



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

FACULTAD DE CIENCIAS

**DETERMINACIÓN DE ESTADOS LIGADOS EN SISTEMAS DE
AMARRE FUERTE POR EL MÉTODO RECURSIVO DE LA
MATRIZ DE DISPERSIÓN**

T E S I S

**QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:
FÍSICO**

P R E S E N T A:

RICARDO Yael DÍAZ BONIFAZ

DIRECTOR DE TESIS:

DR. CARLOS RAMÍREZ RAMOS



Ciudad Universitaria, CD. MX.

Abril, 2021



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, Sandra y Felipe.

Agradecimientos

A mi asesor, el *Dr. Carlos Ramírez Ramos*, por todo el apoyo y orientación que me ha brindado a lo largo de estos años. Agradezco enormemente sus enseñanzas, la oportunidad de trabajar con él y que me haya mostrado el valor de la calidez y amabilidad en el ambiente académico.

A mis padres, *Sandra y Felipe*, y mis hermanos, *Jesús y Roberto*, por apoyarme y acompañarme en todo momento. Por ser los modelos de perseverancia y resiliencia que siempre he necesitado.

A *Alondra, Arturo y Aída*, les agradezco con mucho cariño la confianza depositada en mí en los momentos que más me hacía falta. Gracias por todo su apoyo.

A *Martín y Mauricio*, por todos los momentos y conversaciones que le dieron color al día a día en la carrera.

A mis sinodales, *Dra. Renela María Valladares McNelis, Dr. Luis Antonio Pérez López, Dr. Chumin Wang Chen y Dra. Vicenta Sánchez Morales*, por permitirme enriquecer mi trabajo con sus valiosas aportaciones y observaciones.

Investigación realizada gracias al Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) de la UNAM IN116819. Agradezco a la DGAPA-UNAM la beca recibida.

Los cálculos realizados en esta tesis fueron hechos en la supercomputadora Miztli a través del proyecto LANCAD-UNAM-DGTIC-329.

Índice

Introducción	1
1. Estado Sólido	3
1.1 Redes cristalinas	3
1.1.1 Método de Wigner-Seitz	4
1.1.2 Espacio recíproco y 1ZB.....	5
1.2 Formalismo cuántico.....	5
1.3 Teorema de Bloch.....	7
1.4 Modelo de amarre fuerte.....	9
1.4.1 Funciones de Wannier	9
1.4.2 Sistemas de amarre fuerte	9
1.4.3 Estructura de bandas	11
1.5 Estados ligados y extendidos	13
2. Método recursivo de la matriz de dispersión (MRMD).....	17
2.1 Matriz de dispersión.....	17
2.2 Matriz de dispersión en sistemas de amarre fuerte	20
2.3 Acoplamiento de dispersores	23
2.4 Sistemas cuasi-unidimensionales infinitos (Q1D).....	26
2.5 Sistemas Q1D con defectos	29
3. Algoritmos para determinación de estados ligados	32
3.1 Obtención de estados ligados en sistemas dispersivos	32
3.2 Extensión a sistemas de amarre fuerte	34
3.3 Algoritmo de corte	35
3.4 Determinación numérica de energías de estado ligado.....	37
3.5 Algoritmo de refinamiento selectivo	40
3.6 Obtención de la función de onda	43

4. Resultados	48
4.1 Sistemas finitos	48
4.2 Consideración para estructuras infinitas	51
4.3 Sistemas Q1D con variación de sección transversal.....	52
Conclusiones	59

Introducción

El desarrollo tecnológico en la actualidad requiere de componentes electrónicos cada vez más pequeños y eficientes, lo que ha generado una tendencia constante de miniaturización en décadas recientes. Hemos llegado a un punto en la historia en el que existe una gran demanda de resultados en física que permitan caracterizar a dichos componentes, cuya escala es tal que los efectos cuánticos que previamente se omitían resultan de gran relevancia y deben ser considerados. Lo anterior ha llevado a plantear diferentes modelos que permitan integrar esos efectos cuánticos en la descripción de las propiedades de distintos materiales. Una aproximación que ha probado ser de gran utilidad en la caracterización de semiconductores es el modelo de amarre fuerte, que al combinarse con el teorema de Bloch ofrece una descripción del transporte de electrones en un semiconductor infinito y periódico.

La descripción anterior ofrece un buen punto de comienzo para resolver el problema. Sin embargo, la aproximación de un componente como un medio infinito y periódico supone una condición que difícilmente se cumplirá en la práctica. Por ejemplo, es razonable considerar que el material cuente con alguna impureza o defecto que rompa con las condiciones periódicas e invalide la descripción obtenida por el teorema de Bloch. Entre los posibles efectos de las impurezas en el medio se encuentra la creación de estados ligados. En el caso de transporte electrónico, la existencia de un estado ligado implica la acumulación de carga en una determinada región del medio que puede repercutir de forma importante en la conductividad.

En esta tesis se plantea una serie de condiciones para determinar energías asociadas a estados ligados haciendo uso del formalismo de la matriz de dispersión, además de proponer un método que integre las condiciones para hallar dichas energías. El primer capítulo constituye un marco teórico cuyo objetivo es explicar conceptos de gran utilidad para el entendimiento del método propuesto. El capítulo comienza estableciendo diversos conceptos utilizados en estado sólido entre los que se encuentran las definiciones de red de Bravais, espacio recíproco, primera zona de Brillouin, entre otras. Posteriormente, se introduce la ecuación de Schrödinger y se discute brevemente la interpretación probabilística de la misma. Seguido de esto se muestra el planteamiento del teorema de Bloch, la definición de las funciones de Wannier y se introduce el Hamiltoniano del modelo de amarre fuerte para después incluir un ejemplo que muestre el origen de las bandas de energía en un sistema infinito. El capítulo concluye con la definición de estados ligados, estados extendidos y un ejemplo de estado ligado generado por un defecto en un sistema infinito.

En el segundo capítulo se discute el papel de la matriz de dispersión en sistemas de amarre fuerte. Además, se describe el producto estrella de Redheffer que permite concatenar

estructuras de amarre fuerte en términos de sus matrices de dispersión y es la base del método recursivo propuesto en (Ramírez C. , Scattering Matriz of Arbitrary Tight Binding Hamiltonians, 2017). Este método permite obtener la matriz de dispersión de cualquier estructura de amarre fuerte a partir de matrices base a un bajo costo computacional. Al final del capítulo se introducen los canales abiertos y cerrados en estructuras infinitas y el papel que estos juegan para que el método recursivo sea aplicable a sistemas infinitos.

Finalmente, en el tercer capítulo se propone modelar sistemas finitos e infinitos con defectos a partir de dos diferentes subsistemas que al fusionarse den origen al sistema original. A partir de las matrices de dispersión de los subsistemas, se establecen las condiciones que estas deberán cumplir para una energía dada para que dicha energía esté asociada a un estado ligado. Posteriormente, se plantea una serie de algoritmos que permiten integrar las condiciones establecidas para hallar estados ligados y obtener las funciones de onda asociadas a tales energías. Se incluye además una comparación de las energías y funciones de onda obtenidas por los métodos propuestos con respecto de los resultados obtenido del Hamiltoniano de amarre fuerte para el caso finito. El capítulo concluye mostrando diversas funciones de onda obtenidas para una nanocinta rectangular con un defecto de variación de sección transversal, mostrando que el comportamiento de dichas funciones es, en efecto, correspondiente a un estado ligado.

Capítulo 1

Estado Sólido

1.1 Redes cristalinas

Una forma de definir a un sólido es como “una gran colección de átomos que se atraen entre sí de modo que dichos átomos queden confinados a un volumen específico en el espacio” (Patterson, 2007). Dentro de la física del estado sólido se pone especial atención en un tipo particular de sólido llamado cristal, en los cuales se puede identificar una estructura periódica. La razón por la que se han estudiado exhaustivamente estos sistemas es porque, gracias a la periodicidad, se han desarrollado modelos que permiten conocer algunas de sus propiedades y aprovecharlas en el desarrollo y optimización de componentes tecnológicos. Cabe mencionar que, aunque exista periodicidad en la estructura, esta deberá extenderse por todo el material para poder hablar de un cristal. Otra posibilidad es que la periodicidad se extienda solo en una región determinada del material formando granos. Si el tamaño de los granos es suficientemente pequeño se tendrá un material amorfo con propiedades físicas diferentes a las de un cristal (Dekker, 1958).

Un cristal consiste en una base de átomos o moléculas que se repite a sí misma en un arreglo infinito de puntos. Dicho arreglo deberá estar formado por puntos en el espacio que sean totalmente indistinguibles entre sí. Es decir, el arreglo y orientación de los puntos de la red deberán ser los mismos independientemente del punto de la red desde el cual se observe (Ashcroft, 1976). A la red de puntos que satisface la condición anterior se le denomina red de Bravais y se puede definir matemáticamente como el conjunto de puntos en el espacio que satisfacen la relación (Kittel, 2005)

$$\mathbf{R} = \sum_{i=1}^d n_i \mathbf{a}_i, \quad (1.1)$$

en donde d representa la dimensión del sistema ($d=2$ para sistemas bidimensionales y $d=3$ para sistemas tridimensionales), los vectores \mathbf{a}_i forman una base para la red y las n_i representan enteros cualesquiera. En otras palabras, cualquier punto de una red de Bravais puede escribirse como una combinación lineal entera de los vectores \mathbf{a}_i . Cabe resaltar que se necesitan d vectores linealmente independientes para definir la base de una red de Bravais de dimensión d .

Si bien la ecuación (1.1) proporciona una definición útil y precisa para una red de Bravais, existen diferentes formas de elegir a los vectores \mathbf{a}_i , teniendo 5 posibilidades en dos dimensiones, o 14 posibilidades en redes de tres dimensiones. Si a cada punto de la red de Bravais se asocia una única partícula, al cristal se le llama un cristal de Bravais. En caso de tener más de una partícula por punto de la red, decimos que se tiene una red de Bravais con base (Quinn, 2018). En este último caso se requerirá de un conjunto de vectores base para indicar la posición de las partículas con respecto de un punto cualquiera de la red de Bravais.

El paralelepípedo formado por los vectores \mathbf{a}_i satisface que al repetirse a sí mismo se reproduce al cristal completo, por lo que se le denomina celda unitaria. Si los vectores se eligen de tal forma que el paralelepípedo formado contiene a un único punto de la red entonces se tiene una celda unitaria primitiva y a dichos vectores se les denomina vectores primitivos de la red (Simon, 2013). Al igual que con las bases, la forma en la cual se puede construir una celda unitaria primitiva no es única. En particular, es posible obtener la celda unitaria de volumen mínimo a partir del método de Wigner Seitz. A continuación, se explica dicho método.

1.1.1 Método de Wigner-Seitz

El algoritmo para construir la celda unitaria de Wigner-Seitz de una red de Bravais consiste en tomar un punto cualquiera de la red y trazar los segmentos de recta que unen a dicho punto con sus vecinos cercanos. En el caso bidimensional deberá trazarse la bisectriz de dichos segmentos y el área encerrada por las bisectrices será la celda de Wigner-Seitz. Para el caso tridimensional, la celda estará dada por el volumen contenido dentro de los planos perpendiculares a los segmentos de recta que los corten en el punto medio. En la figura 1c se puede observar la celda unitaria de Wigner-Seitz para una red triangular. La celda unitaria de Wigner-Seitz corresponde a la región del espacio cuyo punto de la red más cercano es el punto a partir del cual se construyó la celda (Simon, 2013).

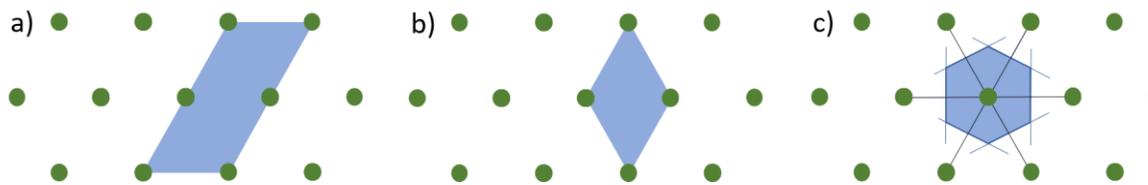


Figura 1: Ejemplos de celdas unitarias para una red triangular. a) muestra una celda unitaria arbitraria de la red, b) corresponde a una celda unitaria primitiva (que contiene un único punto de la red) y c) es la celda unitaria de Wigner-Seitz para la misma red.

1.1.2 Espacio recíproco y 1ZB

La forma en la cual se determina la estructura de un cristal no es a través de observación directa sino a partir del patrón de difracción de rayos X incidentes sobre una muestra cristalina. El estudio de la transmisión de ondas electromagnéticas y acústicas en un cristal se hace a través de la red recíproca. Esta red se define como la colección de puntos \mathbf{G} que satisfacen $\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = 2\pi n$, en donde $n \in \mathbb{Z}$ y \mathbf{R} representa cualquier vector de la red de Bravais definida en (1.1), a la que nos referiremos a partir de ahora como red real. Al igual que la red real, la red recíproca puede expresarse como combinación lineal entera de vectores \mathbf{b}_i , que para tres dimensiones pueden calcularse a partir de los vectores primitivos de la red real de la siguiente manera (Simon, 2013)

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

La red recíproca corresponde a la red de Bravais asociada al cristal en el espacio de Fourier. El hecho de que cada punto del espacio de Fourier está asociado a un vector de onda es lo que hace a la red recíproca ideal para la descripción de ondas en el cristal (Kittel, 2005).

Las celdas unitarias primitivas en el espacio recíproco son de gran importancia para el estudio de la propagación de ondas en un cristal ya que, debido a su periodicidad, los vectores de onda son equivalentes bajo traslaciones por vectores de la red recíproca. Es decir, el vector de onda \mathbf{k} es físicamente equivalente al vector de onda $\mathbf{k} + \mathbf{G}$. Esto permite definir una zona de Brillouin como aquella que contiene cada uno de los vectores de onda \mathbf{k} físicamente diferentes sin repeticiones (Simon, 2013). Eligiendo un punto de la red recíproca como origen es posible definir la *primera zona de Brillouin (o 1ZB)* como la región en el espacio recíproco cuyo punto más cercano de la red es el origen. Es decir, la 1ZB será la celda unitaria primitiva de Wigner-Seitz alrededor del origen. Al volumen de la primera zona de Brillouin se le denotará con Ω_{ZB} . La segunda zona de Brillouin será la colección de puntos en el espacio recíproco cuyo segundo punto más cercano sea el origen. Análogamente, la n-ésima zona de Brillouin será aquella cuyo n-ésimo punto más cercano de la red recíproca sea el origen.

1.2 Formalismo cuántico

No es casualidad que el desarrollo de la física del estado sólido haya sido precedido y acompañado por la mecánica cuántica. El estudio de un cristal se lleva a partir del análisis de sus componentes en un nivel atómico y molecular, así como la forma en la que estos componentes se relacionan dentro de un arreglo periódico. Dada la escala del problema en cuestión, la descripción más adecuada para este se obtiene a partir de la mecánica cuántica.

En mecánica clásica, la solución para el movimiento de una partícula sometida a un potencial consiste en conocer la posición y velocidad de la partícula en función del tiempo, a partir de la segunda ley de Newton. En cambio, en mecánica cuántica la solución a este mismo problema consiste en obtener la función de onda de la partícula. La función de onda Ψ será aquella que satisfaga la ecuación de Schrödinger (Saleem, 2015)

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (1.3)$$

en donde \hat{H} es el Hamiltoniano asociado al potencial $V(\mathbf{r}, t)$ y está dado por

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}, t). \quad (1.4)$$

En las ecuaciones (1.3) y (1.4) \hbar representa la constante reducida de Planck, $i = \sqrt{-1}$ es la unidad compleja, \mathbf{r} es la posición en el espacio, t el tiempo y m corresponde a la masa de la partícula.

Para un potencial independiente de tiempo, $V(\mathbf{r})$, la ecuación de Schrödinger puede escribirse como una función separable. Para tal caso la solución de la ecuación se puede escribir de la forma $\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar}$, en donde la parte espacial de la función de onda satisface la ecuación

$$H\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (1.5)$$

y E es la energía. A la ecuación (1.5) se le llama ecuación de Schrödinger estacionaria o independiente del tiempo y es de gran utilidad ya que las soluciones generales de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo pueden escribirse como combinación lineal de las soluciones estacionarias (Griffiths, 1995).

La función de onda asociada a una partícula no proporciona su posición o velocidad exacta, a diferencia del caso clásico. En cambio, esta aporta información acerca de la probabilidad $P(\mathbf{r} + d\mathbf{r}, t)$ de encontrar a la partícula en una región específica del espacio $\mathbf{r} + d\mathbf{r}$. La expresión a partir de la cual se obtiene la probabilidad es

$$P(\mathbf{r} + d\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r, \quad (1.6)$$

en donde $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ funciona como una densidad de probabilidad.

La figura 2 muestra un ejemplo de la interpretación probabilística de la función de onda de una partícula en el caso unidimensional ($\Psi = \Psi(x, t)$). El área sombreada bajo la curva representa la probabilidad de encontrar a la partícula entre x_0 y $x_0 + dx$.

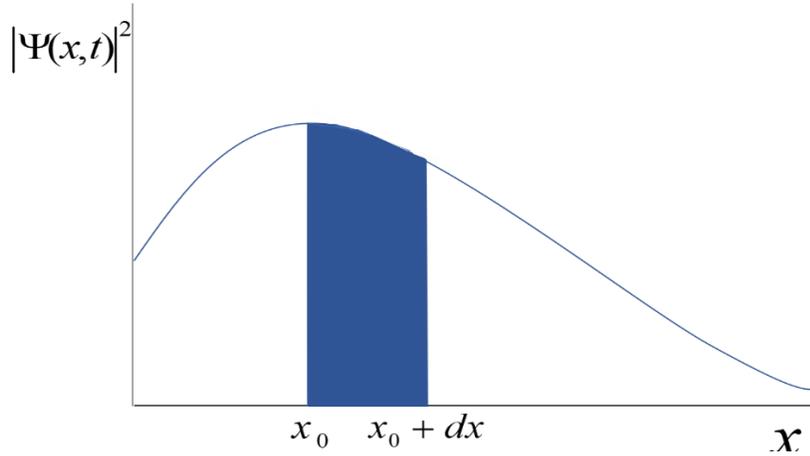


Figura 2: Gráfica de la norma de la función de onda de una partícula con respecto de la posición.

Para que la probabilidad obtenida a partir de la ecuación (1.6) tenga sentido, es necesario que al realizar la integral en todo el espacio el valor obtenido sea 1. Esto porque la partícula deberá encontrarse en algún punto del espacio. A esta condición impuesta sobre Ψ se le denomina condición de normalización y puede escribirse como

$$1 = \int_{\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3 r \quad (1.7)$$

Más adelante veremos la forma en la que esta condición de normalización se ve modificada dentro de un cristal al tenerse condiciones periódicas en el potencial.

1.2 Teorema de Bloch

Un caso de especial interés en el cálculo de la función onda de una única partícula dentro de un cristal es aquel en el que se considera a ésta sujeta a un potencial con la misma periodicidad de la red (McKelvey, 1966). Este caso corresponde a que el potencial en el Hamiltoniano (1.4) cumpla con la condición

$$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R}), \quad (1.8)$$

con \mathbf{R} algún vector de la red real. Las soluciones a tal Hamiltoniano son tales que satisfacen

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.9)$$

En esta ecuación, \mathbf{k} representa vectores en el espacio recíproco, \mathbf{r} es el vector de posición y $u_{\mathbf{k}}$ satisface la misma condición de periodicidad que el potencial. Las funciones $\psi_{\mathbf{k}}$ son conocidas como funciones de Bloch. A este resultado se le denomina teorema de Bloch (Ashcroft, 1976) y es un resultado de gran importancia en estado sólido debido a que la periodicidad de las condiciones dentro de un cristal es representable a partir de un potencial de la forma (1.8).

Una forma equivalente de enunciar el teorema de Bloch es decir que las funciones de onda del Hamiltoniano periódico son tales que

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.10)$$

Notando que cualquier vector \mathbf{k} puede escribirse como $\mathbf{k} = \mathbf{k}' + \mathbf{G}$ con \mathbf{G} un vector de la red recíproca y \mathbf{k}' en la primera zona de Brillouin, que además $\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = 2\pi m$ con m entero, la ecuación (1.10) puede reescribirse como

$$\psi_{\mathbf{k}' + \mathbf{G}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}} \psi_{\mathbf{k}' + \mathbf{G}}(\mathbf{r}). \quad (1.11)$$

Si se etiqueta con un entero n a cada uno de los posibles vectores \mathbf{G} , que puede ser cualquiera de los vectores de la red recíproca, entonces es posible expresar el teorema de Bloch en términos solamente de \mathbf{k} dentro de la primera zona de Brillouin como una expresión de la forma

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.12)$$

El poder en la expresión (1.12) recae en que permite mostrar las soluciones para cualquier vector \mathbf{k} de la red recíproca como una de las n diferentes soluciones para \mathbf{k} dentro de la primera zona de Brillouin. En particular, para cualquier \mathbf{k} en la 1ZB la energía tendrá una infinidad numerable de soluciones, es decir, las soluciones para la energía serán de la forma $E_n(\mathbf{k})$ dentro de la 1ZB. A esta representación de la energía como función de los vectores de onda de la primera zona de Brillouin se le denomina *representación de zona reducida* (McKelvey, 1966).

Cabe añadir que las funciones de Bloch no son normalizables en el sentido de la ecuación (1.7). No obstante, dado que el cristal se reproduce a partir de una celda unitaria entonces la función de onda deberá ser tal que se reproduzca a si misma salvo un cambio de fase dentro de dicha celda unitaria. Esto conduce a que la norma de la función de onda integrada a lo largo de la celda unitaria sea un valor constante, dando origen a la condición de normalización

$$\frac{1}{\Omega} \int_{c.u.} |\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 d^3r = 1, \quad (1.13)$$

con la integral corriendo a lo largo de la celda unitaria y Ω siendo el volumen de la celda.

1.4 Modelo de amarre fuerte

1.4.1 Funciones de Wannier

Las condiciones periódicas en la red permiten expresar a la función de onda $\psi_{nk}(\mathbf{r})$ de un electrón libre dentro del cristal a partir de la serie de Fourier (Jones, 1973)

$$\psi_{nk}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} w_{\mathbf{R}}^n(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}, \quad (1.14)$$

en donde a las funciones $w_{n\mathbf{R}}(\mathbf{r})$ se les denomina *funciones de Wannier* y están dadas por la expresión

$$w_{n\mathbf{R}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\Omega_{\text{ZB}}} \int_{\Omega_{\text{ZB}}} \psi_{nk}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}. \quad (1.15)$$

En notación de Dirac, la ecuación (1.14) puede reescribirse como

$$|\psi_{nk}\rangle = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} |w_{n\mathbf{R}}\rangle, \quad (1.16)$$

donde \mathbf{R} toma todos los posibles valores de la red real.

Las funciones de Wannier forman un set completo de funciones ortogonales, es decir, que satisfacen la condición $\langle w_{n\mathbf{R}_0} | w_{n\mathbf{R}} \rangle = \delta_{n'n} \delta_{\mathbf{R}\mathbf{R}_0}$ y que conforman una base alternativa para describir la función de onda del electrón en el cristal (Ashcroft, 1976). Las funciones de Wannier tienen la propiedad de estar localizadas alrededor de cada punto de la red real, decayendo exponencialmente al alejarse de este punto. Por ello, su comportamiento es similar al de orbitales atómicos (Marder, 2011).

1.4.2 Sistemas de amarre fuerte

La representación de la función de onda del electrón dentro del cristal en términos de las funciones de Wannier adquiere una interpretación física poderosa en el caso en el que los electrones se encuentran muy fuertemente ligados a los núcleos ubicados en cada uno de los sitios de la red. En tal caso, es posible aproximar a la función de onda de un electrón en la red a partir de orbitales atómicos que sean solución para el caso de un átomo libre. A esta aproximación se le conoce como *modelo de amarre fuerte* y es aplicable cuando el traslape de los orbitales atómicos centrados en los diferentes puntos de la red es pequeño y pueda considerarse como una corrección a la descripción de átomo libre (Ashcroft, 1976). En términos de las funciones de Wannier, tendremos que el modelo de amarre fuerte será aquel

en el que la diferencia entre las funciones $w_{n\mathbf{R}}(\mathbf{r})$ y los orbitales del átomo libre sea tan pequeña que las funciones de Wannier puedan interpretarse como orbitales atómicos perturbados.

Aplicando el Hamiltoniano a la expresión de la función de onda (1.16) y proyectando sobre una función de Wannier correspondiente a un punto particular de la red real \mathbf{R}_0 entonces se tiene que

$$\langle w_{n\mathbf{R}_0} | \hat{H} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \langle w_{n\mathbf{R}_0} | \hat{H} | w_{n\mathbf{R}} \rangle, \quad (1.17)$$

en donde

$$\langle w_{n\mathbf{R}_0} | \hat{H} | w_{n\mathbf{R}} \rangle = \int w_{n\mathbf{R}_0}^*(\mathbf{r}) \hat{H} w_{n\mathbf{R}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (1.18)$$

con la integral desarrollándose a lo largo de todo el espacio. Por otro lado, por la ecuación de eigenvalores (1.5) y la hermiticidad del Hamiltoniano sabemos que

$$\langle w_{n\mathbf{R}_0} | \hat{H} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle = E_{n\mathbf{k}} \langle w_{n\mathbf{R}_0} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle. \quad (1.19)$$

Reescribiendo (1.19) en términos de la ecuación (1.17) se obtiene

$$\langle w_{n\mathbf{R}_0} | \hat{H} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle = E_{n\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \langle w_{n\mathbf{R}_0} | w_{n\mathbf{R}} \rangle. \quad (1.20)$$

Ahora, la ortogonalidad de las funciones de Wannier implica que $\langle w_{n\mathbf{R}_0} | w_{n\mathbf{R}} \rangle = \delta_{\mathbf{R}\mathbf{R}_0}$, por lo que la expresión (1.20) se reduce a

$$\langle w_{n\mathbf{R}_0} | \hat{H} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle = E_{n\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_0}. \quad (1.21)$$

Finalmente, usando (1.16) tenemos que

$$E_{n,\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}-\mathbf{R}_0)} \langle w_{n\mathbf{R}_0} | \hat{H} | w_{n\mathbf{R}} \rangle, \quad (1.22)$$

con \mathbf{k} en la primera zona de Brillouin.

A la integral correspondiente a (1.18) para $\mathbf{R} = \mathbf{R}_0$ se le denomina energía de sitio $\varepsilon^{(n)}$, mientras que en el caso con $\mathbf{R} \neq \mathbf{R}_0$ a dicha integral se le conoce como *integral de salto* entre \mathbf{R} y \mathbf{R}_0 y se le denota por $t_{\mathbf{R}\mathbf{R}_0}^{(n)}$. Esto permite escribir la relación de dispersión (1.22) de la forma

$$E_n(\mathbf{k}) = \varepsilon^{(n)} + \sum_{\mathbf{R} \neq \mathbf{R}_0} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}-\mathbf{R}_0)} t_{\mathbf{R}\mathbf{R}_0}^{(n)}. \quad (1.23)$$

1.4.3 Estructura de bandas

Como un ejemplo del modelo de amarre fuerte, consideremos una cadena unidimensional de átomos separados por una distancia a . Tomemos el caso donde la energía de sitio vaya alternándose entre ε_1 y ε_2 . Consideremos además integrales de salto de valor constante t entre primeros vecinos y nulas para el resto de los casos. Notemos que en este caso la periodicidad del sistema se tiene cada que se recorren dos sitios de la cadena, es decir, cuando se recorre una distancia $2a$. Debido a esto, la celda unitaria deberá contener a dos sitios consecutivos de la cadena y será conveniente etiquetar a las funciones de Wannier asociadas a cada elemento de la cadena de la forma $|n, i\rangle$, en donde $i = 1, 2$ indica si se trata del primer o segundo sitio dentro de la celda y n indica la celda.



Figura 3: Cadena unidimensional con energías de sitio alternantes ε_1 y ε_2 e integral de salto t .

El Hamiltoniano de amarre fuerte asociado a este sistema se escribe de la forma

$$\hat{H} = \sum_n \left[\begin{array}{c} \varepsilon_1 |n, 1\rangle \langle n, 1| + \varepsilon_2 |n, 2\rangle \langle n, 2| \\ + t (|n, 1\rangle \langle n, 2| + |n, 2\rangle \langle n, 1| + |n+1, 1\rangle \langle n, 2| + |n, 2\rangle \langle n+1, 1|) \end{array} \right] \quad (1.24)$$

Además, por el teorema de Bloch tenemos que $|n+1, 1\rangle = e^{i2ka} |n, 1\rangle$, Sustituyendo lo anterior en el Hamiltoniano y agrupando términos semejantes, la ecuación (1.24) se puede reescribir como

$$\hat{H} = \sum_n \left[\begin{array}{c} \varepsilon_1 |n, 1\rangle \langle n, 1| + \varepsilon_2 |n, 2\rangle \langle n, 2| \\ + t \left[(1 + e^{2ika}) |n, 1\rangle \langle n, 2| + (1 + e^{-2ika}) |n, 2\rangle \langle n, 1| \right] \end{array} \right]. \quad (1.25)$$

Por otro lado, recordemos que las funciones de Wannier forman una base completa, lo que garantiza que las eigenfunciones del Hamiltoniano puedan escribirse como combinación lineal de dichas funciones. Es decir, de la forma

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_{n,1} |n, 1\rangle + c_{n,2} |n, 2\rangle. \quad (1.26)$$

A partir de las ecuaciones (1.25) y (1.26) podemos calcular $\hat{H} |\Psi\rangle$ y se obtiene que

$$\hat{H} |\Psi\rangle = \sum_n c_{n,1} \varepsilon_1 |n, 1\rangle + c_{n,2} \varepsilon_2 |n, 2\rangle + c_{n,2} t (1 + e^{2ika}) |n, 1\rangle + c_{n,1} t (1 + e^{-2ika}) |n, 2\rangle. \quad (1.27)$$

Agrupando términos se obtiene que

$$\hat{H}|\Psi\rangle = \sum_n \left(c_{n,1}\varepsilon_1 + c_{n,2}t(1 + e^{2ika}) \right) |n,1\rangle + \left(c_{n,2}\varepsilon_2 + c_{n,1}t(1 + e^{-2ika}) \right) |n,2\rangle. \quad (1.28)$$

Para que la ecuación (1.28) sea compatible con que $|\Psi\rangle$ sea solución de la ecuación de onda $\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ y debido a la independencia lineal de las funciones de Wannier, los coeficientes de la combinación lineal de (1.26) deberán satisfacer las condiciones

$$\begin{aligned} Ec_{n,1} &= \varepsilon_1 c_{n,1} + t c_{n,2} (1 + e^{i2ka}) \quad \text{y} \\ Ec_{n,2} &= \varepsilon_2 c_{n,2} + t c_{n,1} (1 + e^{-i2ka}). \end{aligned} \quad (1.29)$$

Del sistema de ecuaciones (1.29) se puede despejar el cociente de coeficientes $c_{n,2}/c_{n,1}$ de ambas ecuaciones y, tras igualarlas se obtiene la ecuación

$$(E - \varepsilon_1)(E - \varepsilon_2) = t^2 (1 + e^{i2ka})(1 + e^{-i2ka}). \quad (1.30)$$

La ecuación (1.30) corresponde a la relación de dispersión del sistema y, al ser una ecuación cuadrática en la energía, lleva a dos diferentes soluciones dadas por

$$E = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2 \pm \sqrt{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + 8t^2(1 + \cos(2ka))}}{2}. \quad (1.31)$$

Al graficarse las soluciones dadas por (1.31) para valores de $\varepsilon_1 = 2$ y $\varepsilon_2 = 3$ como función de k en el esquema de zona reducida, se obtienen dos curvas en donde cada una de ellas corresponde a un intervalo diferente de energías. A los intervalos de energías asociados a cada una de las soluciones se les denomina *bandas de energía*. La región sombreada en la gráfica corresponde al intervalo de energías que separa a las bandas, por lo que a este intervalo se le conoce como *brecha energética*. Si bien la figura 4 se obtuvo a partir de un sistema específico, la obtención de bandas y brechas de energía es un resultado muy común en estado sólido y su estudio resulta en una herramienta de gran utilidad para modelar propiedades físicas.

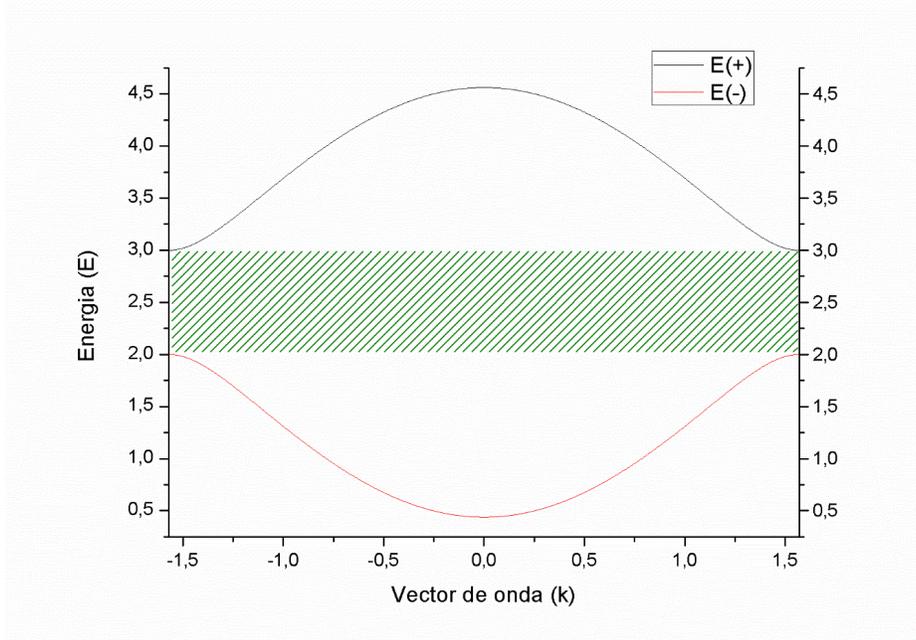


Figura 4: Esquema de zona reducida de las soluciones obtenidas para la energía asociada al ejemplo de la cadena unidimensional con energía de sitio alternante.

1.5 Estados ligados y extendidos

En las pasadas secciones hemos trabajado con diferentes herramientas para hallar la función de onda de una partícula en un sistema de amarre fuerte. Sin embargo, queda pendiente aún discutir la utilidad que tiene la función de onda y qué información podemos obtener de la partícula a partir de ella. Por lo visto anteriormente sabemos que la función de onda puede interpretarse como una densidad de probabilidad y nos permite calcular la probabilidad de hallar a la partícula en una determinada región del espacio haciendo uso de la ecuación (1.6). Para que la función de onda pueda interpretarse de esta manera debe ser tal que al integrarse en todo el espacio la probabilidad de hallar a la partícula sea 1, es decir, debe cumplir la condición de normalización (1.7). Dado que las funciones de onda pueden ser en general no normalizables, podemos clasificar a las funciones de onda dependiendo de si satisfacen la condición (1.7). Ambos casos poseen una interpretación física que discutiremos a continuación.

Una función de onda normalizable deberá cumplir con ser cuadráticamente integrable de modo que la integral involucrada en la ecuación (1.6) sea convergente. Para que esto último ocurra es necesario que la amplitud de la función sea diferente de cero en una determinada región del espacio y tienda rápidamente a cero al alejarse de dicha región. Bajo la interpretación probabilística, que es consistente para este caso, lo anterior implica que la probabilidad de hallar a la partícula es tal que podemos considerarla prácticamente contenida

en una determinada región del espacio. Debido a esto, decimos que las funciones de onda normalizables corresponden a *estados ligados*.

Por otro lado, para las funciones no normalizables resulta imposible asignar una densidad de probabilidad como función de la posición, por lo que en general la partícula tiene probabilidad de encontrarse en cualquier punto del espacio. Debido a esto, se dice que las funciones de este tipo corresponden a *estados extendidos* o *dispersivos*. En los siguientes capítulos daremos a los estados extendidos una interpretación de ondas viajeras sometidas a potenciales dispersivos y estudiaremos las condiciones bajo las cuales se pueden obtener estados ligados a partir de estados dispersivos en estructuras de amarre fuerte.

Un ejemplo de estado extendido que resulta de gran importancia para el presente trabajo es la función de onda periódica obtenida en la ecuación (1.12). A este tipo de soluciones las llamaremos *ondas de Bloch* y, como hemos visto, se obtienen aplicando el teorema de Bloch a un sistema infinito y periódico. A continuación, revisaremos un ejemplo en el que un defecto que rompe la periodicidad de un sistema infinito tiene como consecuencia la creación de un estado ligado.

Ejemplo de estado ligado generado por defecto

Consideremos una cadena de sitios con energía de sitio nula que se encuentran separados por una distancia a y unidos por integrales de salto de valor constante t entre primeros vecinos. Como este sistema es periódico e infinito el teorema de Bloch garantiza que las funciones de onda asociadas serán ondas de Bloch, es decir, estados extendidos. Una forma de introducir un defecto en este sistema es considerando a un único sitio con energía de sitio $\varepsilon \neq 0$. Este defecto, al que denominamos *defecto de sitio*.

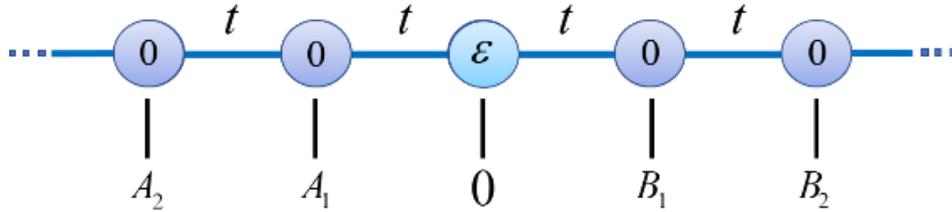


Figura 5: Cadena de amarre fuerte con defecto de sitio.

Una posible manera de enumerar a los sitios de la cadena es asignando valores A_n a los sitios a la izquierda del defecto y B_n a los que se encuentran a la derecha, dejando al sitio del defecto el valor $n = 0$. La enumeración de los sitios se puede observar en la figura 5. Luego, cualquier eigenfunción del sistema puede expresarse en términos de funciones de Wannier de la forma

$$|\psi\rangle = c|0\rangle + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n |A_n\rangle + b_n |B_n\rangle), \quad (1.32)$$

en donde $|A_n\rangle$, $|B_n\rangle$ y $|0\rangle = |A_0\rangle = |B_0\rangle$ corresponden a las funciones de Wannier de los sitios A_n , B_n y 0 respectivamente. Por otro lado, el Hamiltoniano de amarre fuerte del sistema estará dado por

$$\hat{H} = \varepsilon |0\rangle + t \sum_{n=0}^{\infty} (|A_n\rangle\langle A_{n+1}| + |A_{n+1}\rangle\langle A_n| + |B_n\rangle\langle B_{n+1}| + |B_{n+1}\rangle\langle B_n|). \quad (1.33)$$

Para comenzar a abordar el problema comencemos por considerar la siguiente proyección

$$\langle A_n | \hat{H} | \psi \rangle = \varepsilon_n a_n + t(a_{n+1} + a_{n-1}), \quad (1.34)$$

Si ψ es una eigenfunción del sistema entonces deberá cumplir con la ecuación de eigenvalores $\hat{H} | \psi \rangle = E | \psi \rangle$, por lo que la proyección calculada en (1.34) es a su vez

$$\langle A_n | \hat{H} | \psi \rangle = E \langle A_n | \psi \rangle = E a_n. \quad (1.35)$$

Recordando que $\varepsilon_n = \delta_{n,0}$ tenemos que al igualar las ecuaciones (1.34) y (1.35) para $n \neq 0$ se obtiene la siguiente relación

$$-E a_n + t(a_{n+1} + a_{n-1}) = 0. \quad (1.36)$$

Si el sistema fuera periódico, sería posible hacer uso del teorema de Bloch para relacionar los coeficientes a_n , a_{n-1} y a_{n+1} a través de exponenciales complejas y obtener una relación de dispersión a partir de (1.36). Como este no es el caso debido al defecto de sitio, consideremos una propuesta más general de la forma $a_{n+1} = \lambda a_n$, en donde λ es un parámetro a determinar. Bajo esta propuesta, la expresión (1.36) puede reescribirse como

$$[-E + t(\lambda + \lambda^{-1})] a_n = 0. \quad (1.37)$$

Dado que en general el coeficiente a_n puede ser diferente de cero, para que la relación (1.37) se cumpla el término en paréntesis deberá ser cero. Luego, al multiplicar la ecuación por λ se tiene la siguiente ecuación cuadrática

$$\lambda^2 - \lambda \frac{E}{t} + 1 = 0. \quad (1.38)$$

La ecuación (1.38) no restringe la norma del coeficiente λ , siendo esta una diferencia fundamental con respecto del teorema de Bloch en el que el coeficiente es siempre una fase unitaria. Para explorar los posibles valores que puede tomar λ podemos redefinir al coeficiente como una exponencial de la forma $\lambda = e^{a(p+ik)} = e^{pa} e^{ika}$. En tal caso, el coeficiente de amplitud a_n se relaciona con el coeficiente $a_0 = c$ de la forma

$$|a_n| = e^{npa} |c| \quad (1.39)$$

De aquí se puede observar para $p = 0$ se tiene que λ es simplemente una fase compleja como en el teorema de Bloch, siendo esta una posible solución. Por otro lado, si $p > 0$ el comportamiento la norma de los coeficientes de amplitud diverge a medida que n tiende a infinito, por lo que no representa una solución física del problema. Finalmente, si $p < 0$ lo

que se tiene es un comportamiento en el que la norma de los coeficientes tiende a cero a medida que n crece. Este último caso resulta de gran interés, ya que corresponde a un estado en el que la probabilidad de hallar a la partícula en el n -ésimo sitio de la cadena decae exponencialmente al aumentar n . Esto se traduce en que la función de onda está restringida a una región específica de la cadena que contiene al defecto, es decir, se tiene un estado ligado.

Capítulo 2

Método recursivo de la matriz de dispersión (MRMD)

Hemos visto hasta el momento que en un sistema perfectamente periódico la función de onda asociada a los electrones es a su vez periódica y se extiende por todo el sistema. Más aún, a partir del modelo de amarre fuerte hemos encontrado bandas de energía que corresponden a los posibles estados extendidos que pueden ocupar los electrones cuando estos se encuentran fuertemente ligados a los átomos de la red (como en un semiconductor). No obstante, el problema se torna mucho más complejo en el caso de sistemas en los que no se tiene una periodicidad completa tal como se observó en el ejemplo del defecto de sitio para el que, además de una banda de energía, encontramos un estado localizado fuera de dicha banda. Para abordar sistemas infinitos no periódicos es necesario realizar modificaciones sobre los métodos que hemos presentado hasta ahora. Una posibilidad para tratar sistemas más generales es considerar sistemas que sean periódicos salvo por una región particular del espacio, en cuyo caso a la región que rompe con la periodicidad se le puede considerar como una región de dispersión que provocará que los electrones que incidan en ella la atraviesen o se reflejen con cierta probabilidad. Estas probabilidades de transmisión o reflexión se pueden escribir a partir de matrices de dispersión que caracterizan a la región de dispersión. En este capítulo hablaremos de esta aproximación. Hablaremos también de la forma en la cual se puede obtener la matriz de dispersión de un sistema a partir de la matriz de dispersión de los subsistemas que lo conforman, a lo que se le conoce como el método recursivo de la matriz de dispersión (MRMD).

2.1 Matriz de dispersión

Consideremos un potencial unidimensional constante de valor V_0 en todo el espacio excepto en el intervalo comprendido entre 0 y x_0 , en donde se tiene un potencial arbitrario dado por $V(x)$. A la región en donde el potencial no es constante la llamamos región de dispersión. Tomemos ahora una onda incidente desde la izquierda con amplitud A y número de onda k , como se muestra en la figura 6A. Para una energía E dada el número de onda correspondiente será

$$k = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}. \quad (2.1)$$

Al incidir, la onda podrá transmitirse o reflejarse con cierta probabilidad que será determinada por la forma del potencial, lo que provocará que una porción de la onda sea transmitida con amplitud tA y otra sea reflejada con amplitud rA . A los coeficientes r y t se les denomina amplitudes de reflexión y transmisión. Como las ondas salientes pueden tener una fase con respecto de las entrantes, r y t son en general números complejos que contienen la información asociada a la fase de las ondas salientes. Además, por conservación de la probabilidad, las amplitudes r y t deberán cumplir con la condición

$$|t|^2 + |r|^2 = 1. \quad (2.2)$$

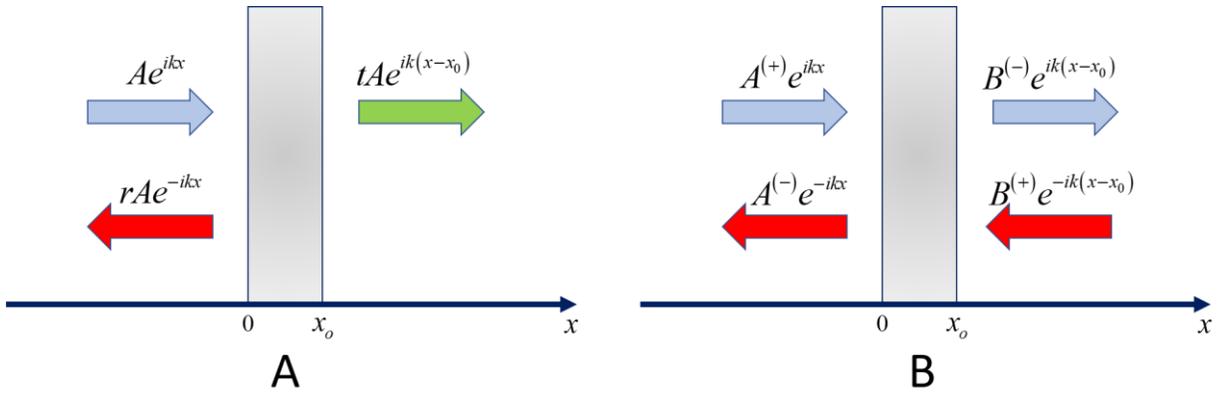


Figura 6: A) Dispersión unidimensional de onda incidente por la izquierda. B) Dispersión unidimensional de ondas incidentes por ambos lados.

La figura 6B corresponde a una repetición del razonamiento anterior, pero ahora considerando ondas incidentes por ambos lados, en donde la onda que incide desde la izquierda lo hace con una amplitud $A^{(+)}$ y la que incide desde la derecha tiene amplitud $B^{(-)}$. Siguiendo el razonamiento del ejemplo de la figura 6A, tendremos ondas salientes a la izquierda y a la derecha, cuyas amplitudes denotaremos por $A^{(-)}$ y $B^{(-)}$ respectivamente. La onda con amplitud $A^{(-)}$ estará dada por la parte transmitida de la onda con amplitud $B^{(+)}$ y la parte reflejada de la onda con amplitud $A^{(+)}$. De forma análoga, la onda con amplitud $B^{(-)}$ debe coincidir con la superposición de la parte transmitida de la onda con amplitud $A^{(+)}$ y la parte reflejada de la onda que incide con amplitud $B^{(+)}$. Esto último implica que la relación entre las amplitudes puede escribirse de la forma

$$\begin{aligned} A^{(-)} &= rA^{(+)} + tB^{(+)} \text{ y} \\ B^{(-)} &= tA^{(+)} + rB^{(+)}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

El sistema de ecuaciones (2.3) puede escribirse de forma matricial a partir de la expresión

$$\begin{pmatrix} A^{(-)} \\ B^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r & t \\ t & r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A^{(+)} \\ B^{(+)} \end{pmatrix} = \mathbf{S} \begin{pmatrix} A^{(+)} \\ B^{(+)} \end{pmatrix}. \quad (2.4)$$

A la matriz \mathbf{S} se le denomina *matriz de dispersión* y contiene toda la información acerca de la dispersión de las ondas entrantes al potencial $V(x)$, incluyendo la fase.

Es importante mencionar que hasta el momento solo hemos considerado el caso en donde el potencial a un lado del dispersor es el mismo que el del lado opuesto, lo que se conoce como una unión simétrica. Para este caso particular la matriz \mathbf{S} resulta ser simétrica y unitaria, tomando en cuenta la condición (2.2). En un caso más general, en donde se tenga una constante V_1 para el potencial del lado izquierdo y otra constante V_2 para el lado derecho, tendremos dos diferentes números de onda k_1 y k_2 dados por la ecuación (2.1) tomando el potencial correspondiente a cada lado. Como consecuencia de esto, los coeficientes de transmisión asociados a $A^{(+)}$ serán diferentes a los asociados a $B^{(+)}$. Esto provoca que la ecuación (2.4) deba reescribirse como

$$\begin{pmatrix} A^{(-)} \\ B^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A^{(+)} \\ B^{(+)} \end{pmatrix} = \mathbf{S} \begin{pmatrix} A^{(+)} \\ B^{(+)} \end{pmatrix}, \quad (2.5)$$

en donde los coeficientes primados corresponden a la onda $B^{(+)}$ y la matriz en la ecuación ya no es simétrica ni unitaria. No obstante, es posible obtener nuevamente una matriz unitaria redefiniendo las entradas como (Ryndyk, 2016)

$$S_{nm}' = \sqrt{\frac{k_n}{k_m}} S_{nm}. \quad (2.6)$$

La gran utilidad de la matriz de dispersión recae en que permite extender de forma sencilla el resultado (2.4) al caso en donde se tengan más de dos ondas o *modos* entrantes a la región de dispersión. Si se tienen N modos entrantes, denotados por $A_n^{(+)}$, entonces la relación entre los modos entrantes y salientes estará dada por una extensión de la ecuación (2.4) que se escribe de la forma

$$\begin{pmatrix} A_1^{(-)} \\ A_2^{(-)} \\ \vdots \\ A_N^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{21} & \dots & S_{N1} \\ S_{12} & S_{22} & \dots & S_{N2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ S_{1N} & S_{2N} & \dots & S_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1^{(+)} \\ A_2^{(+)} \\ \vdots \\ A_N^{(+)} \end{pmatrix} = \mathbf{S} \begin{pmatrix} A_1^{(+)} \\ A_2^{(+)} \\ \vdots \\ A_N^{(+)} \end{pmatrix}, \quad (2.7)$$

en donde la matriz \mathbf{S} es una matriz simétrica de $N \times N$. La relación entre los modos entrantes y salientes se puede obtener a partir de los elementos de la matriz a partir de la expresión $|S_{ni}|^2$, que es la probabilidad de que el n -ésimo modo entrante sea dispersado a través del i -ésimo modo saliente. Por ello, exigiendo la conservación de la probabilidad para

El Hamiltoniano correspondiente a este sistema, tomando en cuenta a las cadenas infinitas, estará dado como un Hamiltoniano de amarre fuerte convencional en términos de las energías de sitio e integrales de salto de cada uno de los elementos. En particular, nos será conveniente dividir a dicho Hamiltoniano en la parte asociada a los N sitios del sistema original, a la que escribiremos como \hat{H}_D y la parte asociada a las cadenas. Recordando que la única interacción de los sitios en las cadenas es con sus primeros vecinos a partir de la integral de salto t_C tenemos que el Hamiltoniano puede escribirse como

$$\hat{H} = \hat{H}_D + t_C \sum_{F=1}^{N_F} \sum_{C=1}^{C_F} \sum_{l=1}^{\infty} \left(|C_l^F\rangle \langle C_{l-1}^F| + |C_{l-1}^F\rangle \langle C_l^F| \right). \quad (2.10)$$

Notemos que tomando $|C_0^F\rangle \equiv |F\rangle$ el segundo término de la ecuación (2.10) ya incluye la contribución de la integral de salto entre $|F\rangle$ y $|C_1^F\rangle$.

A partir de la ortonormalidad de las funciones de Wannier y de las expresiones dadas en (2.9) y (2.10) se obtiene que

$$\hat{H}|\Psi\rangle = \hat{H}_D \left(\sum_{I=1}^{N_I} \alpha_I |I\rangle + \sum_{F=1}^{N_F} \beta_F |F\rangle \right) + \sum_{F=1}^{N_F} \sum_{C=1}^{C_F} \sum_{l=0}^{\infty} t_C (\gamma_{C,l-1}^F + \gamma_{C,l+1}^F) |C_l^F\rangle. \quad (2.11)$$

Dado que $|\Psi\rangle$ es una eigenfunción del Hamiltoniano debe de satisfacer la ecuación de eigenvalores (1.5). Para que esto suceda para una energía E la independencia lineal de las funciones de Wannier exige que se cumpla la condición

$$E\gamma_{C,l}^F = t_C (\gamma_{C,l-1}^F + \gamma_{C,l+1}^F). \quad (2.12)$$

Una forma de resolver la ecuación (2.12) motivados por el teorema de Bloch sobre las cadenas infinitas es proponer soluciones de la forma

$$\gamma_{C,l}^F = A_{F,C}^{(+)} e^{-ikl} + A_{F,C}^{(-)} e^{ikl}, \quad (2.13)$$

en cuyo caso k queda como una variable a determinar y evaluando en $l=0$ se tiene que $A_{F,C}^{(+)} + A_{F,C}^{(-)} = \gamma_{C,0}^F = \beta_F$. Sustituyendo (2.13) en (2.12) se obtiene que

$$E = t_C (e^{-ik} + e^{ik}) \Rightarrow k = \cos^{-1} \left(\frac{E}{2t_C} \right). \quad (2.14)$$

El resultado anterior permite interpretar el efecto de las cadenas acopladas al sistema como ondas entrantes y salientes (Ramírez C. , Scattering Matriz of Arbitrary Tight Binding Hamiltonians, 2017). En general, si se tienen P cadenas en total entonces se tendrán P modos entrantes y salientes denotados respectivamente por $A_n^{(+)}$ y $A_n^{(-)}$. La relación entre los modos entrantes y salientes al sistema formado por los N sitios iniciales, al que nos referiremos como dispersor, estará dada a partir de una matriz de dispersión como la que se aparece en la ecuación (2.7). Es importante mencionar que las dimensiones de dicha matriz no dependerán del número de sitios en el dispersor, sino únicamente del número de modos entrantes y salientes, es decir, del número de cadenas acopladas.

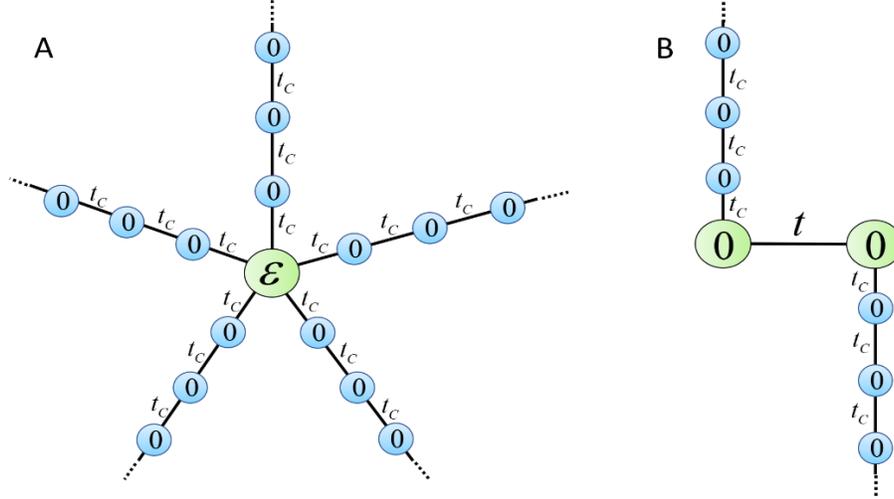


Figura 8: A) Estructura de sitio con $N=5$ cadenas acopladas. B) Estructura de enlace.

Para conocer la matriz de dispersión de un sistema se requiere conocer cómo se relacionan los modos salientes asociados a cada una de las cadenas semi-infinitas con los modos entrantes de todas las cadenas tomando en cuenta el Hamiltoniano del dispersor \hat{H}_D , lo que en general puede implicar un problema desafiante a menos que se cuente con un algoritmo simple que permita llevarlo a cabo.

Empecemos por considerar dos estructuras particulares que resultarán de gran utilidad para obtener la matriz de dispersión de estructuras arbitrarias. El primero de estos sistemas, al que nos referiremos como *estructura de sitio* (ver figura 8A), consiste en una región de dispersión formada por un único sitio con energía de sitio ε que tiene N cadenas unidas. Recordando que por cada una de las cadenas unidas a la región de dispersión se tendrá una pareja formada por un modo entrante y otro saliente tenemos que la matriz de dispersión asociada a una estructura de sitio será una matriz de $N \times N$. Las entradas de dicha matriz de dispersión estarán dadas por (Medina-Amayo, 2018)

$$S_{n,m}^{\text{sitio}} = \frac{2it_c \sin(ka)}{\varepsilon - E + Nt_c e^{ika}} \delta_{n,m}, \quad (2.15)$$

en donde $\delta_{n,m}$ corresponde a una delta de Kronecker.

El segundo sistema a considerar, llamado *estructura de enlace*, consta de una región de dispersión formada por dos sitios con energía de sitio nula unidos a través de una integral de salto t y en donde a cada uno de estos sitios se encuentra unida una cadena (ver figura 8B). Dado que se tienen dos cadenas, la matriz de dispersión de esta estructura será una de dimensión 2×2 cuyas entradas serán (Medina-Amayo, 2018)

$$S_{n,m}^{\text{enlace}} = \begin{cases} r & \text{para } n = m \\ \frac{t_c}{r} (e^{ika} + r e^{-ik}) & \text{para } n \neq m, \end{cases} \quad (2.16)$$

en donde

$$r = -\frac{t_C - t_C^2}{t_C - t_C^2 e^{-2ik}}. \quad (2.17)$$

2.3 Acoplamiento de dispersores

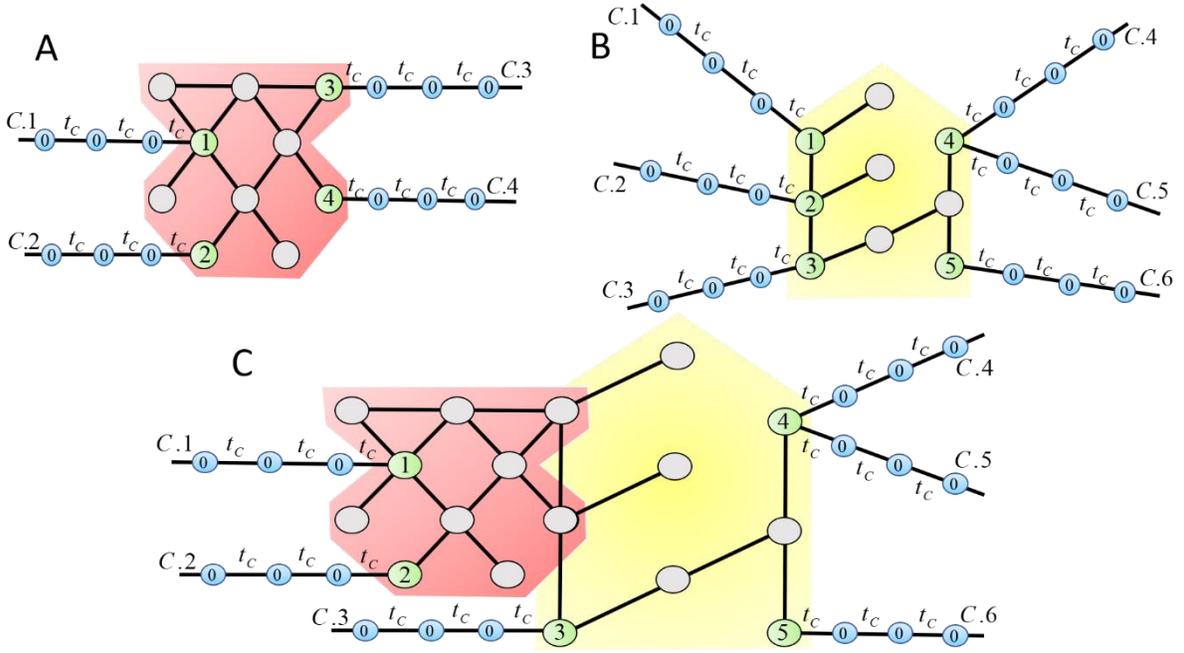


Figura 9: A) Estructura con 4 sitios frontera y 4 cadenas. B) Estructura con 5 sitios frontera y 6 cadenas. C) Estructura compuesta obtenida a partir de la fusión de las 2 últimas cadenas de A con las dos primeras de B.

Consideremos una estructura A con N_A cadenas acopladas, cada una con modos entrantes y salientes denotados por $A_n^{(\pm)}$, y una segunda estructura B con N_B cadenas acopladas con modos entrantes y salientes denotados por $B_n^{(\pm)}$, por ejemplo, las que se muestran en las figuras 9A y 9B. Cada uno de estos sistemas tendrá asociada una matriz de dispersión de la forma (2.7), siendo de dimensión $N_A \times N_A$ la del primer sistema y de $N_B \times N_B$ la del segundo. Supongamos ahora que las cadenas de ambos sistemas están enumeradas de forma tal que se satisface la relación

$$A_{n'}^{(\pm)} = B_n^{(\mp)}, \quad (2.18)$$

en donde $n = 1, \dots, P$ y $n' = N_A - P + n$. Esto se puede resumir en que los modos salientes (entrantes) de las últimas P cadenas del sistema A coinciden con los modos entrantes (salientes) de las primeras P cadenas del sistema B . A las cadenas asociadas a los modos

que satisfagan la condición (2.18) le llamaremos *cadena de conexión* y a los sitios de frontera unidos a cadenas de conexión les llamaremos *sitios de conexión*. Podemos ahora agrupar a los modos entrantes y salientes de cada sistema dependiendo de si satisfacen o no la condición (2.18) en vectores de la forma

$$\mathbf{A}_1^{(\pm)} = \begin{pmatrix} A_1^{(\pm)} \\ A_2^{(\pm)} \\ \vdots \\ A_{N_A-P}^{(\pm)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}_2^{(\pm)} = \begin{pmatrix} A_{N_A-P+1}^{(\pm)} \\ A_{N_A-P+2}^{(\pm)} \\ \vdots \\ A_{N_A}^{(\pm)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B}_1^{(\pm)} = \begin{pmatrix} B_1^{(\pm)} \\ B_2^{(\pm)} \\ \vdots \\ B_P^{(\pm)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B}_2^{(\pm)} = \begin{pmatrix} B_{P+1}^{(\pm)} \\ B_{P+2}^{(\pm)} \\ \vdots \\ B_{N_B}^{(\pm)} \end{pmatrix}. \quad (2.19)$$

En este caso, las ecuaciones que satisfacen las matrices de dispersión \mathbf{S}_A y \mathbf{S}_B de cada sistema pueden escribirse de la forma

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_1^{(-)} \\ \mathbf{A}_2^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{11}^{(A)} & \mathbf{S}_{12}^{(A)} \\ \mathbf{S}_{21}^{(A)} & \mathbf{S}_{22}^{(A)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1^{(+)} \\ \mathbf{A}_2^{(+)} \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \begin{pmatrix} \mathbf{B}_1^{(-)} \\ \mathbf{B}_2^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{11}^{(B)} & \mathbf{S}_{12}^{(B)} \\ \mathbf{S}_{21}^{(B)} & \mathbf{S}_{22}^{(B)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{B}_1^{(+)} \\ \mathbf{B}_2^{(+)} \end{pmatrix}, \quad (2.20)$$

en donde la dimensión de cada una de las submatrices involucradas está dada por $\dim(\mathbf{S}_{ij}^{(A)}) = \dim(\mathbf{A}_i^{(\pm)}) \times \dim(\mathbf{A}_j^{(\pm)})$ y $\dim(\mathbf{S}_{ij}^{(B)}) = \dim(\mathbf{B}_i^{(\pm)}) \times \dim(\mathbf{B}_j^{(\pm)})$ respectivamente.

Notemos que las ecuaciones obtenidas en (2.20) tienen una forma similar a la ecuación (2.5) que corresponde a ondas incidentes por la derecha y por la izquierda en un potencial dispersor unidimensional. Bajo este razonamiento, tomando como ejemplo la ecuación del dispersor A , podemos pensar en los modos correspondientes al vector $\mathbf{A}_1^{(+)}$ ($\mathbf{A}_1^{(-)}$) como incidentes (salientes) por la izquierda y los modos de $\mathbf{A}_2^{(+)}$ ($\mathbf{A}_2^{(-)}$) como incidentes (salientes) por la derecha. En tal caso, tenemos que las submatrices $\mathbf{S}_{11}^{(A)}$ y $\mathbf{S}_{21}^{(A)}$ estarán asociadas respectivamente a la reflexión y transmisión de las ondas incidentes por la izquierda, contempladas en el vector $\mathbf{A}_1^{(+)}$. De forma análoga, las submatrices $\mathbf{S}_{21}^{(A)}$ y $\mathbf{S}_{22}^{(A)}$ estarán asociadas respectivamente a la transmisión y reflexión de las ondas contenidas en el vector $\mathbf{A}_2^{(+)}$ (Ryndyk, 2016). Repitiendo este razonamiento en el sistema dispersor B tenemos que la condición (2.18), que en términos de los vectores definidos en (2.19) se puede escribir como $\mathbf{A}_2^{(\pm)} = \mathbf{B}_1^{(\mp)}$, puede visualizarse como el sistema mostrado en la figura 10A en el que los modos salientes (entrantes) por la derecha de A coinciden con los modos entrantes (salientes) por la izquierda en B . Bajo estas condiciones, es posible unificar el efecto de ambos sistemas, pensándolo como un único sistema C (ver figura 10B) con modos incidentes $\mathbf{A}_1^{(+)}$ y $\mathbf{B}_2^{(+)}$, y con modos salientes $\mathbf{A}_1^{(-)}$ y $\mathbf{B}_2^{(-)}$ (Rumpf, 2011). La matriz de dispersión \mathbf{S}_C de este nuevo sistema puede escribirse de forma tal que satisfaga la ecuación

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_1^{(-)} \\ \mathbf{B}_2^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{11}^{(C)} & \mathbf{S}_{12}^{(C)} \\ \mathbf{S}_{21}^{(C)} & \mathbf{S}_{22}^{(C)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1^{(+)} \\ \mathbf{B}_2^{(+)} \end{pmatrix}, \quad (2.21)$$

en donde las submatrices que conforman a \mathbf{S}_C se pueden obtener en términos de \mathbf{S}_A y \mathbf{S}_B como (Rumpf, 2011)

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}_{11}^{(C)} &= \mathbf{S}_{11}^{(A)} + \mathbf{S}_{12}^{(A)} \left[\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^{(B)} \mathbf{S}_{22}^{(A)} \right]^{-1} \mathbf{S}_{11}^{(B)} \mathbf{S}_{21}^{(A)}, \\
\mathbf{S}_{12}^{(C)} &= \mathbf{S}_{12}^{(A)} \left[\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^{(B)} \mathbf{S}_{22}^{(A)} \right]^{-1} \mathbf{S}_{12}^{(B)}, \\
\mathbf{S}_{21}^{(C)} &= \mathbf{S}_{21}^{(B)} \left[\mathbf{I} - \mathbf{S}_{22}^{(A)} \mathbf{S}_{11}^{(B)} \right]^{-1} \mathbf{S}_{21}^{(A)} \quad \text{y} \\
\mathbf{S}_{22}^{(C)} &= \mathbf{S}_{22}^{(B)} + \mathbf{S}_{21}^{(B)} \left[\mathbf{I} - \mathbf{S}_{22}^{(A)} \mathbf{S}_{11}^{(B)} \right]^{-1} \mathbf{S}_{22}^{(A)} \mathbf{S}_{12}^{(B)}.
\end{aligned}
\tag{2.22}$$

Las ecuaciones (2.22) corresponden a una operación matricial conocida como *producto estrella de Redheffer*, al cual denotaremos por el símbolo $*$. En otras palabras, la matriz del sistema compuesto C se puede obtener como $\mathbf{S}_C = \mathbf{S}_A * \mathbf{S}_B$.

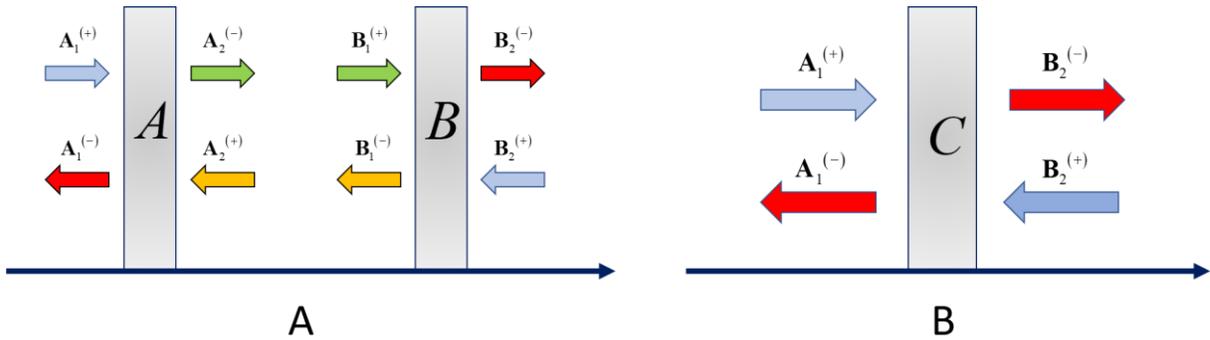


Figura 10: A) Representación de dos sistemas de dispersión. B) Representación del sistema de dispersión equivalente a los dispersores A y B.

Si bien hasta el momento hemos obtenido una expresión para la matriz de dispersión \mathbf{S}_C del sistema acoplado aún hace falta describir a dicho sistema. En el acoplamiento o *fusión* de dos dispersores, A y B , basados en estructuras de amarre fuerte, la estructura resultante C consistirá en la unión de los sistemas iniciales bajo las siguientes consideraciones (Ramírez C., Scattering Matriz of Arbitrary Tight Binding Hamiltonians, 2017) (Medina-Amayo, 2018):

En primer lugar, los sitios internos y los sitios de frontera que no sean de conexión y que no se encuentren unidos a sitios de conexión permanecerán sin cambio alguno en las energías de sitio ni en las integrales de salto que los unan con otros sitios; el número de cadenas acopladas también se mantendrá sin cambios en el caso de los sitios de frontera. Las cadenas de conexión de los sistemas A y B serán eliminadas. Los sitios de conexión unidos a partir de una cadena de conexión corresponderán a un mismo sitio en el sistema acoplado, cuya energía de sitio será la suma de las energías de sitio de los sitios de conexión originales y las integrales de salto con respecto de algún otro sitio serán la suma de las integrales de salto de los sitios originales con respecto de dicho sitio. Los sitios de frontera del sistema resultante serán todos los sitios de frontera de los sistemas originales que aún conserven al menos una cadena acoplada. Así mismo, el número de cadenas acopladas al sistema resultante será la suma de todas las cadenas de los sistemas originales que no sean de conexión. Es decir, si el sistema A tiene N_A cadenas acopladas, el sistema B tiene N_B

cadenas y ambos sistemas se fusionan a través de P cadenas de conexión entonces el sistema resultante tendrá $N_A + N_B - 2P$ cadenas acopladas.

La gran importancia que reside en el método recién descrito para fusionar estructuras dispersoras es que permite conocer la matriz de dispersión de sistemas complejos a partir de la matriz de dispersión de sistemas más sencillos que lo conformen. A este método se le denomina *método recursivo de la matriz de dispersión (MRMD)*. Aún más, el MRMD nos permite construir la matriz de dispersión de cualquier estructura sólo en términos de las matrices asociadas a las estructuras de sitio y enlace, cuya expresión analítica está dada en las ecuaciones (2.15) y (2.16), lo que termina por resolver el problema de la matriz de dispersión de un sistema arbitrario (Ramírez C. , 2017).

2.4 Sistemas cuasi-unidimensionales infinitos (Q1D)

En el presente trabajo utilizaremos el MRMD para modelar defectos en estructuras infinitas con el objetivo de hallar estados localizados. Para poder estudiar el efecto de los defectos es necesario primero conocer la forma en la cual se comporta un sistema sin ellos. En particular, trabajaremos con sistemas que puedan construirse a partir de una estructura arbitraria finita que se une consigo misma para dar origen a una arreglo periódico e infinito en una única dirección (ver figura 11). Notemos que, a pesar de que la estructura que acabamos de describir no es 1D, podemos pensarla como un cristal 1D cuya base es la estructura finita a partir de la cual se construyó, por lo que podemos considerarlo como un sistema *cuasi-unidimensional (Q1D)*.

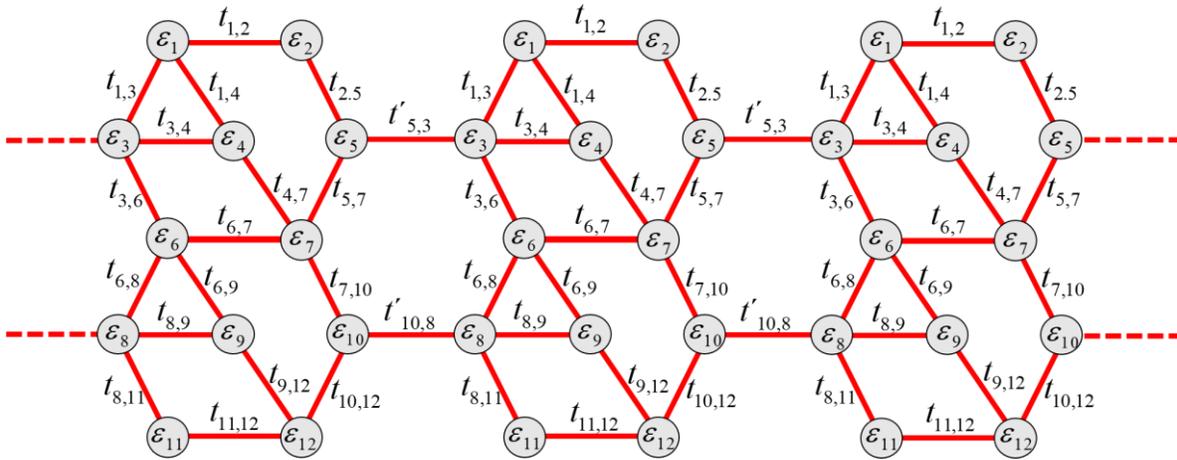


Figura 11: Ejemplo de sistema Q1D infinito

Una observación importante es que, como en todo cristal, la forma en la cual se puede elegir a la base no es única. En particular, resulta conveniente elegir una base que permita aprovechar el MRMD para fusionarse consigo misma. Para ello, pensemos en una base que se una consigo misma a partir del acoplamiento de Q sitios. En tal caso, una posibilidad es

considerar una base que contenga a cada uno de estos Q sitios por duplicado, uno con energía de sitio ε_i y otro con $\varepsilon = 0$. De esta forma, si enumeramos a los sitios de frontera de tal forma que los Q primeros, con energías ε_i , se unen con los Q últimos de la base anterior y los Q últimos, con $\varepsilon = 0$, se unen con los Q primeros de la siguiente llegamos a un algoritmo a partir del cual se puede construir al sistema completo usando el MRDM. En la figura 12 se puede observar un ejemplo de base a partir de la cual se puede construir el sistema de la figura 11.

El proceso puede repetirse para unir a la estructura resultante consigo misma y, tras repetir infinitas veces el proceso, construir al sistema completo. Notemos que para poder llevar a cabo el proceso anterior sólo se requiere conocer la matriz de dispersión asociada a la base que, como hemos mencionado anteriormente, puede calcularse en términos solamente de las matrices de sitio y enlace. Si bien el problema puede parecer resuelto en este punto, tenemos el problema de que no nos es posible llevar a cabo la fusión de estructuras de forma infinita, por lo que debemos usar una aproximación diferente.

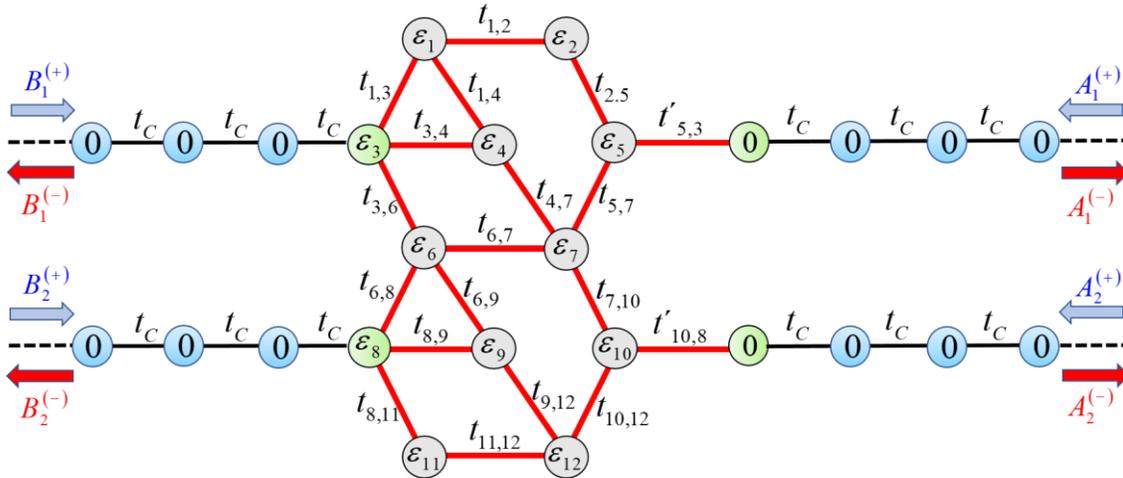


Figura 12: Ejemplo de base.

Pensemos en la base que hemos definido. Como hemos visto, para cada una de las cadenas acopladas tendremos una pareja formada por un modo entrante y uno saliente. Si denotamos por $A_m^{(+)} (A_m^{(-)})$ a los modos entrantes(salientes) en la m -ésima cadena de la derecha y por $B_m^{(+)} (B_m^{(-)})$ a los modos entrantes(salientes) en la m -ésima cadena de la izquierda, entonces para una base con $2Q$ sitios frontera la ecuación de dispersión podrá escribirse como

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(-)} \\ \mathbf{B}^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{11} & \mathbf{S}_{12} \\ \mathbf{S}_{21} & \mathbf{S}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(+)} \\ \mathbf{B}^{(+)} \end{pmatrix}, \quad (2.23)$$

en donde $(\mathbf{A}^{(\pm)})_m = A_m^{(\pm)}$ y $(\mathbf{B}^{(\pm)})_m = B_m^{(\pm)}$ para $m = 1, 2, \dots, Q$. Ahora, como esperamos obtener un sistema periódico, motivados por el teorema de Bloch y debido a la condición (2.18) necesaria para poder acoplar las bases, tenemos que los modos entrantes(salientes) por la izquierda deberán diferir de los modos salientes(entrantes) por la derecha solo por un factor

λ , es decir, tendremos que $\mathbf{B}^{(\pm)} = \lambda \mathbf{A}^{(\mp)}$. Aplicando esta condición a la ecuación (2.23) se obtiene que (Ramírez C. , 2018)

$$\begin{pmatrix} -\mathbf{S}_{11} & \mathbf{I} \\ -\mathbf{S}_{21} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(+)} \\ \mathbf{A}^{(-)} \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{S}_{12} \\ -\mathbf{I} & \mathbf{S}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(+)} \\ \mathbf{A}^{(-)} \end{pmatrix}, \quad (2.24)$$

en donde \mathbf{I} es la matriz identidad de dimensiones $Q \times Q$.

La ecuación (2.24) es una ecuación generalizada de eigenvalores da origen a $2Q$ diferentes valores para λ . En particular, tendremos Q parejas de valores (λ, λ') que satisfacen que $\lambda\lambda'=1$. Notemos que cuando se cumpla que $|\lambda|=1$ tendremos una onda de Bloch y que, si λ está asociada a una onda de Bloch, entonces su pareja λ' también lo estará. Escribiendo a estos eigenvalores de la forma $\lambda_k = e^{ika}$ y como $\lambda'_k = \lambda_k^{-1} = \lambda_{-k}$, tendremos que las ondas vendrán en parejas que viajen a la derecha y a la izquierda con el mismo vector de onda. Los eigenvectores asociados al j -ésimo eigenvalor (λ_j) pueden escribirse como

$$\mathbf{V}_j = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{k_j}^{(+)} \\ \mathbf{A}_{k_j}^{(-)} \end{pmatrix}, \quad (2.25)$$

en donde $\mathbf{A}_{k_j}^{(+)} (\mathbf{A}_{k_j}^{(-)})$ son vectores de tamaño Q correspondientes a ondas que se mueven en con el mismo vector de onda k_j entrantes(salientes) en la región de dispersión. Si normalizamos a estos vectores de forma tal que satisfagan la condición

$$\left| \mathbf{A}_{k_j}^{(+)\dagger} \mathbf{A}_{k_j}^{(+)} - \mathbf{A}_{k_j}^{(-)\dagger} \mathbf{A}_{k_j}^{(-)} \right| = 1, \quad (2.26)$$

entonces la densidad de corriente asociada a cada una de las ondas de Bloch será la misma que la de una cadena infinita de átomos con energía de sitio nula e integrales de salto t_C (Ramírez C. , 2018).

Considerando el caso en el que tenemos \tilde{Q} parejas de eigenvalores (λ, λ') asociados a ondas de Bloch, habrá $2(Q - \tilde{Q})$ eigenvalores tales que $|\lambda| \neq 1$. Si proponemos soluciones para estos eigenvalores de la forma $\lambda = e^{ka}$ entonces tendremos que aquellos que cumplan que $|\lambda| < 1$, o bien $k < 0$, corresponderán a estados que decaen a la derecha y divergen a la izquierda. Análogamente, si $|\lambda| > 1$ se tendrán estados que decaen a la izquierda y divergen a la derecha. Notemos que debido a la condición $\lambda\lambda'=1$ tendremos que por cada estado que diverja a la derecha deberá haber otro que lo haga a la izquierda, por lo que tendremos $Q - \tilde{Q}$ de cada uno. Como tenemos un comportamiento divergente para todas estas soluciones, ninguna de ellas puede corresponder a estados físicos aceptables en el sistema infinito.

2.5 Sistemas Q1D con defectos

Una forma de modelar un sistema Q1D infinito con algún defecto es dividir a dicho sistema en dos regiones semi-infinitas separadas por una región finita que contiene a todos los defectos. Las estructuras semi-infinitas deberán ser tales que al acoplar sus matrices de dispersión con la de la región central se reproduzca al sistema infinito completo sin que queden cadenas libres. La motivación de esta aproximación es que, como hemos visto, podemos asociar ondas de Bloch a los sistemas Q1D, lo que permite describir el efecto de la región central a partir de la dispersión de estas ondas. Por este motivo, a la región central la llamaremos región de dispersión y nos referiremos a los sistemas semi-infinitos como *guías de onda* o simplemente *guías*. En la figura 13 se puede observar un ejemplo de una estructura que podría servir como guía para alguna región de dispersión.

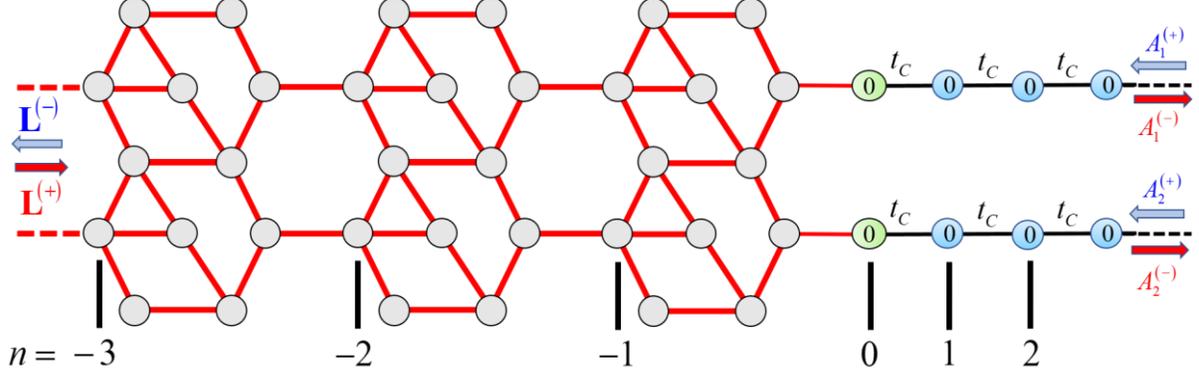


Figura 13: Ejemplo de guía de onda construida a partir de un sistema Q1D semi-infinito.

Para encontrar la matriz de dispersión asociada a la guía recordemos que en el caso infinito los eigenvalores de la ecuación (2.24) corresponden a Q parejas de modos que viajan en ambas direcciones con el mismo vector de onda y $Q-Q$ parejas de exponenciales que divergen a la derecha o a la izquierda que no representaban soluciones físicas. Si consideramos que la estructura semi-infinita está enumerada desde -1 hasta $-\infty$ entonces las exponenciales que diverjan a la derecha ya serán soluciones físicas admisibles. Como tendremos $Q-Q$ soluciones de este tipo, si enumeramos a los eigenvalores de forma tal que los primeros Q correspondan a las ondas de Bloch entonces los valores de λ pueden escribirse como

$$\lambda_j = \begin{cases} e^{ik_j a} & \text{para } j=1, 2, \dots, \tilde{Q} \\ e^{k_j a} & \text{para } j=\tilde{Q}+1, \dots, Q. \end{cases} \quad (2.27)$$

Esto permite expresar las eigenfunciones de la guía periódica como una combinación lineal de las Q ondas viajeras a la derecha (izquierda), con coeficientes de amplitud $L_j^{(+)} (L_j^{(-)})$, y de los $Q-Q$ estados evanescentes, con coeficientes L_j .

Por otro lado, anteriormente encontramos que a cada una de las cadenas acopladas está asociada a ondas que viajan con k dada por (2.14). Si denotamos los coeficientes de amplitud de las ondas que viajan a la derecha(izquierda) en la cadena asociada al m -ésimo sitio por $D_m^{(+)} (D_m^{(-)})$ entonces se tiene que la relación entre los coeficientes estará dada por la ecuación matricial

$$\begin{pmatrix} \mathbf{D}^{(+)} \\ \mathbf{D}^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_1^{(+)} & \mathbf{M}_2^{(+)} & \mathbf{M}_3^{(+)} \\ \mathbf{M}_1^{(-)} & \mathbf{M}_1^{(-)} & \mathbf{M}_1^{(-)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{L}^{(+)} \\ \mathbf{L}^{(-)} \\ \mathbf{L} \end{pmatrix}, \quad (2.28)$$

en donde

$$\mathbf{D}^{(\pm)} = \begin{pmatrix} D_1^{(\pm)} \\ D_2^{(\pm)} \\ \vdots \\ D_Q^{(\pm)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{L}^{(\pm)} = \begin{pmatrix} L_1^{(\pm)} \\ L_1^{(\pm)} \\ \vdots \\ L_{\tilde{Q}}^{(\pm)} \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \mathbf{L} = \begin{pmatrix} L_{\tilde{Q}+1} \\ \vdots \\ L_Q \end{pmatrix}. \quad (2.29)$$

Los vectores $\mathbf{M}_n^{(\pm)}$ que forman la matriz están dados en términos de los eigenvectores escritos en la ecuación (2.25) como

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_1^{(\pm)} &= \left(\mathbf{A}_1^{(\pm)} \quad \cdots \quad \mathbf{A}_{\tilde{Q}}^{(\pm)} \right), \\ \mathbf{M}_2^{(\pm)} &= \left(\mathbf{A}_1^{(\mp)} \quad \cdots \quad \mathbf{A}_{\tilde{Q}}^{(\mp)} \right) \quad \text{y} \\ \mathbf{M}_3^{(\pm)} &= \left(\mathbf{A}_{\tilde{Q}+1}^{(\pm)} \quad \cdots \quad \mathbf{A}_Q^{(\pm)} \right). \end{aligned} \quad (2.30)$$

La ecuación (2.28) puede reescribirse de forma tal que se asemeje más a una matriz de dispersión (que escriba modos salientes en términos de los entrantes) como (Ramírez C. , 2018)

$$\begin{pmatrix} \mathbf{D}^{(-)} \\ \mathbf{L}^{(-)} \\ \mathbf{L} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{P}_{11} & \mathbf{P}_{12} \\ \mathbf{P}_{21} & \mathbf{P}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{D}^{(+)} \\ \mathbf{L}^{(+)} \end{pmatrix}, \quad (2.31)$$

en donde

$$\begin{aligned}
\mathbf{P}_{11} &= \tilde{\mathbf{M}}_2^{(-)} \left[\tilde{\mathbf{M}}_2^{(+)} \right]^{-1}, \\
\mathbf{P}_{12} &= \mathbf{M}_1^{(-)} - \tilde{\mathbf{M}}_2^{(-)} \left[\tilde{\mathbf{M}}_2^{(+)} \right]^{-1} \mathbf{M}_1^{(+)}, \\
\mathbf{P}_{21} &= \left[\tilde{\mathbf{M}}_2^{(+)} \right]^{-1} \quad y \\
\mathbf{P}_{22} &= - \left[\tilde{\mathbf{M}}_2^{(+)} \right]^{-1} \mathbf{M}_1^{(+)},
\end{aligned} \tag{2.32}$$

con $\tilde{\mathbf{M}}_2^{(\pm)} \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{M}_2^{(\pm)} & \mathbf{M}_3^{(\pm)} \end{pmatrix}$. Para eliminar a los estados evanescentes de la ecuación (2.31) y que efectivamente se trate de una matriz de dispersión basta con eliminar los últimos $Q-Q$ renglones de la matriz para que de esa forma sólo tengamos la relación de los modos salientes en términos de los entrantes. Por lo tanto, la matriz de dispersión \mathbf{S}_L asociada a la guía estará formada por los primeros $Q+Q$ renglones de la matriz de la ecuación (2.31)

Capítulo 3

Algoritmos para determinación de estados ligados

3.1 Obtención de estados ligados en sistemas dispersivos

La existencia de estados ligados en un sistema es un fenómeno de gran interés para el desarrollo de componentes tecnológicos debido al impacto que pueden tener en la conductividad eléctrica. En el caso de los semiconductores el modelo de amarre fuerte nos permite proponer el Hamiltoniano del sistema. Sin embargo, si se consideran estructuras que se extiendan de forma infinita como nanocintas o nanotubos, el Hamiltoniano será de dimensión infinita y será imposible de diagonalizar. Incluso en estructuras finitas, las dimensiones de la matriz crecen cuadráticamente con el número de sitios, haciendo altamente costoso el proceso de diagonalización para estructuras con número grande de sitios. Esto lleva a la necesidad de proponer un proceso alternativo para hallar estados ligados en sistemas de amarre fuerte. En este capítulo se plantean las condiciones necesarias para tener estados ligados en sistemas dispersivos y se propone un algoritmo que combina dichas condiciones con el MRMD para encontrar numéricamente las energías y funciones de onda de estados ligados. El algoritmo propuesto es aplicable a sistemas finitos e infinitos con la particularidad de reducir los recursos computacionales necesarios con respecto de la diagonalización directa en el caso finito. Para ello, comencemos realizando una breve descripción de la forma en la que se pueden obtener estados localizados en la ecuación de Schrödinger en una dimensión a partir de la matriz de dispersión (Ramírez & al., 2019) (González, 2019).

Consideremos un potencial unidimensional arbitrario $V(x)$ como el de la figura 14a. Con el objetivo de obtener una descripción de las eigenfunciones asociadas a dicho potencial en términos de coeficientes de dispersión podemos dividir al potencial en otros dos potenciales unidimensionales $V_1(x)$ y $V_2(x)$ dados por

$$V_1(x) = \begin{cases} V(x) & \text{para } x < 0 \\ V_0 & \text{para } x \geq 0 \end{cases} \quad \text{y} \quad V_2(x) = \begin{cases} V_0 & \text{para } x \leq 0 \\ V(x) & \text{para } x > 0 \end{cases} \quad (3.1)$$

respectivamente, dando origen a los sistemas mostrados en la figura 14b.

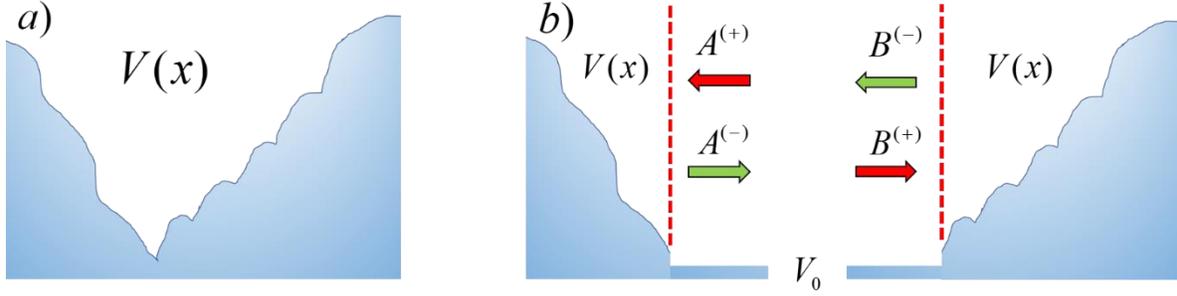


Figura 14: a) Potencial unidimensional $V(x)$. b) Potenciales $V_1(x)$ y $V_2(x)$.

En cada uno de los potenciales propuestos V_1 y V_2 nos es posible proponer funciones de onda asociadas sean tales que, en la región donde el potencial se mantiene constante, puedan expresarse como modos entrantes y salientes con una determinada amplitud, es decir de la forma

$$\Psi_1(x) = \begin{cases} \psi_1(x) & \text{para } x < 0 \\ A^{(+)} e^{ikx} + A^{(-)} e^{-ikx} & \text{para } x \geq 0 \end{cases} \quad y \quad (3.2)$$

$$\Psi_2(x) = \begin{cases} B^{(+)} e^{ikx} + B^{(-)} e^{-ikx} & \text{para } x > 0 \\ \psi_2(x) & \text{para } x \leq 0 \end{cases}.$$

Para reconstruir la función de onda asociada al potencial completo $V(x)$ a partir de las funciones de onda dadas en (3.2) podemos exigir que los modos entrantes(salientes) del lado izquierdo del potencial coincidan con los modos salientes(entrantes) del lado derecho, lo que da origen a la condición

$$A^{(\pm)} = B^{(\mp)}. \quad (3.3)$$

Dado que en un estado localizado los modos entrantes y salientes de cada lado deberán relacionarse a partir de factores de fase complejos S_A y S_B (González, 2019), la condición (3.3) implica que

$$A^{(-)} = S_A A^{(+)} = S_A B^{(-)} = S_A S_B B^{(+)} = S_A S_B A^{(-)}. \quad (3.4)$$

En otras palabras, en un estado ligado será necesario que los factores de fase cumplan con la condición $S_A S_B = 1$.

3.2 Extensión a sistemas de amarre fuerte

Para extender el razonamiento anterior y aplicarlo a sistemas de amarre fuerte comencemos considerando una estructura arbitraria E . Como hemos visto anteriormente, es posible construir la matriz de dispersión \mathbf{S}_E asociada a E mediante el MRMD. En particular, el método nos permite construir por separado dos sistemas con matrices de dispersión \mathbf{S}_A y \mathbf{S}_B de modo tal que al fusionar las matrices a través del producto estrella de Redheffer se obtenga la matriz del sistema completo \mathbf{S}_E .

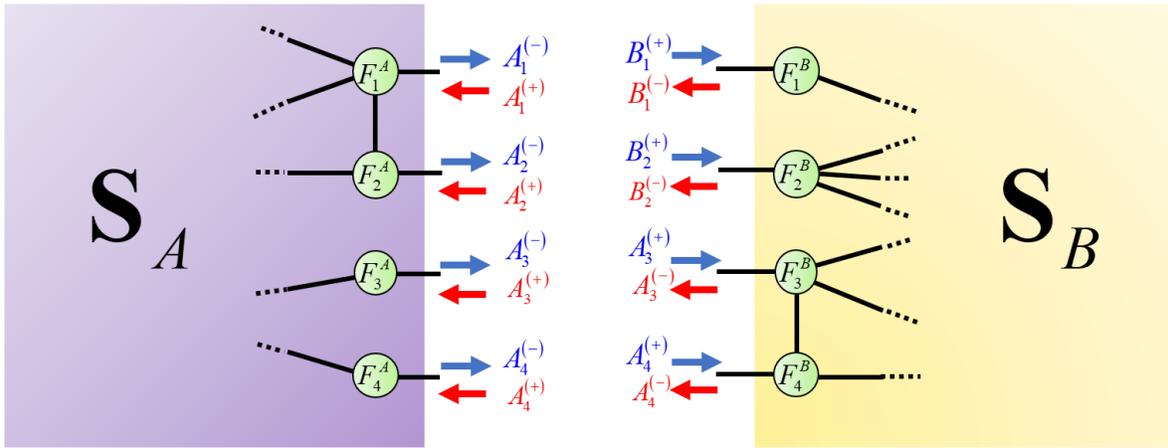


Figura 15: Subsistemas A y B que al fusionarse mediante MRMD dan origen al sistema E .

Los sistemas A y B serán a su vez estructuras de amarre fuerte como los que se muestran en la figura 15, en los que las dimensiones de las matrices \mathbf{S}_A y \mathbf{S}_B estarán determinadas por el número total de cadenas acopladas a los sitios de frontera. Para cada una de estas cadenas existirá una pareja formada por un modo entrante y uno saliente, lo que nos permite tener vectores de modos entrantes y salientes de la forma

$$\mathbf{A}^{(\pm)} = \begin{pmatrix} A_1^{(\pm)} \\ A_2^{(\pm)} \\ \vdots \\ A_N^{(\pm)} \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \mathbf{B}^{(\pm)} = \begin{pmatrix} B_1^{(\pm)} \\ B_2^{(\pm)} \\ \vdots \\ B_{N'}^{(\pm)} \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

en donde N y N' son respectivamente el número de cadenas acopladas a los subsistemas A y B . Cabe mencionar que si el sistema completo E no cuenta con cadenas acopladas entonces deberá ocurrir que $N = N'$.

En un estado ligado deberá ocurrir que los modos salientes de cada subsistema estén totalmente determinados por los entrantes a través de la matriz de dispersión. Es decir, de la forma

$$\mathbf{A}^{(-)} = \mathbf{S}_A \mathbf{A}^{(+)} \quad \text{y} \quad \mathbf{B}^{(-)} = \mathbf{S}_B \mathbf{B}^{(+)} \quad (3.6)$$

Más aún, como el resultado de la fusión de A y B es que los sitios de frontera unidos a través de una cadena representan el mismo sitio dentro del sistema completo entonces en cada uno de ellos es aplicable el razonamiento de dispersión unidimensional explicado anteriormente. Debido a esto, si se enumeran los modos de cada subsistema de tal forma que la i -ésima cadena de uno de ellos se corresponda con la i -ésima cadena del otro entonces deberá satisfacerse que $A_i^{(\pm)} = B_i^{(\mp)}$, es decir, se cumple que

$$\mathbf{A}^{(\pm)} = \mathbf{B}^{(\mp)} \quad (3.7)$$

A partir de las ecuaciones (3.6) y (3.7) podemos reproducir de manera matricial el razonamiento llevado a cabo en (3.4) y obtener que en un estado ligado deberá cumplirse la condición

$$\mathbf{A}^{(-)} = \mathbf{S}_A \mathbf{S}_B \mathbf{A}^{(-)} \quad (3.8)$$

En el resto de esta tesis nos referiremos a la ecuación (3.8) como la *condición de estado ligado*. Dicha condición puede interpretarse de la siguiente manera:

Una estructura de amarre fuerte cuya matriz de dispersión se construye a partir de la fusión de las matrices de dispersión de dos subsistemas \mathbf{S}_A y \mathbf{S}_B , que tiene un estado ligado para una determinada energía E deberá cumplir que alguno de los eigenvalores del producto $\mathbf{S}_A \mathbf{S}_B$ sea igual a uno. En tal caso, el vector propio asociado a dicho eigenvalor será igual al vector de modos salientes del sistema A .

En el capítulo anterior se discutió la forma en la cual podemos construir cualquier estructura de amarre fuerte, finita o infinita, utilizando el MRMD. Esto nos permite calcular las matrices de dispersión \mathbf{S}_A y \mathbf{S}_B de cualesquiera dos estructuras tales que al unirse den origen a un tercer sistema, al que nos referiremos como sistema completo. Dada la condición (3.8), para conocer las energías asociadas a estados ligados en el sistema completo basta con hallar las energías para las que alguno de los eigenvalores del producto de las matrices de dispersión de los subsistemas sea igual a uno. A este proceso lo llamaremos algoritmo de corte y será explorado más a detalle a continuación.

3.3 Algoritmo de corte

Consideremos dos subsistemas A y B que se unen a través de M cadenas para dar origen a un sistema completo del cual deseamos hallar las energías de estado localizado. Como cada uno de los subsistemas cuenta con exactamente M cadenas acopladas, entonces las matrices de dispersión en ambos casos serán de dimensión $M \times M$ y su producto $\mathbf{S}_A \mathbf{S}_B$ tendrá exactamente M eigenvalores para cualquier energía, a los que denotaremos por D_i para $i = 1, 2, \dots, M$. La condición de estado ligado implica que siempre que la energía corresponda a un estado ligado deberá ocurrir simultáneamente que

$$\text{Im}(D_i) = 0 \text{ y } \text{Re}(D_i) = 1 \quad (3.9)$$

para algún valor de i . Una consideración importante al construir los subsistemas es que los valores de k dados en (2.14) deben ser reales, obligando a la energía a cumplir con la relación $|E| < 2t_c$. Debido a esto, el valor elegido para la integral de salto de las cadenas (t_c) debe ser tal que esta relación se cumpla para todos los valores del barrido deseado.

Una forma en la que se puede verificar que la condición coincide con los estados ligados de una estructura es a través de estructuras finitas, para las que se tiene un Hamiltoniano finito cuyos eigenvalores son las energías de los estados ligados. Consideremos, por ejemplo, una estructura rectangular finita de N sitios de largo por M sitios de ancho. El número total de sitios en este sistema es $P = N \times M$, por lo que la matriz asociada al Hamiltoniano será de dimensión $P \times P$. Como resultado de la diagonalización de la matriz se obtienen P energías que corresponden a P estados ligados en el sistema.

Por otro lado, podemos pensar en otras dos estructuras rectangulares A y B de dimensiones $N_A \times M$ y $(N_B + 1) \times M$ respectivamente, en donde $N_A + N_B = N$ como los que se muestran en la figura 16. La columna adicional en el segundo rectángulo se incluye debido a que al fusionarse A y B las dos columnas de sitios de frontera se convierten en la columna N_A del sistema original.

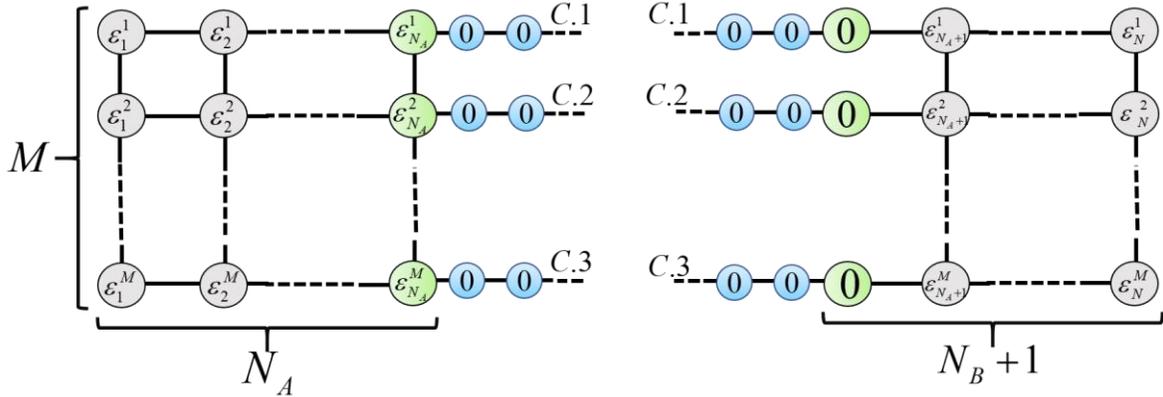


Figura 16: Estructuras rectangulares de amarre fuerte.

Una vez construidas las matrices de dispersión \mathbf{S}_A , \mathbf{S}_B y su producto podemos llevar a cabo el proceso de diagonalización y obtener M diferentes curvas para $\text{Re}(D_i)$ e $\text{Im}(D_i)$ como función de la energía. Las gráficas mostradas en la figura 17 muestran las curvas obtenidas para una estructura rectangular con $N = 5$, $M = 3$ a partir de subsistemas con $N_A = 2$ y $N_B = 3$. En las mismas gráficas se muestran en color verde las eigenenergías calculadas directamente a partir del Hamiltoniano de amarre fuerte. Se puede observar en las gráficas 16A y 16B que las eigenenergías del sistema coinciden siempre con ceros de $\text{Im}(D_i)$, en particular cuando la intersección ocurre en curvas descendentes. Por otro lado, a partir de las gráficas 16C y 16D se puede observar que las eigenenergías coinciden también con puntos en donde $\text{Re}(D_i) = 1$. Este comportamiento es consistente con lo planteado en la condición de estado ligado.

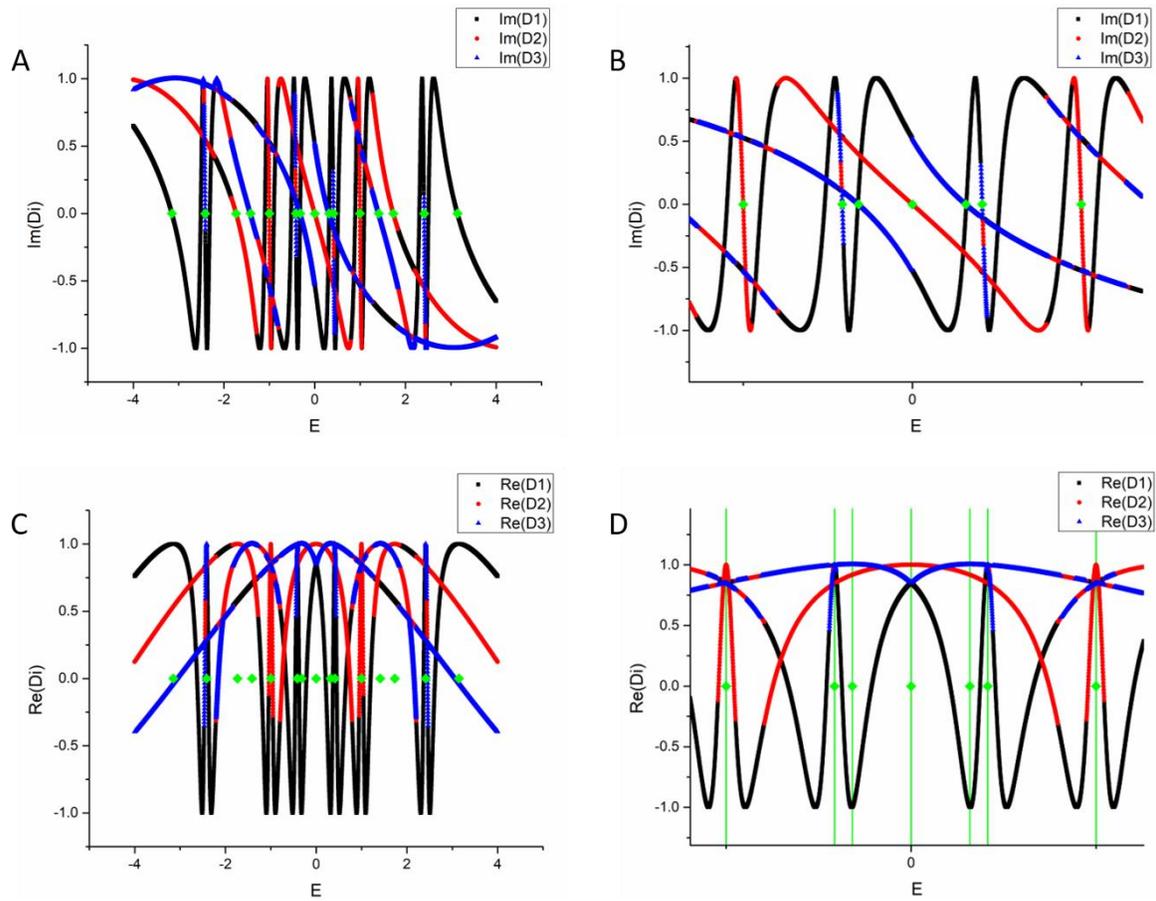


Figura 17: A) $Im(D_i)$ vs E en azul, negro y rojo. Eigenenergías del sistema en color verde. B) Acercamiento de A para energías entre -1 y 1 . C) $Im(D_i)$ vs E en azul, negro y rojo. Eigenenergías del sistema en color verde. D) Acercamiento de C para energías entre -1 y 1 .

Con el objetivo de desarrollar un método que permita hallar estados ligados es necesario obtener numéricamente los valores de las energías para las que se satisface la condición (3.9). Si bien el método de corte nos permite obtener curvas cuyos ceros corresponden a estados ligados, el hecho de tener varias curvas complica la implementación de un método numérico sobre ellas para obtener los ceros. Más aún, la diagonalización de $\mathbf{S}_A \mathbf{S}_B$ no siempre arroja los M eigenvalores exactamente en el mismo orden. Esto se puede observar en los cambios de color de las curvas en las gráficas de la figura 17. Lo anterior complica aún más la determinación numérica de las eigenenergías, por lo que se requiere de una aproximación diferente que permita obtener una única curva en la que se pueda aplicar un método numérico.

3.4 Determinación numérica de energías de estado ligado

Consideremos una estructura de amarre fuerte arbitraria con una única cadena acoplada a cualquiera de los sitios, como la que se muestra en la figura 18B. Una observación de gran

importancia es que añadir una cadena a una estructura provoca que esta sea un sistema completamente diferente. Por ejemplo, una estructura rectangular finita es un sistema diferente a una estructura rectangular de las mismas dimensiones, pero con una cadena acoplada. En el primer sistema no existen guías de onda, por lo que no podemos asociarle una matriz de dispersión. En cambio, en el segundo podemos identificar una pareja de modos $A^{(+)}$ y $A^{(-)}$ relacionados a partir de un coeficiente complejo de dispersión D . Debido a esto, una de las formas en las que podemos recuperar el sistema cerrado a partir del sistema dispersivo es justamente exigiendo que la superposición del modo entrante con el saliente se anule, es decir, $A^{(+)} = -A^{(-)}$. Esto quiere decir que para aquellas energías en las que se tenga que el coeficiente de dispersión es $D = -1$ el sistema es equivalente a la estructura cerrada.

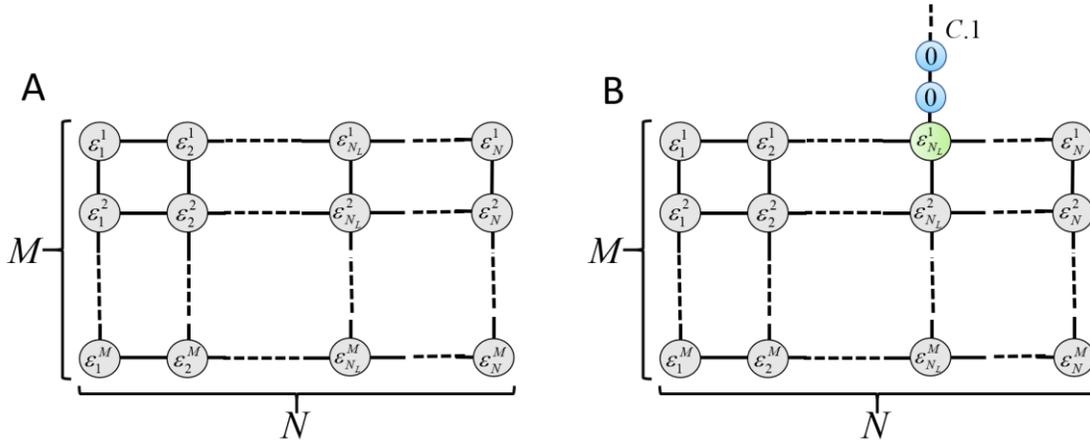


Figura 18: A) Estructura rectangular cerrada de dimensiones NM . B) Estructura rectangular cerrada de dimensiones NM con una cadena acoplada.

Debido a lo anterior, tenemos que una forma de encontrar las eigenenergías de una estructura finita a partir del MRMD es construyendo la matriz de dispersión del sistema completo a partir de dos subsistemas utilizando el método de corte, pero añadiendo una cadena adicional a alguno de los sitios del sistema. De esta forma, al llevar a cabo la fusión de las matrices se obtiene el factor de fase que relaciona a la única pareja de modos del sistema resultante. Al único sitio de frontera que queda después de la fusión lo llamaremos *sitio de cadena*. Luego, tenemos que las energías de estado ligado serán aquellas para las cuales ocurra simultáneamente que

$$\text{Im}(D) = 0 \quad \text{y} \quad \text{Re}(D) = -1. \quad (3.10)$$

En las gráficas 18A y 18B se observan las curvas asociadas a las partes real e imaginaria de D para una estructura rectangular con $N=6$, $M=3$ y una cadena acoplada al sitio $(N=3, M=1)$. Se puede apreciar que las energías para las cuales se satisface la condición (3.10) coinciden con las eigenenergías obtenidas directamente del Hamiltoniano de amarre fuerte.

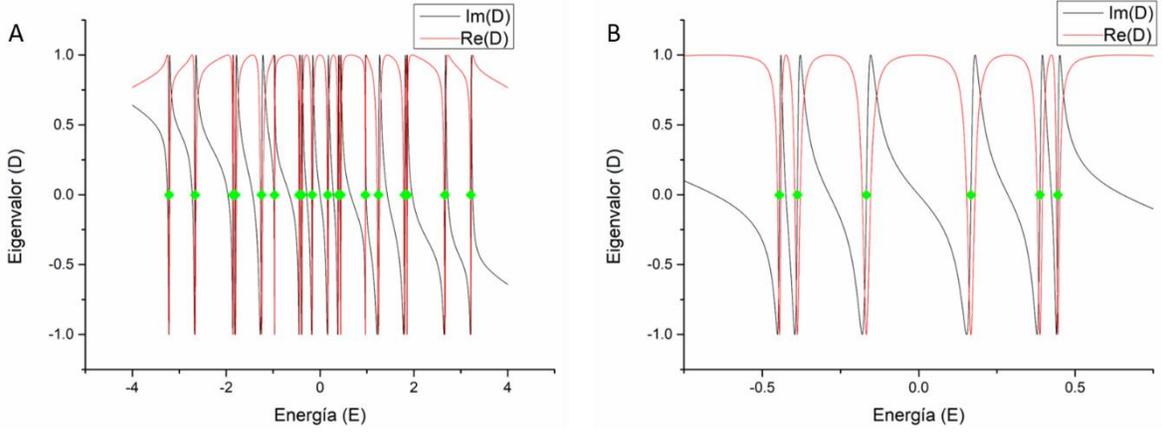


Figura 19: A) $\text{Im}(D)$ en negro, $\text{Re}(D)$ en rojo y eigenenergías en color verde para estructura rectangular de $N=6$ por $M=3$. B) Acercamiento de A para energías entre -0.75 y 0.75 .

De esta forma, podemos proponer un método numérico al que llamaremos *método de cadena* para hallar las energías asociadas a los estados localizados. El algoritmo consiste en utilizar el método de secante para encontrar los ceros $\text{Im}(D)$ y verificar que para tales valores $\text{Re}(D) = -1$. Tras correr muchos ejemplos de diferentes dimensiones y geometrías se observó que las raíces de $\text{Im}(D)$ para los que $\text{Re}(D) = -1$ son siempre aquellos en los que la curva cruza el cero de manera descendente, lo que permite hacer más eficiente el código al centrarse sólo en este tipo de raíces. El método se resume en lo siguiente

Algoritmo 1: Método de cadena para la obtención de energías de estado ligado

1. Establecer el intervalo de energías $[E_{\min}, E_{\max}]$ en el que se llevará a cabo el barrido. Si el barrido se lleva a cabo utilizando una cantidad p de puntos entonces denotaremos a cada una de las energías del barrido por E_i con $i = 1, 2, \dots, p$. Es importante recordar que para todas las energías del intervalo la elección de la integral de salto t_c debe ser tal que $|E| \leq 2t_c$.
2. Dividir al sistema de interés en dos subsistemas A y B de forma tal que al fusionarse utilizando el MRMD se obtenga el sistema original con una cadena acoplada a cualquiera de sus sitios (ver figura 18B).
3. Para cada una de las energías del barrido, calcular las matrices $\mathbf{S}_A(E_i)$ y $\mathbf{S}_B(E_i)$ de los subsistemas y fusionarlas utilizando el producto estrella de Redheffer para obtener el factor de fase $D(E_i)$ correspondiente a la única cadena sobrante. Para simplificar la notación consideremos $\text{Im}(D(E_i)) = \eta_i$
4. Hallar las energías consecutivas para las que η_1 y η_2 cruzan el cero de manera ascendente, es decir, aquellos que cumplen con la condición

$$\eta_1 < 0 \text{ y } \eta_2 > 0. \quad (3.11)$$

5. Encontramos una energía intermedia tal que η_i tenga un valor más cercano a cero. La forma en la que hallamos la energía es a partir de la regla del algoritmo de secante (Pang, 2006)

$$E_3 = E_2 - (E_2 - E_1)\eta_2 / (\eta_2 - \eta_1) \quad (3.12)$$

6. Redefiniendo a las energías como $E_1 = E_2$ y $E_2 = E_3$ repetimos el punto 5 hasta que las energías converjan con una determinada tolerancia δ , es decir, cuando se obtengan energías tales que

$$|E_2 - E_3| < \delta. \quad (3.13)$$

7. Si el valor obtenido para E_3 es tal que $\text{Re}(D(E_3)) + 1 < \delta$ entonces tenemos que E_3 es una energía que satisface las condiciones (3.10) de estado ligado.

3.5 Algoritmo de refinamiento selectivo

Una observación valiosa respecto al método recién descrito es que una estructura finita con N sitios en total puede tener hasta el mismo número de eigenenergías, provocando que a medida que se consideran estructuras más grandes la densidad de energías en un determinado intervalo también aumente. Como el algoritmo de secante requiere la curva asociada a $\text{Im}(D)$ cruce el cero en cada una de estas energías de forma ascendente para poder localizarlas, a medida que el número total de sitios de un sistema aumente la cantidad de puntos necesaria para lograr obtener todos los cruces de $\text{Im}(D)$ también debe de aumentar. Dado el objetivo de reducir los recursos computacionales necesarios para hallar las eigenenergías de sistemas de gran tamaño, resulta de gran interés modificar el algoritmo anterior de modo que sea posible hallar energías de estado ligado aún cuando la cantidad de puntos de la partición no permita observar el cruce en cero de la curva. A continuación, se motiva una modificación al algoritmo que permite mejorar la efectividad del método para barridos de pocos puntos.

Consideremos las gráficas de la figura 20. En ellas se observan las curvas asociadas a $\text{Im}(D)$ y $\text{Re}(D)$ para una estructura rectangular de dimensiones $N=35$ y $M=15$. Las gráficas 20A y 20B corresponden a una partición homogénea de 1,000 puntos del intervalo de energías comprendido entre -3.5 y -3 , mientras que las gráficas 20C y 20D corresponden a una partición de 100,000 puntos para el mismo intervalo de energías. En estas gráficas se puede apreciar que, dado que esta estructura de 35×15 tiene un total 525 sitios, la densidad de energías en el intervalo es tal que la partición de 1,000 puntos no permite observar los cruces de $\text{Im}(D)$ que la partición de 100,000 puntos sí permite ver.

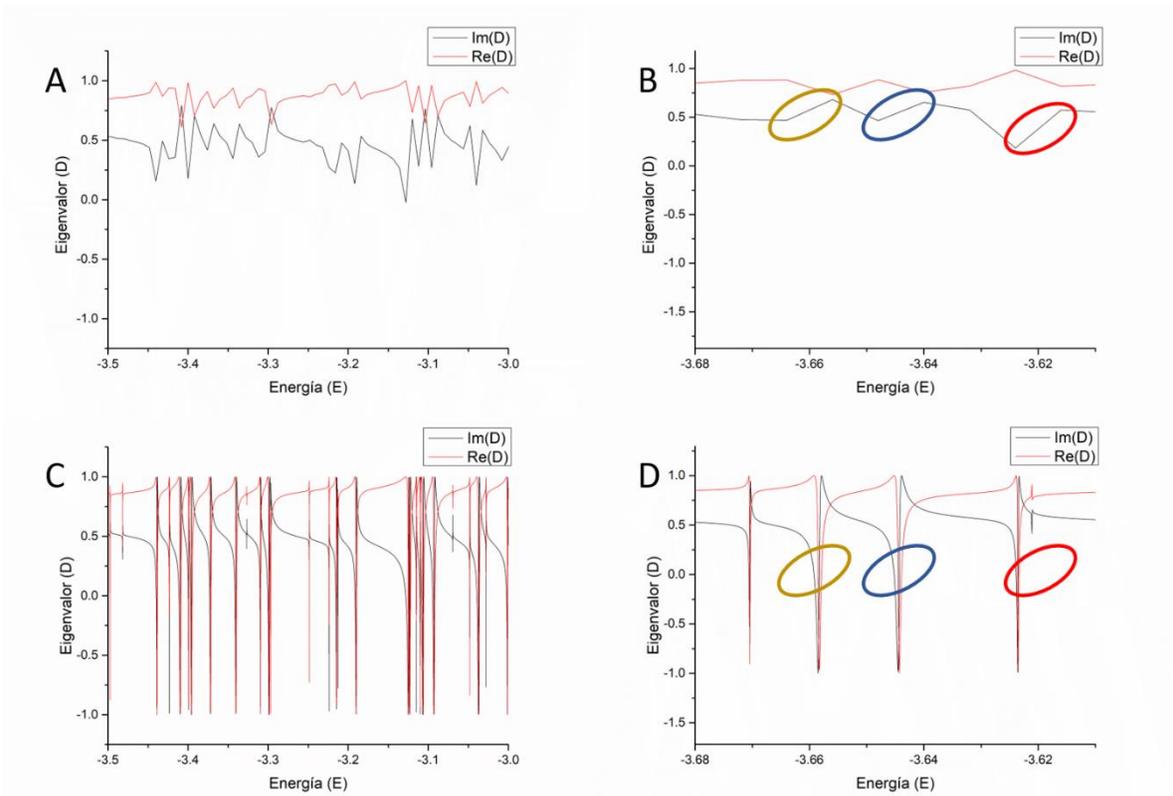


Figura 20: Curvas de $\text{Im}(D)$ y $\text{Re}(D)$ para una estructura rectangular de 35×15 . A) corresponde a una partición de 1,000 puntos para energías entre -3.5 y -3. B) Es un acercamiento de A para energías entre -3.68 y -3.1. C) corresponde a una partición de 100,000 puntos y D) es un acercamiento de C.

Sin embargo, en la gráfica 20B podemos identificar colecciones de 3 puntos consecutivos tales que el segmento de recta que une a los primeros dos de ellos tiene pendiente negativa y el segmento de recta que une al segundo con el tercero tiene una pendiente positiva. Si denotamos a los 3 puntos consecutivos como η_1 , η_2 y η_3 , tenemos una condición a la que nos referiremos como *curva en V* y que podemos escribir como

$$\eta_1 > \eta_2 > 0 \quad \text{y} \quad 0 < \eta_2 < \eta_3. \quad (3.14)$$

El cambio en la pendiente sugiere que la región comprendida entre estos 3 puntos debe contener una raíz de la curva. Esto podemos observarlo a partir de las regiones marcadas en elipses en las figuras 20B y 20D, se puede apreciar que las regiones de 20B en las que se tiene una curva en V coinciden con las regiones en donde la curva imaginaria de 20D cruza el origen de forma ascendente. Esto permite que, una vez obtenida la curva de $\text{Im}(D)$ para una cantidad de puntos en particular, se lleve a cabo una refinación específicamente en las regiones que presenten curva en V. Al refinar exclusivamente estas regiones se mejora la capacidad de detección de eigenenergías de una partición de pocos puntos de una forma más eficiente que llevando a cabo un refinamiento en todo el intervalo de interés.

El razonamiento anterior es igualmente válido para cuando se tenga un cambio en el signo de la pendiente de 3 puntos consecutivos η'_1, η'_2 y η'_3 que se encuentren debajo de cero, es decir, tales que

$$\eta'_1 < \eta'_2 < 0 \quad \text{y} \quad 0 > \eta'_2 > \eta'_3. \quad (3.15)$$

A este comportamiento le llamaremos *V invertida* y también representa una región de interés para llevar a cabo una refinación selectiva con el objetivo de hallar una raíz de $\text{Im}(D)$. A continuación, se presenta el diagrama de flujo que describe el algoritmo de refinamiento selectivo.

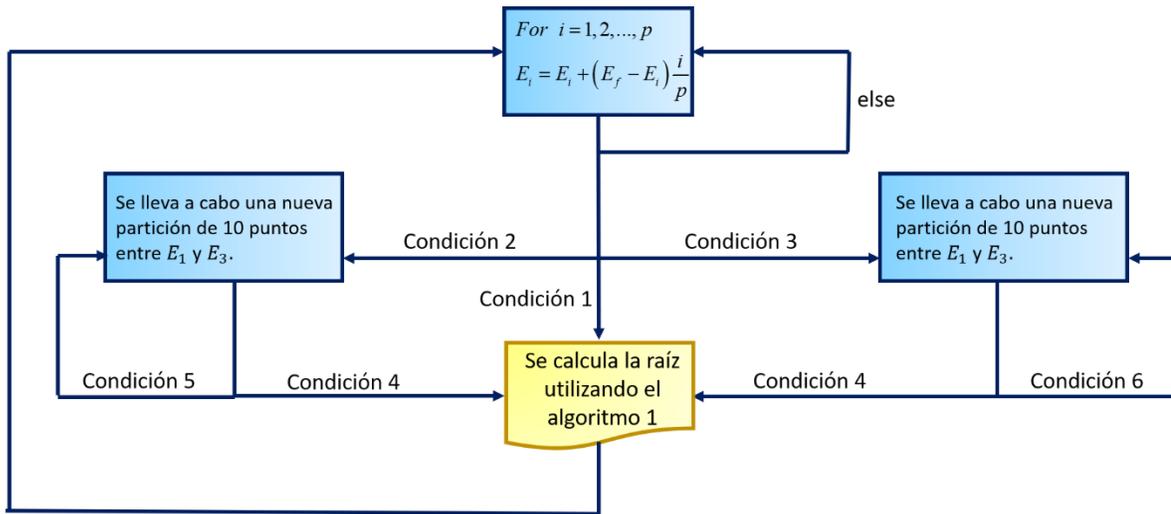


Figura 21: Diagrama de flujo del algoritmo de secante con refinamiento selectivo.

Listado de condiciones:

1. Se tiene una pareja de energías consecutivas E_1 y E_2 cuyas fases imaginarias cumplen con (3.11)
2. Se tienen 3 energías consecutivas E_1, E_2 y E_3 , que cumplen con la condición de curva en V.
3. Se tienen 3 energías consecutivas E_1, E_2 y E_3 , que cumplen con la condición de curva en V invertida.
4. Se tiene una nueva pareja de energías consecutivas de la nueva partición que cumplen con la condición 1.
5. Se tiene un nuevo conjunto de energías consecutivas E_1, E_2 y E_3 , que cumplen con la condición 2.
6. Se tiene un nuevo conjunto de energías consecutivas E_1, E_2 y E_3 , que cumplen con la condición 3.

3.6 Obtención de la función de onda

Como el algoritmo recién descrito nos permite hallar las energías asociadas a estados ligados, el siguiente paso es obtener la función de onda asociada a cada una de estas energías. El MRMD también nos permite plantear un algoritmo para reconstruir la función de onda a partir de las matrices de dispersión de los subsistemas que dan origen a la estructura completa. Consideremos una estructura en la que etiquetamos a todos los sitios utilizando dos números enteros n y m , por ejemplo, la que se muestra en la figura 22A. En este caso, dado que las funciones de Wannier forman una base completa tenemos que la función de onda será una combinación lineal de la forma

$$|\psi\rangle = \sum_{n,m} \lambda_{n,m} |n,m\rangle, \quad (3.16)$$

en donde $|n,m\rangle$ es la función de Wannier normalizada asociada al sitio etiquetado por n y m , y los coeficientes complejos $\lambda_{n,m}$ son los factores de amplitud de cada sitio. Dicho esto, para conocer la función de onda asociada a un estado ligado basta con determinar los coeficientes $\lambda_{n,m}$ para la energía correspondiente a dicho estado.

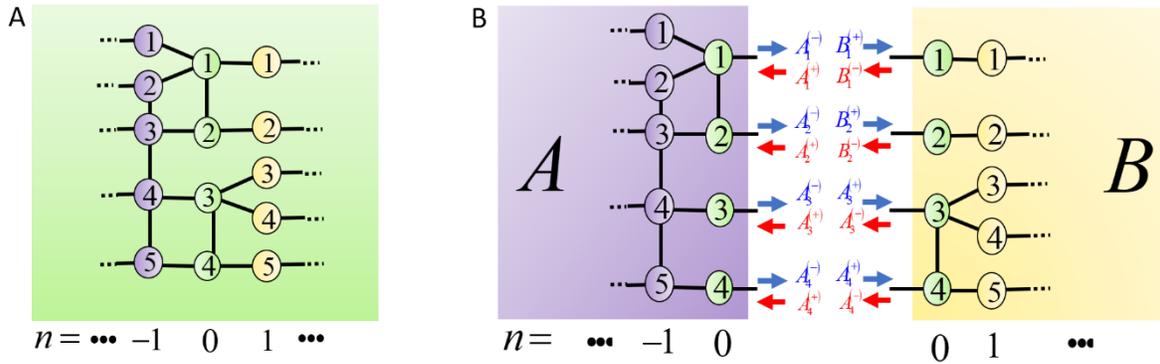


Figura 22: A) Estructura de amarre fuerte con sitios etiquetados a partir de parejas de enteros n y m . B) División de la estructura A) en dos subsistemas.

Para comenzar a abordar el problema, podemos dividir la estructura en dos subsistemas A y B como los de la figura 22B, en donde los sitios de frontera que se fusionan para dar origen a la estructura original son los M sitios etiquetados con $n=0$ de la estructura original. Consideremos el subsistema A . Para que la descripción de la función de onda propuesta en (3.16) sea compatible con la que se planteó anteriormente en un sistema dispersivo, debe ocurrir que el coeficiente $\lambda_{0,m}$ coincida con el coeficiente $\gamma_{C,0}^F$ de la ecuación (2.9). Recordando también que $\gamma_{C,0}^F$ se relaciona con las amplitudes entrantes y salientes a partir de la expresión (2.13) tomando $l=0$, tenemos que

$$\lambda_{0,m} = A_m^{(+)} + A_m^{(-)}, \quad (3.17)$$

en donde $A_m^{(+)} (A_m^{(-)})$ corresponde al coeficiente de amplitud entrante(saliente) del m -ésimo sitio de frontera de A .

Al deducir las condiciones utilizadas en el método de corte, encontramos que las energías para las cuales se tiene un estado localizado son aquellas para las que alguno de los eigenvalores del producto de matrices $\mathbf{S}_A \mathbf{S}_B$, al que denotaremos por D_α , es igual a 1. Esto lo podemos observar en la ecuación (3.8), de donde también se deduce que el eigenvector \mathbf{D}_α asociado a D_α es aquel cuyas entradas corresponden a los modos salientes del sistema A , es decir, $\mathbf{D}_\alpha = \mathbf{A}^{(-)}$.

Por otro lado, dado que el vector de modos entrantes en A debe coincidir con el de modos salientes de B tenemos que $\mathbf{A}^{(+)} = \mathbf{B}^{(-)}$. Si además tomamos en cuenta que $\mathbf{B}^{(+)}$ debe coincidir con $\mathbf{A}^{(-)}$ y que se satisface la ecuación de dispersión $\mathbf{B}^{(-)} = \mathbf{S}_B \mathbf{B}^{(+)}$, entonces podemos obtener los modos entrantes de A en términos de los salientes a partir de la relación

$$\mathbf{A}^{(+)} = \mathbf{S}_B \mathbf{A}^{(-)} = \mathbf{S}_B \mathbf{D}_\alpha. \quad (3.18)$$

Luego, el coeficiente asociado a las funciones de la forma $|0, m\rangle$ estará dado en términos de las entradas de la expresión vectorial

$$\mathbf{\Lambda}_0 = (\mathbf{I} + \mathbf{S}_B) \mathbf{D}_\alpha, \quad (3.19)$$

en donde $\mathbf{\Lambda}_0$ es el vector cuyas entradas corresponden a los coeficientes de (3.17), es decir,

$$\mathbf{\Lambda}_0 = \begin{pmatrix} \lambda_{0,1} \\ \vdots \\ \lambda_{0,M} \end{pmatrix}. \quad (3.20)$$

Para determinar los coeficientes asociados al resto de la estructura consideremos a todos aquellos sitios etiquetados por algún valor de n en particular, por ejemplo, $n = -p$. Si la numeración de los sitios se realiza de forma tal que todos los sitios con n negativa se encuentran en el subsistema A entonces podemos dividirlo en una nueva pareja de estructuras C y E tales que los sitios de frontera que se unen para formar al sistema A son los M' sitios con $n = -p$. En la figura 23 se puede apreciar un ejemplo de un sistema dividido de la forma recién descrita. Esta división provoca que tengamos parejas de modos entrantes(salientes) al subsistema C , a los que denotaremos por $C_m^{(+)} (C_m^{(-)})$. De forma análoga para E , tendremos parejas de modos entrantes(salientes) denotados por $E_m^{(+)} (E_m^{(-)})$.

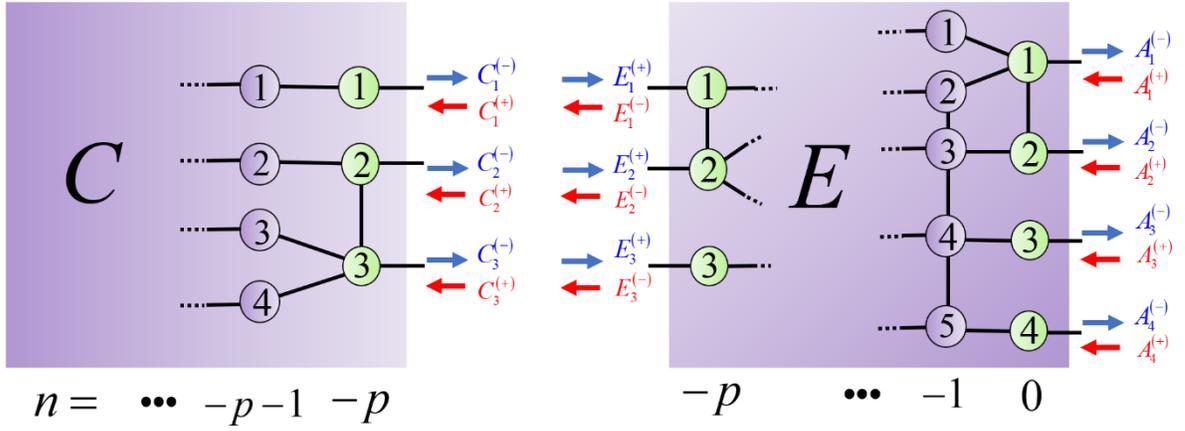


Figura 23: División del subsistema A en dos estructuras, C y E.

Aplicando el mismo razonamiento que usamos anteriormente tenemos que los coeficientes asociados a los sitios de frontera de C estarán dados en términos de las amplitudes de los modos entrantes y salientes de la forma

$$\lambda_{-p,m} = C_m^{(+)} + C_m^{(-)}. \quad (3.21)$$

Luego, si ya se conocen las amplitudes $A_m^{(\pm)}$ asociadas a $n=0$ basta con conocer cómo se relacionan con las amplitudes $C_m^{(\pm)}$ para poder obtener los coeficientes $\lambda_{-p,m}$. Para esto, consideremos a las matrices de dispersión asociadas a C y E , denotadas por \mathbf{S}_C y \mathbf{S}_E respectivamente. Una primera observación a partir de la cantidad de ondas entrantes a cada uno de los subsistemas es que la matriz \mathbf{S}_C será de dimensiones $M' \times M'$, mientras que \mathbf{S}_E será de $(M + M') \times (M + M')$ en donde M es la cantidad de cadenas que unen a los sistemas A con B y M' es la cantidad de cadenas que una a C con el sistema E .

Consideremos el vector $\mathbf{E}^{(+)}(\mathbf{E}^{(-)})$, cuyas entradas son los modos entrantes(salientes) en E . Si las entradas del vector se enumeran de forma tal que las primeras M corresponden a los modos entrantes desde el sistema B y las últimas M' entradas corresponden a los modos entrantes desde el sistema C . Recordando además que la condición de acoplamiento que exige que los modos entrantes(salientes) en C coincidan los M' últimos modos salientes(entrantes) en E tenemos que el vector $\mathbf{E}^{(\pm)}$ puede escribirse como

$$\mathbf{E}^{(\pm)} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(\pm)} \\ \mathbf{C}^{(\mp)} \end{pmatrix}, \quad \text{con } \mathbf{A}^{(\pm)} = \begin{pmatrix} A_1^{(\pm)} \\ \vdots \\ A_M^{(\pm)} \end{pmatrix} \text{ y } \mathbf{C}^{(\mp)} = \begin{pmatrix} C_1^{(\mp)} \\ \vdots \\ C_{M'}^{(\mp)} \end{pmatrix}. \quad (3.22)$$

Dada esta organización, nos será conveniente dividir la matriz \mathbf{S}_E de la forma

$$\mathbf{S}_E = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{11}^E & \mathbf{S}_{12}^E \\ \mathbf{S}_{21}^E & \mathbf{S}_{22}^E \end{pmatrix}, \quad (3.23)$$

en donde las dimensiones de cada submatriz son $\dim(\mathbf{S}_{11}^E) = M \times M$, $\dim(\mathbf{S}_{12}^E) = M \times M'$, $\dim(\mathbf{S}_{21}^E) = M' \times M$ y $\dim(\mathbf{S}_{22}^E) = M' \times M'$.

A partir de la expresión (3.22) y de la ecuación de dispersión $\mathbf{E}^{(-)} = \mathbf{S}_E \mathbf{E}^{(+)}$ tenemos que

$$\mathbf{C}^{(+)} = \mathbf{S}_{21}^E \mathbf{A}^{(+)} + \mathbf{S}_{22}^E \mathbf{C}^{(-)}. \quad (3.24)$$

Por otro lado, a partir de la ecuación de dispersión de \mathbf{C} tenemos que $\mathbf{C}^{(-)} = \mathbf{S}_C \mathbf{C}^{(+)}$, por lo que la ecuación (3.24) puede reescribirse de la forma

$$\mathbf{C}^{(+)} = \mathbf{S}_{21}^E \mathbf{A}^{(+)} + \mathbf{S}_{22}^E \mathbf{S}_C \mathbf{C}^{(+)}. \quad (3.25)$$

Esto nos permite obtener a $\mathbf{C}^{(+)}$ en términos de $\mathbf{A}^{(+)}$ a partir de la expresión

$$\mathbf{C}^{(+)} = (\mathbf{I} - \mathbf{S}_{22}^E \mathbf{S}_C)^{-1} \mathbf{S}_{21}^E \mathbf{A}^{(+)}. \quad (3.26)$$

Una vez conocidos los modos entrantes al sistema \mathbf{C} , los modos salientes pueden obtenerse a partir de la relación de dispersión como $\mathbf{S}_C \mathbf{C}^{(+)}$. Luego, la expresión de los coeficientes de la función de onda asociados a los M' sitios con $n = -p$ se pueden obtener como las entradas del vector dado por

$$\mathbf{\Lambda}_{-p} = (\mathbf{I} + \mathbf{S}_C)(\mathbf{I} - \mathbf{S}_{22}^E \mathbf{S}_C)^{-1} \mathbf{S}_{21}^E \mathbf{A}^{(+)}, \quad (3.27)$$

en donde

$$\mathbf{\Lambda}_{-p} = \begin{pmatrix} \lambda_{-p,1} \\ \vdots \\ \lambda_{-p,M'} \end{pmatrix}. \quad (3.28)$$

La expresión (3.27) nos permite hallar los coeficientes de amplitud asociados a cada uno de los sitios del sistema en términos solamente del eigenvector \mathbf{D}_α y de matrices de dispersión parciales de estructuras que separan diferentes puntos del sistema. A continuación, se presenta el algoritmo que resume el razonamiento anterior para obtener la función de onda de un estado ligado.

Algoritmo 2: Construcción de la función de onda de un estado ligado

1. Obtener las energías asociadas a estados ligados haciendo uso del método de cadena (algoritmo 1).
2. Dividir la estructura en dos subsistemas A y B que al fusionarse reproduzcan al sistema completo y calcular las matrices de dispersión \mathbf{S}_A y \mathbf{S}_B (método de corte) para alguna de las energías obtenidas en el paso 1.

3. Obtener los eigenvalores y eigenvectores del producto $\mathbf{S}_A \mathbf{S}_B$. Las entradas de los eigenvectores \mathbf{D}_α cuyo eigenvalor sea $D_\alpha = 1$ corresponden a las amplitudes de los modos entrantes en A en un estado ligado.
4. Obtener los coeficientes $\lambda_{0,m}$ de la combinación lineal (3.16) a partir de la ecuación (3.19) aplicada sobre \mathbf{D}_α .
5. Dividir al subsistema A en dos subsistemas, C y E , y calcular sus matrices de dispersión \mathbf{S}_C y \mathbf{S}_E .
6. Calcular los coeficientes $\lambda_{n,m}$ de los sitios de frontera que unen a C con E a partir de la ecuación (3.27).
7. Repetir los pasos 5 y 6 para diferentes divisiones del sistema hasta que se conozcan los coeficientes de todos los sitios en ella.
8. Repetir los pasos 5, 6 y 7 para los sitios de la subestructura B .

Capítulo 4

Resultados

4.1 Sistemas finitos

Una forma de verificar la validez del método propuesto para hallar la función de onda de estados ligados es comparando con los resultados obtenidos por un método diferente. En particular, en el caso de estructuras con una cantidad finita de sitios, las eigenenergías pueden obtenerse directamente del Hamiltoniano de amarre fuerte y los eigenvectores corresponderán directamente a las funciones de onda asociadas a cada energía. A este proceso le llamaremos *método directo*.

Consideremos una estructura rectangular finita de $N \times M$ sitios. Como el Hamiltoniano correspondiente a este sistema será de dimensiones $(N \times M) \times (N \times M)$. Los recursos computacionales necesarios para llevar a cabo el proceso de diagonalización crecen muy rápidamente, lo que provoca que el estudio de estructuras con un número muy grande de sitios sea imposible por esta vía. Con el objetivo de comparar los métodos, consideremos una estructura de dimensiones $N = 100$ y $M = 50$. La matriz a diagonalizar por el método directo es de 5000×5000 , mientras que en el método asistido por MRMD las matrices involucradas son apenas de 50×50 . Esto no sólo permite reducir el costo computacional del proceso, sino que también disminuye el tiempo necesario para llevarlo a cabo.

En las figuras 24 y 25 podemos observar las funciones de onda obtenidas por el método directo y por el método asistido por MRMD para dos diferentes eigenenergías obtenidas de la diagonalización del Hamiltoniano. Podemos apreciar que el método asistido por MRMD es capaz de reproducir los resultados del método directo. Debido a esto, y a la discusión anterior respecto a la dimensionalidad de las matrices involucradas en ambos métodos, se concluye que el método propuesto ofrece una alternativa de menor costo computacional con respecto del método directo.

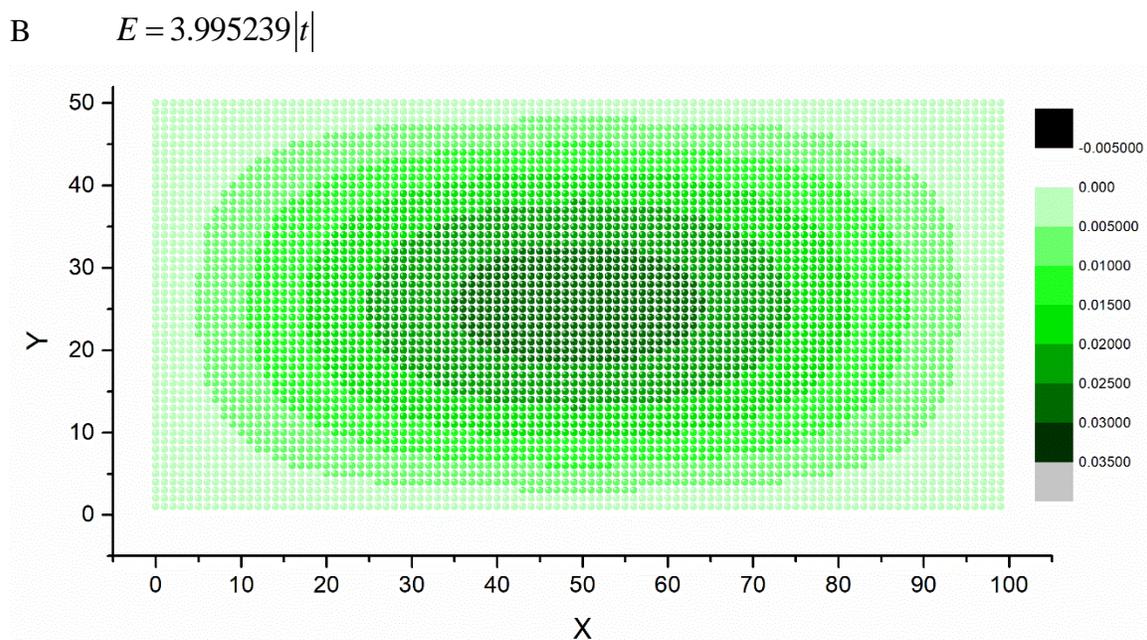
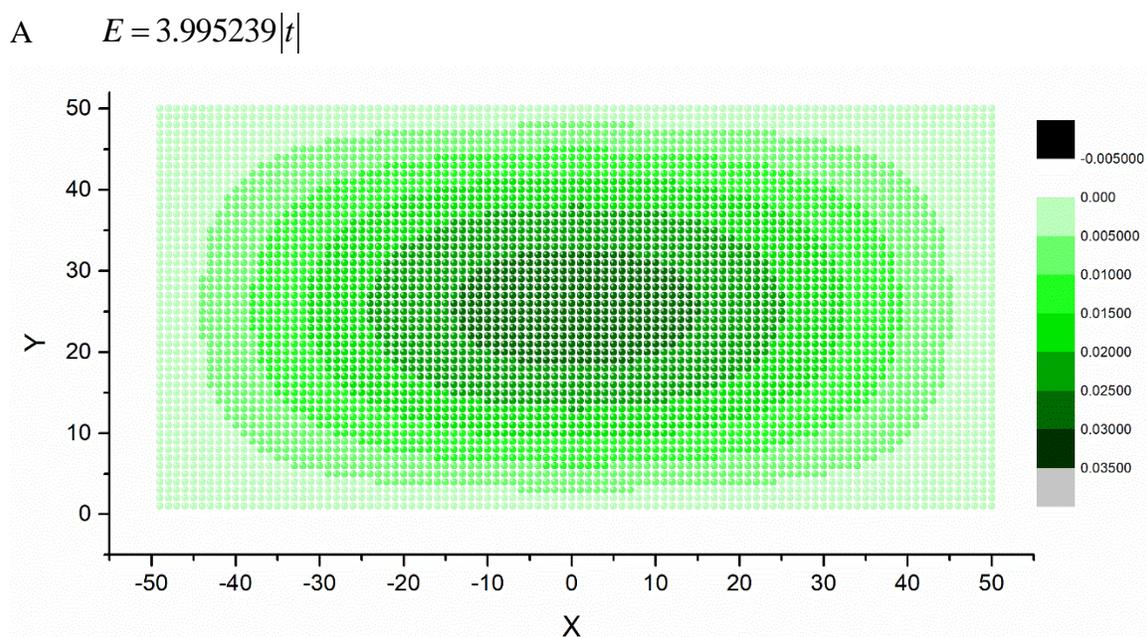
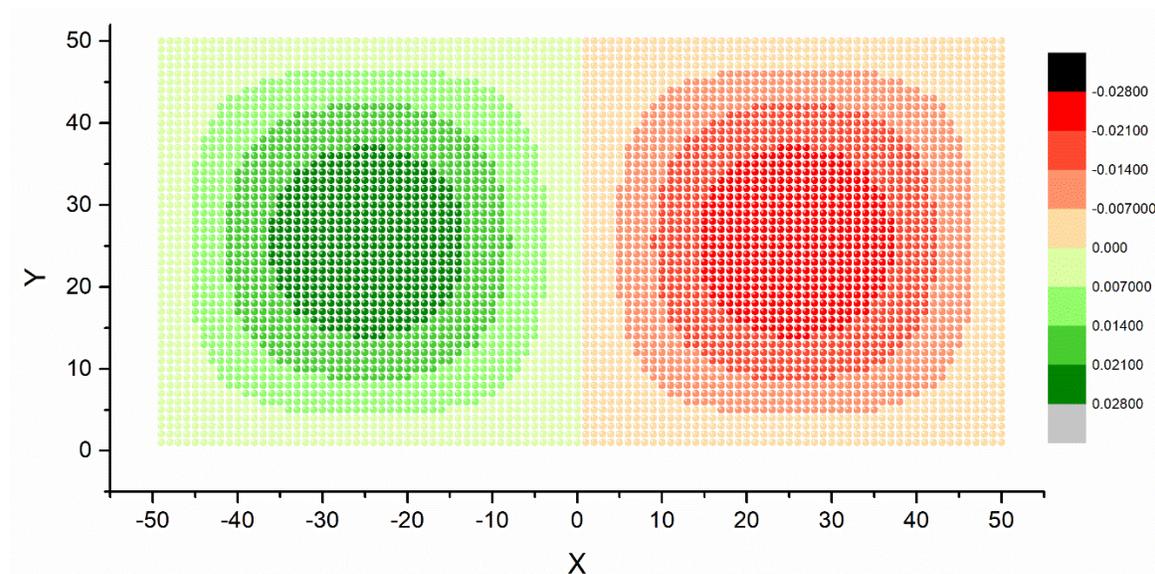


Figura 24: Eigenfunciones normalizadas para una estructura rectangular de 100 sitios de largo por 50 de ancho. A fue obtenida por el método asistido por MRMD mientras que B se obtuvo por diagonalización directa del Hamiltoniano.

A $E = 3.992337|t|$



B $E = 3.992337|t|$

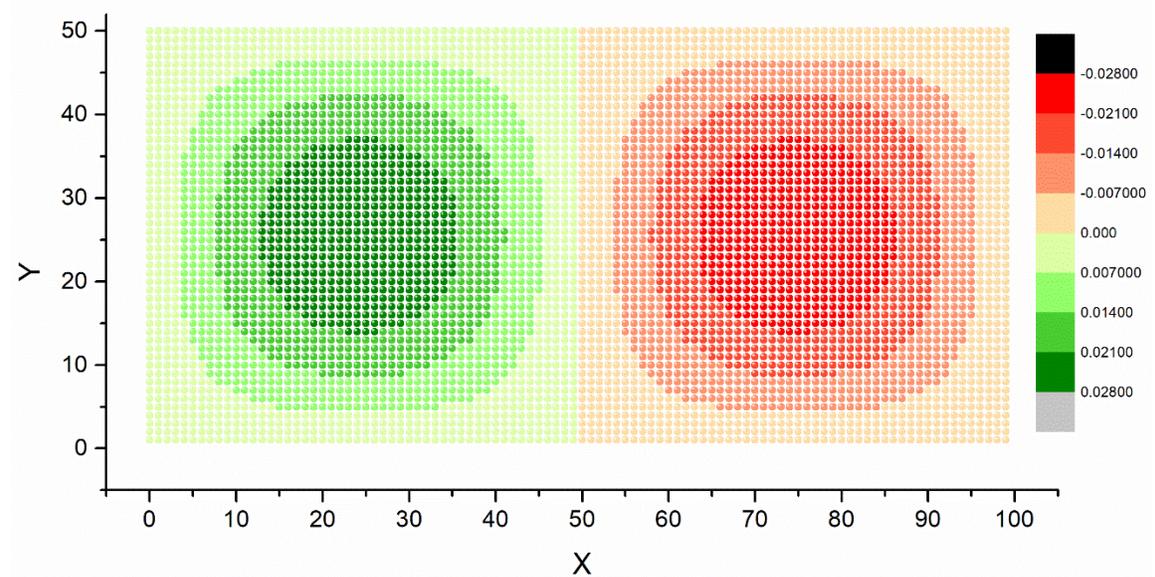


Figura 25: Eigenfunciones normalizadas para una estructura rectangular de 100 sitios de largo por 50 de ancho. A fue obtenida por el método asistido por MRMD mientras que B se obtuvo por diagonalización directa del Hamiltoniano.

4.2 Consideración para estructuras infinitas

Además de reducir los costos computacionales, el método asistido por MRMD también permite hallar las energías de estados ligados en sistemas infinitos, lo que resulta imposible por el método de diagonalización directa. Al extender el método a sistemas infinitos debe tenerse en consideración la forma en la cual se obtiene la matriz de dispersión. En particular, en el presente trabajo se consideran estructuras Q1D infinitas con algún defecto que provoque la existencia de estados localizados. Retomando la discusión realizada en el tercer capítulo, una forma en la que se puede modelar este tipo de sistemas es considerando regiones semi-infinitas, a las que nos referimos como *guías de onda*, que se acoplan a una región de dispersión central que contiene al defecto.

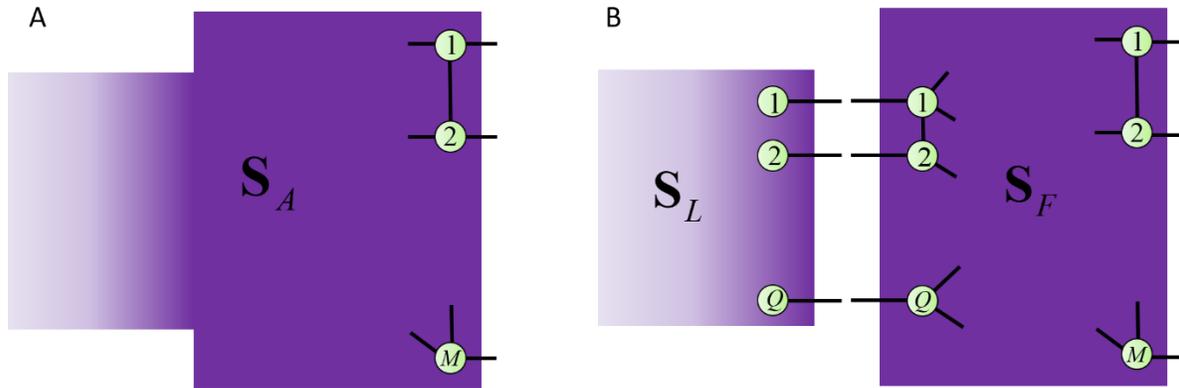


Figura 26: A) Sub-sistema de una estructura Q1D infinita. B) División del sub-sistema A en una estructura finita y una infinita periódica.

A partir de lo establecido en el algoritmo 1, para poder obtener las energías de estado ligado es necesario dividir a sistema en dos subsistemas A y B de forma tal que las matrices de dispersión S_A y S_B sean de la misma dimensión y que esta sea igual al número de sitios de frontera que se unen para dar origen al sistema completo. Observemos el ejemplo de la figura 26. En este ejemplo podemos observar que las matrices S_A y S_B deberán ser ambas de dimensión $M \times M$, ya que este es el número de sitios que deberían unirse para dar origen al sistema completo. Notemos además que ambos sistemas contienen una región semi-infinita, por lo que para construir cualquiera de las dos matrices es necesario fusionar la matriz de una estructura finita S_F con la matriz de dispersión S_L de una guía de onda. En el capítulo 3 se encontró que la matriz de dispersión asociada a un sistema semi-infinito periódico se puede obtener a partir de las ecuaciones (2.31) y (2.32). Dicha matriz será de dimensión $(Q + \tilde{Q}) \times (Q + \tilde{Q})$, en donde Q corresponde al número de sitios que se unirán a la estructura finita y \tilde{Q} es el número de canales abiertos en la guía de onda. Debido a esto, al realizarse la fusión de las matrices S_L y S_F se obtendrá una matriz S_A de dimensiones $(M + \tilde{Q}) \times (M + \tilde{Q})$.

Esto representa un problema, ya que la dimensión de las matrices \mathbf{S}_A y \mathbf{S}_B dependerá del número de canales abiertos y sólo será igual a $M \times M$ cuando no se tengan canales abiertos. Una forma de solucionar este problema es considerando que los últimos Q renglones y columnas de la matriz \mathbf{S}_L corresponden a estados extendidos en las guías de onda, mismos que en un estado ligado no deberán de existir. Esto nos permite redefinir a la matriz de la guía de onda como $\mathbf{S}'_L = \mathbf{S}_L(i, j)$ con $i, j = 1, 2, \dots, Q$. En otras palabras, para hallar estados ligados consideramos solamente la submatriz de la guía de onda que no está asociada a estados extendidos.

4.3 Sistemas Q1D con variación de sección transversal

Tras haber validado los resultados obtenidos en el caso finito tenemos ahora la posibilidad de aplicar el método a sistemas infinitos. Consideremos, por ejemplo, una nanocinta rectangular infinita de ancho $M = 40$ en donde todas las energías de sitio son $\varepsilon = 0$ y el valor de todas las integrales de salto entre primeros vecinos es $t = -1$. Dado que este sistema es periódico, sabemos que se tendrán estados extendidos cuyas funciones de onda son no normalizables.

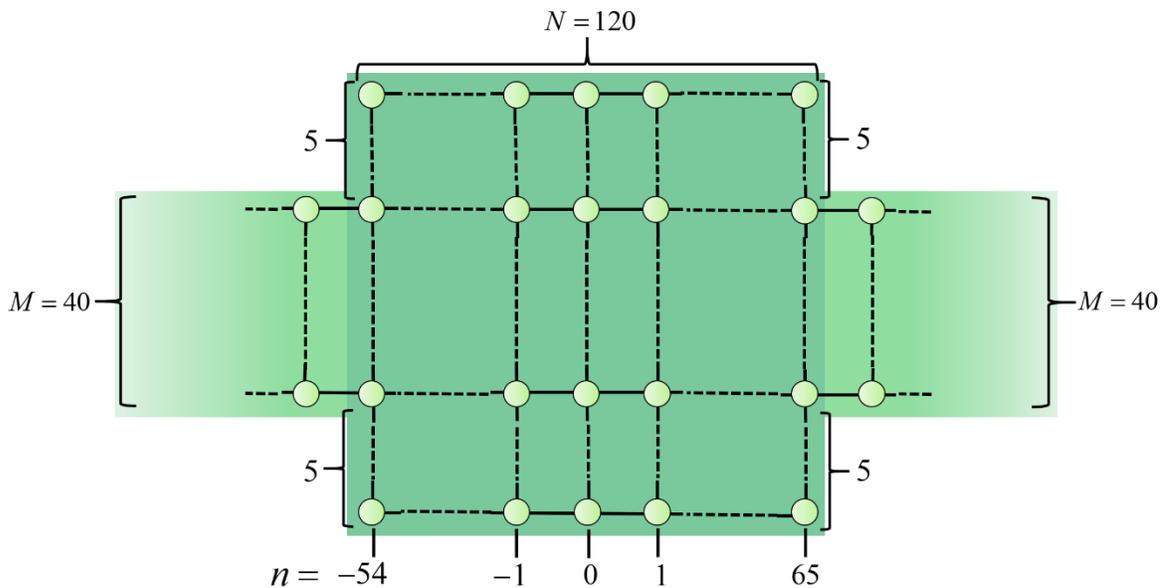


Figura 27: Estructura rectangular infinita bidimensional con defecto de variación de sección transversal.

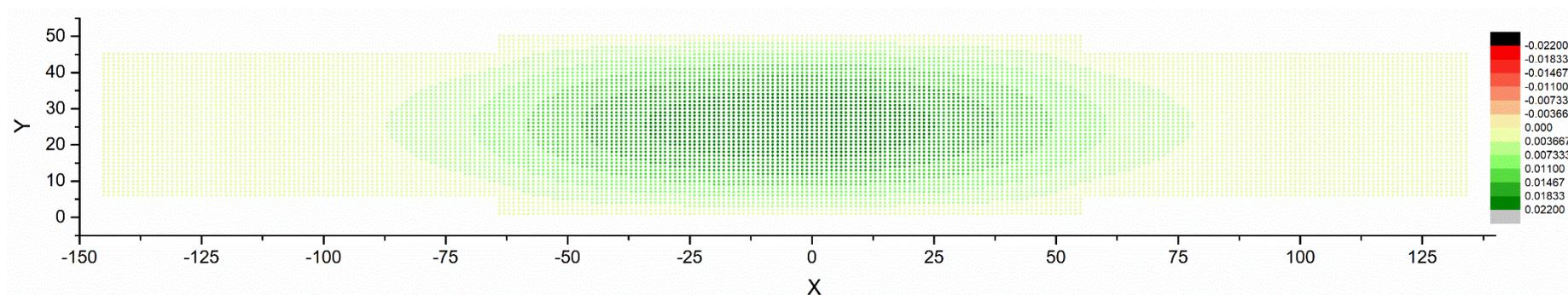
Como hemos discutido anteriormente, es posible obtener estados ligados en la estructura infinita a condición de que exista algún defecto en ella que rompa con la periodicidad. Retomemos la estructura rectangular periódica pero esta vez con una región 10 sitios más ancha que se extiende longitudinalmente por 120 sitios, tal como se muestra en la figura 27.

A este defecto le denominamos *variación de sección transversal*. En caso de existir un estado ligado, es razonable considerar que tal estado deberá ubicarse en una región que contenga al defecto. Como hemos visto antes, al aplicar el algoritmo 1 sobre el sistema se obtiene una lista de energías para las que la parte imaginaria del eigenvalor $\text{Im}(D(E))$ se anula. Sabemos también que aquellas energías en la lista para las cuales $\text{Re}(D(E)) = -1$ son las que están asociadas a estados ligados. Si se divide la estructura en un sistema A formado por 55 sitios de la región ancha más una región semi-infinita y otro sistema B formado por 65 sitios de la región ancha más la otra región semi-infinita, y ubicando la cadena adicional en el sitio de frontera número 15 contando de arriba abajo, se obtienen 10 diferentes energías que satisfacen la condición de estado ligado. En las figuras 28-32 se muestran las funciones de onda calculadas por el algoritmo 2 para cada una de las 10 energías halladas.

A partir de las gráficas 28-32 se puede apreciar que las funciones de onda obtenidas en todos los casos decaen al alejarse del defecto, lo que confirma que las energías halladas efectivamente corresponden a estados ligados.

Entre otras observaciones interesantes, se tiene que las 10 energías corresponden a 5 valores diferentes con signo positivo y negativo. En el caso de energías positivas se distinguen regiones en las que la parte real de la función es totalmente positiva o negativa. Por otro lado, en las energías negativas se tiene siempre una alternancia en el signo de la parte real. A pesar de esta clara diferencia entre ambos casos, se puede apreciar también que el comportamiento del valor absoluto de la parte real de la función de onda es idéntico para cada pareja de energías.

A $E = 3.995815|t|$



B $E = -3.995815|t|$

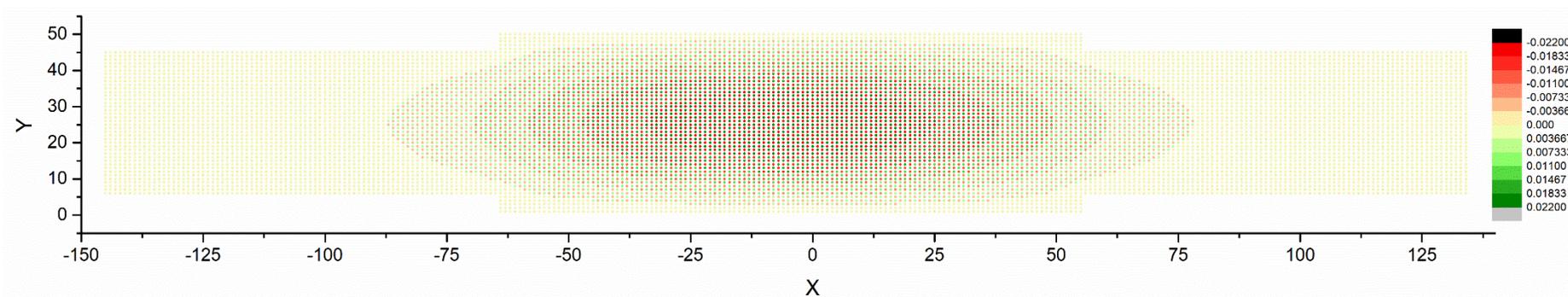
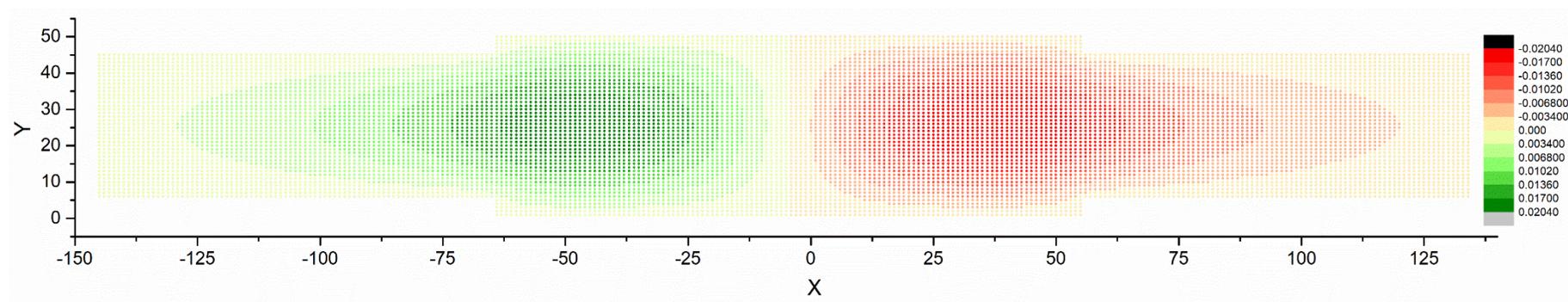


Figura 28: Funciones de onda normalizadas obtenidas por MRMD para una nanocinta rectangular de $ML=40$ sitios de ancho con un defecto de variación de sección transversal que consiste en una región con ancho $M=50$ sitios que se extiende longitudinalmente por 120 sitios. El valor absoluto de la energía es $E=3.995815|t|$.

A $E = 3.994762|t|$



B $E = -3.994762|t|$

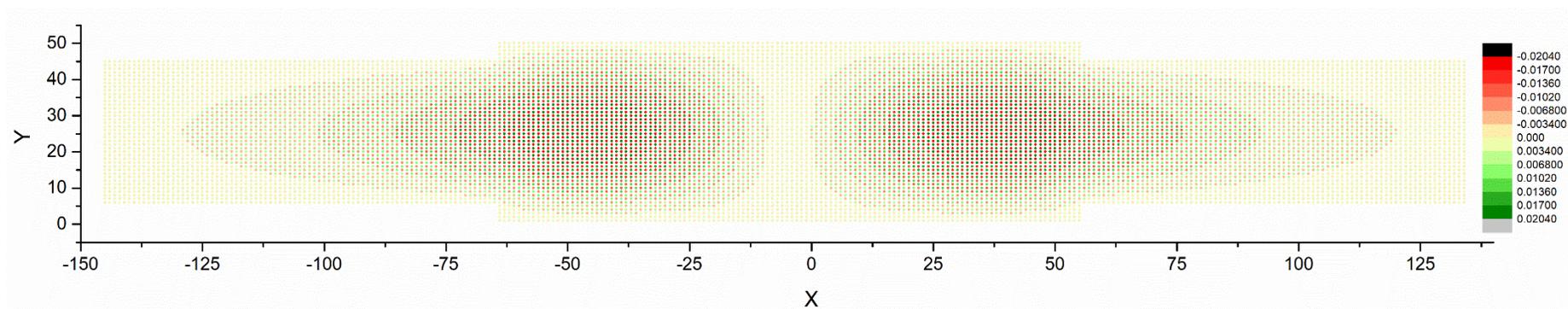
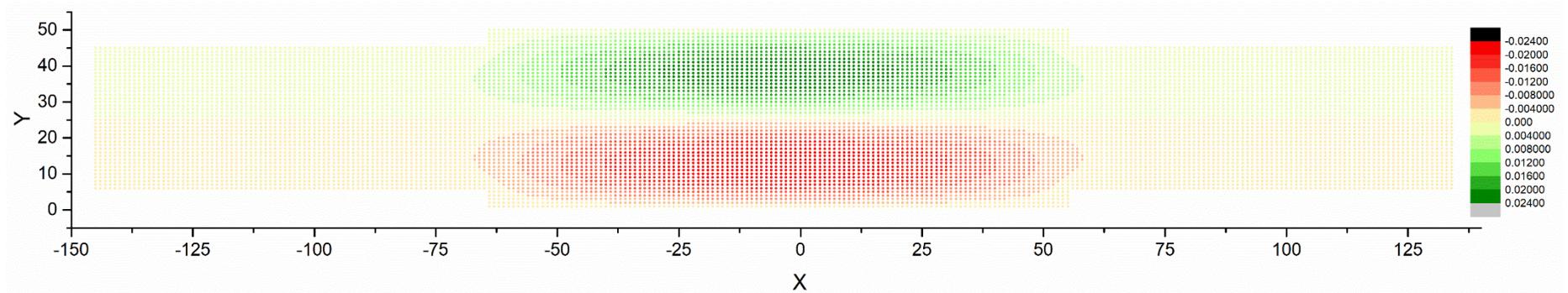


Figura 29: Funciones de onda normalizadas obtenidas por MRMD para una nanocinta rectangular de $ML=40$ sitios de ancho con un defecto de variación de sección transversal que consiste en una región con ancho $M=50$ sitios que se extiende longitudinalmente por 120 sitios. El valor absoluto de la energía es $E=3.994762|t|$.

A $E = 3.984310 |t|$



B $E = -3.984310 |t|$

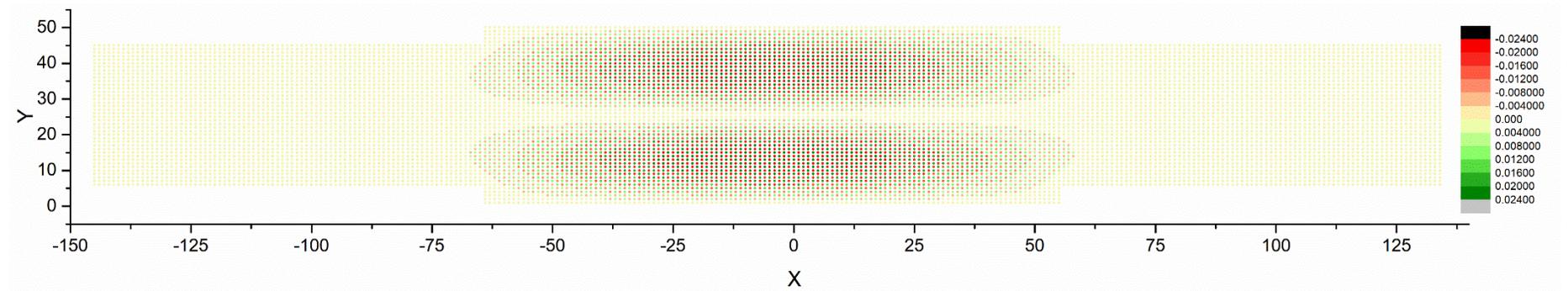
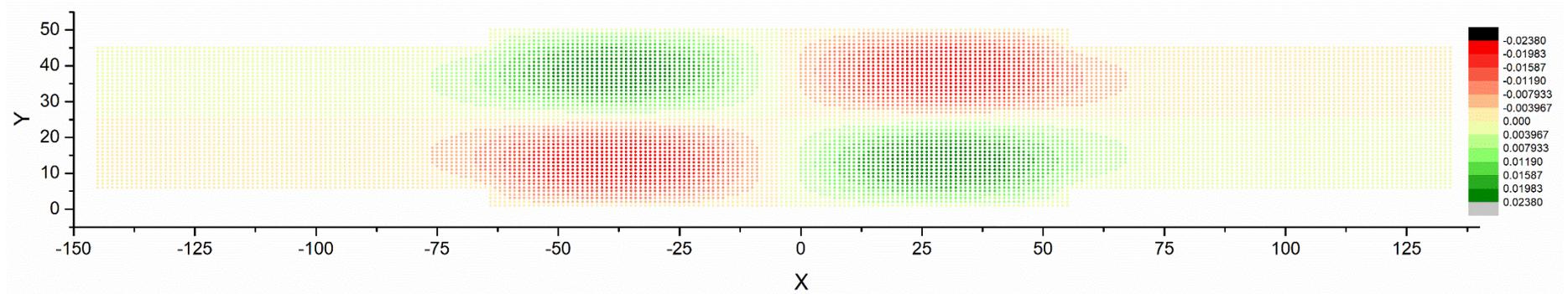


Figura 30: Funciones de onda normalizadas obtenidas por MRMD para una nanocinta rectangular de $ML=40$ sitios de ancho con un defecto de variación de sección transversal que consiste en una región con ancho $M=50$ sitios que se extiende longitudinalmente por 120 sitios. El valor absoluto de la energía es $E=3.984310 |t|$.

A $E = 3.982741 |t|$



B $E = -3.982741 |t|$

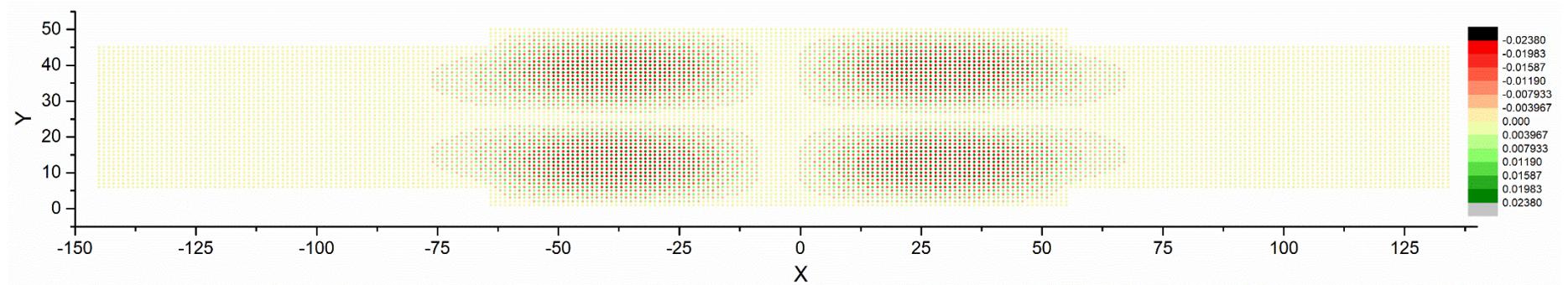


Figura 31: Funciones de onda normalizadas obtenidas por MRMD para una nanocinta rectangular de $ML=40$ sitios de ancho con un defecto de variación de sección transversal que consiste en una región con ancho $M=50$ sitios que se extiende longitudinalmente por 120 sitios. El valor absoluto de la energía es $E=3.982741 |t|$.

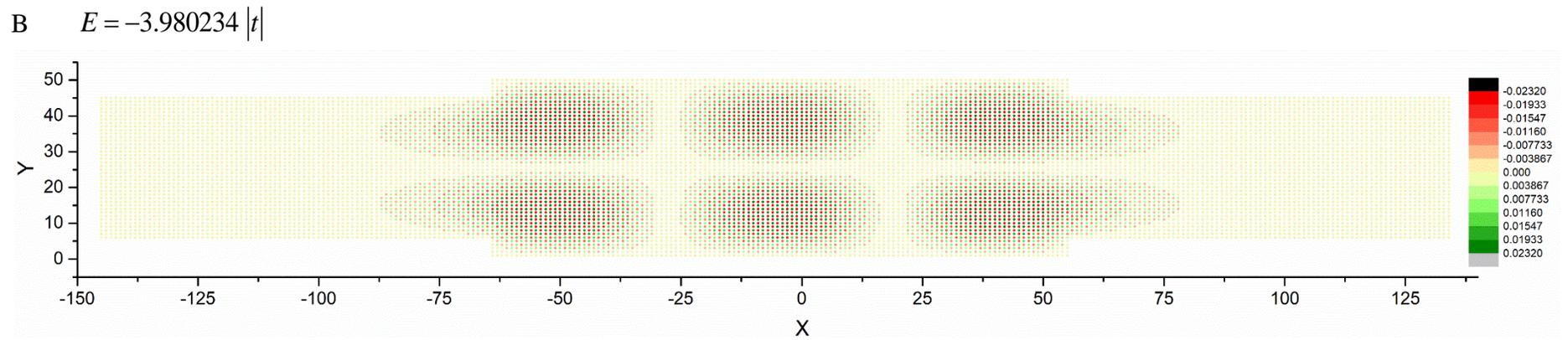
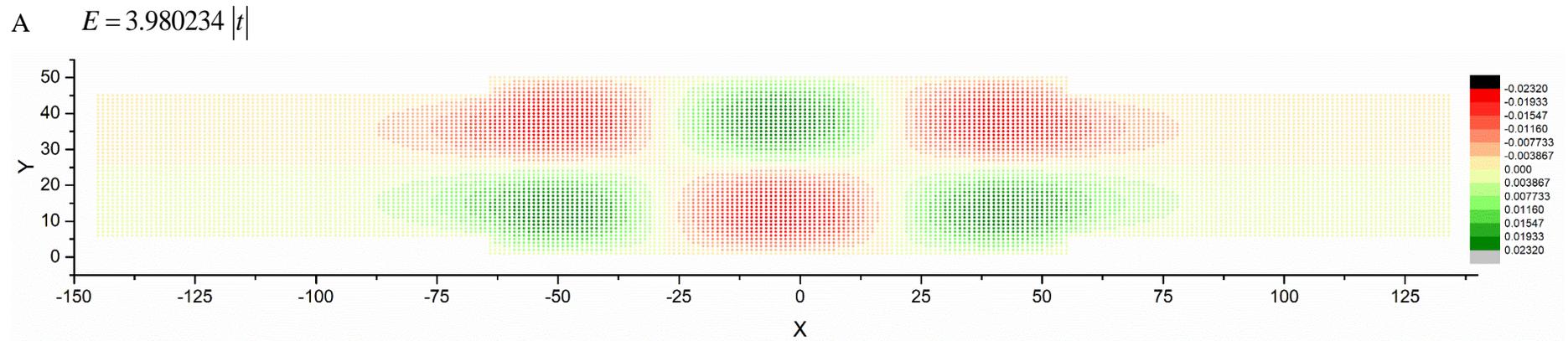


Figura 32: Funciones de onda normalizadas obtenidas por MRMD para una nanocinta rectangular de $ML=40$ sitios de ancho con un defecto de variación de sección transversal que consiste en una región con ancho $M=50$ sitios que se extiende longitudinalmente por 120 sitios. El valor absoluto de la energía es $E=3.980234 |t|$.

Conclusiones

El presente trabajo tuvo como objetivo el desarrollo de métodos numéricos que permitieran hallar las energías de estado ligado y sus funciones de onda para sistemas de amarre fuerte, haciendo uso del formalismo de la matriz de dispersión. Esto con el fin de estudiar los estados ligados en sistemas infinitos inducidos por defectos que rompen con las condiciones periódicas, además de explorar la posibilidad de reducir los costos computacionales necesarios para hallar las eigenenergías de sistemas finitos con respecto de la diagonalización directa del Hamiltoniano de amarre fuerte.

El método desarrollado para hallar las energías de estado ligado consiste en la división de los sistemas de amarre fuerte, finitos o infinitos, en dos diferentes subsistemas cuyas matrices de dispersión se obtienen a partir del MRMD. Para determinar las energías se añade una cadena adicional de modo que al fusionar los subsistemas haciendo uso del producto estrella de Redheffer se obtenga un único valor complejo $D(E)$ que deberá satisfacer las condiciones (3.10) para que la energía sea asociada a un estado ligado. Con cada energía obtenida, el algoritmo 2 permite hallar las funciones de onda normalizadas a partir de la determinación de los coeficientes $\lambda_{n,m}$ de la ecuación (3.16), que corresponde a la función de onda expresada en términos de funciones de Wannier. A partir de los métodos desarrollados se pueden obtener las siguientes conclusiones:

- Es posible hallar las energías de estado ligado, para sistemas finitos e infinitos, a partir de condición (3.10) sobre $D(E)$. Esto se verificó para el caso finito comparando las energías obtenidas a partir del algoritmo 1 con los eigenvalores del Hamiltoniano.
- Para hallar las energías basta con encontrar los ceros de la curva $\text{Im}(D(E))$ utilizando el método de secante y verificar que cumplan que $\text{Re}(D(E)) = -1$. Se observó que en todos los casos donde esto ocurre, la curva cruza el cero de manera ascendente.
- Realizar un refinamiento iterativo en regiones de la curva $\eta(E)$ que cumplan las condiciones (3.15) permite hallar ceros ascendentes incluso cuando la cantidad de puntos en el barrido de energías no permite observar el cruce con cero. Lo anterior permite optimizar el algoritmo de búsqueda de energías de estado ligado.
- El método de detección de energías por MRMD para estructuras finitas involucra matrices de tamaño mucho menor que el Hamiltoniano. Si bien del Hamiltoniano de una estructura con N sitios en total es de tamaño $N \times N$, las matrices involucradas en el método por MRMD son de apenas $M \times M$, donde M es el número de sitios de

frontera de los subsistemas y puede elegirse de forma tal que sea mucho menor que N .

- Las funciones de onda obtenidas a partir del algoritmo 2 coinciden con los eigenvectores del Hamiltoniano finito, confirmando la validez del método para este caso.
- El algoritmo propuesto permitió hallar energías asociadas a estados ligados para un sistema Q1D infinito con defecto de variación de sección transversal. Las funciones de onda obtenidas por el algoritmo 2 mostraron un comportamiento consistente con el de estados localizados para cada una de las energías obtenidas.

Por lo anterior, se puede confirmar que los métodos propuestos en esta tesis constituyen herramientas útiles para el estudio de estados ligados en nanoestructuras con un bajo costo computacional debido al carácter recursivo del MRMD.

Referencias

- Ashcroft, W. &. (1976). *Introduction to Solid State Physics*. New York: Saunders College Publishing.
- Dekker, A. J. (1958). *Solid State Physics*. London and Basingstoke: The MacMillan Press LTD.
- González, F. H. (2019). *Determinación de estados ligados en la ecuación de Schrödinger unidimensional mediante matrices de dispersión*. Ciudad de México.
- Griffiths, D. J. (1995). *Introduction to Quantum Mechanics*. Estados Unidos: Prentice Hall, Inc.
- Jones, W. &. (1973). *Theoretical Solid State Physics*. New York: Dover Publications Inc.
- Kittel, C. (2005). *Introduction to Solid State Physics*. USA: John Wiley & Sons.
- Marder, M. P. (2011). *Condensed Matter Physics*. Wiley Publications.
- McKelvey, J. (1966). *Solid State and Semiconductor Physics*. Nueva York: Harper & Row.
- Medina-Amayo, L. A. (2018). *Estudio del transporte electrónico mediante la matriz de dispersión para Hamiltonianos arbitrarios de amarre fuerte*.
- Pang, T. (2006). *An Introduction to computational physics*. Cambridge University Press.
- Patterson, J. D. (2007). *Solid State Physics*. Berlin: Springer.
- Quinn, J. &.-S. (2018). *Solid State Physics, Principles and Modern Applications*. Springer International Publishing AG.
- Ramírez, C. (2017). Scattering Matriz of Arbitrary Tight Binding Hamiltonians. *Annals of Physics*.
- Ramírez, C. (2018). Determining Transport Properties of Complex Multiterminal Systems: S-Matrix of General Tight Binding Periodic Leads. *Annalen der Physik*.
- Ramírez, C., & al., e. (2019). Solving Schrödinger equation with scattering matrices. Bound states of Lennard Jones Potential. *Journal of the Physical Society of Japan*.
- Rumpf, R. C. (2011). Improved Formulation of Scattering Matrices for Semi-Analytical Methods that is Consistent with Convention. *Progress in Electromagnetic Research B*, 241-261.
- Ryndyk, D. A. (2016). *Theory of Quantum Transport At Nanoscale*. Switzerland: Springer International Publishing.
- Saleem, M. (2015). *Quantum Mechanics*. IOP Publishing.

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