Celda de Bravais	Parámetros	Simple (s)	Centrada en el Volumen (bc)	Centrada en la Base (ec)	Centrada en las Caras (fc)
Triclínica	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} \neq \alpha_{23} \neq \alpha_{31}$	tr 			
Monoclínica	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$ $\alpha_{12} \neq 90^\circ$	sm 	cm 		
Ortorrónica	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$	so 	bco 	eco 	fco 
Tetragonal	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$	st 	ct 		
Romboédrica	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} < 120^\circ$	rh 			
Cúbica	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$	sc 	bcc 		fcc 
Hexagonal	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = 120^\circ$ $\alpha_{23} = \alpha_{31} = 90^\circ$	hex 			

Figura 1.3. Las 14 redes de Bravais en tres dimensiones. Los vectores base son $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ y \mathbf{a}_3 con norma $\|\mathbf{a}_1\| = a_1, \|\mathbf{a}_2\| = a_2, \|\mathbf{a}_3\| = a_3$ y ángulos $\angle \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2 = \alpha_{12}, \angle \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3 = \alpha_{23}, \angle \mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1 = \alpha_{31}$. En la esquina superior izquierda de cada recuadro se indica la nomenclatura con la cual se conoce a estas celdas. Basada en [Young, 1991].

tres *vectores base recíprocos*, $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$ y \mathbf{b}_3 , los cuales al considerar la condición de periodicidad de la estructura, se demuestra que se relacionan con los vectores base de la siguiente manera [Kittel, 2005]

$$\begin{cases} \mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\Omega_c}, \\ \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\Omega_c}, \\ \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\Omega_c}, \end{cases} \quad (1.2)$$

con $\Omega_c = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$ el volumen de la celda unitaria en el espacio real. Podemos notar que como los vectores base en el espacio real no son coplanares entre sí, entonces los vectores base en el espacio recíproco tampoco lo son.

Operando las expresiones en (1.2) se encuentra que, tanto los vectores en el espacio real como en el espacio recíproco obedecen la relación

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{i,j}. \quad (1.3)$$

De la anterior se puede concluir que el tamaño de la celda en el espacio recíproco es inversamente proporcional al tamaño de la celda en el espacio real [Wang, 2014]. Esto es relevante ya que el análisis de una estructura compleja de grandes dimensiones en el espacio real se puede simplificar en gran medida al transformar el sistema al espacio recíproco.

Al igual que en el espacio real, existe un vector en el espacio recíproco con el cual es posible desplazarse de un sitio de la red recíproca a otro, el cual está dado por

$$\mathbf{G} = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 + m_3 \mathbf{b}_3 \quad \text{con} \quad m_1, m_2, m_3 \in \mathbb{Z}. \quad (1.4)$$

Como veremos más adelante, en cristales no es necesario trabajar sobre toda la estructura en el espacio real pues toda la física del sistema se ve englobada en una pequeña zona del espacio recíproco. Dicha zona se conoce como *primera zona de Brillouin* y corresponde a la celda unitaria de Wigner-Seitz en la red recíproca. Para nuestros futuros cálculos usaremos un enfoque conocido como *esquema de Zonas Reducidas*, en el cual las zonas de orden superior a partir de la segunda zona de Brillouin son trasladadas mediante reflexiones a la primera zona de Brillouin. [Kittel, 2005].

1.2 Teorema de Bloch

Para poder tratar el problema de un electrón en un arreglo cristalino es necesario tomar en consideración muchos efectos que actúan sobre la partícula, como lo son el potencial causado por los núcleos atómicos y la interacción electrón-electrón que hay debido al resto de los átomos de la estructura. Este resulta ser un problema de muchos cuerpos imposible de tratar analíticamente. Una primera aproximación para resolver dicho problema consiste en suponer que el cristal contiene electrones que no interactúan entre sí pero que se encuentran sometidos a un potencial efectivo periódico, que contempla al potencial por interacciones con otras partículas. A pesar de que en casos reales es muy difícil determinar el antedicho potencial efectivo, esta aproximación logró explicar muchas propiedades de los cristales.

En virtud de que los átomos en la estructura cristalina se encuentran ordenados de forma regular, consideramos un potencial periódico que cumple

$$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R}), \quad (1.5)$$

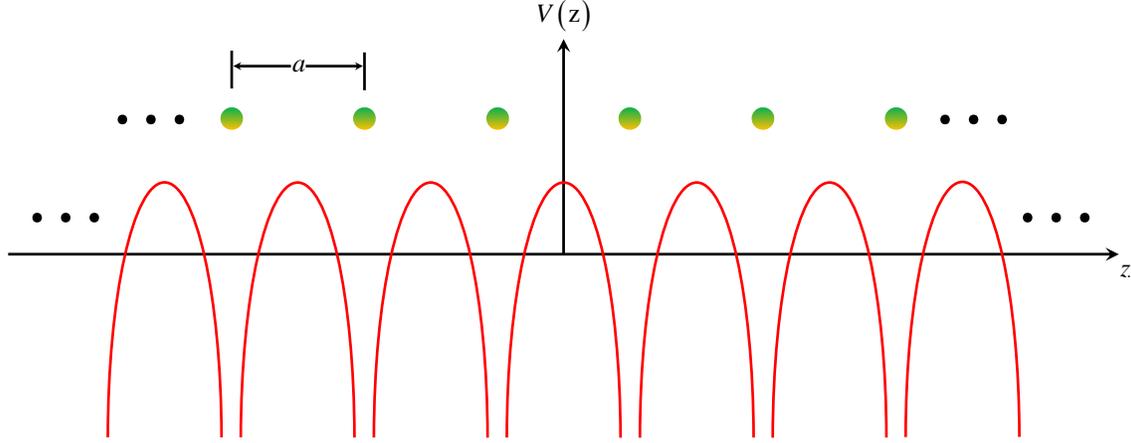


Figura 1.4. Representación de un potencial periódico en un arreglo unidimensional de átomos. Nótese que en este caso el potencial cumple que $V(z) = V(z + a)$ con a la constante de red.

donde \mathbf{R} es el vector de traslación de la red real (1.1) y \mathbf{r} es el vector posición dentro de la celda unitaria. Por ejemplo, la Fig. 1.4 muestra un potencial unidimensional que se repite periódicamente a lo largo del eje z . Entonces, el Hamiltoniano para un solo electrón puede escribirse como

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (1.6)$$

A los electrones que cumplen con el anterior se les conoce como *electrones de Bloch*.

Con base en la periodicidad del potencial a lo largo del cristal, el físico suizo Felix Bloch planteó el siguiente teorema:

“Para el Hamiltoniano de una sola partícula $\hat{H}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ con $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ para toda \mathbf{R} en una red de Bravais, los eigenestados $\psi(\mathbf{r})$ se pueden escribir de tal forma que tengan la siguiente estructura

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

donde $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ representa a una onda plana y $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ es una función periódica cuyo periodo es el mismo que el de la celda de Bravais, es decir cumple que $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ para toda \mathbf{R} en la red de Bravais” [Ashcroft, 1976].

A este enunciado se le conoce como *Teorema de Bloch* y a las funciones $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ se les suele llamar *funciones de Bloch*. Además, utilizando la definición de función de Bloch y la ecuación (1.7) tenemos que

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.8)$$

para toda \mathbf{R} en la celda de Bravais.

Siempre es posible tomar una combinación lineal de funciones de Bloch para generar paquetes de ondas localizadas. Esto se puede lograr aplicando la transformada de Fourier a dichas funciones, de modo que se obtiene

$$w_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{ZB} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{k}, \quad (1.9)$$

donde la integral corre a lo largo de todos los puntos en la primera zona de Brillouin y V es el volumen de la celda primitiva en el espacio coordinado. A las funciones $w_{\mathbf{R}}(\mathbf{r})$ se les conoce como *funciones de Wannier* y se caracterizan por su dependencia con el vector \mathbf{R} en el espacio real. Adicionalmente, es posible demostrar que las anteriores funciones forman un set completo de funciones ortogonales [Stangel, 2013].

1.2.1 Funciones de Bloch en guías de onda

Suponiendo una onda que se traslada en dirección paralela al eje z a través de una guía cuya sección transversal es invariante, en la cual el electrón se ve sujeto a un potencial de soporte finito independiente de la dirección de propagación $V(x, y)$. Podemos definir a la función de onda como

$$\psi_n(\mathbf{r}) = \phi_n(x, y) e^{ik_n z} \quad \text{con } n \in \mathbb{N}, \quad (1.10)$$

donde k_n es el número de onda y $\phi_n(x, y)$ son soluciones al Hamiltoniano transversal

$$\hat{H}_{\perp} \phi_n(x, y) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V(x, y) \right] \phi_n(x, y) = E_n \phi_n(x, y). \quad (1.11)$$

De este modo, la energía total del sistema está dada por

$$E = E_n + \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}, \quad (1.12)$$

en la cual el primer término corresponde a un eigenvalor del Hamiltoniano (1.11) y por ello a una posible energía transversal, mientras que el segundo término está asociado a una energía longitudinal. De la anterior ecuación se encuentra que

$$k_n = \pm \frac{\sqrt{2m(E - E_n)}}{\hbar}. \quad (1.13)$$

Para los casos con $E > E_n$ el número de onda (k_n) toma valores reales, los cuales al ser sustituidos en la ecuación (1.10) generan factores oscilantes que determinan a las funciones $\psi_n(\mathbf{r})$ como funciones de Bloch. Por el contrario, cuando $E < E_n$, el número de onda toma valores imaginarios y por consiguiente se producen exponenciales reales que establecen a $\psi_n(\mathbf{r})$ como *funciones evanescentes*. Estas no representan soluciones físicas en sistemas periódicos infinitos pues divergen cuando $z \rightarrow \pm\infty$.

En otro orden de ideas, cabe destacar que podemos definir una función generalizada $\Psi_n(\mathbf{r})$ como

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_n a_n \psi_n(\mathbf{r}). \quad (1.14)$$

Cuando $\psi_n(\mathbf{r})$ corresponden a funciones de Bloch, los estados electrónicos se extienden a lo largo de todo el sistema, formando modos de propagación que permiten la conductancia en la nanoestructura, en cuyo caso se dice que los electrones se encuentran en un *canal abierto*. Para el caso contrario, cuando $\psi_n(\mathbf{r})$ es una función evanescente, se tiene un *canal cerrado*.

1.3 Modelo de Amarre Fuerte

El estudio de un electrón en una estructura cristalina resulta ser un problema muy complicado para tratar analíticamente debido a sus múltiples interacciones con el medio, sin embargo, se simplifica al suponer que los electrones correspondientes a cada núcleo atómico se encuentran fuertemente ligados a éstos y forman orbitales atómicos que interactúan con aquellos de los sitios más cercanos. A este enfoque se le conoce como *modelo de amarre fuerte* [Hofmann, 2015] [Mervyn, 2015].

Las funciones de Wannier (1.9) forman una base alternativa a aquella representada por las funciones de Bloch. Las primeras representan a cada sitio de la red, mientras que las otras se refieren a estados extendidos sobre todo el sistema. Por ello, conviene utilizar la base de Wannier para describir estructuras en las cuales los electrones se encuentran fuertemente ligados a los núcleos atómicos. En este sentido, las funciones de Wannier son equivalentes a la descripción por medio de orbitales atómicos en cada sitio de la red. La relación entre ambas bases escrita en notación de Dirac y según la ecuación (1.9) está dada por

$$|\mathbf{R}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}}^{ZB} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} |\mathbf{k}\rangle, \quad (1.15)$$

donde $|\mathbf{R}\rangle$ representa a la función de Wannier centrada en el sitio con coordenadas \mathbf{R} y la suma corre sobre todos los momentos \mathbf{k} en la primera zona de Brillouin [Altland, 2010]. A su vez es posible obtener las funciones de Bloch en términos de las de Wannier mediante la siguiente relación

$$|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} |\mathbf{R}\rangle. \quad (1.16)$$

Considerando nuevamente el Hamiltoniano correspondiente a un sistema periódico tenemos que

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \right] \psi(\mathbf{r}), \quad (1.17)$$

donde $V_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$ tiene el mismo periodo que la red cristalina.

Suponiendo que las funciones de Bloch son soluciones al Hamiltoniano (1.17), estas deben cumplir que

$$\hat{H}|\mathbf{k}\rangle = E(\mathbf{k})|\mathbf{k}\rangle. \quad (1.18)$$

Sustituyendo (1.16) en (1.18) obtenemos

$$\sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \hat{H}|\mathbf{R}\rangle = E(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} |\mathbf{R}\rangle, \quad (1.19)$$

que al proyectarse sobre la función de Wannier centrada en \mathbf{R}_0 resulta

$$\sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \langle \mathbf{R}_0 | \hat{H} | \mathbf{R} \rangle = E(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \langle \mathbf{R}_0 | \mathbf{R} \rangle = E(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \delta_{\mathbf{R}_0\mathbf{R}} = E(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_0}, \quad (1.20)$$

donde se utilizó la ortonormalidad de las funciones de Wannier. Finalmente, simplificando se obtiene que la energía en el modelo de amarre fuerte se determina por

$$E(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}-\mathbf{R}_0)} \langle \mathbf{R}_0 | \hat{H} | \mathbf{R} \rangle. \quad (1.21)$$

Una forma alternativa de expresar (1.21) implica separar la suma de tal modo que

$$E(\mathbf{k}) = \langle \mathbf{R}_0 | \hat{H} | \mathbf{R}_0 \rangle + \sum_{\mathbf{R} \neq \mathbf{R}_0} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}-\mathbf{R}_0)} \langle \mathbf{R}_0 | \hat{H} | \mathbf{R} \rangle = \varepsilon_{\mathbf{R}_0} + \sum_{\mathbf{R} \neq \mathbf{R}_0} t_{\mathbf{R}_0\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}-\mathbf{R}_0)}, \quad (1.22)$$

con

$$\varepsilon_{\mathbf{R}_0} = \langle \mathbf{R}_0 | \hat{H} | \mathbf{R}_0 \rangle \quad (1.23)$$

la denominada *energía del sitio* \mathbf{R}_0 y

$$t_{\mathbf{R}_0\mathbf{R}} = \langle \mathbf{R}_0 | \hat{H} | \mathbf{R} \rangle \quad (1.24)$$

la *integral de salto* entre los sitios \mathbf{R}_0 y \mathbf{R} [Mervyn, 2015]. Cabe destacar que en cristales atómicos, al tratarse de una estructura periódica, la energía de un sitio \mathbf{R}' es idéntica a aquella en un sitio \mathbf{R} puesto que los núcleos atómicos de la red son los mismos, por ello en estos casos resulta que $\varepsilon_{\mathbf{R}_0} = \varepsilon$.

De forma equivalente, podemos expresar el Hamiltoniano (1.18) en términos de los parámetros ε y $t_{\mathbf{R}_0\mathbf{R}}$ al considerar que las funciones de Wannier ($|\mathbf{R}\rangle$) forman una base completa [Stangel, 2013]. En virtud de lo anterior, dichas funciones cumplen con la condición de cerradura

$$\hat{I} = \sum_{\mathbf{R}} |\mathbf{R}\rangle \langle \mathbf{R}|, \quad (1.25)$$

de tal forma que

$$\hat{H} = \hat{I} \hat{H} \hat{I} = \left(\sum_{\mathbf{R}} |\mathbf{R}\rangle \langle \mathbf{R}| \right) \hat{H} \left(\sum_{\mathbf{R}} |\mathbf{R}\rangle \langle \mathbf{R}| \right) = \sum_{\mathbf{R}} \langle \mathbf{R} | \hat{H} | \mathbf{R} \rangle |\mathbf{R}\rangle \langle \mathbf{R}|. \quad (1.26)$$

Separando la suma anterior obtenemos que

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{R}_0} \langle \mathbf{R}_0 | \hat{H} | \mathbf{R}_0 \rangle |\mathbf{R}_0\rangle \langle \mathbf{R}_0| + \sum_{\mathbf{R}_0 \neq \mathbf{R}} \langle \mathbf{R}_0 | \hat{H} | \mathbf{R} \rangle |\mathbf{R}_0\rangle \langle \mathbf{R}|, \quad (1.27)$$

y sustituyendo tanto la energía de sitio como la integral de salto, resulta

$$\hat{H} = \varepsilon \sum_{\mathbf{R}_0} |\mathbf{R}_0\rangle \langle \mathbf{R}_0| + \sum_{\mathbf{R}_0 \neq \mathbf{R}} t_{\mathbf{R}_0\mathbf{R}} |\mathbf{R}_0\rangle \langle \mathbf{R}|, \quad (1.28)$$

que es la forma del Hamiltoniano en el modelo de amarre fuerte. Cabe destacar que, por su ubicación, las integrales de salto disminuyen conforme a su lejanía con el sitio \mathbf{R}_0 , de modo

que en la práctica se suelen despreciar aquellas integrales correspondientes a vecinos lejanos a partir de segundos vecinos.

1.3.1 Modelo de amarre fuerte en cadena unidimensional

En el caso particular de un sistema unidimensional con interacciones sólo a primeros vecinos, la ecuación (1.22) se expresa

$$E(k) = \varepsilon + \sum_{\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}_0 \rangle} t_{\mathbf{R}_0 \mathbf{R}} e^{ik(\mathbf{R} - \mathbf{R}_0)}. \quad (1.29)$$

donde $\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}_0 \rangle$ indica que la suma sobre \mathbf{R} corre sólo sobre primeros vecinos de \mathbf{R}_0 . Suponiendo que la cadena tiene periodicidad a y el origen se encuentra fijo en un sitio \mathbf{R}_0 , podemos ver que dichos vecinos se encuentran en las posiciones $\mathbf{R} = \mathbf{R}_0 + a$ y $\mathbf{R} = \mathbf{R}_0 - a$. Además considerando orbitales tipo s, a causa de la simetría en éstos, se cumple que $t_{\mathbf{R}_0 \mathbf{R}} = t$ con t constante, por lo cual la ecuación (1.29) queda como

$$E(k) = \varepsilon + t \left[e^{ik(\mathbf{R}_0 - \mathbf{R}_0 + a)} + e^{ik(\mathbf{R}_0 - \mathbf{R}_0 - a)} \right] = \varepsilon + t \left(e^{ika} + e^{-ika} \right), \quad (1.30)$$

es decir

$$E(k) = \varepsilon + t \cos(ka), \quad (1.31)$$

siendo ésta la relación de dispersión en una cadena atómica unidimensional.

1.4 Teoría de Bandas

Pensemos en una estructura cristalina con parámetro de red a . En el caso en que dicho parámetro sea grande (es decir, los átomos de la estructura se encuentren muy separados), los sitios de la red se consideran aislados, pues la interacción entre electrones de valencia de sitios vecinos es despreciable, así como la probabilidad de que éstos pasen de un sitio a otro. Debido a que los niveles de energía asociados a cada sitio corresponden a orbitales atómicos, las funciones de Wannier $|\mathbf{R}\rangle$ resultan ser eigenfunciones del Hamiltoniano del sistema. En el caso contrario en que el parámetro de red es pequeño, los sitios de la red se encuentran muy juntos y existe una mayor interacción entre ellos, por lo que a su vez aumenta la probabilidad de que un electrón de valencia “salte” de un sitio a otro. A causa de lo anterior, las eigenfunciones del sistema forman estados extendidos a lo largo de todos los sitios de la red, de modo que ahora estarán caracterizados por funciones de Bloch. En virtud de esta interacción, los orbitales atómicos de cada sitio de la red se van a modificar y por ende la energía asociada a estos variará. Como el sistema es periódico e infinito, las energías que anteriormente eran discretas van a formar ahora un continuo que se puede visualizar como una *banda energética* cuyo ancho va a depender de la separación entre los sitios de la

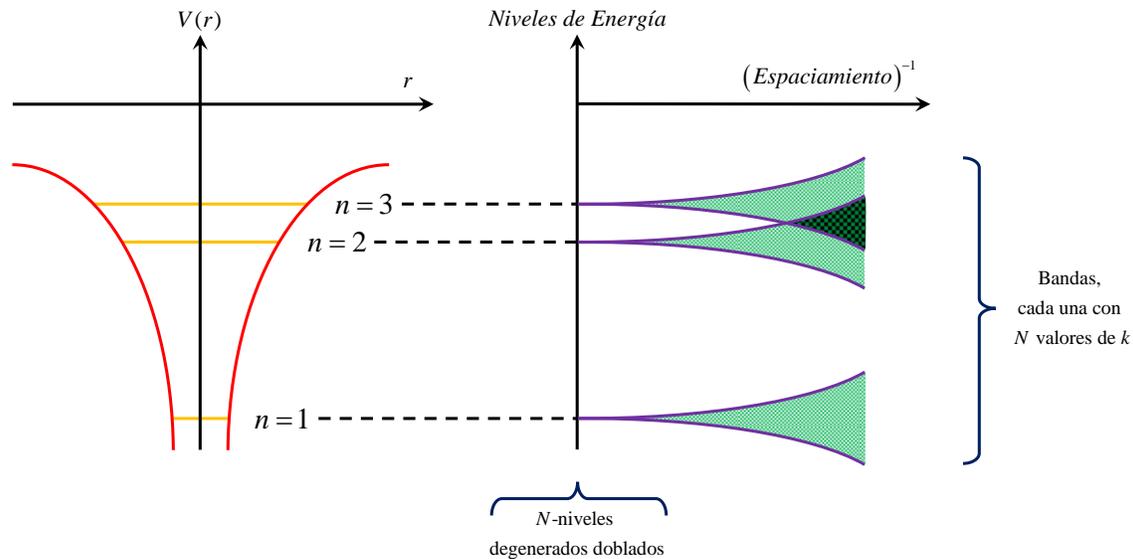


Figura 1.5. Desdoblamiento de niveles energéticos debido a la interacción atómica. Podemos notar que conforme los átomos se encuentran más cercanos el desdoblamiento es mucho más marcado y, de igual manera, entre más separados se encuentren, se recuperan los resultados correspondientes a un átomo individual.

red. Así, entre más separados se encuentran, se recupera el resultado discreto, y mientras más juntos se encuentran, se produce una banda energética más ancha, como se muestra en la Fig 1.5. Estas bandas están separadas por brechas de energías prohibidas para el sistema periódico. Eventualmente se puede llegar a un punto en el cual el parámetro de red es tan pequeño que las bandas energéticas se solapan entre sí, desapareciendo la brecha. La naturaleza de los materiales está determinada tanto por sus bandas como por sus brechas energéticas, de modo que se clasifican en: metales, semiconductores o aislantes. Para entender las características que debe presentar cada uno de los anteriores necesitamos primero comprender algunos conceptos básicos como *energía de Fermi*, *banda de valencia* y *banda de conducción*.

Supongamos que se somete un sólido a temperatura cero absoluto. En este caso podremos observar que los electrones del arreglo tienden a irse al nivel de menor energía posible, sin embargo sabemos por el principio de exclusión de Pauli que no es posible que haya más de dos electrones (en general fermiones) en un estado con números cuánticos idénticos, por ello, una vez lleno el estado de mínima energía, los electrones ocuparán el estado siguiente y así sucesivamente hasta llegar a un determinado nivel en el cual ya no hay electrones libres, siendo éste el máximo estado de ocupación. A la energía asociada a dicho estado se le conoce como *energía de Fermi*, mientras que a la última banda energética ocupada a temperatura cero se le conoce como *banda de valencia* y los electrones dentro de la misma se denominan *electrones de valencia*. Por otro lado, la primera banda energética desocupada a esta

temperatura se le conoce como *banda de conducción* y a los electrones en esta se les llama *electrones de conducción* [Hu, 2009].

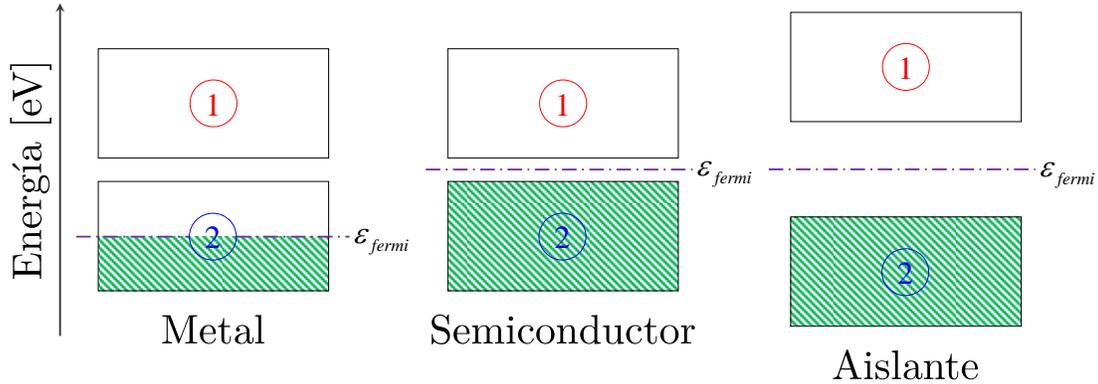


Figura 1.6. Estructura de bandas para metales, semiconductores y aislantes. En este caso (1) etiqueta a las bandas de conducción y (2) etiqueta a las bandas de valencia.

Considerando lo establecido por la teoría de bandas, es posible que la energía de Fermi encuentre en una banda de energía o en una brecha, si se encuentra ubicada dentro de una banda energética, se dice que el material es un *metal*, en caso contrario se trata de un *semiconductor* o un *aislante*, como se muestra en la Fig. 1.6. Estos tres tipos de materiales cuentan con una conductancia muy característica, por ejemplo, los metales son conocidos por ser muy buenos conductores y los aislantes por tener conducción nula, pero ¿a qué se debe esto?

Para que un material sea buen conductor es necesario que sus electrones puedan desplazarse con facilidad a los estados de mayor energía disponibles. Dijimos anteriormente que la conductancia se define como la libertad con la que pueden desplazarse los electrones dentro de un sólido. Para que esto suceda buscamos que la banda energética correspondiente a éstos no esté llena en su totalidad, pues la conductancia dependerá únicamente de aquellos electrones que se encuentran en bandas parcialmente ocupadas [Ashcroft, 1976].

En el caso de los metales, dado que la energía de Fermi se encuentra ubicada dentro de una banda energética, ésta se encuentra parcialmente llena en el cero absoluto, por lo cual basta con aplicar un pequeño campo eléctrico para que los electrones empiecen a conducir.

En el caso de los aislantes la banda de valencia está completamente llena y la brecha en la cual se encuentra la energía de Fermi es muy grande ($\approx 7\text{eV}$), evitando que los electrones de valencia se exciten y pasen a niveles en la banda de conducción, esto ocasiona que el desplazamiento de electrones sea muy poco probable y no haya conducción a ninguna temperatura. Cabe mencionar que debido a esta propiedad se dice que en el cero absoluto los aislantes presentan una resistencia infinita [Sólyom, 2008]

En el caso de los semiconductores sucede algo parecido a los aislantes, excepto que la brecha energética no es tan grande ($\approx 1\text{eV}$). Al igual que en los anteriores, es sumamente

complicado que algún electrón cruce a la banda de conducción a temperaturas cercanas al cero absoluto, pero a medida que aumente, es más probable que se trasladen de una banda energética a otra. No obstante, la cantidad de electrones que pueden desplazarse es mucho menor a aquella en un metal, por ello los semiconductores no tienen tan buena conductividad como estos últimos.

1.5 Defectos en Cristales

Hasta el momento hemos hablado únicamente de sólidos cristalinos ideales, es decir, que no presentan ninguna imperfección y son periódicos en todo el espacio. Sin embargo, en sistemas reales se presentan varios tipos de defectos que deben ser considerados para el estudio de sus propiedades, éstos se clasifican como químicos o de estructura.

Consideremos una estructura periódica en la cual todos los sitios tienen energía de sitio ε , la integral de salto entre primeros vecinos es t y se desprecian las interacciones con demás vecinos. Pensemos que en una determinada sección del sistema se presenta un sitio desplazado como se muestra en la Fig. 1.7 (A). Este desplazamiento modifica las integrales de salto del sitio con sus vecinos próximos, por lo que el sistema tiene un *defecto de estructura*. Supongamos que ahora se sustituye un átomo de la red por una impureza cuya energía de sitio es ε' . En este caso se dice que el sistema presenta un *defecto de sitio*. Por otro lado, debido a que los orbitales atómicos asociados al nuevo núcleo introducido pueden ser distintos, la integral de salto entre este sitio y sus primeros vecinos también se ve afectada y pasa a ser una integral de salto t' , lo cual representa un *defecto de enlace*.

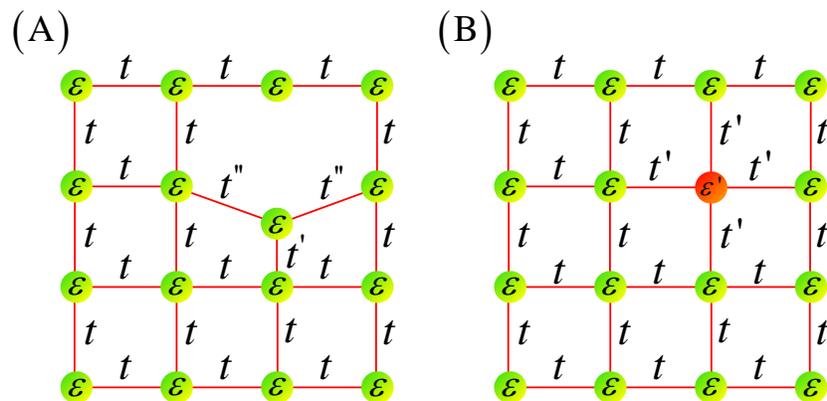


Figura 1.7. (A) un defecto de estructura, (B) un defecto de sitio y uno de enlace causado por una impureza.

Como se aprecia, el modelo de amarre fuerte es un formalismo conveniente para estudiar estructuras cristalinas con defectos. En esta tesis estudiaremos los efectos causados en el transporte electrónico considerando regiones dispersoras que contienen defectos de sitio y de enlace modelados por Hamiltonianos de amarre fuerte.

II

CONDUCTANCIA ELÉCTRICA

Entre las muchas propiedades que tienen los sólidos, la que es de especial relevancia para nuestro estudio es la conductancia eléctrica. Físicamente, este concepto nos indica la facilidad con la cual circulará una corriente eléctrica a través de un sólido.

Pensemos en un sistema que consta de dos electrodos macroscópicos incoherentes (izquierdo y derecho) conectados a una región central de dimensiones nanométricas en la que suponemos que los estados son coherentes, es decir, la función de onda preserva la información de fase. A dicho sistema se le conoce como *nanoconexión* y se encuentra ilustrado en la Fig. 2.1. Por conveniencia de nuestro estudio, dividiremos la sección central en dos partes: la región de dispersión y los saturadores cuánticos.

Los saturadores son aquellos que unen a los electrodos con la región central donde ocurre la dispersión. Éstos sirven como guía para los electrones y suponemos tienen una estructura periódica que permite definir funciones entrantes y salientes de los electrodos a la región de dispersión. Cabe mencionar que los saturadores suelen modelarse con longitud semi-infinita puesto que el cambio en su sección transversal debe ser muy lento para no producir reflexiones de la función de onda a lo largo de los mismos (es decir, obedecen una aproximación adiabática).

La región de dispersión (*scattering*), como su nombre lo indica, corresponde a aquella en la cual ocurre la dispersión de electrones debido a impurezas o defectos.

Una condición que deben cumplir las nanoconexiones es que los electrodos se encuentren situados muy lejos de la región de dispersión para asegurar que este efecto solamente ocurra en la región central. Un caso importante de mencionar es aquel en el cual los electrones provenientes de un electrodo atraviesan la nanoconexión sin sufrir ningún efecto de dispersión, es decir cuando la región central es *transparente*. La importancia de este caso yace en que el sistema presenta propiedades de transmisión no-clásica y muestra la cuantización de la conductancia [Ryndyk, 2016].

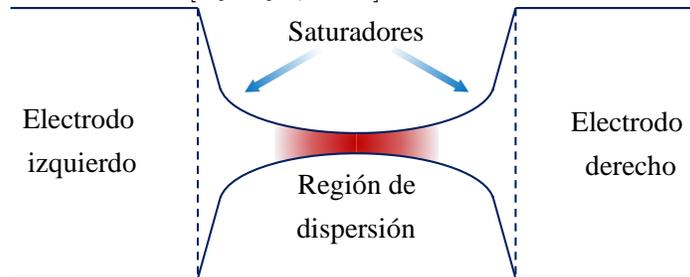


Figura 2.1. Estructura de una nanoconexión.

Para aquellos sistemas que presentan dispersión se utiliza el *método de Landauer-Büttiker*, el cual calcula la conductancia por medio de los coeficientes de transmisión usando la fórmula de Landauer. En las siguientes secciones describiremos la técnica utilizada para la obtención de los coeficientes de transmisión y reflexión, así como la deducción de la fórmula de Landauer bajo el modelo de amarre fuerte.

2.1 Fórmula de Landauer

Supongamos dos electrodos, izquierdo y derecho, cuyos potenciales químicos son μ_I y μ_D respectivamente (Fig. 2.2). En el caso en que $\mu_I = \mu_D$ el sistema se encuentra en equilibrio y no existe desplazamiento neto de electrones. Por otro lado, cuando $\mu_I \neq \mu_D$, el flujo de electrones del electrodo izquierdo al derecho es distinto al que va del derecho al izquierdo, produciendo un flujo neto de electrones distinto a cero, hasta que el sistema alcance el equilibrio. La cantidad de electrones cedidos por cada electrodo dependerá de la diferencia entre potenciales químicos a manera que aquel con mayor potencial será quien ceda mayor número de electrones. Por ejemplo: si $\mu_I > \mu_D$, el electrodo izquierdo será quien ceda más electrones y por ello se producirá una corriente neta que circula en dirección al electrodo derecho.

Cabe destacar que solamente aquellos electrones que cruzan la región de dispersión y llegan de un electrodo a otro originan una corriente, es por ello que ésta va a depender de la probabilidad de transmisión de los mismos, $T(n, k_z)$, y de la velocidad (de grupo) con la que se transmiten a lo largo de la región central, $v(n, k_z)$, donde n enumera los canales abiertos y k_z es el número de onda dado en la ecuación (1.10).

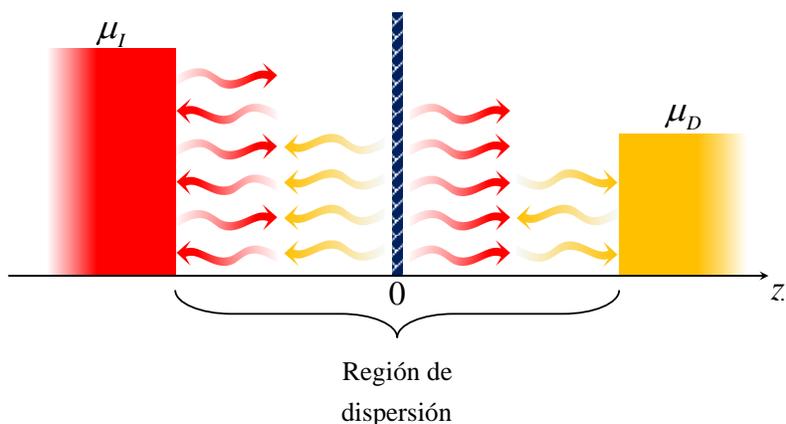


Figura 2.2. Nanoconexión con una barrera de potencial en el origen y potenciales químicos $\mu_I > \mu_D$. La barrera de potencial en el centro representa un defecto en general.

Pensemos el caso en que un sistema se encuentra a temperatura $\Theta = 0$ y suponemos que el nivel energético asociado al canal n contiene r electrones, mientras que el nivel energético asociado al canal n' se encuentra totalmente desocupado. Es inmediato concluir que de estos dos niveles, solamente aquel relacionado al canal n aportará electrones a la corriente neta del sistema, pues el otro se encuentra desocupado. Esto ilustra la relevancia de la ocupación de niveles energéticos en el cálculo de la corriente de un sistema. Es por ello que la probabilidad de encontrar un electrón con energía E viajando de izquierda a derecha puede considerarse como aquella dada por la *función de distribución de Fermi-Dirac* en el electrodo izquierdo, la cual se ilustra en la Fig. 2.3, y se expresa como [Pathria, 2011]

$$f_I(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu_I}{k_B \Theta}\right) + 1}. \quad (2.1)$$

De la misma manera, la probabilidad de encontrar un electrón con energía E que se desplaza de derecha a izquierda en el electrodo derecho es

$$f_D(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu_D}{k_B \Theta}\right) + 1}. \quad (2.2)$$

En resumen, para calcular la corriente que circula a lo largo de un sistema es necesario considerar las diferentes energías y canales disponibles para la conducción de los electrones, así como la probabilidad de transmisión y la velocidad de grupo de los electrones provenientes de cada electrodo, las cuales dependen a su vez del número de onda asociado a la función de onda de los mismos. De esta manera, tenemos que la corriente que circula del electrodo izquierdo al derecho, viene dada por

$$i_{I \rightarrow D} = 2e \sum_n \int_0^\infty T_{I \rightarrow D}(n, k_z) v_I(n, k_z) f_I(n, k_z) \frac{dk_z}{2\pi}, \quad (2.3)$$

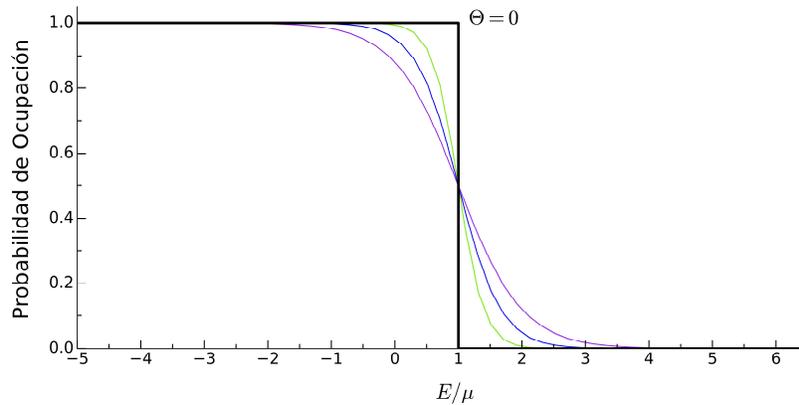


Figura 2.3. Función de distribución para electrones a diferentes temperaturas. Las líneas verde, azul y morada corresponden a la función de distribución para temperatura $\Theta \neq 0$ con $\Theta_{\text{verde}} < \Theta_{\text{azul}} < \Theta_{\text{morado}}$.

mientras que la que circula de derecha a izquierda es

$$i_{D \rightarrow I} = 2e \sum_n \int_0^\infty T_{D \rightarrow I}(n, k_z) v_D(n, k_z) f_D(n, k_z) \frac{dk_z}{2\pi}. \quad (2.4)$$

donde el factor de 2 surge al considerar el grado de libertad del espín del electrón. La velocidad de grupo se obtiene mediante

$$v(n, k_z) = \frac{\partial E(n, k_z)}{\hbar \partial k_z} = \frac{\partial E_z(k_z)}{\hbar \partial k_z}, \quad (2.5)$$

donde $E(n, k_z) = E_n + E_z(k_z)$ como en la ecuación (1.12). De aquí tenemos que (2.3) y (2.4) pueden reescribirse como

$$\begin{aligned} I_{I \rightarrow D} &= \frac{2e}{h} \sum_n \int_{E_{nI}}^\infty T_{I \rightarrow D}(n, E) f_I(n, E) dE \\ I_{D \rightarrow I} &= \frac{2e}{h} \sum_n \int_{E_{nD}}^\infty T_{D \rightarrow I}(n, E) f_D(n, E) dE \end{aligned} \quad (2.6)$$

En consecuencia, la corriente neta en la nanoconexión $I = I_{I \rightarrow D} - I_{D \rightarrow I}$ queda planteada como

$$I = \frac{2e}{h} \sum_n \int_{-\infty}^\infty T_n(E) [f(E, \mu_I, T) - f(E, \mu_D, T)] dE, \quad (2.7)$$

en donde usamos el hecho de que $T_{I \rightarrow D}(n, E) = T_{D \rightarrow I}(n, E) = T_n(E)$, lo cual asegura una corriente nula en el caso $\mu_I = \mu_D$.

2.1.1 Corriente generada por una diferencia de potencial

Supongamos que se aplica una diferencia de potencial al electrodo izquierdo, de modo que la función de distribución (2.1) se sustituye por

$$f_I(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu - eV}{k_B \Theta}\right) + 1}. \quad (2.8)$$

De aquí suele definirse el *potencial electroquímico* como $\tilde{\mu} = \mu + eV$. Análogamente al caso del potencial nulo, hallamos que el equivalente a la ecuación (2.7) es

$$I = \frac{2e}{h} \sum_n \int_{-\infty}^\infty T_n(E) [f_0(E - eV) - f_0(E)] dE, \quad (2.9)$$

donde $f_0(E)$ es la función de distribución cuando $\mu_I = \mu_D = \mu$. A partir de lo anterior, podemos definir una *función de transmisión* como

$$T(E) \equiv \sum_n T_n(E), \quad (2.10)$$

de tal forma que (2.9) se reduce a

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

Esta es la forma general de la fórmula de Landauer.

Ahora, en la Fig. 2.3 se muestra la gráfica de la función de distribución para el caso con $\Theta=0$, la cual coincide con la energía de Fermi, es decir, $\mu = E_F$. Podemos observar que dicha función vale cero para energías mayores al potencial químico, lo cual representa el hecho de que a esta temperatura no existen electrones en estados de mayor energía. No obstante, si graficamos la función $f_0(E - eV)$, debido al factor extra eV , veremos que ésta vale cero a partir de una energía $E_F + eV$. De esta manera, al efectuar la diferencia de funciones de distribución en (2.11) la integral se reduce a

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

sin embargo, en este intervalo y para potenciales muy chicos ($V \ll 1$) se espera que la función de transmisión tenga un comportamiento aproximadamente constante, de modo que

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

Por otro lado, de la ley de Ohm tenemos que la corriente en términos de la conductancia (G) viene dada por

$$I = GV . \quad (2.14)$$

Así, comparando (2.13) con (2.14) llegamos a que

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

La ecuación (2.15) es la *fórmula de Landauer* a temperatura $\Theta=0$. En el caso de un sistema unidimensional la expresión anterior se reduce a

$$G = \frac{2e^2}{h} T(E_F) , \quad (2.16)$$

lo cual tiene mucho sentido ya que en el caso en que hay total reflexión ($T=0$) no hay conducción.

En otras palabras, la ecuación (2.15) establece una relación directa entre la conductancia y la función de transmisión, por lo que en la siguiente sección analizaremos el problema de la dispersión que nos permite hallar dicha función.

2.2 Dispersión cuántica

Consideremos un potencial unidimensional tipo escalón que se ubica en el punto $z=0$ tal que

$$V(z) = \begin{cases} V_0 & \text{para } z \geq 0 \\ 0 & \text{para } z < 0 \end{cases} \quad (2.17)$$

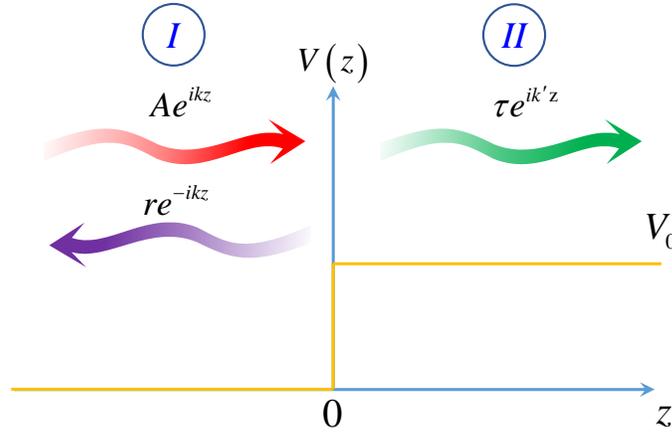


Figura 2.4. Modelo de un electrón viajando de izquierda a derecha en dirección a un escalón de potencial ubicado en $z=0$. Los índices (I) y (II) denotan las regiones en las que se describe la función de onda.

Sea un electrón con $E > V_0$ que se desplace a lo largo del espacio tal que la función de onda asociada a este corresponde a una onda plana cuyo vector de onda es $\mathbf{k} = k\hat{\mathbf{z}}$ a la izquierda del escalón, mientras que a la derecha del mismo es $\mathbf{k}' = k'\hat{\mathbf{z}}$.

Para el caso de un electrón que viaja de izquierda a derecha, esperamos que al momento en que se encuentre con el escalón, una porción de su función de onda cambie su dirección de propagación reflejándose, mientras que la otra conserva la dirección de propagación, como se representa en la Fig. 2.4. La fracción de función de onda que cambia su dirección de propagación corresponde a la *onda reflejada*, y la fracción que conserva corresponde a la *onda transmitida*. A cada una de estas ondas les corresponde una determinada amplitud de onda. Consideremos a τ , r y A como las amplitudes de las ondas transmitida, reflejada e incidente respectivamente.

Como podemos ver en la Fig. 2.4, nuestro modelo consta de dos regiones (I y II) en las cuales podemos expresar la función de onda del electrón como la superposición de todas las ondas planas que se encuentran en dicha región. En este caso tenemos que

$$\psi_I(z) = Ae^{ikz} + re^{-ikz} \quad \text{y} \quad \psi_{II}(z) = \tau e^{ik'z} \quad (2.18)$$

donde $\psi_I(z)$ es la función de onda en la región I y $\psi_{II}(z)$ es la función de onda en la región II, con

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{y} \quad k' = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}. \quad (2.19)$$

Para determinar la probabilidad de que una partícula se transmita o se refleje al cruzar el escalón de potencial, podemos usar la *densidad de corriente de probabilidad* definida como

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} [\psi(\mathbf{r})\nabla\psi^*(\mathbf{r}) - \psi^*(\mathbf{r})\nabla\psi(\mathbf{r})]. \quad (2.20)$$

Así tenemos que

$$j_I = j_{\text{incidente}} - j_{\text{reflejada}} = \frac{\hbar k}{m} (|A|^2 - |r|^2), \quad (2.21)$$

donde $v_{\text{incidente}} = \frac{\hbar k}{m}$ es la velocidad de las ondas viajeras a la izquierda del escalón. De forma equivalente se tiene que el flujo de probabilidad a la derecha del escalón es

$$j_{II} = j_{\text{transmitida}} = \frac{\hbar k'}{m} |\tau|^2, \quad (2.22)$$

con $v_{\text{transmitida}} = \frac{\hbar k'}{m}$ la velocidad de la onda a la derecha del potencial [Griffiths, 2005].

Considerando lo anterior podemos definir los *coeficientes de transmisión y reflexión*. El *coeficiente de transmisión* nos indica la probabilidad que tiene una onda incidente de transmitirse, está definido como la razón entre el flujo de probabilidad de la onda transmitida entre el flujo de probabilidad de la onda incidente, es decir

$$T = \frac{j_{\text{transmitida}}}{j_{\text{incidente}}} = \frac{v_{\text{transmitida}} |\tau|^2}{v_{\text{incidente}} |A|^2} = \frac{k' |\tau|^2}{k |A|^2}. \quad (2.23)$$

El *coeficiente de reflexión* nos indica la probabilidad que tiene la onda incidente de reflejarse. De forma análoga al coeficiente de transmisión, se define como la razón entre el flujo de probabilidad de la onda reflejada entre el flujo de probabilidad de la onda incidente

$$R = \frac{j_{\text{reflejada}}}{j_{\text{incidente}}} = \frac{v_{\text{reflejada}} |r|^2}{v_{\text{incidente}} |A|^2} = \frac{|r|^2}{|A|^2}. \quad (2.24)$$

Una propiedad que cumplen estos dos coeficientes es que su suma es la unidad, es decir

$$T + R = 1, \quad (2.25)$$

que es una consecuencia de la conservación de probabilidad. Lo anterior nos indica que, si una partícula incide sobre este potencial, solamente puede ocurrir que se transmita o se refleje y no que el potencial la absorba.

Cabe mencionar además que los valores de los coeficientes de transmisión y de reflexión deben ser los mismos ya sea para una onda incidente por la izquierda o para una onda incidente por la derecha de acuerdo con lo que se explicó en 2.1.1.

En cuanto a los coeficientes τ y r , éstos se pueden obtener al considerar las condiciones de continuidad de la función de onda y su primera derivada que deben cumplirse en la región

de dispersión, ($z=0$), y empleando las soluciones planteadas en (2.18), como se resuelve a continuación.

2.2.1 Matriz de transferencia y matriz de dispersión

Para casos tanto de onda incidente por la izquierda como por la derecha del potencial escalón mostrado en la Fig. 2.4, las funciones de onda generales toman la forma

$$\psi_I(z) = Ae^{ikz} + Be^{-ikz} \quad \text{y} \quad \psi_{II}(z) = Ce^{ik'z} + De^{-ik'z}. \quad (2.26)$$

Estudiando el comportamiento del sistema en el sitio donde se ubica el escalón ($z=0$), se debe cumplir que tanto las funciones como sus primeras derivadas sean continuas, es decir,

$$\begin{cases} \psi(0^+) = \psi(0^-) \\ \psi'(0^+) = \psi'(0^-) \end{cases} \quad (2.27)$$

Sustituyendo en (2.27) las funciones de onda mostradas en (2.26) obtenemos que

$$\begin{cases} A + B = C + D \\ k(A - B) = k'(C - D) \end{cases} \quad (2.28)$$

Al resolver el sistema anterior encontramos una matriz (\mathbf{S}) que relaciona las amplitudes de las ondas entrantes con las amplitudes de las ondas salientes del sistema como se muestra a continuación

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

A esta matriz \mathbf{S} se le denomina *matriz de dispersión* o *matriz de Scattering*.

De forma análoga es posible encontrar una matriz \mathbf{M} con la cual se puede expresar a las amplitudes de las ondas de lado derecho del potencial en términos de las amplitudes del lado izquierdo, es decir

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{k+k'}{2k'} & \frac{k'-k}{2k'} \\ \frac{k'-k}{2k'} & \frac{k+k'}{2k'} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}. \quad (2.30)$$

Esta matriz \mathbf{M} se conoce como *matriz de transferencia*.

Considerando la matriz de dispersión (\mathbf{S}) y la matriz de transferencia (\mathbf{M}) junto con las ecuaciones (2.23) y (2.24) es posible encontrar expresiones para los coeficientes de reflexión y de transmisión en términos de las componentes de dichas matrices. Estas expresiones dependerán de la dirección por la que incide el electrón al sistema.

Para un electrón que incide por la izquierda tenemos que

$$T = \frac{v_{transmitada}}{v_{incidente}} \left| M_{11} - M_{12} \frac{M_{21}}{M_{22}} \right|^2 = \frac{v_{transmitada}}{v_{incidente}} |S_{21}|^2, \quad R = \frac{|M_{21}|^2}{|M_{22}|^2} = |S_{11}|^2, \quad (2.31)$$

y en el caso de un electrón incidente por la derecha se obtiene

$$T = \frac{v_{transmitada}}{v_{incidente}} \frac{1}{|M_{22}|^2} = \frac{v_{transmitada}}{v_{incidente}} |S_{12}|^2, \quad R = \frac{|M_{12}|^2}{|M_{22}|^2} = |S_{22}|^2. \quad (2.32)$$

Para el ejemplo del potencial escalón, tanto en el caso de onda incidente por la izquierda, como por la derecha, obtenemos que los coeficientes de transmisión y reflexión son

$$T = \frac{4k'k}{(k+k')^2}, \quad R = \frac{(k-k')^2}{(k+k')^2}. \quad (2.33)$$

los cuales cumplen la condición (2.25). Cabe destacar que en este ejemplo los cocientes de velocidades en (2.31) y (2.32) resultan ser $\frac{k'}{k}$ y $\frac{k}{k'}$ respectivamente.

Supongamos ahora que tenemos tres tipos de potenciales distintos: un potencial tipo escalón (subida), un potencial constante V_0 y un potencial tipo escalón (bajada). Siguiendo la notación de la Fig. 2.5, podemos encontrar asociada a cada uno de estos potenciales una matriz de transferencia tal que: al primer potencial le corresponde la matriz \mathbf{M}_I que relaciona las amplitudes de onda A, B en términos de las amplitudes de onda C, D; al segundo potencial le corresponde la matriz \mathbf{M}_{II} que relaciona las amplitudes de onda E, F en términos de las amplitudes de onda G, H y finalmente al tercer potencial le corresponde la matriz \mathbf{M}_{III} que relaciona las amplitudes de onda I, J en términos de las amplitudes de onda K, L.

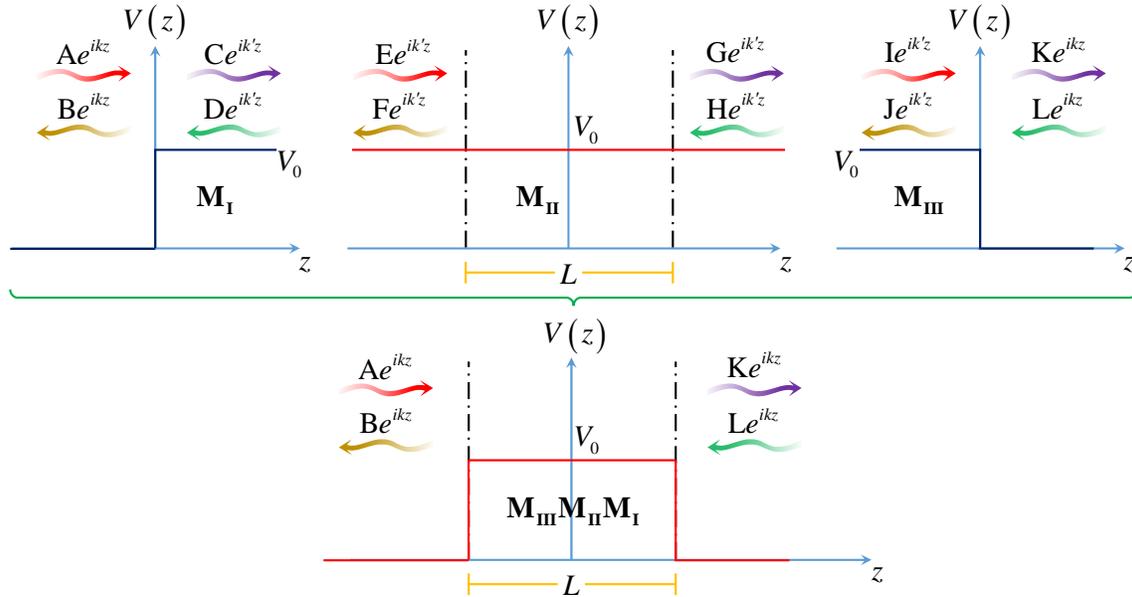


Figura 2.5. Proceso para hallar la matriz de transferencia total \mathbf{M} de un arreglo conformado por tres potenciales distintos.

Mediante estas tres matrices es posible calcular la matriz de transferencia para el caso de una barrera de potencial, la cual se obtiene al juntar los tres potenciales anteriores y mediante las siguientes condiciones

$$\begin{cases} \mathbf{C} = \mathbf{E} \\ \mathbf{D} = \mathbf{F} \\ \mathbf{G} = \mathbf{I} \\ \mathbf{H} = \mathbf{J} \end{cases} \quad (2.34)$$

En consecuencia, la matriz de transferencia de la barrera de potencial está dada por

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}_{\text{III}} \mathbf{M}_{\text{II}} \mathbf{M}_{\text{I}}, \quad (2.35)$$

donde \mathbf{M} relaciona las amplitudes de onda \mathbf{A}, \mathbf{B} en términos de las amplitudes de onda \mathbf{K}, \mathbf{L} como se muestra en la Fig. 2.5. Lo anterior es relevante ya que si se tiene un sistema que se compone de N potenciales, para los cuales se conocen sus matrices de transferencia, es posible determinar la matriz de transferencia del sistema en su totalidad mediante el producto de matrices de transferencia de cada potencial que le constituye, es decir

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}_N \cdots \mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1. \quad (2.36)$$

2.3 Sistemas Periódicos Infinitos

En la sección anterior se mostró cómo obtener las matrices de dispersión y transferencia de un determinado sistema para obtener los coeficientes de transmisión y reflexión del mismo. El objetivo de la presente sección es describir el comportamiento de la función de onda en sistemas periódicos con diferentes secciones transversales.

Consideremos una estructura transversal general como la que se muestra en la Fig. 2.6(A). En esta tesis consideraremos sistemas periódicos que se generan al conectar sitios equivalentes de estas estructuras mediante integrales de salto t_L , como se muestra en la Fig. 2.6(B).

Resolvamos primeramente el sistema asociado a una estructura transversal aislada [Fig. 2.6(A)] que en general se modela como un arreglo de Q sitios con Hamiltoniano

$$\hat{h}_\perp = \sum_{m=1}^Q \varepsilon_m |m\rangle \langle m| + \sum_{m=1}^Q \sum_{\substack{l=1 \\ (l \neq m)}}^Q t_{ml} |m\rangle \langle l|, \quad (2.37)$$

cuya ecuación de eigenvalores es

$$\hat{h}_\perp |\psi_\perp^{(p)}\rangle = E_\perp^{(p)} |\psi_\perp^{(p)}\rangle, \quad (2.38)$$

donde $p = 1, 2, \dots, Q$ enumera a las diferentes soluciones linealmente independientes, siendo

$$|\psi_\perp^{(p)}\rangle = \sum_{m=1}^Q \alpha_m^{(p)} |m\rangle \quad (2.39)$$

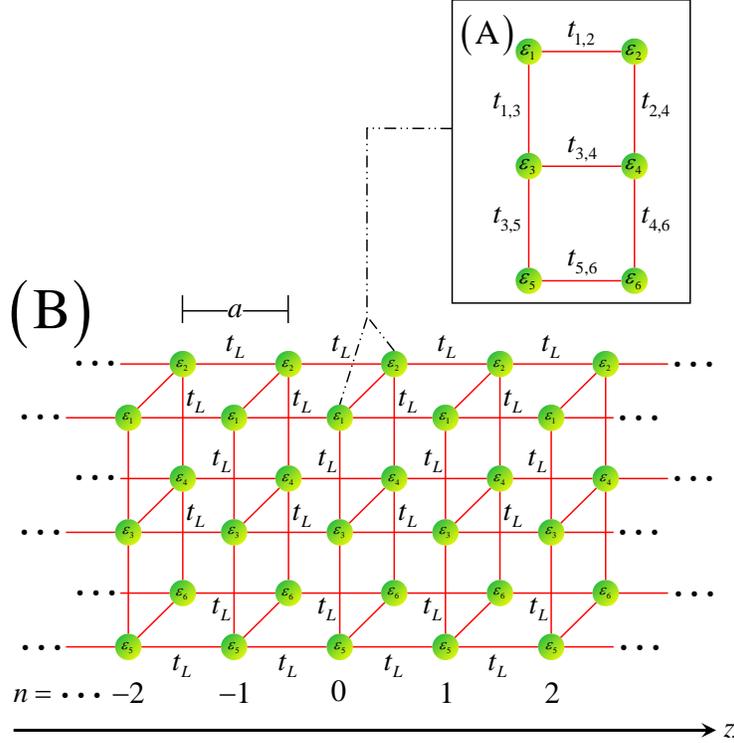


Figura 2.6. (A) Un sistema de 6 sitios conectados por integrales de salto t_{ij} . (B) Un sistema de longitud infinita que se obtiene de conectar las secciones transversales (A) mediante una integrales de salto t_L entre sitios equivalentes.

el eigenket con energía $E_{\perp}^{(p)}$. Sustituyendo (2.39) en (2.38) obtenemos que los coeficientes $\alpha_m^{(p)}$ satisfacen

$$\left(E_{\perp}^{(p)} - \epsilon_m\right) \alpha_m^p = \sum_{\substack{l=1 \\ (l \neq m)}}^Q t_{ml} \alpha_l^p. \quad (2.40)$$

Por otro lado, el Hamiltoniano general de una estructura como la exhibida en la Fig. 2.6(B) puede escribirse como $\hat{H} = \hat{h}_{\parallel} \otimes \hat{h}_{\perp}$, donde \hat{h}_{\perp} está dado en (2.37) y

$$\hat{h}_{\parallel} \equiv t_L \sum_{n=-\infty}^{\infty} (|n\rangle\langle n+1| + |n+1\rangle\langle n|). \quad (2.41)$$

Podemos escribir las eigenfunciones de \hat{H} como

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=1}^Q C_{nm} |nm\rangle, \quad (2.42)$$

con $|nm\rangle$ la función de Wannier en el sitio longitudinal n y transversal m . Para una energía E , los coeficientes en (2.42) cumplen

$$(\epsilon_m - E) C_{nm} + \sum_{\substack{l=1 \\ (l \neq m)}}^Q t_{ml} C_{nl} + t_L (C_{n-1,m} + C_{n+1,m}) = 0. \quad (2.43)$$

Proponemos que

$$C_{nm}^{(p)} = b_n^{(p)} \alpha_m^{(p)}, \quad (2.44)$$

donde $\alpha_m^{(p)}$ son los coeficientes en la ecuación (2.39). Sustituyendo (2.44) en (2.43) se obtiene que

$$\alpha_m^{(p)} \left[(\varepsilon_m - E) b_n^{(p)} + t_L (b_{n-1}^{(p)} + b_{n+1}^{(p)}) \right] + b_n \sum_{j \neq m}^Q t_{mj} \alpha_j^{(p)} = 0. \quad (2.45)$$

El segundo término de la anterior ecuación se puede reescribir de acuerdo con la ecuación (2.40), de modo que nos queda

$$\alpha_m^{(p)} \left[(\varepsilon_m - E) b_n^{(p)} + t_L (b_{n-1}^{(p)} + b_{n+1}^{(p)}) + (E_{\perp}^{(p)} - \varepsilon_m) b_n^{(p)} \right] = 0. \quad (2.46)$$

Puesto que $\alpha_m^{(p)} \neq 0$, la ecuación (2.46) se reduce a

$$(E_{\perp}^{(p)} - E) b_n^{(p)} + t_L (b_{n-1}^{(p)} + b_{n+1}^{(p)}) = 0. \quad (2.47)$$

La ecuación (2.47) se puede interpretar como aquella que debe cumplir un sitio en un sistema cristalino unidimensional con energía de sitio $E_{\perp}^{(p)}$ e integral de salto t_L , como se ilustra en la Fig. 2.7. Para resolver este problema, podemos aprovechar la periodicidad del sistema mediante el uso del teorema de Bloch, estableciendo una celda unitaria primitiva que contiene a un átomo de la cadena (representada por líneas punteadas en la Fig. 2.7), de tal forma que podemos proponer [Sutton, 2004]

$$b_n^{(p)} = b_0 e^{ik_z^{(p)} na}. \quad (2.48)$$

Sustituyendo la expresión (2.48) en (2.47) se obtiene que $k_z^{(p)}$ debe cumplir

$$E - E_{\perp}^{(p)} = 2t_L \cos(k_z^{(p)} a). \quad (2.49)$$

Nótese que si $k_z^{(p)}$ satisface (2.49), también lo hará $-k_z^{(p)}$. Además, si $\left| (E - E_{\perp}^{(p)}) / 2t_L \right| \geq 1$, tendremos $k_z^{(p)}$ toma valores imaginarios, lo que conduciría a funciones evanescentes en (2.48), las cuales divergen a la derecha o a la izquierda, por lo que no son soluciones físicas posibles del sistema. Por otro lado, si $\left| (E - E_{\perp}^{(p)}) / 2t_L \right| < 1$, tendremos funciones de Bloch correspondientes a canales abiertos. En este último caso, tendremos que

$$b_n = A_p e^{ik_z^{(p)} na} + B_p e^{-ik_z^{(p)} na}. \quad (2.50)$$

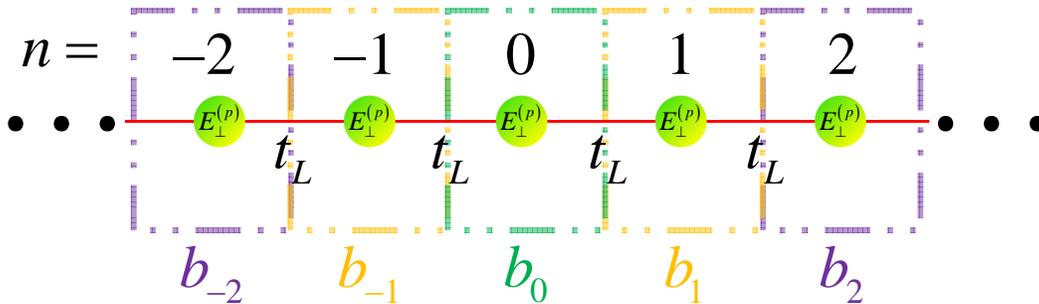


Figura 2.7. Representación equivalente de un sistema con Q sitios en su sección transversal como una cadena unidimensional con energías de sitio $E_{\perp}^{(p)}$, donde p indica la eigenfunción asociada.

donde $k_z^{(p)} \in (0, \pi]$, mientras que A_p y B_p son respectivamente las amplitudes de las ondas viajeras a la derecha y a la izquierda asociadas al p -ésimo canal abierto, las cuales se desplazan con velocidad

$$|v_s^{(p)}| = \frac{1}{\hbar} \left| \frac{\partial E}{\partial k} \right| = \frac{2|t_L| a \sin(k_z^{(p)} a)}{\hbar}. \quad (2.51)$$

En consecuencia, los coeficientes en la ecuación (2.42) pueden escribirse como

$$C_{nm} = \sum_{p=1}^{\tilde{Q}} C_{nm}^{(p)} = \sum_{p=1}^{\tilde{Q}} \left[A_p e^{ik_z^{(p)} na} + B_p e^{-ik_z^{(p)} na} \right] \alpha_m^{(p)}, \quad (2.52)$$

donde hemos enumerado a los estados transversales de tal forma que

$$\begin{cases} |(E - E_{\perp}^p)/2t_L| < 1 & \text{si } p = 1, 2, \dots, \tilde{Q} \\ |(E - E_{\perp}^p)/2t_L| \geq 1 & \text{si } p = \tilde{Q} + 1, \dots, Q \end{cases} \quad (2.53)$$

con \tilde{Q} el número de canales abiertos.

2.3.1 Nanocintas

Como ejemplo de aplicación, consideremos una nanocinta periódica como la que se muestra en la Fig. 2.8. Utilizando el desarrollo en el Apéndice A para el caso $Q=2$, obtenemos que las energías asociadas a las estructuras transversales son $E_{\perp}^{(1)} = t$ y $E_{\perp}^{(2)} = -t$ mientras que

$$\alpha_m^{(1)} = 1/\sqrt{2} \quad \text{y} \quad \alpha_m^{(2)} = (-1)^{m+1}/\sqrt{2}. \quad (2.54)$$

De esta manera, obtenemos que para $k_z^{(p)}$ dada en la ecuación (2.49),

$$C_{nm} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} \left[A_1 e^{ik_z^{(1)} na} + B_1 e^{-ik_z^{(1)} na} \right] & \text{si } -3t \leq E \leq -t \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left[A_1 e^{ik_z^{(1)} na} + B_1 e^{-ik_z^{(1)} na} \right] + \frac{(-1)^{m+1}}{\sqrt{2}} \left[A_2 e^{ik_z^{(2)} na} + B_2 e^{-ik_z^{(2)} na} \right] & \text{si } -t \leq E \leq t \\ \frac{(-1)^{m+1}}{\sqrt{2}} \left[A_2 e^{ik_z^{(2)} na} + B_2 e^{-ik_z^{(2)} na} \right] & \text{si } t \leq E \leq 3t \end{cases} \quad (2.55)$$

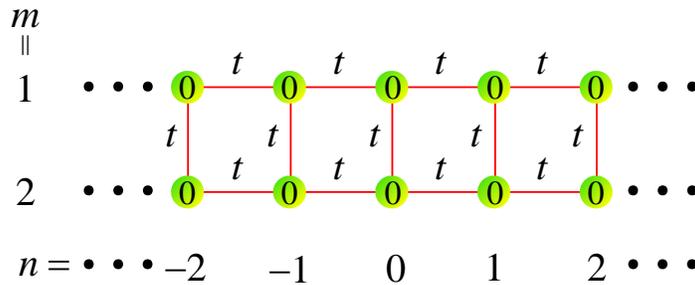


Figura 2.8. Nanocinta periódica con integral de salto t tanto en su sección longitudinal como en su sección transversal y energía de sitio nula.

2.4 Sistemas Periódicos Semi-Infinitos

Como hemos mencionado antes, los saturadores son estructuras periódicas semi-infinitas que están conectadas a una región dispersora, como se muestra en la Fig. 2.9. A diferencia de los sistemas periódicos estudiados en la sección anterior, las soluciones evanescentes que decaen hacia la derecha son también soluciones físicas posibles en los saturadores.

Por lo anterior, podemos plantear que las soluciones evanescentes por la derecha son tales que $b_n^{(p)}$ en la ecuación (2.47) toma la forma

$$b_n^{(p)} = b_0 F_p^n e^{-\kappa_z^{(p)} n a}. \quad (2.56)$$

Al sustituir (2.56) en (2.47) obtenemos que

$$F_p^n = \begin{cases} 1 & \text{si } \frac{E - E_\perp^{(p)}}{2t_L} \geq 1 \\ (-1)^n & \text{si } \frac{E - E_\perp^{(p)}}{2t_L} \leq -1 \end{cases}, \quad (2.57)$$

Mientras que $k_z^{(p)}$ satisface

$$\kappa_z^{(p)} a = \text{arcosh} \left| \frac{E - E_\perp^{(s)}}{2t_L} \right| \in [0, \infty). \quad (2.58)$$

Por lo tanto, en sistemas semi-infinitos, los coeficientes C_{nm} para $n \geq 0$ toman la forma

$$C_{nm} = \sum_{p=1}^{\tilde{Q}} (A_p e^{ink_s a} + B_p e^{-ink_s a}) \alpha_m^{(p)} + \sum_{p=\tilde{Q}+1}^{\tilde{Q}} C_p F_s^n e^{-n\kappa a} \alpha_m^{(s)}, \quad (2.59)$$

donde los estados transversales se enumeran de acuerdo con la ecuación (2.53).

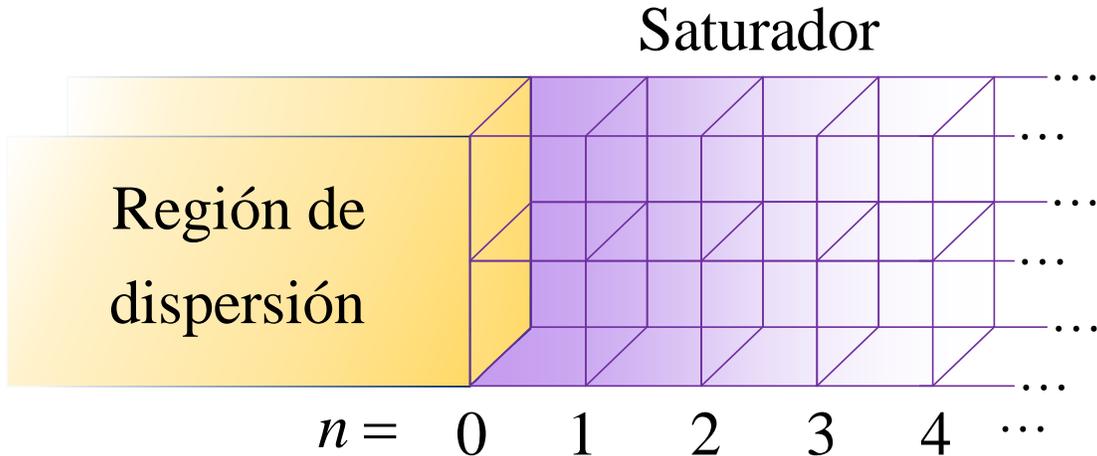


Figura 2.9. Zona de transición entre la región de dispersión y el saturador de la nanoconexión en la cual inicia la numeración de sitios longitudinales. Debido a esta, los saturadores reciben su atributo de longitud semi-infinita.

III

SISTEMAS CON DEFECTOS

Mientras que para estructuras periódicas la función de transmisión del sistema corresponde al número de canales abiertos como función de la energía, en casos de sistemas con defectos (ya sean de sitio o de enlace) lo anterior no es válido pues se genera una región de dispersión.

A continuación, estudiaremos el comportamiento de la función de onda en sistemas con distintos tipos de defectos para analizar su respectiva conductancia.

3.1 Cadena con Defecto de Sitio

Consideremos el caso de una cadena unidimensional que presenta un defecto de sitio ε_{def} ubicado en $n=0$, mientras que para los sitios con $n \neq 0$ tenemos $\varepsilon=0$, como se muestra en la Fig. 3.1. Notemos que este sistema tiene dos saturadores, representados por cadenas semi-infinitas acopladas a izquierda y derecha del defecto (esferas verdes), y que corresponden respectivamente a los casos $n < 0$ y $n > 0$.

Siguiendo el razonamiento de la sección 2.4, tenemos que la función de onda escrita como

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n |n\rangle, \quad (3.1)$$

tiene por soluciones

$$C_n = \begin{cases} A^{(+)} e^{ikna} + A^{(-)} e^{-ikna} & \text{para } n \leq 0 \\ B^{(+)} e^{-ikna} + B^{(-)} e^{ikna} & \text{para } n \geq 0 \end{cases}, \quad (3.2)$$

para energía $E = 2t \cos(ka) \in [-2t, 2t]$, donde $A^{(+)} (B^{(+)})$ y $A^{(-)} (B^{(-)})$ son las amplitudes de las ondas entrantes y salientes del defecto por la izquierda (derecha), respectivamente. Adicionalmente, debe cumplirse la ecuación

$$(\varepsilon - E)C_0 + tC_1 + tC_{-1} = 0. \quad (3.3)$$

Sustituyendo (3.2) en (3.3) se obtiene que

$$B^{(+)} (te^{-ika}) + B^{(-)} (te^{ika}) + A^{(+)} (\varepsilon - E + te^{-ika}) + A^{(-)} (\varepsilon - E + te^{ika}) = 0. \quad (3.4)$$

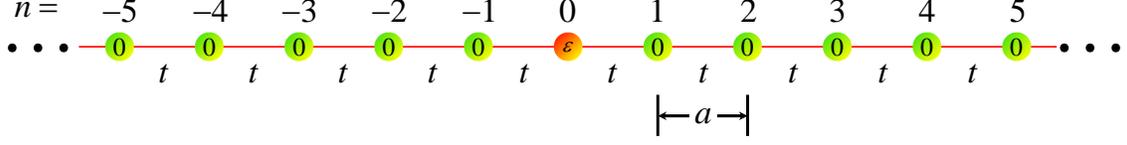


Figura 3.1. Cadena unidimensional con un defecto de sitio ε en $n=0$ e integral de salto t entre primeros vecinos.

Además, de (3.2) tenemos que para $n=0$

$$\mathbf{A}^{(+)} + \mathbf{A}^{(-)} = \mathbf{B}^{(+)} + \mathbf{B}^{(-)}. \quad (3.5)$$

Finalmente, usando (3.4) y (3.5) obtenemos que la matriz de dispersión es

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(-)} \\ \mathbf{B}^{(-)} \end{pmatrix} = \mathbf{S} \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(+)} \\ \mathbf{B}^{(+)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon}{E - \varepsilon - 2te^{ika}} & \frac{-2it \sin(ka)}{E - \varepsilon - 2te^{ika}} \\ \frac{-2it \sin(ka)}{E - \varepsilon - 2te^{ika}} & \frac{\varepsilon}{E - \varepsilon - 2te^{ika}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(+)} \\ \mathbf{B}^{(+)} \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

mientras que la matriz de transferencia correspondiente resulta

$$\begin{pmatrix} \mathbf{B}^{(-)} \\ \mathbf{B}^{(+)} \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(+)} \\ \mathbf{A}^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - E + 2te^{-ika}}{-2it \sin(ka)} & \frac{\varepsilon}{-2it \sin(ka)} \\ \frac{\varepsilon}{2it \sin(ka)} & \frac{\varepsilon - E + 2te^{ika}}{2it \sin(ka)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(+)} \\ \mathbf{A}^{(-)} \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

Para hallar los coeficientes de reflexión y transmisión correspondientes al sistema se utilizan las ecuaciones (2.31) o (2.32), donde el cociente de velocidades es uno, debido a que ambos saturadores son iguales. Por lo anterior, los coeficientes de transmisión (T) y reflexión (R) son

$$T = \frac{4t^2 \sin^2(ka)}{\varepsilon^2 + 4t^2 \sin^2(ka)} \quad \text{y} \quad R = \frac{\varepsilon^2}{\varepsilon^2 + 4t^2 \sin^2(ka)}. \quad (3.8)$$

Por otro lado, para $E \notin [-2t, 2t]$, las soluciones de la función de onda son evanescentes en los saturadores, por lo que no es posible hallar estados que contribuyan a la conductancia del sistema.

3.2 Cadena con Defecto Fano

Supongamos una cadena unidimensional en la cual todos los átomos tienen energía de sitio $\varepsilon=0$ y la integral de salto entre primeros vecinos es t . Al acoplar una nanoestructura a uno de los sitios de esta cadena, el sistema presenta un defecto Fano. Por ejemplo, en la Fig. 3.2, tenemos un defecto Fano formado por una cadena de N' átomos con energías de sitio $\varepsilon=0$ e integrales de salto t' (esferas rojas), que esta acoplada a una cadena unidimensional infinita (esferas verdes).

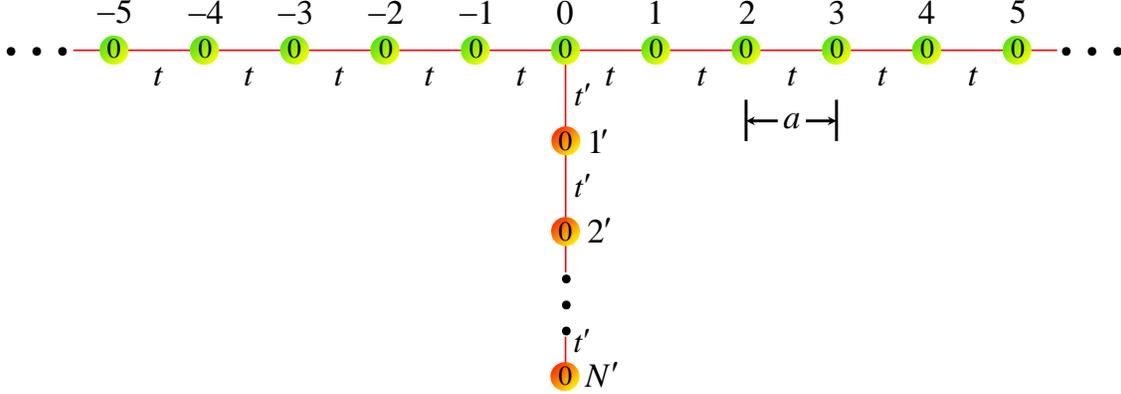


Figura 3.2: Cadena unidimensional infinita (esferas verdes) con energía de sitio nula e integral de salto t que presenta un defecto Fano de N' sitios con energía cero e integral de salto t' en el sitio $n=0$. Los átomos en la cadena acoplada (esferas rojas) están indexados con números primados.

Nótese que, una vez más el sistema consiste de dos saturadores semi-infinitos. Por lo que la solución propuesta en (3.2) sigue siendo válida para los sitios en la cadena infinita. Por otro lado, la región dispersora conformada por los sitios en el defecto Fano y el sitio $n=0$ de la cadena infinita, nos conduce a las ecuaciones

$$\begin{cases} -EC_0 + tC_{-1} + tC_1 + t'C_{1'} = 0 \\ -EC_i + t'C_{i-1'} + t'C_{i+1'} = 0 \text{ para } i=1', 2', \dots, N'-1, \\ -EC_{N'} + t'C_{N'-1} = 0 \end{cases} \quad (3.9)$$

Para el caso de onda incidente por la izquierda, $B^{(+)} = 0$, la función de onda

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n |n\rangle + \sum_{i=1'}^{N'} C_i |i\rangle \quad (3.10)$$

tiene solución

$$\begin{cases} C_i \text{ con } i=1', 2', \dots, N' \text{ coeficientes por determinar} \\ C_{-1} = A^{(+)} e^{-ika} + A^{(-)} e^{ika} \\ C_0 = A^{(+)} + A^{(-)} = B^{(-)} \\ C_1 = B^{(-)} e^{ika} \end{cases}, \quad (3.11)$$

de modo que sustituyendo (3.11) en (3.9) obtenemos

$$\begin{cases} -E(A^{(+)} + A^{(-)}) + t(A^{(+)} e^{-ika} + A^{(-)} e^{ika}) + t(B^{(-)} e^{ika}) + t'C_{1'} = 0 \\ -EC_{1'} + t'(A^{(+)} + A^{(-)}) + t'C_{2'} = 0 \\ \vdots \\ -EC_{N'-1} + t'C_{N'} + t'C_{N'-2} = 0 \\ -EC_{N'} + t'C_{N'-1} = 0 \end{cases}. \quad (3.12)$$

Considerando $A^{(+)}$ como el término independiente, el anterior sistema se reduce a

$$\begin{cases} [-E + 2te^{ika}]A^{(-)} + t'C_{1'} = [E - 2t\cos(ka)]A^{(+)} \\ t'A^{(-)} - EC_{1'} + t'C_{2'} = -t'A^{(+)} \\ t'C_{1'} - EC_{2'} + t'C_{3'} = 0 \\ \vdots \\ t'C_{N'-2} - EC_{N'-1} + t'C_{N'} = 0 \\ t'C_{N'-1} - EC_{N'} = 0 \end{cases} \quad (3.13)$$

el cual podemos ver se conforma de $N' + 1$ ecuaciones y $N' + 1$ incógnitas, por lo que podemos encontrar una solución única para cada energía. En particular tendríamos que $B^{(-)} = S_{21}A^{(+)}$ siendo S_{21} parte de la matriz \mathbf{S} y de donde la transmitancia es $T = |S_{21}|^2$. La Fig. 3.3 muestra T que se obtuvo al resolver el sistema de ecuaciones (3.13) para distintas energías con $N' = 3, 5, 7$. Es importante mencionar que estos resultados coinciden con los de la literatura obtenidos mediante la matriz de transferencia [Miroshnichenko, 2005] y mediante la fórmula de Kubo-Greenwood [Ramírez, 2013]

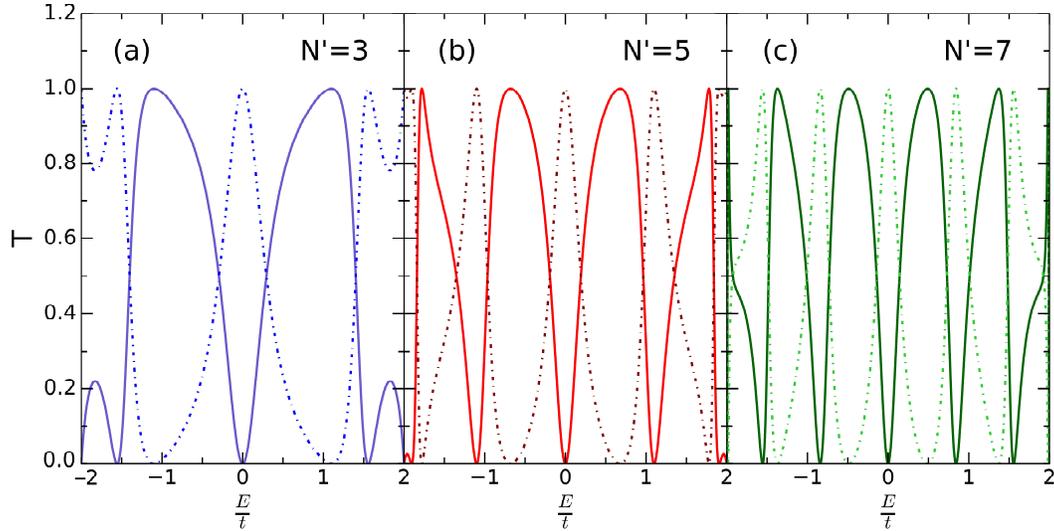


Figura 3.3. En la presente figura se muestra la transmitancia T (línea sólida) y la reflectancia R (línea punteada) para una cadena con un defecto Fano de (a) 3, (b) 5 y (c) 7 átomos con $t = 1$ y $t' = t + 0.1$.

3.3 Nanocintas de Sección Transversal Variable

Consideremos una estructura cuasi-unidimensional que sufre un cambio en su sección transversal de uno a dos átomos como se ilustra en la Fig. 3.4. En este ejemplo, tenemos una región dispersora (esferas rojas) conectada a su izquierda con una cadena periódica unidimensional (esferas verdes) y a su derecha con una nanocinta cuadrada de dos átomos de ancho (esferas azules).

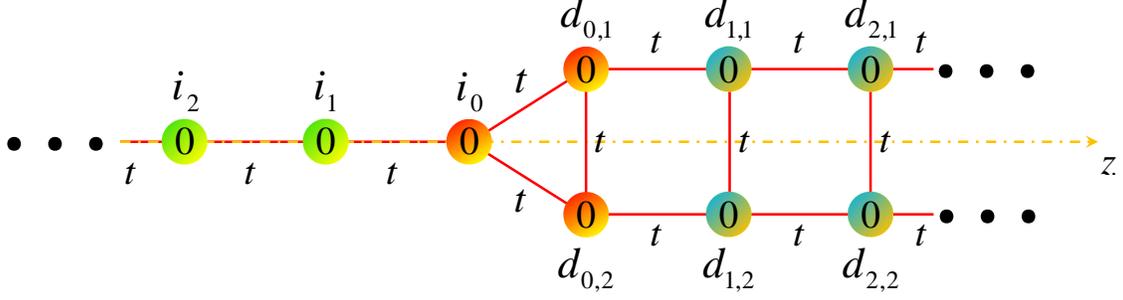


Figura 3.4. Modelo de un sistema cuasi-unidimensional con sección transversal variable.

Al igual que en los casos anteriores, las soluciones de este sistema pueden expresarse como

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_{i_n} |i_n\rangle + \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=1}^2 C_{d_{nm}} |d_{nm}\rangle \quad (3.14)$$

donde la periodicidad de los saturadores, siguiendo las ideas de la sección 2.4, nos permite escribir a los coeficientes de (3.14) como

$$C_{i_n} = \begin{cases} A_1 (-1)^n e^{-kna} & \text{si } E/2t \leq -1 \\ A_1^{(+)} e^{ikna} + A_1^{(-)} e^{-ikna} & \text{si } |E/2t| < 1 \\ A_1 e^{-kna} & \text{si } E/2t \geq 1 \end{cases} \quad (3.15)$$

y

$$C_{d_{nm}} = \begin{cases} \frac{(-1)^{m+1}}{\sqrt{2}} \left[A_3^{(+)} e^{-ik_z^{(2)} na} + A_3^{(-)} e^{ik_z^{(2)} na} \right] + \frac{(-1)^n}{\sqrt{2}} A_2 e^{-\kappa_z^{(1)} na} & \text{si } -3 < E/t \leq -1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left[A_2^{(+)} e^{-ik_z^{(1)} na} + A_2^{(-)} e^{ik_z^{(1)} na} \right] + \frac{(-1)^{m+1}}{\sqrt{2}} \left[A_3^{(+)} e^{-ik_z^{(2)} na} + A_3^{(-)} e^{ik_z^{(2)} na} \right] & \text{si } -1 < E/t < 1, \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left[A_2^{(+)} e^{-ik_z^{(1)} na} + A_2^{(-)} e^{ik_z^{(1)} na} \right] + \frac{(-1)^{m+1}}{\sqrt{2}} A_3 e^{-\kappa_z^{(2)} na} & \text{si } 1 \leq E/t < 3 \end{cases} \quad (3.16)$$

que proviene de incluir los modos evanescentes en la expresión (2.55) y en donde

$$E - E_{\perp}^{(p)} = 2t \cos(k_z^{(p)} a), \quad (3.17)$$

siendo $E_{\perp}^{(1)} = t$ y $E_{\perp}^{(2)} = -t$. Por otro lado, el efecto de la región dispersora se traduce en las siguientes ecuaciones

$$\begin{cases} -EC_{i_0} + tC_{i_1} + tC_{d_{01}} + tC_{d_{02}} = 0 \\ -EC_{d_{01}} + tC_{d_{02}} + tC_{d_{11}} + tC_{i_0} = 0 \\ -EC_{d_{02}} + tC_{d_{01}} + tC_{d_{12}} + tC_{i_0} = 0 \end{cases} \quad (3.18)$$

Para el caso de onda incidente por la izquierda con $|E| < 2t$, tenemos que $A_2^{(+)} = A_3^{(+)} = 0$, lo cual nos conduce a un sistema de tres ecuaciones con tres incógnitas siendo $A_1^{(+)}$ la variable independiente. En particular, estas ecuaciones nos permiten establecer las relaciones

$$\begin{cases} \mathbf{A}_1^{(-)} = S_{11}\mathbf{A}_1^{(+)}, \mathbf{A}_3^{(-)} = S_{21}\mathbf{A}_1^{(+)} & \text{si } -3t < E \leq -t \\ \mathbf{A}_1^{(-)} = S_{11}\mathbf{A}_1^{(+)}, \mathbf{A}_2^{(-)} = S_{21}\mathbf{A}_1^{(+)} \text{ y } \mathbf{A}_3^{(-)} = S_{31}\mathbf{A}_1^{(+)} & \text{si } -t < E < t, \\ \mathbf{A}_1^{(-)} = S_{11}\mathbf{A}_1^{(+)}, \mathbf{A}_2^{(-)} = S_{21}\mathbf{A}_1^{(+)} & \text{si } t \leq E < 3t \end{cases} \quad (3.19)$$

donde S_{11} , S_{21} y S_{31} son elementos de la primera columna de la matriz de dispersión correspondiente. De forma análoga, suponer $\mathbf{A}_1^{(+)} = \mathbf{A}_3^{(+)} = \mathbf{0}$ nos permite calcular la segunda columna de la matriz de dispersión, mientras $\mathbf{A}_1^{(+)} = \mathbf{A}_2^{(+)} = \mathbf{0}$ nos permite hallar su tercera columna. Nótese que sólo en el caso de $|E| < t$ tenemos una matriz de dispersión de 3×3 ya que las funciones de onda en ambos saturadores están expresadas como funciones de Bloch (canales abiertos); en contraste, los otros dos casos conducen a matrices de 2×2 ya que uno de los canales del saturador derecho esta expresado como una función evanescente (canal cerrado).

Para el cálculo de la función de transmisión (T) en el caso de onda incidente por la izquierda, usamos la expresión [Ryndyk, 2016]

$$T = \begin{cases} \left| \frac{v_{d_2}}{v_i} \right| |S_{21}|^2 & \text{si } -3t < E \leq -t \\ \left| \frac{v_{d_1}}{v_i} \right| |S_{21}|^2 + \left| \frac{v_{d_2}}{v_i} \right| |S_{31}|^2 & \text{si } -t < E < t \\ \left| \frac{v_{d_1}}{v_i} \right| |S_{21}|^2 & \text{si } t \leq E < 3t \end{cases} \quad (3.20)$$

lo cual es una generalización de la ecuación (2.31) y que indica la probabilidad total de que una onda incidente por el saturador izquierdo se transmita a cualquiera de los modos del saturador derecho. En la ecuación (3.20),

$$|v_i| = \frac{1}{\hbar} \left| \frac{\partial E}{\partial k} \right| = \frac{2|t| \sin(ka)}{\hbar} \quad \text{y} \quad |v_{d_p}| = \frac{1}{\hbar} \left| \frac{\partial E}{\partial k_z^{(p)}} \right| = \frac{2|t| \sin(k_z^{(p)} a)}{\hbar} \quad (3.21)$$

con $p=1,2$, son las velocidades de grupo correspondientes a los modos de propagación en los saturadores izquierdo y derecho. Además, la función de reflexión vendría dada como

$$R = |S_{11}|^2. \quad (3.22)$$

En la Fig. 3.5 se muestran la función de transmisión y de reflexión para el sistema de la Fig. 3.4, en el caso de onda incidente por la izquierda. Nótese que se satisface que $R+T=1$, confirmando que una onda incidente solo puede transmitirse o reflejarse. Por otro lado, encontramos que la transmitancia es nula para $E < -t$, a pesar de que existan canales abiertos en ambos saturadores. Para entender el motivo de esto, notemos que el sistema es simétrico ante reflexiones sobre el eje z , lo cual asegura que las soluciones halladas tendrán paridad bien definida ante reflexiones sobre este eje. Sin embargo, las soluciones no nulas del saturador izquierdo tienen siempre simetría par ante esta reflexión, por lo que únicamente

puede existir transmisión del saturador izquierdo hacia soluciones pares del saturador derecho. La solución oscilante par del saturador derecho, con amplitud $A_2^{(\pm)}$, ocurre para $E \in [-t, 3t]$, mientras que la solución oscilante del saturador derecho existe en el rango $E \in [-2t, 2t]$. Por lo anterior, sólo hay transmitancia en la intersección de ambos rangos, es decir, $E \in [-t, 2t]$. Una consecuencia adicional, es que si $A_1^{(+)} = A_2^{(+)} = 0$, entonces también ocurrirá que $A_1^{(-)} = A_2^{(-)} = 0$, o, en otras palabras, si una onda incide por el segundo modo de conducción del saturador derecho, este sólo tiene como opción reflejarse a través de este mismo modo como si la región dispersora actuara como una barrera infinita de potencial. Esto explica por qué la transmitancia calculada en la Fig. 3.5 está acotada por uno.

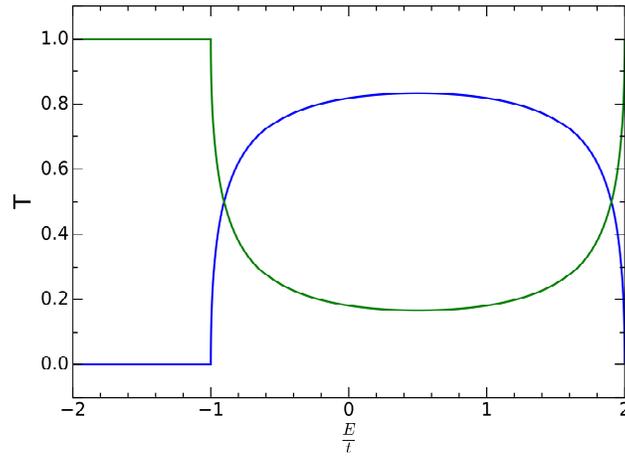


Figura 3.5. Transmitancia (azul) y reflectancia (verde) del sistema mostrado en la figura 3.4.

3.4 Limitaciones del Método Directo

Como hemos visto en los ejemplos anteriores, para determinar las funciones de transmisión y reflexión usando el método directo, es necesario conocer la forma de las funciones de onda en los saturadores para plantear un sistema de ecuaciones acopladas. El número de dichas ecuaciones corresponde al número de sitios en la región dispersora N . Por lo tanto, se hace necesario invertir una matriz de dimensión $N \times N$, cuyos elementos son las energías de sitio y las integrales de salto que conectan a esta región. Si suponemos que cada elemento de la matriz almacena un número en precisión doble, requeriremos $8 \times N \times N$ bytes de memoria para almacenarla. En otras palabras, si la región dispersora contiene 100 átomos, se necesitarán alrededor de 80 KB de memoria, lo cual es perfectamente realizable con la capacidad de cómputo actual. Por otro lado, si contiene 1 millón de átomos, requeriremos 8 TB de memoria para modelarlo. Las dimensiones de un sistema unidimensional de tamaño macroscópico son del orden de 10^8 átomos, por lo que es imposible de modelar usando el método directo con cualquier tecnología contemporánea. En el siguiente capítulo se planteará una técnica alternativa para superar esta restricción.

IV

MÉTODO RECURSIVO DE LA MATRIZ DE DISPERSIÓN

En el capítulo anterior, calculamos diversos sistemas con defectos usando métodos directos. Sin embargo, esto tiene el inconveniente de que numéricamente es necesario invertir matrices del tamaño de la región de dispersión. A medida que esta crezca, nos encontraremos con problemas de memoria computacional, debido a la dimensión de las matrices involucradas, así como un incremento considerable en el tiempo de cómputo, que vuelve en general insostenible este tipo de cálculos con la capacidad de cómputo actual.

En este capítulo, se propone un nuevo método para hallar la matriz de dispersión en sistemas con Hamiltonianos de amarre fuerte arbitrarios. Este método consiste en calcular la matriz de dispersión de un sistema, utilizando las matrices de dispersión de sus subsistemas. Lo anterior permite un uso muy eficiente de la memoria computacional, permitiendo abordar incluso sistemas con regiones dispersoras de tamaño macroscópico.

4.1 Composición de Matrices de Dispersión

Consideremos un sistema A con N_A sitios internos, M_A sitios en su frontera y P_A cadenas acopladas con energía de sitio $\varepsilon = 0$ e integral de salto t_C , como el que se muestra en la Fig. 4.1(A). Por definición, los sitios en la frontera están conectados a una o más de estas cadenas acopladas. Las eigenfunciones del sistema pueden escribirse como

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=1}^{N_A} A_n^I |I_n\rangle + \sum_{n=1}^{M_A} A_n^F |F_n\rangle + \sum_{n=1}^{P_A} \sum_{m=1}^{\infty} A_{n,m}^C |C_{n,m}\rangle \quad (4.1)$$

donde $|I_n\rangle$, $|F_n\rangle$ y $|C_{n,m}\rangle$ son respectivamente funciones de Wannier del n -ésimo sitio interno, del n -ésimo sitio en la frontera, y del m -ésimo sitio en la n -ésima cadena acoplada. En estos últimos, usaremos la convención de contar los sitios con números naturales comenzando a partir del sitio frontera al que esta acoplada la cadena. Por ser cadenas semi-infinitas, tenemos que

$$A_{n,m}^C = A_n^{(+)} e^{-ikma} + A_n^{(-)} e^{ikma}. \quad (4.2)$$

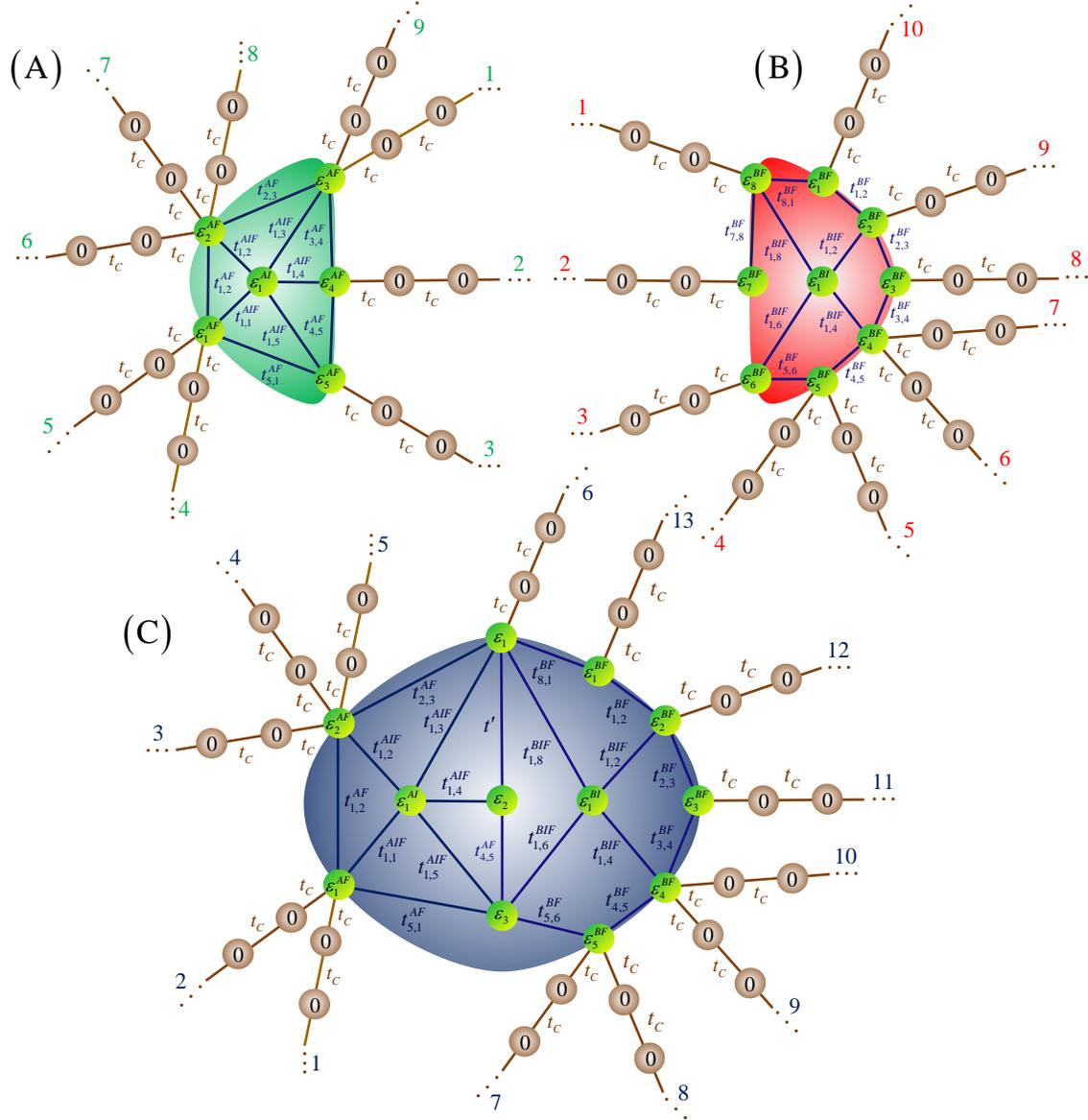


Figura 4.1. Unión de dos estructuras (A) y (B) que generan un nuevo sistema (C), donde $\varepsilon_1 = \varepsilon_3^{AF} + \varepsilon_8^{BF}$, $\varepsilon_2 = \varepsilon_4^{AF} + \varepsilon_7^{BF}$ y $\varepsilon_3 = \varepsilon_5^{AF} + \varepsilon_6^{BF}$ mientras que $t' = t_{3,4}^{AF} + t_{7,8}^{BF}$.

De esta manera, las soluciones del sistema se interpretan como ondas entrantes y salientes que viajan a través de las cadenas acopladas con coeficientes de amplitud $A_n^{(+)}$ y $A_n^{(-)}$, respectivamente.

Tomemos otro sistema B , con N_B sitios internos, M_B sitios en su frontera y P_B cadenas acopladas, cuyas soluciones se escriben en términos de coeficientes de amplitud $B_n^{(+)}$ y $B_n^{(-)}$. Como demostramos formalmente en el artículo anexo en el apéndice F, si sobre estos sistemas consideramos las siguientes igualdades

$$A_i^{(\pm)} = B_i^{(\mp)} \quad (4.3)$$

para $i=1,2,\dots,N$, encontraremos la solución de un sistema C que resulta de la fusión del sistema A y B de acuerdo con las siguientes reglas:

- (a) Las cadenas $i=1,2,\dots,N$ de cada sistema son removidas., y los sitios en la frontera a los cuales estos están acoplados se superponen, sumando sus energías de sitio. Por ejemplo, en la Fig. 4.1, al fusionar la cadena 1 de cada sistema, obtenemos que en C la energía de sitio $\varepsilon_1 = \varepsilon_3^{AF} + \varepsilon_8^{BF}$, $\varepsilon_2 = \varepsilon_4^{AF} + \varepsilon_7^{BF}$ y $\varepsilon_3 = \varepsilon_5^{AF} + \varepsilon_6^{BF}$.
- (b) Las integrales de salto entre dos sitios frontera conectados a las cadenas $i=1,2,\dots,N$ se sumarán. Por ejemplo, en el sistema C se tiene que $t' = t_{3,4}^{AF} + t_{7,8}^{BF}$.
- (c) Los sitios que no estén directamente conectados a las cadenas $i=1,2,\dots,N$, se mantendrán sin cambios tanto en energías de sitio como en integrales de salto.
- (d) El sistema producido de la fusión de dos subestructuras con P_A y P_B cadenas auxiliares respectivamente, tendrá $P_A + P_B - 2N$ cadenas acopladas y su matriz de dispersión asociada será de dimensión $[(P_A + P_B - 2N) \times (P_A + P_B - 2N)]$.

Lo anterior puede ser aprovechado para resolver sistemas por medio de la solución de los subsistemas, como se hace a continuación, en donde obtenemos la matriz de dispersión del sistema C usando las matrices de dispersión de los sistemas A y B .

Sean \mathbf{S}^A y \mathbf{S}^B las matrices de dispersión de cada sistema, las cuales satisfacen respectivamente

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_1^{(-)} \\ \mathbf{A}_2^{(-)} \end{pmatrix} = \mathbf{S}^A \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1^{(+)} \\ \mathbf{A}_2^{(+)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{11}^A & \mathbf{S}_{12}^A \\ \mathbf{S}_{21}^A & \mathbf{S}_{22}^A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1^{(+)} \\ \mathbf{A}_2^{(+)} \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

y

$$\begin{pmatrix} \mathbf{B}_1^{(-)} \\ \mathbf{B}_2^{(-)} \end{pmatrix} = \mathbf{S}^B \begin{pmatrix} \mathbf{B}_1^{(+)} \\ \mathbf{B}_2^{(+)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{11}^B & \mathbf{S}_{12}^B \\ \mathbf{S}_{21}^B & \mathbf{S}_{22}^B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{B}_1^{(+)} \\ \mathbf{B}_2^{(+)} \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

donde definimos

$$\mathbf{A}_1^{(\pm)} \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1^{(\pm)} \\ \mathbf{A}_2^{(\pm)} \\ \vdots \\ \mathbf{A}_N^{(\pm)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}_2^{(\pm)} \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{N+1}^{(\pm)} \\ \mathbf{A}_{N+2}^{(\pm)} \\ \vdots \\ \mathbf{A}_{M_A}^{(\pm)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B}_1^{(\pm)} \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{B}_1^{(\pm)} \\ \mathbf{B}_2^{(\pm)} \\ \vdots \\ \mathbf{B}_N^{(\pm)} \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \mathbf{B}_2^{(\pm)} \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{B}_{N+1}^{(\pm)} \\ \mathbf{B}_{N+2}^{(\pm)} \\ \vdots \\ \mathbf{B}_{M_B}^{(\pm)} \end{pmatrix}. \quad (4.6)$$

Como se muestra en el Apéndice B, la igualdad (4.3) nos conduce a que la matriz de dispersión (\mathbf{S}^C) del sistema C satisface

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_2^{(-)} \\ \mathbf{B}_2^{(-)} \end{pmatrix} = \mathbf{S}^C \begin{pmatrix} \mathbf{A}_2^{(+)} \\ \mathbf{B}_2^{(+)} \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

donde

$$\mathbf{S}^C = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{22}^A + \mathbf{S}_{21}^A (\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{S}_{11}^A)^{-1} \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{S}_{12}^A & \mathbf{S}_{21}^A (\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{S}_{11}^A)^{-1} \mathbf{S}_{12}^B \\ \mathbf{S}_{21}^B (\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{S}_{11}^B)^{-1} \mathbf{S}_{12}^A & \mathbf{S}_{22}^B + \mathbf{S}_{21}^B (\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{S}_{11}^B)^{-1} \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{S}_{12}^B \end{pmatrix}. \quad (4.8)$$

En resumen, si conocemos la matriz de dispersión de sistemas pequeños, podemos construir iterativamente la matriz de dispersión de sistemas cada vez más grandes. Nótese que la dimensión de las matrices de dispersión es igual al número de cadenas acopladas y no depende del número de sitios internos. De esta manera, este método conduce a un importante ahorro de esfuerzo computacional.

4.2 Bloques Básicos

Como se mostró en la sección anterior, es posible determinar la matriz de dispersión correspondiente a un sistema complejo mediante las matrices de dispersión de sus subestructuras. De hecho, cualquier estructura compleja puede abordarse a partir de dos estructuras elementales a las cuales denominaremos como *estructura de sitio* y *estructura de enlace*, y que se muestran en la Fig. 4.2.

Como se demuestra en el Apéndice C, para una estructura de sitio con p cadenas acopladas, la matriz de dispersión asociada de dimensión $p \times p$ es

$$(\mathbf{S}^{sitio})_{nm} = \frac{2it_c \sin(ka)}{\varepsilon - E + pt_c e^{ika}} - \delta_{nm}. \quad (4.9)$$

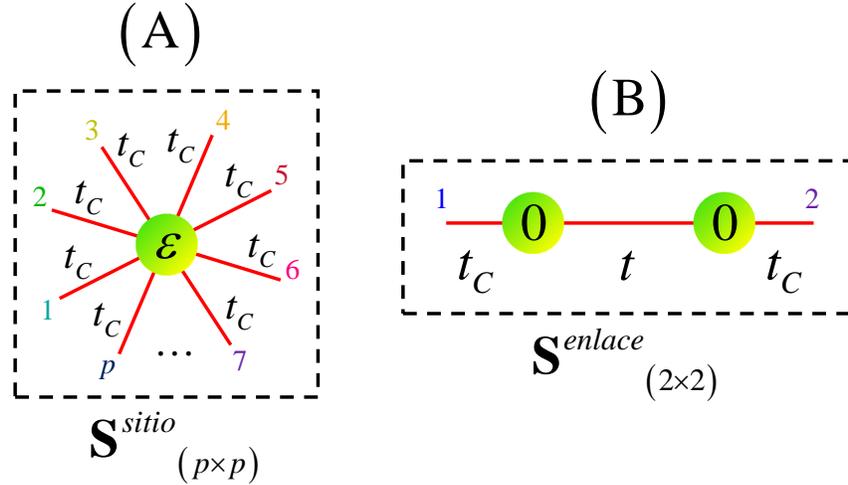


Figura 4.2. (A) *estructura de sitio* con p cadenas acopladas, a la cual le corresponde una matriz de dispersión \mathbf{S}^{sitio} de dimensión $(p \times p)$. (B) *estructura de enlace* cuya matriz de dispersión es \mathbf{S}^{enlace} de dimensión (2×2) .

Por otro lado, en el Apéndice D se demuestra que la estructura de enlace genera una matriz de dispersión de 2×2 con componentes

$$(\mathbf{S}^{entlace})_{nm} = \begin{cases} r & \text{para } n = m \\ \frac{t_C}{t} (e^{ika} - r e^{-ika}) & \text{para } n \neq m \end{cases} \quad \text{con} \quad r \equiv -\frac{t^2 - t_C^2}{t^2 - t_C^2 e^{-2ika}}. \quad (4.10)$$

Las estructuras de sitio permiten aumentar o disminuir el número de cadenas acopladas, así como modificaciones a las energías de sitio de los sitios en la frontera. Por otro lado, la estructura de enlace aumenta el número de sitios de un sistema, y también permite modificar integrales de salto entre dos sitios en la frontera. En la sección 4.4 se mostrarán ejemplos del uso de estas estructuras.

4.3 Saturadores

Para modelar sistemas con saturadores arbitrarios, es necesario considerar estructuras acopladas distintas a las cadenas que se muestran en la Fig. 4.1. Afortunadamente, el método en la sección 4.1 nos permite modelar a los saturadores de manera individual, resolviendo la matriz de dispersión de un sistema semi-infinito con sitios frontera conectados a cadenas periódicas. La información de esta matriz se utilizará con la de otras matrices de dispersión de otros subsistemas, para así resolver las propiedades de dispersión de sistemas más complejos.

Consideremos una estructura periódica semi-infinita (saturador) con Q átomos en su sección transversal, en cuya frontera se conectan cadenas unidimensionales periódicas con energía de sitio $\varepsilon=0$ e integral de salto t_C tal y como se muestra en la Fig. 4.3. En la sección 2.4 demostramos que los coeficientes de la función de onda en la región semi-infinita están dados por

$$C_{n,m} = \sum_{s=1}^{\tilde{Q}} \alpha_m^{(s)} (\mathbf{B}_s^{(+)} e^{ink_s a} + \mathbf{B}_s^{(-)} e^{-ink_s a}) + \sum_{s=Q+1}^{\tilde{Q}} \alpha_m^{(s)} \mathbf{B}_s e^{nk_s a} \mathbf{F}_s^n, \quad (4.11)$$

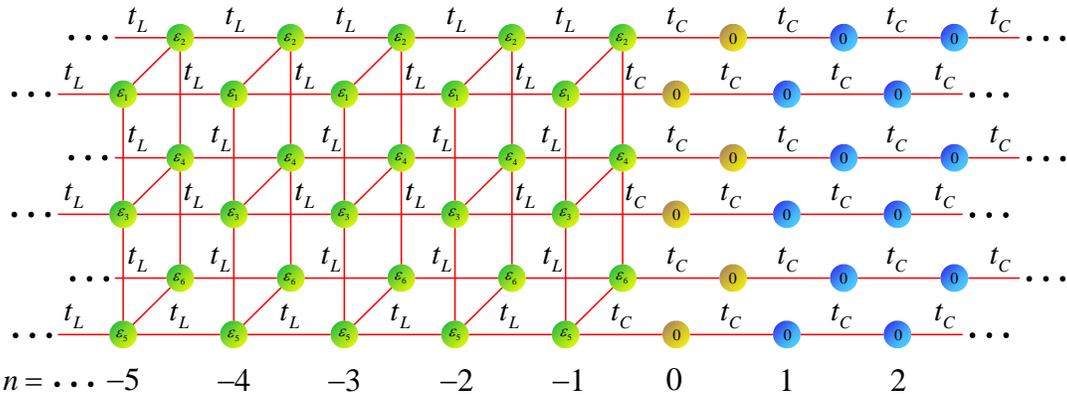


Figura 4.3. Extremo de un saturador (esferas verdes) al cual se le conectan cadenas atómicas periódicas (esferas azules) con energía de sitio nula e integral de salto t_C . Las funciones de onda (4.11) y (4.13) deben ser iguales en los sitios frontera (esferas amarillas).

para $n=0,-1,-2,\dots$. La primera suma corre sobre los \tilde{Q} canales abiertos, que satisfacen $\left| \frac{E-E_{\perp}^p}{2t_L} \right| < 1$, y la segunda abarca los $(Q-\tilde{Q})$ canales cerrados, para los cuales $\left| \frac{E-E_{\perp}^p}{2t_L} \right| \geq 1$. A su vez tenemos que $\mathbf{B}_s^{(+)}(\mathbf{B}_s^{(-)})$ corresponde a la amplitud de la onda entrante (saliente) en el canal abierto s , \mathbf{B}_s es la amplitud de la onda en el canal cerrado s , \mathbf{F}_s^n está definida en (2.57) y k_s es tal que

$$k_s a = \begin{cases} \arccos\left(\frac{E-E_{\perp}^{(s)}}{2t_L}\right) \in (0, \pi] & \text{para } s=1,2,\dots,\tilde{Q} \\ \operatorname{arcosh}\left|\frac{E-E_{\perp}^{(s)}}{2t_L}\right| \in [0, \infty) & \text{para } s=\tilde{Q}+1,\tilde{Q}+2,\dots,Q \end{cases}. \quad (4.12)$$

Por otro lado, los coeficientes de la función de onda en las cadenas unidimensionales acopladas al sistema resultan ser

$$\mathbf{C}_{n,m} = \mathbf{A}_m^{(+)} e^{-ikna} + \mathbf{A}_m^{(-)} e^{ikna}, \quad (4.13)$$

para $n=0,1,2,\dots$, donde $\mathbf{A}_m^{(+)}(\mathbf{A}_m^{(-)})$ es el coeficiente de amplitud de la onda entrante (saliente) por la cadena unidimensional acoplada al m -ésimo sitio de la cadena semi-infinita.

Al analizar la frontera entre el saturador y las cadenas acopladas hallamos que las ecuaciones a cumplir son de la forma

$$-EC_{0,m} + t_L C_{-1,m} + t_c C_{1,m} = 0. \quad (4.14)$$

Usando las ecuaciones (4.13) y (4.14) obtenemos que

$$\mathbf{C}_{-1,m} = \mathbf{A}_m^{(+)} \left[\frac{1}{t_L} (E - t_c e^{-ika}) \right] + \mathbf{A}_m^{(-)} \left[\frac{1}{t_L} (E - t_c e^{ika}) \right], \quad (4.15)$$

el cual, de acuerdo con la ecuación (4.11), puede también escribirse como

$$\mathbf{C}_{-1,m} = \sum_{s=1}^{\tilde{Q}} \alpha_m^{(s)} \left(\mathbf{B}_s^{(+)} e^{-ika} + \mathbf{B}_s^{(-)} e^{ika} \right) + \sum_{s=\tilde{Q}+1}^Q \alpha_m^{(s)} \mathbf{B}_s e^{-ka} \mathbf{F}_s. \quad (4.16)$$

Adicionalmente, de (4.11) tenemos que

$$\mathbf{C}_{0,m} = \sum_{s=1}^{\tilde{Q}} \alpha_m^{(s)} \left(\mathbf{B}_s^{(+)} + \mathbf{B}_s^{(-)} \right) + \sum_{s=\tilde{Q}+1}^Q \alpha_m^{(s)} \mathbf{B}_s \mathbf{F}_s, \quad (4.17)$$

Mientras que de (4.13) resulta

$$\mathbf{C}_{0,m} = \mathbf{A}_m^{(+)} + \mathbf{A}_m^{(-)}. \quad (4.18)$$

Las ecuaciones (4.15) y (4.18) pueden escribirse de forma matricial como

$$\begin{pmatrix} \mathbf{C}_0 \\ \mathbf{C}_{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{1,1}^B & \mathbf{M}_{1,2}^B \\ \mathbf{M}_{2,1}^B & \mathbf{M}_{2,2}^B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(+)} \\ \mathbf{A}^{(-)} \end{pmatrix}, \quad (4.19)$$

donde

$$\mathbf{C}_n = \begin{pmatrix} C_{n,1} \\ C_{n,2} \\ \vdots \\ C_{n,Q} \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \mathbf{A}^{(\pm)} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1^{(\pm)} \\ \mathbf{A}_2^{(\pm)} \\ \vdots \\ \mathbf{A}_Q^{(\pm)} \end{pmatrix} \quad (4.20)$$

y

$$\begin{aligned} (\mathbf{M}_{1,1}^A)_{nm} &= (\mathbf{M}_{1,2}^A)_{nm} = \delta_{nm} \\ (\mathbf{M}_{2,1}^A)_{nm} &= \frac{1}{t_L} (E - t_C e^{-ika}) \delta_{nm} \\ (\mathbf{M}_{2,2}^A)_{nm} &= \frac{1}{t_L} (E - t_C e^{ika}) \delta_{nm} \end{aligned} \quad (4.21)$$

De forma análoga, (4.16) y (4.17) conducen a la ecuación matricial

$$\begin{pmatrix} \mathbf{C}_0 \\ \mathbf{C}_{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{1,1}^B & \mathbf{M}_{1,2}^B & \mathbf{M}_{1,3}^B \\ \mathbf{M}_{2,1}^B & \mathbf{M}_{2,2}^B & \mathbf{M}_{2,3}^B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{B}^{(+)} \\ \mathbf{B}^{(-)} \\ \mathbf{B} \end{pmatrix}, \quad (4.22)$$

con

$$\mathbf{B}^{(\pm)} = \begin{pmatrix} \mathbf{B}_1^{(\pm)} \\ \mathbf{B}_2^{(\pm)} \\ \vdots \\ \mathbf{B}_{\tilde{Q}}^{(\pm)} \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} \mathbf{B}_{\tilde{Q}+1} \\ \mathbf{B}_{\tilde{Q}+2} \\ \vdots \\ \mathbf{B}_{\tilde{Q}} \end{pmatrix}, \quad (4.23)$$

y las matrices $\mathbf{M}_{1,1}^B$, $\mathbf{M}_{1,2}^B$, $\mathbf{M}_{2,1}^B$, $\mathbf{M}_{2,2}^B$, $\mathbf{M}_{1,3}^B$ y $\mathbf{M}_{2,3}^B$ son tales que

$$\begin{aligned} (\mathbf{M}_{1,1}^B)_{n,m} &= (\mathbf{M}_{1,2}^B)_{n,m} = \alpha_n^{(m)} \\ (\mathbf{M}_{2,1}^B)_{n,m} &= e^{-ika} \alpha_n^{(m)} \\ (\mathbf{M}_{2,2}^B)_{n,m} &= e^{ika} \alpha_n^{(m)} \\ (\mathbf{M}_{1,3}^B)_{n,m} &= \alpha_n^{(m+\tilde{Q})} \\ (\mathbf{M}_{2,3}^B)_{n,m} &= e^{-ak_{m+\tilde{Q}}} F_{m+\tilde{Q}} \alpha_n^{(m+\tilde{Q})} \end{aligned} \quad (4.24)$$

Igualando el lado derecho en las ecuaciones (4.19) y (4.22), se muestra en el Apéndice E que se satisface

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(-)} \\ \mathbf{B}^{(-)} \\ \mathbf{B} \end{pmatrix} = \mathbf{D} \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(+)} \\ \mathbf{B}^{(+)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{D}_{1,1} & \mathbf{D}_{1,2} \\ \mathbf{D}_{2,1} & \mathbf{D}_{2,2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(+)} \\ \mathbf{B}^{(+)} \end{pmatrix}, \quad (4.25)$$

donde

$$\begin{cases} \mathbf{D}_{1,1} = \left[\mathbf{M}_{2,2}^A - \tilde{\mathbf{M}}_2^B (\tilde{\mathbf{M}}_1^B)^{-1} \mathbf{M}_{1,2}^A \right]^{-1} \left[\tilde{\mathbf{M}}_2^B (\tilde{\mathbf{M}}_1^B)^{-1} \mathbf{M}_{1,1}^A - \mathbf{M}_{2,1}^A \right] \\ \mathbf{D}_{1,2} = \left[\mathbf{M}_{2,2}^A - \tilde{\mathbf{M}}_2^B (\tilde{\mathbf{M}}_1^B)^{-1} \mathbf{M}_{1,2}^A \right]^{-1} \left[\mathbf{M}_{2,1}^B - \tilde{\mathbf{M}}_2^B (\tilde{\mathbf{M}}_1^B)^{-1} \mathbf{M}_{1,1}^B \right] \\ \mathbf{D}_{2,1} = \left[\tilde{\mathbf{M}}_2^B - \mathbf{M}_{2,2}^A (\mathbf{M}_{1,2}^A)^{-1} \tilde{\mathbf{M}}_1^B \right]^{-1} \left[\mathbf{M}_{2,1}^A - \mathbf{M}_{2,2}^A (\mathbf{M}_{1,2}^A)^{-1} \mathbf{M}_{1,1}^A \right] \\ \mathbf{D}_{2,2} = \left[\tilde{\mathbf{M}}_2^B - \mathbf{M}_{2,2}^A (\mathbf{M}_{1,2}^A)^{-1} \tilde{\mathbf{M}}_1^B \right]^{-1} \left[\mathbf{M}_{2,2}^A (\mathbf{M}_{1,2}^A)^{-1} \mathbf{M}_{1,1}^B - \mathbf{M}_{2,1}^B \right] \end{cases} \quad \text{con } \mathbf{M}_i^B \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{i,2}^B & \mathbf{M}_{i,3}^B \end{pmatrix}. \quad (4.26)$$

Puesto que los primeros $(Q + \tilde{Q})$ renglones de la matriz \mathbf{D} relacionan a las ondas entrantes y salientes del sistema, podemos concluir que corresponden a los elementos de la matriz de dispersión del saturador (\mathbf{S}^{lead}), expresada como

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(-)} \\ \mathbf{B}^{(-)} \end{pmatrix} = \mathbf{S}^{lead} \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(+)} \\ \mathbf{B}^{(+)} \end{pmatrix}. \quad (4.27)$$

4.4 Aplicación en Sistemas con Defectos

A continuación, se analizarán diversos ejemplos de aplicación para determinar la matriz de dispersión usando el método en la sección 4.1, a partir de las matrices de dispersión de las estructuras de sitio y de enlace, así como de los saturadores. Los resultados serán usados para expresar las funciones de transmisión, los cuales se compararán con aquellos obtenidos en el capítulo III.

4.4.1 Defecto Fano

En esta sección obtendremos la matriz de dispersión para el sistema de la Fig. 3.2 por medio de las estructuras elementales descritas en la sección 4.2. Para ello seguimos el procedimiento ilustrado en la Fig. 4.4. En cada iteración, fusionamos los sistemas al hacer $\mathbf{A}_1^{(\pm)} = \mathbf{B}_1^{(\mp)}$. Los pasos son:

- a) Establecemos las estructuras que se usarán a lo largo del ensamblaje del sistema. En este caso emplearemos: una estructura de enlace con integral de salto t' y matriz asociada **S2a** [Fig. 4.4(a.1)], dos estructuras de sitio con una y tres cadenas acopladas [Figs. 4.4 (a.2) y (a.3)] respectivamente, y por último un saturador unidimensional [Fig. 4.4(a.4)].
- b) Empezamos fusionando la estructura de enlace consigo misma para generar una cadena unidimensional compuesta por 3 sitios, 2 cadenas auxiliares y matriz asociada **S2** con dimensión (2×2) .

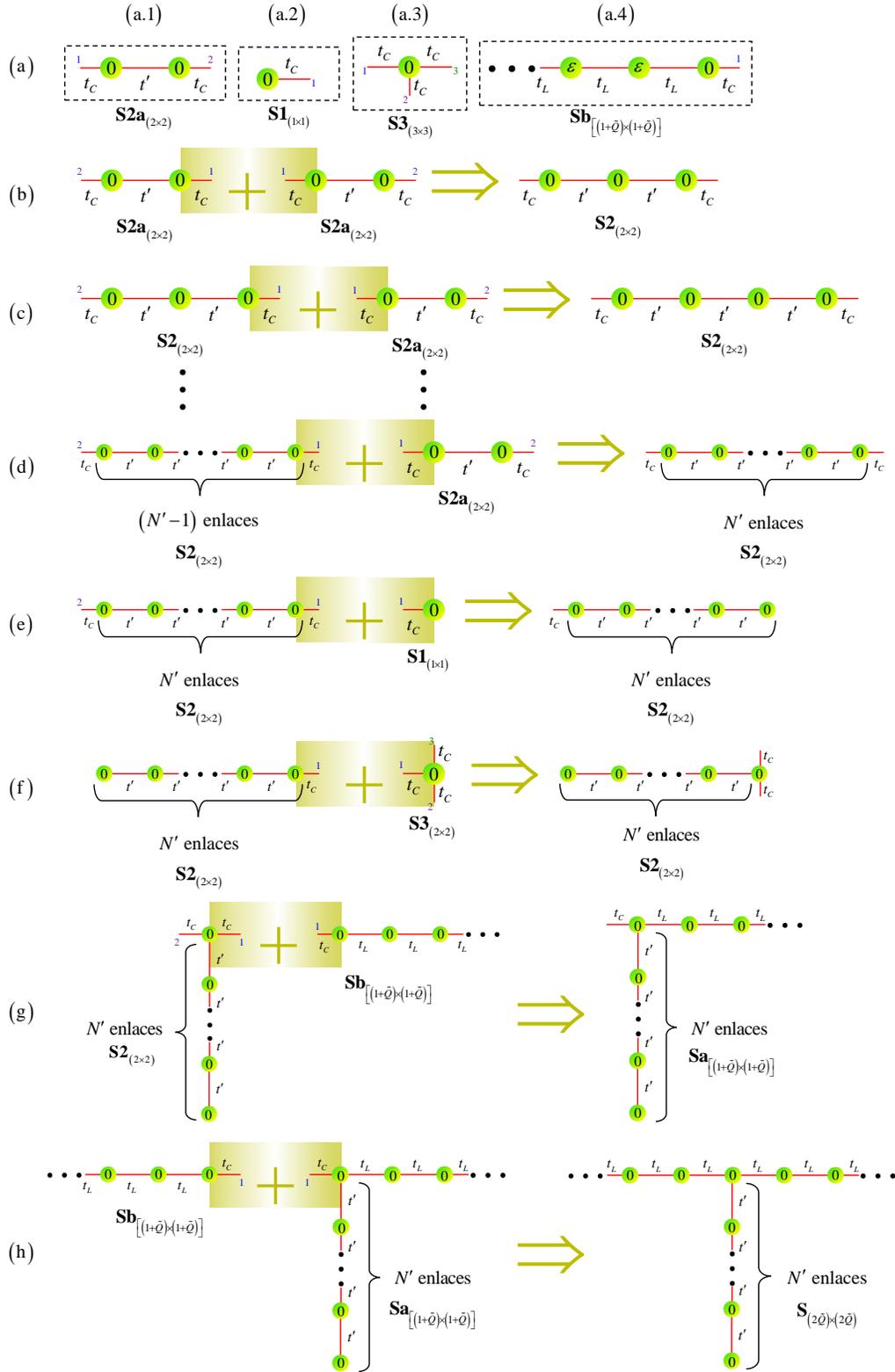


Figura 4.4. Elaboración de una estructura que presenta un defecto Fano de N' átomos. Los incisos (b) a (h) muestran el procedimiento seguido usando los subsistemas definidos en (a).

- c) Uniendo el sistema producido en (b) con una estructura de enlace, se obtiene una nueva estructura constituida por 4 sitios, y su matriz de dispersión es almacenada nuevamente en **S2**. Esta renormalización es posible debido a que el sistema mantiene el número de cadenas acopladas.
- d) Repitiendo el proceso anterior N' veces, obtenemos la matriz **S2**, que contiene a la matriz de dispersión de una cadena unidimensional formada por $N'+1$ sitios y conectada en sus extremos con 2 cadenas auxiliares.
- e) Queremos eliminar una de las cadenas auxiliares del sistema con N' enlaces, por lo que lo fusionamos con la estructura de sitio que solamente tiene una cadena acoplada. El objetivo de lo anterior es producir una cadena finita que represente al defecto Fano en el sistema correspondiente de la sección 4.1. Como en este caso la estructura resultante cuenta únicamente con una cadena acoplada, su matriz de dispersión asociada ahora debe ser **S1**, que es una matriz de (1×1) .
- f) Uniendo el extremo disponible de la cadena finita con la estructura de sitio que tiene tres cadenas acopladas, obtenemos un sistema que dispone de dos cadenas auxiliares al cual le asociamos nuevamente la matriz **S2**.
- g) Conectamos ahora la cadena finita a uno de los saturadores. Por un lado el sistema generado tendrá solamente una cadena acoplada pero por el otro habrá \tilde{Q} canales de conducción, de modo que su matriz asociada **Sb** resulta ser de dimensión $(\tilde{Q}+1) \times (\tilde{Q}+1)$.
- h) Por último, unimos al sistema con el otro saturador en su cadena auxiliar disponible. Esto produce una estructura con defecto Fano cuya matriz de dispersión asociada **S** tiene dimensiones $(2\tilde{Q}) \times (2\tilde{Q})$.

Considerando diferentes longitudes del defecto y calculando la transmitancia y reflectancia en cada uno de los casos obtenemos las gráficas mostradas en la Fig. 4.5. Podemos observar que el método aquí propuesto reproduce los resultados obtenidos por métodos directos en la sección 3.2. Sin embargo, el método directo requiere almacenar e invertir una matriz de dimensión igual al número de elementos en el defecto Fano, lo cual implica un escalamiento de $O(N'^2)$ en el uso de memoria para almacenar la matriz y $O(N'^3)$ en el tiempo de computo requerido para invertir dicha matriz [Cormen, 2009] [Sharma, 2013]. En cambio, en el procedimiento de la Fig. 4.4, la dimensión de las matrices almacenadas no depende de N' , mientras que el paso (c) requiere repetirse N' veces. En otras palabras, este método se escala como $O(1)$ y $O(N')$ en el uso de memoria computacional y tiempo, respectivamente, causando un ahorro considerable de esfuerzo computacional, en comparación con el método directo, especialmente para defectos Fano largos. De hecho, es posible mejorar el tiempo de cómputo a $O(\ln N')$, si en el paso (c) y (d) del procedimiento se sustituye el subsistema de

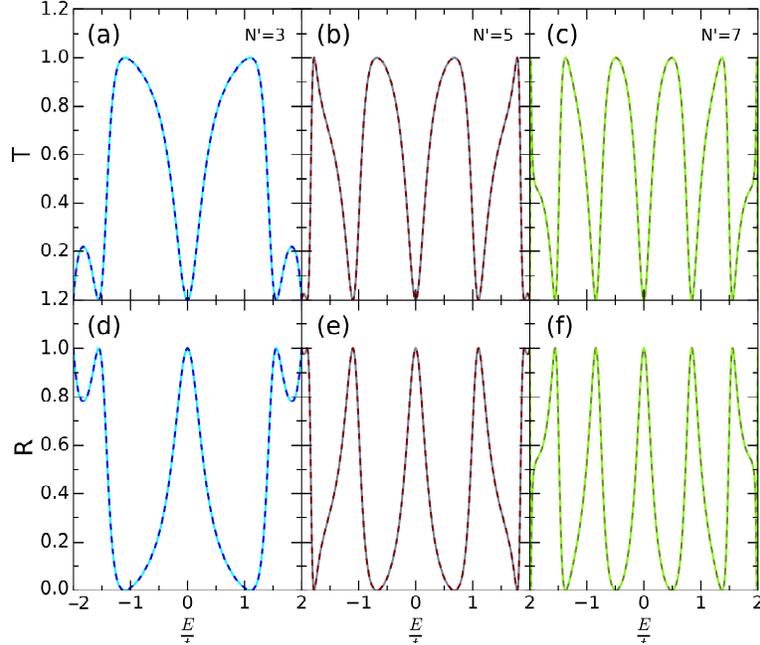


Figura 4.5. Función de Transmisión (arriba) y de Reflexión (abajo) obtenidas para el sistema con defecto Fano ilustrado en la Fig. 3.2 con parámetros $t=1$, $t'=t+0.1$ y $\varepsilon=0$, obtenidas por el método directo (líneas punteadas cyan, gris, verde) y por el método de matriz de dispersión (líneas punteadas azul, vino, oliva) para: (a) y (d) 3 átomos, (b) y (e) 5 átomos, (c) y (f) 7 átomos en la cadena del defecto Fano.

la derecha por uno igual al de la izquierda, lo cual produciría que en cada iteración se duplique la longitud de la cadena acoplada. A esto se le conoce como el método de duplicación [Rumpf, 2011]. De esta manera, es incluso posible abordar sistemas de longitud macroscópica.

4.4.2 Unión cadena atómica – diatómica

Siguiendo un procedimiento análogo al mostrado en el ejemplo anterior, buscaremos reproducir los resultados correspondientes a una transición de una cadena a dos cadenas, como el que se ilustra en la Fig. 3.4, por medio del método propuesto en la sección 4.1.

El procedimiento es exhibido en la Fig. 4.6, y consiste en:

- (a) Definir las estructuras que se van a utilizar en el procedimiento. En este caso requerimos de tres estructuras de enlace con integrales de salto (a.1) t_1 , (a.2) t_2 y (a.3) t ; (a.4) una estructura de sitio con tres cadenas acopladas; (a.5) un saturador unidimensional como el que se usó en el caso del defecto Fano; y (a.6) un saturador bidimensional cuyos sitios se encuentran unidos tanto transversal como longitudinalmente por medio de la integral de salto t .

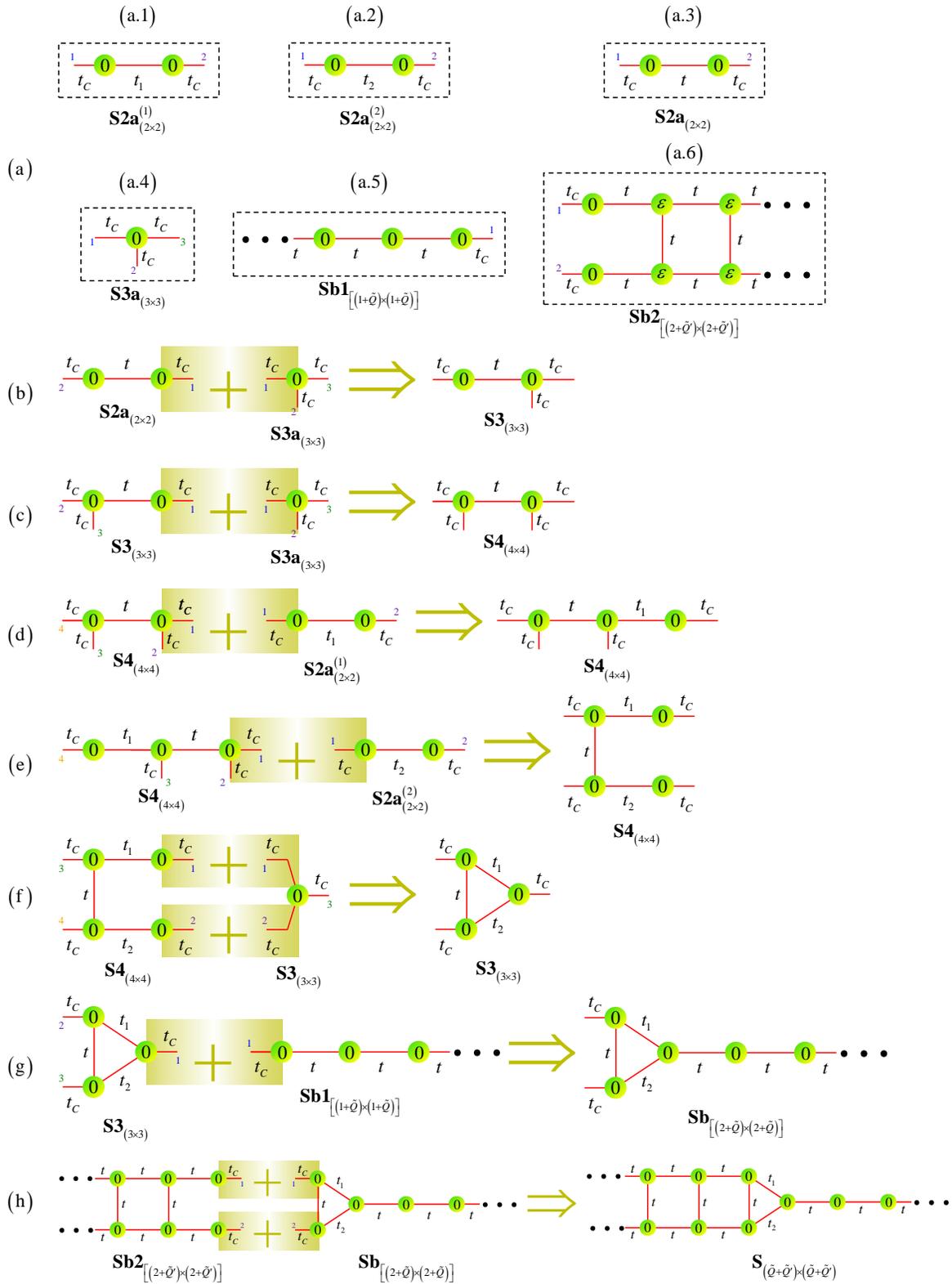


Figura 4.6. Técnica usada para construir un sistema con variación en su sección transversal. Partiendo de las estructuras definidas en (a) se sigue el procedimiento descrito en los pasos (b) a (h).

- (b) Tomando la estructura de enlace con integral de salto es t y fusionándola por un lado con la estructura de sitio descrita en (a.4) producimos una nueva estructura con tres cadenas acopladas, a la cual se le asocia la matriz **S3**.
- (c) Al unir el sistema obtenido en (b) nuevamente con la estructura de sitio con tres cadenas auxiliares (a.4), generamos un sistema que posee cuatro cadenas acopladas y cuya matriz de dispersión es **S4**.
- (d) A continuación, se fusionan el sistema de cuatro cadenas acopladas obtenido en (c) con la estructura de enlace (a.1). Como el número de cadenas acopladas no varía, se renormaliza a la matriz **S4** para este sistema.
- (e) Se repite el paso anterior, sólo que ahora se acopla la estructura de enlace (a.2) al otro extremo, produciendo una estructura que se almacena nuevamente en **S4**.
- (f) Se fusiona la estructura obtenida en (e) con la de sitio (a.4), mediante las igualdades $A_1^{(\pm)} = B_1^{(\mp)}$ y $A_2^{(\pm)} = B_2^{(\mp)}$, formando una estructura de tres sitios frontera conectados entre sí por integrales de salto t_1, t_2 y t_3 . Esta estructura formará la interface donde cambia la sección transversal del sistema.
- (g) Una vez que el anillo de transición está formado, solamente falta conectarlo a los saturadores correspondientes. En este caso se conecta dicho anillo a la cadena atómica (a.5), resultando así una estructura con matriz **Sa** de dimensión $(2 + \tilde{Q}) \times (2 + \tilde{Q})$, siendo \tilde{Q} el número de canales abiertos en la cadena atómica.
- (h) Finalmente se conectan las cadenas auxiliares al saturador (a.6), resultando esto en un sistema periódico unidimensional que presenta el cambio deseado en su sección transversal y cuya matriz de dispersión **S** tiene dimensión $(\tilde{Q} + \tilde{Q}') \times (\tilde{Q} + \tilde{Q}')$, siendo \tilde{Q}' el número de canales abiertos en la cadena diatómica.

En la Fig. 4.7 se muestra la función de transmisión (línea verde sólida) y la reflectancia (línea azul solida) usando el método descrito previamente, en comparación con el calculado en la sección 3.2 (líneas punteadas). Nótese que ambas metodologías producen exactamente el mismo resultado. Sin embargo, utilizando la técnica descrita en la Fig. 4.4, se muestra la posibilidad de reusar matrices de dispersión calculadas previamente, como es el caso de la matriz asociada al saturador (a.5) que ya se había obtenido en el ejemplo anterior. Esta ventaja del método propuesto en la sección 4.1, puede conducir a un ahorro considerable en tiempo de cómputo, ya que es posible reciclar resultados parciales de estructuras calculadas en sistemas ajenos. Esto será aprovechado en los siguientes dos ejemplos, donde la estructura obtenida en (f) se reutilizará para modelar sistemas más complejos.

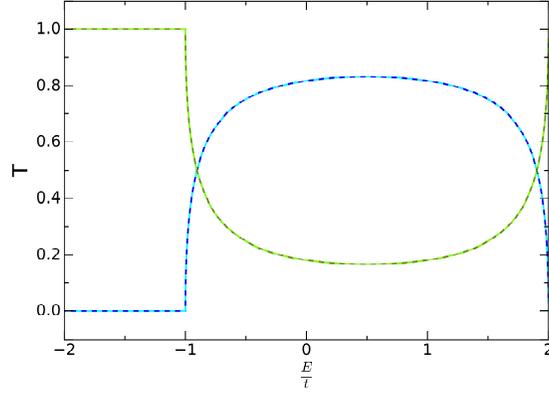


Figura 4.7. Función de Transmisión (línea azul sólida) y de Reflexión (línea verde sólida) para el sistema con variación en su sección transversal mostrado en la Fig. 3.4 con parámetros $t = t_1 = t_2$ y energía de sitio nula obtenidas por el método de matriz de dispersión, respectivamente. Las líneas punteadas representan lo mismo, pero utilizando el método directo.

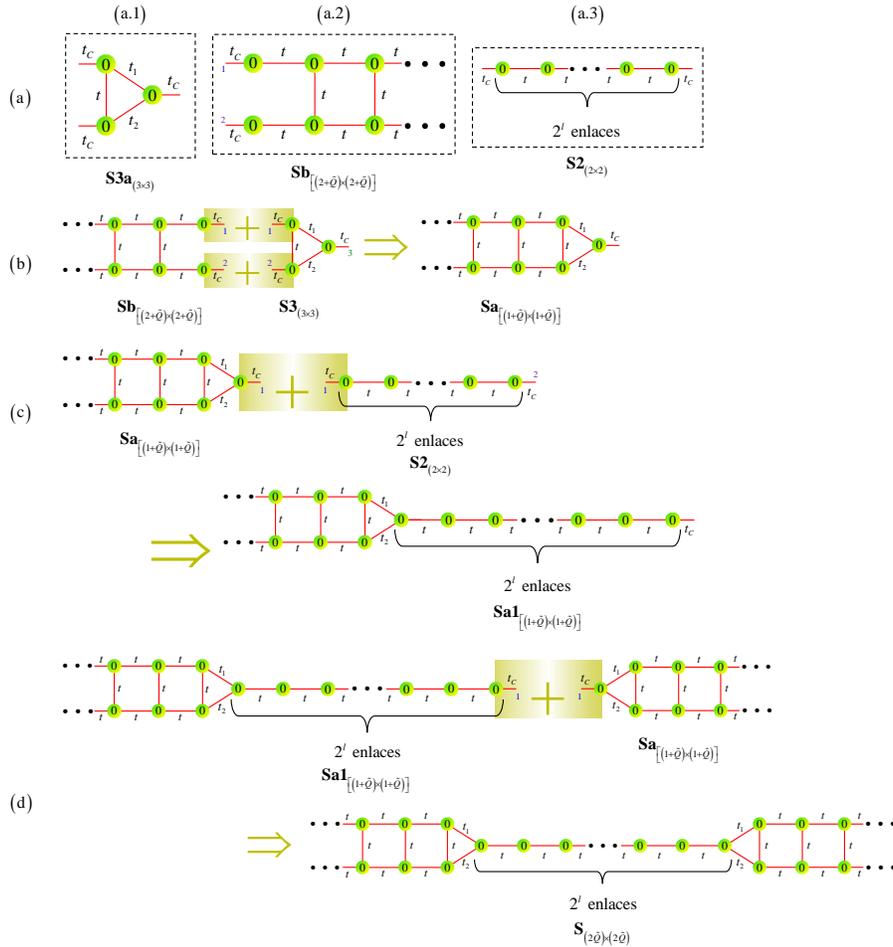


Figura 4.8. Técnica utilizada para elaborar un sistema que presente variaciones en su sección transversal, de tal forma que este pasa de tener dos cadenas atómicas a una cadena y nuevamente vuelve a tener dos cadenas. En este caso, las estructuras empleadas que se enlistan en (a) resultan ser en su mayoría las ya usadas en los ejemplos de las secciones 4.4.2 y 4.4.1, mientras que el procedimiento se muestra en los pasos (b) a (e).

4.4.3 Unión cadena diatómica - atómica - diatómica

En este ejemplo se busca modelar una estructura que presente una reducción en su sección transversal una determinada región, posterior a la cual el sistema recobrará tanto su sección transversal original como su periodicidad. El procedimiento seguido para construir esta estructura se detalla en la Fig. 4.8, de acuerdo con lo siguiente:

- (a) Al igual que en los ejemplos anteriores, el primer paso consiste en definir las estructuras que se van a utilizar para el montaje del sistema. Para ello, reusamos (a.1) la estructura obtenida en la Fig. 4.6(f), (a.2) el saturador de la Fig. 4.6(a.6), y (a.3) la cadena unidimensional de 2^l enlaces con cadenas auxiliares en sus extremos, usada para modelar el defecto Fano en la sección 4.4.1.
- (b) Fusionamos la estructura (a.1) al saturador diatómico.
- (c) Conectamos la estructura resultante de (b) con la cadena atómica (a.3).
- (d) Finalmente, unimos el sistema obtenido en (c) con el sistema resultante del paso (b).

En la Fig. 4.9. se muestran las (a) funciones de transmisión y (b) de reflexión obtenidas para un sistema donde la sección atómica tienen cero (línea punteada), 3 (línea sólida roja), 5 (línea sólida azul), 7 (línea sólida verde) y 2^{13} enlaces (línea sólida amarilla), con parámetros $t_1 = t_2 = t$ a lo largo de toda la estructura. Al igual que en el ejemplo anterior, el sistema es simétrico ante reflexiones sobre el eje z , lo que indica que las soluciones deben tener simetría bien definida ante dicha reflexión. En particular, la sección atómica de la estructura asegura que una partícula incidiendo por un modo impar del saturador, será totalmente reflejada. Por otro lado, el modo par corresponde a un canal abierto sólo si $E \in [-t, 3t]$, como ya se había analizado en la sección 3.3. Adicionalmente, la cadena atómica que une a los dos saturadores, tiene modos extendidos para energías $E \in [-2t, 2t]$. Esto explica que encontremos transmitancia distinta a cero en el rango $E \in [-t, 2t]$. Sin embargo, la cadena atómica, al no tener longitud infinita, permite la presencia de modos evanescentes a través de los cuales la partícula puede transmitirse por efecto túnel, y que se aprecia como una transmitancia distinta a cero para energías ligeramente mayores a $2t$, la cual es rápidamente atenuada al aumentar la longitud de la sección atómica. Por otro lado, vemos que el único efecto de aumentar la longitud del sistema es el de incrementar las oscilaciones en el espectro de transmisión, manteniendo envolventes fijas. La envolvente superior limita la transmitancia a 1, y se debe a que la región de la estructura con sección transversal atómica soporta sólo un canal de conducción.

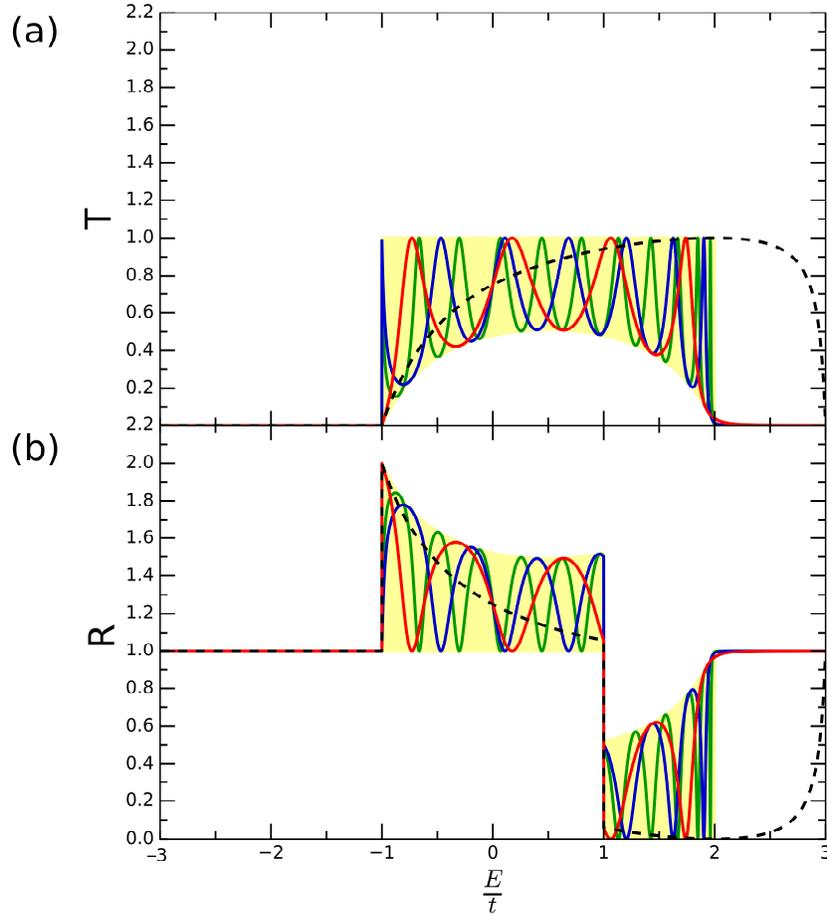


Figura 4.9. Transmitancia y reflectancia obtenidas para dos cadenas diatómicas unidas mediante una cadena atómica con: 3 enlaces (rojo), 5 enlaces (azul), 7 enlaces (verde), 2^{13} enlaces (amarillo) y sin enlaces (negro punteado), siendo las integrales de salto $t_1 = t_2 = t$ y las energías de sitio nulas a lo largo de todo el sistema.

4.4.4 Múltiples variaciones

Siguiendo un desarrollo similar al de las secciones previas, es simple modelar una estructura como la mostrada en la Fig. 4.10, donde la región dispersora está formada por la repetición n veces de la celda (a), y los saturadores son cadenas diatómicas semi-infinitas (b). Como resultado, el sistema tendrá n reducciones periódicas en su sección transversal, donde el ejemplo en la sección 4.4.3 corresponde al caso con $n=1$. Consideraremos que las secciones diatómicas del sistema estarán separadas por cadenas atómicas de 2^l enlaces, mientras que las secciones atómicas se encontrarán separadas por secciones diatómicas con 2^m enlaces.

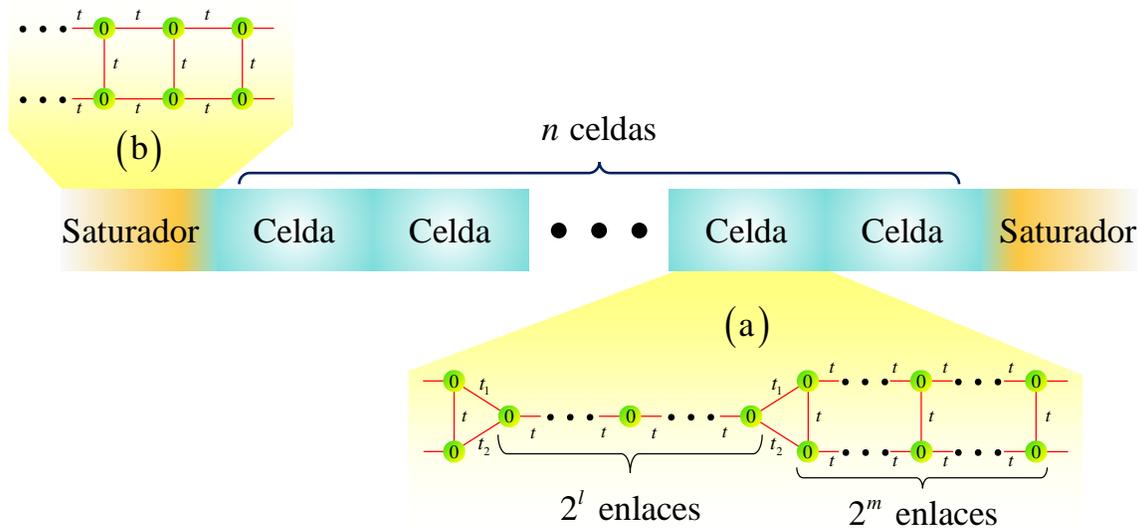


Figura 4.10. Sistema integrado por n variaciones compuestas por (a) una celda que presenta una reducción en su sección transversal, integrada por una cadena atómica de 2^l enlaces y una cadena diatómica de 2^m enlaces, mientras que (b) corresponde a un saturador diatómico.

En la Fig. 4.11, se muestran las funciones de transmisión (T) y reflexión (R) para los casos (a) $l=2$ y $m=3$, (b) $l=3$ y $m=2$, y (c) $l=m=3$, con $n=129$ y $t_1=t_2=t$. Una vez más, la simetría del sistema respecto a reflexiones sobre el eje z explica la transmitancia nula para $E \notin [-t, 3t]$. Por otro lado, la periodicidad de la región dispersora hace que las funciones de onda en esta región puedan expresarse como ondas de Bloch o funciones evanescentes, que generan respectivamente bandas y brechas en el espectro de transmitancia. Nótese que a diferencia de los ejemplos anteriores, esta vez existen bandas de transmitancia para $E/t > 2$, aún cuando la función de onda en las cadenas unidimensionales (si estuvieran aisladas) tiene un comportamiento evanescente. Sin embargo, la celda en la Fig. 4.10(a) tiene eigenvalores en dicha región, generando bandas, de acuerdo con lo visto en la sección 1.5. Además, esto explica el adelgazamiento de dichas bandas cuando las secciones atómicas crecen en longitud, como se observa al comparar las Figuras 4.11(a) y (c), ya que hay un menor acoplamiento entre eigenfunciones de celdas vecinas.

Para abordar casos con distintos valores de t_1 y t_2 , el método propuesto sólo requiere la modificación de la estructura en la Fig. 4.6(f), mientras que la matriz de dispersión de cualquier otra estructura involucrada para formar la Fig. 4.10 puede reciclarse, implicando un importante ahorro de tiempo computacional. En la Fig. 4.12 se muestran ejemplos con distintos valores de t_1 y t_2 . Observe que cuando $t_1 \neq t_2$, se rompe la simetría de reflexión sobre el eje z , por lo cual encontramos bandas de transmisión también para $E < -t$, como se muestra en las Figs. 4.12(a) y 4.12(b), mientras que no se observan en la Fig. 4.12(c).

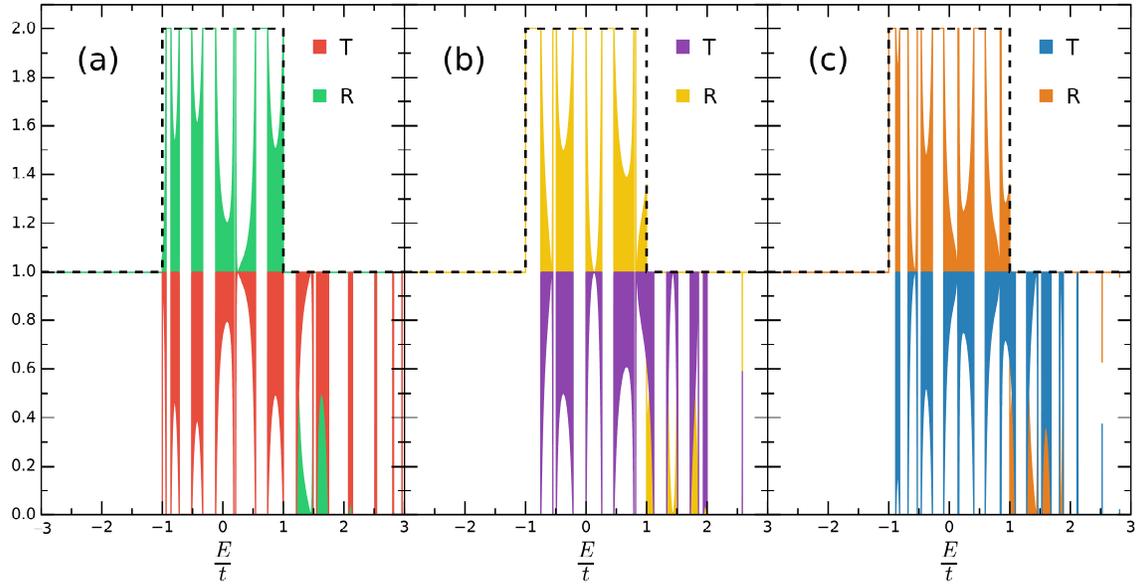


Figura 4.11. Función de transmisión (líneas roja, azul y morada) y de reflexión (líneas verde, naranja y amarilla) para el sistema en la Fig. 4.9 con (a) $l=2$, $m=3$, (b) $l=3$, $m=2$, (c) $l=m=3$, y parámetros $n=129$, $t=t_1=t_2$. La línea negra punteada representa el número de canales abiertos para una energía E .

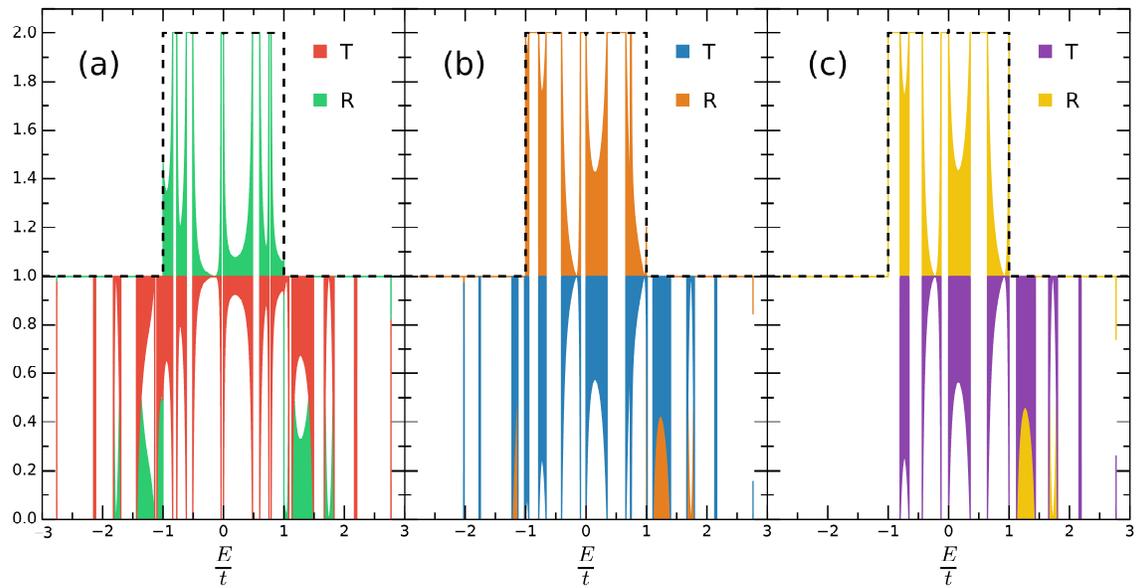


Figura 4.12. Función de transmisión (líneas roja, azul y morada) y de reflexión (líneas verde, naranja y amarilla) para el sistema en la Fig. 4.9 con (a) $t_1=0.1$, $t_2=0.9$, (b) $t_1=0.3$, $t_2=0.6$, (c) $t_1=t_2=0.5$ y parámetros $n=129$, $l=m=2$ y $t=1$. La línea punteada negra representa el número de canales abiertos para una energía E .

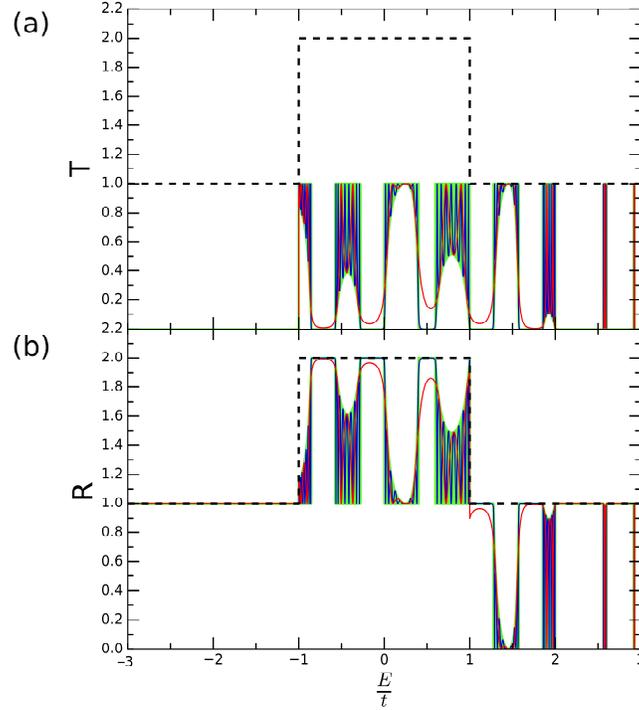


Figura 4.13. Función de transmisión (a) y de reflexión (b) para el sistema en la Fig. 4.9 con $n=2$ (línea sólida roja), $n=9$ (línea sólida azul), $n=524289$ (línea sólida verde) y parámetros $l=m=2$ y $t=t_1=t_2$. La línea punteada negra representa el número de canales abiertos para una energía E .

Además, encontramos que la forma y posición de las bandas de conducción puede modularse cambiando los valores de t_1 y t_2 . Finalmente, la Fig. 4.13 muestra el comportamiento de la función de (a) transmisión y (b) reflexión al variar el número de reducciones en la sección transversal (n). Se aprecia que las brechas halladas para $n=524289$, que evidencian funciones evanescentes en la región dispersora, mantienen una transmitancia finita cuando n es pequeña, en analogía al efecto túnel de una partícula atraviesa una barrera de potencial delgada. Por otro lado, se identifican envolventes en las bandas de transmisión que son seguidas sin importar el número de variaciones en la sección transversal. De hecho, el único efecto que tiene n en este caso, es aumentar el número de oscilaciones, en paralelo a lo ocurrido en la Fig. 4.9.

Por último, podemos destacar que para modelar el resultado con $n=524289$ el método directo requeriría almacenar matrices de dimensión $N \times N$, donde $N=7864320$ sitios en la región dispersora, cuya inversión necesitaría un esfuerzo computacional exorbitante. En cambio, usando el método propuesto en este capítulo, sólo fue necesario almacenar matrices de dispersión de dimensión 4×4 , a lo mucho. Adicionalmente, el método de duplicación permitió modelar el sistema en tan solo 19 iteraciones a partir de que se obtuvo la matriz de dispersión correspondiente a la celda unitaria. De esta forma, el tiempo de cómputo requerido fue muy inferior a aquel que se hubiera precisado empleando el método directo.

V

CONCLUSIONES

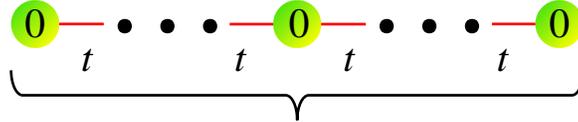
En esta tesis se propuso un nuevo método para encontrar iterativamente la matriz de dispersión de un sistema general de amarre fuerte, que serviría para estudiar la conductancia del mismo por medio de la fórmula de Landauer. Esta fórmula establece una relación entre la conductancia de una nanoconexión y su función de transmisión, la cual se obtiene a partir de los elementos de la matriz de dispersión.

El método consiste en la determinación de la matriz de dispersión de un sistema, usando las matrices de dispersión de sus subestructuras. Éste fue validado al reproducir los resultados obtenidos para diversos ejemplos en los que se emplearon métodos directos. Entre las ventajas que presenta la nueva técnica planteada, podemos resaltar las siguientes:

1. El problema de modelar un sistema arbitrario se reduce al de ensamblar estructuras simples, similar a armar un rompecabezas.
2. Se proponen dos estructuras básicas, la de sitio y la de enlace, con las cuales es posible modelar cualquier estructura compleja.
3. En cada iteración, se requiere conocer la matriz de dispersión de las subestructuras involucradas, la cual relaciona las amplitudes de ondas entrantes y salientes a través de cadenas atómicas auxiliares. Esto ocasiona que las matrices almacenadas tengan una dimensión igual al número de cadenas acopladas, que se traduce en un ahorro de memoria computacional pues dichas matrices contienen toda la información de los efectos causados incluso por sitios internos de la estructura.
4. En general, cualquier matriz obtenida mediante este proceso puede ser reutilizada para modelar distintas estructuras. Por ejemplo, la matriz de dispersión obtenida en la Fig. 4.6(f), es a su vez reutilizada para modelar los cambios de sección transversal en las Figs. 4.8 y 4.10.
5. Se mostró que el tiempo empleado por este método se escala linealmente con la longitud del sistema. Además, en caso de que la estructura presente periodicidad, dicho tiempo se escala logarítmicamente con dicha longitud, permitiendo abordar rápidamente sistemas de longitud macroscópica.

En resumen, el presente método permite investigar el transporte cuántico coherente en modelos con geometrías complejas, con el fin de estudiar la conductancia eléctrica en nanoconexiones.

Apéndice A



N sitios

Figura A.1. Cadena atómica periódica finita compuesta por N sitios con energía nula, unidos mediante integrales de salto t .

Supongamos un sistema unidimensional finito con N átomos como se muestra en la figura A.1. Según (1.28), el Hamiltoniano correspondiente a dicho sistema es

$$\hat{H} = t \sum_{m=1}^{N-1} (|m\rangle\langle m+1| + |m+1\rangle\langle m|), \quad (\text{A.1})$$

cuyas eigenfunciones están dadas por

$$|\psi^{(p)}\rangle = \sum_{m=1}^N \alpha_m^{(p)} |m\rangle, \quad (\text{A.2})$$

donde p denota a las diferentes soluciones linealmente independientes. Aplicando el Hamiltoniano (A.1) a las funciones de onda (A.2) y sustituyendo respectivamente se obtiene que

$$\hat{H}|\psi\rangle = t \sum_{m=1}^{N-1} \sum_{m'=1}^N \alpha_m^{(p)} (|m\rangle\langle m+1|m'\rangle + |m+1\rangle\langle m|m'\rangle) = E_p \sum_{m=1}^N \alpha_m^{(p)} |m\rangle, \quad (\text{A.3})$$

donde la ortonormalidad de las funciones de Wannier conduce a

$$t \left(\sum_{m=1}^{N-1} \alpha_{m+1}^{(p)} |m\rangle + \sum_{m=2}^N \alpha_{m-1}^{(p)} |m\rangle \right) = E_p \sum_{m=1}^N \alpha_m^{(p)} |m\rangle. \quad (\text{A.4})$$

Supongamos que existen $\alpha_0^{(p)} = \alpha_{N+1}^{(p)} = 0$ tales que al introducirlas en la anterior ecuación tenemos

$$t \left(\sum_{m=1}^N \alpha_{m+1}^{(p)} |m\rangle + \sum_{m=1}^N \alpha_{m-1}^{(p)} |m\rangle \right) = E_p \sum_{m=1}^N \alpha_m^{(p)} |m\rangle, \quad (\text{A.5})$$

de modo que

$$\sum_{m=1}^N \left[-E_p \alpha_m^{(p)} + t (\alpha_{m+1}^{(p)} + \alpha_{m-1}^{(p)}) \right] |m\rangle = 0, \quad (\text{A.6})$$

es decir

$$-E_p \alpha_m^{(p)} + t (\alpha_{m+1}^{(p)} + \alpha_{m-1}^{(p)}) = 0. \quad (\text{A.7})$$

La ecuación (A.7) corresponde a aquella que se obtiene en cadenas unidimensionales de longitud infinita, por lo que proponemos

$$\alpha_m^{(p)} = A_p e^{ik_p m a} + B_p e^{-ik_p m a}, \quad (\text{A.8})$$

La condición $\alpha_0 = \alpha_{N+1} = 0$ se traduce en que

$$\begin{cases} A_p + B_p = 0 \\ A_p e^{ik_p(N+1)a} + B_p e^{-ik_p(N+1)a} = 0 \end{cases} \quad (\text{A.9})$$

De la primer igualdad resulta que $A_p = -B_p$, de modo que la segunda ecuación se reduce a

$$A_p \left(e^{ik_p(N+1)a} - e^{-ik_p(N+1)a} \right) = 2iA_p \sin[k_p(N+1)a] = 0. \quad (\text{A.10})$$

Como la solución trivial no es de nuestro interés, de la anterior ecuación se concluye que

$$k_p = \frac{p\pi}{(N+1)a} \text{ con } p \in [1, 2, \dots, N], \quad (\text{A.11})$$

De este modo, los coeficientes $\alpha_m^{(p)}$ son

$$\alpha_m^{(p)} = A_p \sin(k_p m a). \quad (\text{A.12})$$

Sustituyendo en (A.7) obtenemos que

$$-E_p \sin(k_p m a) + t \left\{ \sin[k_p(m+1)a] + \sin[k_p(m-1)a] \right\} = 0. \quad (\text{A.13})$$

Utilizando propiedades trigonométricas, la anterior ecuación resulta ser

$$-E_p \sin(kma) + t \left[2 \sin(kma) \cos(ka) \right] = 0, \quad (\text{A.14})$$

es decir,

$$E_p = 2t \cos(k_p a). \quad (\text{A.15})$$

Finalmente, para que la función de onda (A.2) esté normalizada, tenemos que

$$A_p = \left[\sum_{m=1}^N \sin^2 \left(\frac{p\pi}{N+1} m \right) \right]^{-\frac{1}{2}}. \quad (\text{A.16})$$

Apéndice B

Al sustituir las matrices \mathbf{S}^A , \mathbf{S}^B , $\mathbf{A}_i^{(\pm)}$ y $\mathbf{B}_i^{(\pm)}$ respectivamente en las expresiones (4.4) y (4.5) se obtiene el sistema de ecuaciones

$$\begin{cases} \mathbf{C} = \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{D} + \mathbf{S}_{12}^A \mathbf{A}_2^{(+)} \\ \mathbf{A}_2^{(-)} = \mathbf{S}_{21}^A \mathbf{D} + \mathbf{S}_{22}^A \mathbf{A}_2^{(+)} \\ \mathbf{D} = \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{C} + \mathbf{S}_{12}^B \mathbf{B}_2^{(+)} \\ \mathbf{B}_2^{(-)} = \mathbf{S}_{21}^B \mathbf{C} + \mathbf{S}_{22}^B \mathbf{B}_2^{(+)} \end{cases} \quad (\text{B.1})$$

donde

$$\begin{aligned} \mathbf{C} &= \mathbf{A}_1^{(-)} = \mathbf{B}_1^{(+)} \\ \mathbf{D} &= \mathbf{B}_1^{(-)} = \mathbf{A}_1^{(+)} \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

debido a la condición (4.3). Al sustituir \mathbf{C} en la tercera ecuación de (B.1) resulta

$$\mathbf{D} = (\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{S}_{11}^A)^{-1} \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{S}_{12}^A \mathbf{A}_2^{(+)} + (\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{S}_{11}^A)^{-1} \mathbf{S}_{12}^B \mathbf{B}_2^{(+)} \quad (\text{B.3})$$

Por otro lado, sustituyendo \mathbf{D} en la primera ecuación de (B.1) se deduce que

$$\mathbf{C} = (\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{S}_{11}^B)^{-1} \mathbf{S}_{12}^A \mathbf{A}_2^{(+)} + (\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{S}_{11}^B)^{-1} \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{S}_{12}^B \mathbf{B}_2^{(+)} \quad (\text{B.4})$$

Reemplazando respectivamente las anteriores expresiones para \mathbf{C} y \mathbf{D} en la segunda y cuarta ecuación de (B.1) se obtiene

$$\begin{cases} \mathbf{A}_2^{(-)} = \mathbf{S}_{21}^A \left[(\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{S}_{11}^A)^{-1} \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{S}_{12}^A \mathbf{A}_2^{(+)} + (\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{S}_{11}^A)^{-1} \mathbf{S}_{12}^B \mathbf{B}_2^{(+)} \right] + \mathbf{S}_{22}^A \mathbf{A}_2^{(+)} \\ \mathbf{B}_2^{(-)} = \mathbf{S}_{21}^B \left[(\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{S}_{11}^B)^{-1} \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{S}_{12}^B \mathbf{B}_2^{(+)} + (\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{S}_{11}^B)^{-1} \mathbf{S}_{12}^A \mathbf{A}_2^{(+)} \right] + \mathbf{S}_{22}^B \mathbf{B}_2^{(+)} \end{cases} \quad (\text{B.5})$$

o lo que es lo mismo

$$\begin{cases} \mathbf{A}_2^{(-)} = \left[\mathbf{S}_{22}^A + \mathbf{S}_{21}^A (\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{S}_{11}^A)^{-1} \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{S}_{12}^A \right] \mathbf{A}_2^{(+)} + \left[\mathbf{S}_{21}^A (\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{S}_{11}^A)^{-1} \mathbf{S}_{12}^B \right] \mathbf{B}_2^{(+)} \\ \mathbf{B}_2^{(-)} = \left[\mathbf{S}_{21}^B (\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{S}_{11}^B)^{-1} \mathbf{S}_{12}^A \right] \mathbf{A}_2^{(+)} + \left[\mathbf{S}_{22}^B + \mathbf{S}_{21}^B (\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{S}_{11}^B)^{-1} \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{S}_{12}^B \right] \mathbf{B}_2^{(+)} \end{cases} \quad (\text{B.6})$$

De esta forma, la matriz de dispersión asociada al sistema C generado por la fusión de los subsistemas A y B tiene componentes

$$\mathbf{S}_{11}^C = \mathbf{S}_{22}^A + \mathbf{S}_{21}^A (\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{S}_{11}^A)^{-1} \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{S}_{12}^A, \quad (\text{B.7})$$

$$\mathbf{S}_{12}^C = \mathbf{S}_{21}^A (\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{S}_{11}^A)^{-1} \mathbf{S}_{12}^B, \quad (\text{B.8})$$

$$\mathbf{S}_{21}^C = \mathbf{S}_{21}^B (\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{S}_{11}^B)^{-1} \mathbf{S}_{12}^A, \quad (\text{B.9})$$

y

$$\mathbf{S}_{22}^C = \mathbf{S}_{22}^B + \mathbf{S}_{21}^B (\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{S}_{11}^B)^{-1} \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{S}_{12}^B. \quad (\text{B.10})$$

Apéndice C

Pensemos en un sistema con p cadenas auxiliares con energía de sitio $\varepsilon = 0$ e integral de salto t_c que convergen en un sitio con energía ε como se muestra en Fig. 4.2 (A). Análogo al desarrollo expuesto en 3.1, la función de onda

$$|\Psi^{(p)}\rangle = \sum_{s=1}^p \sum_{n=0}^{\infty} C_n^{(s)} |n^{(s)}\rangle, \quad (\text{C.1})$$

tiene como soluciones

$$C_n^{(s)} = A_+^{(s)} e^{-ikna} + A_-^{(s)} e^{ikna}, \quad (\text{C.2})$$

donde el superíndice s indica el número de cadena auxiliar del sistema y $A_+^{(s)}, A_-^{(s)}$ corresponden a las amplitudes de las ondas entrantes y salientes del defecto por la cadena s , respectivamente.

Asignando al sitio de convergencia el índice $n=0$, se tiene que este debe cumplir con la ecuación

$$(\varepsilon - E)C_0 + t_c \sum_{s=1}^p C_1^{(s)} = 0. \quad (\text{C.3})$$

Nótese que en el primer término del lado izquierdo de (C.3) no se especifica una cadena en particular pues el sitio de convergencia cumple adicionalmente con la condición

$$C_0 = A_+^{(1)} + A_-^{(1)} = A_+^{(2)} + A_-^{(2)} = \dots = A_+^{(p)} + A_-^{(p)}. \quad (\text{C.4})$$

Sustituyendo (C.2) y (C.4) en (C.3) respectivamente se obtiene

$$(\varepsilon - E)(A_+^{(p)} + A_-^{(p)}) + t_c \sum_{s=1}^p (A_+^{(s)} e^{-ika} + A_-^{(s)} e^{ika}) = 0, \quad (\text{C.5})$$

la cual al agrupar términos semejantes resulta ser

$$A_-^{(p)} (\varepsilon - E + t_c e^{ika}) + t_c e^{ika} \sum_{s \neq p} A_-^{(s)} = -A_+^{(p)} (\varepsilon - E + t_c e^{-ika}) - t_c e^{-ika} \sum_{s \neq p} A_+^{(s)}. \quad (\text{C.6})$$

Mediante las igualdades de (C.4) podemos expresar los coeficientes $A_-^{(s)}$ de la anterior ecuación en términos de $A_-^{(p)}$ y $A_+^{(s)}$ como

$$A_-^{(s)} = A_+^{(p)} + A_-^{(p)} - A_+^{(s)}, \quad (\text{C.7})$$

de modo que al hacer las sustituciones y reagrupar términos tenemos

$$A_-^{(p)} (\varepsilon - E + pt_c e^{ika}) = -A_+^{(p)} [\varepsilon - E + pt_c e^{ika} - 2it_c \sin(ka)] + [2it_c \sin(ka)] \sum_{s \neq p} A_+^{(s)}, \quad (\text{C.8})$$

donde p es el número de cadenas del sistema. Simplificando la anterior expresión se obtiene que

$$A_-^{(p)} = A_+^{(p)} \left[\frac{2it_c \sin(ka)}{\varepsilon - E + pt_c e^{ika}} - 1 \right] + \left[\frac{2it_c \sin(ka)}{\varepsilon - E + pt_c e^{ika}} \right] \sum_{s \neq p} A_+^{(s)}. \quad (\text{C.9})$$

Que en forma matricial conduce a la matriz de dispersión dada en la ecuación (4.9) [Ramírez, 2017].

Apéndice D

Sea un sistema compuesto por dos sitios con energía $\varepsilon = 0$, unidos entre sí por una integral de salto t y que a su vez tienen una cadena acoplada con energía de sitio nula e integral de salto t_c como se muestra en Fig. 4.2 (B). Siguiendo el procedimiento utilizado en el capítulo III, la función de onda

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_n |n^{(1)}\rangle + \sum_{n=0}^{\infty} D_n |n^{(2)}\rangle, \quad (\text{D.1})$$

tiene como solución a los coeficientes

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

Las ecuaciones que se deben cumplir en torno al defecto de enlace resultan ser

$$\begin{cases} -EC_0 + tD_0 + t_c C_1 = 0 \\ -ED_0 + tC_0 + t_c D_1 = 0 \end{cases}, \quad (\text{D.3})$$

de modo que al sustituir (D.2) en (D.3) obtenemos

$$\begin{cases} -E(A^{(+)} + A^{(-)}) + t(B^{(+)} + B^{(-)}) + t_c(A^{(+)} e^{-ika} + A^{(-)} e^{ika}) = 0 \\ -E(B^{(+)} + B^{(-)}) + t(A^{(+)} + A^{(-)}) + t_c(B^{(+)} e^{-ika} + B^{(-)} e^{ika}) = 0 \end{cases}, \quad (\text{D.4})$$

el cual, al reagrupar términos semejantes es

$$\begin{cases} A^{(-)}(-E + t_c e^{ika}) + tB^{(-)} = A^{(+)}(E - t_c e^{-ika}) - tB^{(+)} \\ tA^{(-)} + B^{(-)}(-E + t_c e^{ika}) = -tA^{(+)} + B^{(+)}(E - t_c e^{-ika}) \end{cases}. \quad (\text{D.5})$$

Analizando el caso de onda incidente por la cadena con coeficientes C_n , es decir $B^{(+)} = 0$, el sistema (D.5) se transforma en

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

del cual la primera ecuación conduce a

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

Sustituyendo este término en la segunda expresión de (D.6) se obtiene que

$$A^{(-)} = rA^{(+)}. \quad (\text{D.8})$$

donde $r \equiv -\frac{t^2 - t_c^2}{t^2 - t_c^2 e^{-2ika}}$.

En este caso de onda incidente por C_n , la primera ecuación del sistema (D.4) nos permite escribir

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

el cual, al sustituir (D.8) se reduce a

$$\mathbf{B}^{(-)} = \frac{t_C}{t} (e^{ika} + r e^{-ika}) \mathbf{A}^{(+)} . \quad (\text{D.10})$$

Si examinamos el caso de onda incidente por D_n en el cual se cumple que $\mathbf{A}^{(+)} = \mathbf{0}$, veremos que el sistema (D.5) resulta semejante al del caso de onda incidente por C_n , de modo que

$$\mathbf{B}^{(-)} = -\frac{t^2 - t_C^2}{t^2 - t_C^2 e^{-2ika}} \mathbf{B}^{(+)} = r \mathbf{B}^{(+)} \quad (\text{D.11})$$

y

$$\mathbf{A}^{(-)} = \frac{t_C}{t} (e^{ika} + r e^{-ika}) \mathbf{B}^{(+)} . \quad (\text{D.12})$$

Con las expresiones (D.8), (D.10), (D.11) y (D.12) podemos establecer la matriz de dispersión asociada al sistema, siendo esta

$$\left(\mathbf{S}^{\text{enlace}} \right)_{nm} = \begin{cases} r & \text{si } n = m \\ \frac{t_C}{t} (e^{ika} + r e^{-ika}) & \text{si } n \neq m \end{cases} , \quad (\text{D.13})$$

$$\text{con } r \equiv -\frac{t^2 - t_C^2}{t^2 - t_C^2 e^{-2ika}} .$$

Apéndice E

Partiendo de las ecuaciones (4.15) a (4.18) tenemos que se debe cumplir la igualdad

$$\begin{pmatrix} \mathbf{M}_{1,1}^B & \mathbf{M}_{1,2}^B & \mathbf{M}_{1,3}^B \\ \mathbf{M}_{2,1}^B & \mathbf{M}_{2,2}^B & \mathbf{M}_{2,3}^B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{B}^{(+)} \\ \mathbf{B}^{(-)} \\ \mathbf{B} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{1,1}^A & \mathbf{M}_{1,2}^A \\ \mathbf{M}_{2,1}^A & \mathbf{M}_{2,2}^A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(+)} \\ \mathbf{A}^{(-)} \end{pmatrix}. \quad (\text{E.1})$$

de donde desarrollamos y obtenemos

$$\begin{cases} \mathbf{M}_{1,1}^B \mathbf{B}^{(+)} + \tilde{\mathbf{M}}_1^B \begin{pmatrix} \mathbf{B}^{(-)} \\ \mathbf{B} \end{pmatrix} = \mathbf{M}_{1,1}^A \mathbf{A}^{(+)} + \mathbf{M}_{1,2}^A \mathbf{A}^{(-)} \\ \mathbf{M}_{2,1}^B \mathbf{B}^{(+)} + \tilde{\mathbf{M}}_2^B \begin{pmatrix} \mathbf{B}^{(-)} \\ \mathbf{B} \end{pmatrix} = \mathbf{M}_{2,1}^A \mathbf{A}^{(+)} + \mathbf{M}_{2,2}^A \mathbf{A}^{(-)} \end{cases}, \quad (\text{E.2})$$

con $\tilde{\mathbf{M}}_i^B \equiv (\mathbf{M}_{i,2}^B \quad \mathbf{M}_{i,3}^B)$ una matriz de dimensión $Q \times Q$. Despejando $\begin{pmatrix} \mathbf{B}^{(-)} \\ \mathbf{B} \end{pmatrix}$ y $\mathbf{A}^{(-)}$ de la primera y segunda ecuación respectivamente resulta que

$$\begin{pmatrix} \mathbf{B}^{(-)} \\ \mathbf{B} \end{pmatrix} = (\tilde{\mathbf{M}}_1^B)^{-1} [\mathbf{M}_{1,1}^A \mathbf{A}^{(+)} - \mathbf{M}_{1,1}^B \mathbf{B}^{(+)} + \mathbf{M}_{1,2}^A \mathbf{A}^{(-)}] \quad (\text{E.3})$$

y

$$\mathbf{A}^{(-)} = (\mathbf{M}_{1,2}^A)^{-1} \left[\mathbf{M}_{1,1}^B \mathbf{B}^{(+)} - \mathbf{M}_{1,1}^A \mathbf{A}^{(+)} + \tilde{\mathbf{M}}_1^B \begin{pmatrix} \mathbf{B}^{(-)} \\ \mathbf{B} \end{pmatrix} \right]. \quad (\text{E.4})$$

Reemplazando (E.3) en (E.2) y reagrupando términos se llega a que la matriz $\mathbf{A}^{(-)}$ cumple con la expresión

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^{(-)} &= \left[\mathbf{M}_{2,2}^A - \tilde{\mathbf{M}}_2^B (\tilde{\mathbf{M}}_1^B)^{-1} \mathbf{M}_{1,2}^A \right]^{-1} \left[\tilde{\mathbf{M}}_2^B (\tilde{\mathbf{M}}_1^B)^{-1} \mathbf{M}_{1,1}^A - \mathbf{M}_{2,1}^A \right] \mathbf{A}^{(+)} \\ &\quad + \left[\mathbf{M}_{2,2}^A - \tilde{\mathbf{M}}_2^B (\tilde{\mathbf{M}}_1^B)^{-1} \mathbf{M}_{1,2}^A \right]^{-1} \left[\mathbf{M}_{2,1}^B - \tilde{\mathbf{M}}_2^B (\tilde{\mathbf{M}}_1^B)^{-1} \mathbf{M}_{1,1}^B \right] \mathbf{B}^{(+)} \end{aligned}, \quad (\text{E.5})$$

mientras que, al sustituir (E.4) en (E.2) tenemos

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \mathbf{B}^{(-)} \\ \mathbf{B} \end{pmatrix} &= \left[\tilde{\mathbf{M}}_2^B - \mathbf{M}_{2,2}^A (\mathbf{M}_{1,2}^A)^{-1} \tilde{\mathbf{M}}_1^B \right]^{-1} \left[\mathbf{M}_{2,1}^A - \mathbf{M}_{2,2}^A (\mathbf{M}_{1,2}^A)^{-1} \mathbf{M}_{1,1}^A \right] \mathbf{A}^{(+)} \\ &\quad + \left[\tilde{\mathbf{M}}_2^B - \mathbf{M}_{2,2}^A (\mathbf{M}_{1,2}^A)^{-1} \tilde{\mathbf{M}}_1^B \right]^{-1} \left[\mathbf{M}_{2,2}^A (\mathbf{M}_{1,2}^A)^{-1} \mathbf{M}_{1,1}^B - \mathbf{M}_{2,1}^B \right] \mathbf{B}^{(+)} \end{aligned}. \quad (\text{E.6})$$

Al expresar (E.5) y (E.6) en su forma matricial se obtienen las componentes de la matriz \mathbf{C}^A , descritas en (4.26).

Apéndice F

Los resultados más importantes de esta tesis fueron publicados en el artículo

C. Ramírez & L.A. Medina-Amayo (2017). Scattering matrix of arbitrary tight-binding Hamiltonians, *Annals of Physics*, 378, 303-316.

doi: 10.1016/j.aop.2017.01.015

el cual se puede consultar en el siguiente URL

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003491617300271?via%3Dihub>

Referencias

[Altland, 2010]

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

[Anghel, 2010]

Anghel, D. V. (2003). *Bravais Lattice Table*.

[Ashcroft, 1976]

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

[Can, 2014]

Can, C., Zhuo-Bin, L., Xiao-Liang, W., Xin-Bing, Z., & Wei-Qiang, H. (2014). Recent Advances in Inorganic Solid Electrolytes for Lithium Batteries. *Front. Energy Res.*, 2:25. doi:10.3389/fenrg.2014.00025

[Cormen, 2009]

Cormen, T., Leiserson, C., Rivest, R., & Stein, C. (2009). *Introduction to Algorithms* (3th edition ed.). USA: The MIT Press.

[Fink, 2006]

Fink, D., & Beaty, H. (2006). *Standard Handbook of Electrical Engineering* (15 ed.). New York: McGraw-Hill.

[Gellings, 1997]

Gellings, P., & Bouwmeester, H. (1997). *The CRC Handbook of Solid State Electrochemistry*. Boca Raton, Florida, USA: CRC Press.

[Griffiths, 2005]

Griffiths, D. (2005). *Introduction to Quantum Mechanics*. USA: Pearson Prentice Hall .

[Guinier, 1963]

Guinier, A. (1963). *X-Ray Diffraction In Crystals, Imperfect Crystals, and Amorphous Bodies*. San Francisco: W. H. Freeman and Co.

[Hahn, 2002]

Hahn, T. (2002). *International Tables for Crystallography, Volume A: Space Group Symmetry*. Berlin, New York: Springer-Verlag. doi:10.1107/97809553602060000100

[Hofmann, 2015]

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

[Hu, 2009]

Hu, C. C. (2009). *Modern Semiconductor Devices for Integrated Circuits* (1 ed.). USA: Pearson.

[Kittel, 2005]

Kittel, C. (2005). *Introduction to Solid State Physics* (8° ed.). E.U.A.: Jon Wiley & Sons, Inc.

[Mervyn, 2015]

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

[Miroshnichenko, 2005]

Miroshnichenko, A., & Kivshar, Y. (2005). Engineering Fano resonances in discrete arrays. *Physical Review E*, 72(5). doi: 10.1103/PhysRevE.72.056611

[Morris, 2007]

Morris, J. (2007). *A Survey of Materials Science: I. Structure*. Berkeley, California, USA: University of California.

[Mott, 1936]

Mott, N., & Jones, H. (1936). *The Theory of the Properties of Metals and Alloys*. London: Oxford University Press.

[Nazarov, 2009]

Nazarov, Y., & Blanter, Y. (2009). *Quantum Transport: Introduction to Nanoscience*. Cambridge: Cambridge University Press.

[Pathria, 2011]

Pathria, R. (2011). *Statistical Mechanics*. USA: Elsevier.

[Pokropivny, 2007]

Pokropivny, V., Lohmus, R., Hussainova, I., Pokropivny, A., & Vlassov, S. (2007). *Introduction in nanomaterials and nanotechnology*. Estonia: University of Tartu.

[Ramírez, 2013]

Ramírez, C., & Sánchez, V. (2013). Kubo conductivity of macroscopic systems with Fano defects for periodic and quasiperiodic cases by means of renormalization methods in real space. *physica status solidi (a)*, 2431-2438. doi:10.1002/pssa.201329283

[Ramírez, 2017]

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

- [Rumpf, 2011]
Rumpf, R. (2011). Improved formulation of scattering matrices for semi-analytical methods that is consistent with convention. *Prog. Electromagn. Res. B*, 35, 241-261.
- [Ryndyk, 2016]
Ryndyk, D. (2016). *Theory of Quantum Transport at Nanoscale: An Introduction*. Switzerland: Springer International Publishing. doi:10.1007/978-3-319-24088-6
- [Salgado, 2009]
Salgado, D. (2009). *Transporte Electrónico en Redes Hexagonales*. México: UNAM, Facultad de Ciencias.
- [Sánchez, 2004]
Sánchez, V., & Wang, C. (2004). Application of renormalization and convolution methods to the Kubo-Greenwood formula in multidimensional Fibonacci systems, *Physical Review B*, 70, 144207. doi: 10.1103/PhysRevB.70.144207
- [Sharma, 2013]
Sharma, G., Agarwala, A., & Bhattacharya, B. (2013). A fast parallel Gauss Jordan algorithm for matrix inversion using CUDA. *Computers and Structures* , 31-37.
- [Sólyom, 2008]
Sólyom, J. (2008). *Fundamentals of the Physics of Solids: Volume 2: Electronic Properties*. Berlin, New York: Springer-Verlag.
- [Stangel, 2013]
Stangel, A. (2013). *Wannier functions from Bloch Orbitals in Solids*. Sweden: Upsala University.
- [Suárez, 2002]
Suárez, J. (2002). *Solución al Problema de Tres Partículas Correlacionadas en una Cadena Lineal*. Puebla, México: BUAP, Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas.
- [Sutton, 2004]
Sutton, A. (2004). *Electronic Structure of Materials*. Oxford, United Kingdom: Oxford University Press.
- [Tang, 2005]
Tang, C. L. (2005). *Fundamentals of Quantum Mechanics: For Solid State Electronics and Optics*. New York, USA: Cambridge University Press.
- [Wang, 2014]

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

[Young, 1991]

Young, D. (1991). *Phase Diagrams of the Elements*. Berkeley: University of California Press.