



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS  
FACULTAD DE CIENCIAS

Método Recursivo de la Matriz de Dispersión para el Estudio  
del Transporte Electrónico en Nanocintas con Variaciones  
Transversales Mediante Renormalización

**TESIS**

Que para optar por el grado de:  
Maestro en Ciencias (Física)

*Presenta:*

LUIS ARTURO MEDINA AMAYO

*Tutor Principal:*

DR. CARLOS RAMÍREZ RAMOS  
FACULTAD DE CIENCIAS, UNAM

*Comité Tutor:*

DRA. VICENTA SÁNCHEZ MORALES  
FACULTAD DE CIENCIAS, UNAM

DR. CHUMIN WANG CHEN  
INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN MATERIALES, UNAM

CIUDAD DE MÉXICO, NOVIEMBRE, 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.

# AGRADECIMIENTOS

Agradezco a la UNAM, al Posgrado en Ciencias Físicas y a los institutos que lo conforman, por haberme brindado las herramientas necesarias para alcanzar mis metas y por convertirse en mi segunda casa.

Agradezco al CONACYT por la beca otorgada, sin la cual este logro no habría sido posible.

A mis sinodales, Dra. Renela Valladares, Dr. Luis Pérez, Dr. Fernando Posadas y Dr. Alberto Ruíz, por el tiempo brindado, sus observaciones, sus gentilezas y su apoyo para mi desarrollo en la vida académica.

A mi asesor, Dr. Carlos Ramírez, por su paciencia, su comprensión y su ayuda, pero principalmente, por permitirme encontrar en él a un amigo y no solo a un colega.

Agradezco al Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) de la UNAM IN116819, por su apoyo para el desarrollo de la presente investigación. Asimismo, agradezco a la DGAPA-UNAM la beca recibida. Los cálculos realizados en esta tesis fueron realizados en la supercomputadora Miztli a través del proyecto LANCAD-UNAM-DGTIC-329.

# ÍNDICE

<b>Introducción</b>	<b>1</b>
<b>I. Estado Sólido y Conductancia</b>	<b>4</b>
1.1 Teorema de Bloch	4
1.2 Modelo de Amarre Fuerte	6
1.3 Conductancia de Landauer	8
1.4 Dispersión Cuántica	11
<b>I. Método Recursivo de la Matriz de Dispersión</b>	<b>14</b>
2.1 Composición de Estructuras	14
2.2 Estructuras Elementales	17
2.3 Saturadores	19
<b>III. Métodos de Renormalización Aplicados a la Matriz de Dispersión</b>	<b>27</b>
3.1 Renormalización y Método de Duplicación	27
3.2 Método de Eigenvalores	29
3.3 Validación de los Métodos	32
<b>IV. Transmitancia de Estructuras Cuasiperiódicas</b>	<b>38</b>
4.1 Estructura Cuasiperiódica tipo Fibonacci	38
4.2 Red Cuadrada Aperiódica	41
4.3 Red Panal de Abeja Tipo ZigZag Aperiódica	47
4.4 Red Panal de Abeja Tipo Silla de Montar Aperiódica	52
<b>V. Conclusiones</b>	<b>57</b>
<b>Apéndice A</b>	<b>59</b>
<b>Apéndice B</b>	<b>61</b>
<b>Apéndice C</b>	<b>63</b>
<b>Referencias</b>	<b>65</b>

# INTRODUCCIÓN

La miniaturización de dispositivos electrónicos ha sido un aspecto de gran importancia para el desarrollo de nuevas tecnologías, y es actualmente una de las áreas donde más se han invertido esfuerzos y recursos económicos (Dickherber, Morris, & Grodzinski, 2014) (Chen, y otros, 2013). Estas han encontrado aplicaciones en múltiples áreas, han facilitado tareas complejas, e incluso, han aumentado la eficacia de ciertos procesos. Por ejemplo, hoy en día la nanotecnología ha encontrado una gran aplicación en los campos relacionados con la salud, donde se han desarrollado múltiples tipos de dispositivos, como lo son: detectores de virus mediante nanoalambres, biomoléculas con radio control, robots biológicos (Freitas, 2005), tratamientos contra el cáncer (Gmeiner & Ghosh), dispositivos para medicina terapéutica y liberación de medicamentos (Kawasaki & Player, 2005), entre otros. Si bien los anteriores casos ejemplifican las posibles aplicaciones de la teoría desarrollada en cuanto a nanotecnología, es necesario recalcar que las bases fundamentales fueron desglosadas en el estudio de la materia condensada, específicamente hablando, en el estado sólido, esto debido a que, al conocer las propiedades cuánticas y macroscópicas de los materiales, es posible construir dispositivos que exploten dichas características con un fin específico.

En diciembre de 1959, el físico americano Richard Feynman ofreció una plática llamada “There’s Plenty of Room at the Bottom”, en la cual establecía el concepto central de miniaturización. Entre sus creencias, consideraba la posibilidad de manipular los átomos de una estructura, uno por uno, para así modificar las propiedades macroscópicas de los materiales y poder aplicarlos a diversos propósitos (Hey, 1998). Si bien en ese tiempo estas ideas llegaron a pasar desapercibidas, con el paso de los años, cobraron fuerza y hoy en día, gracias a estas, se ha desarrollado en gran manera la nanotecnología.

Como se establece en el párrafo anterior, nuestro objetivo recae en modificar la configuración atómica de los materiales para analizar sus propiedades macroscópicas y encontrar las posibles aplicaciones de dichos sistemas en las diversas áreas de conocimiento. Ahora, dentro del estado sólido, sabemos que los materiales se pueden clasificar según la periodicidad de su estructura en: cristales, cuasicristales y sólidos amorfos, los cuales describiremos brevemente en los capítulos siguientes. Debido a su periodicidad, los cristales han sido los objetos mayormente estudiados y han encontrado un sin número de aplicaciones, entre las que podemos mencionar: su uso en la industria de semi conductores, su uso para la fabricación de celdas solares, fabricación de transistores, detectores de rayos gamma (Fornari, 2018), etc. En contraparte, debido a su falta de periodicidad, los sólidos amorfos presentan un análisis mucho más complejo y no han tenido el mismo desarrollo que los cristales. No obstante, debido a sus propiedades macroscópicas, estos han sido muy útiles en sistemas que

involucren fenómenos como electrofotografía, electrónica de películas delgadas (Mort, 1980), efectos piezoresistivos (Madan & Shaw, 1988), entre otros. Los cuasicristales, por otro lado, se pueden interpretar como un punto medio entre cristales y sólidos amorfos debido a que estos poseen un ordenamiento, más no disponen de una simetría traslacional (Mahan & Widom, 2016); es decir, no se puede definir una celda unitaria cuya repetición reproduzca al sistema en su totalidad. Como se comenta más adelante, estos materiales llamaron la atención de la comunidad científica debido a que contaban con características propias de un cristal, pero su simetría no correspondía con aquellas admisibles. En el estudio de estas estructuras, se manifestaron diversas propiedades físicas que no se habían exhibido en otro tipo de sistemas, y que rompían con el comportamiento lógico esperado, por ejemplo: la existencia de una transición metal-aislante (Maciá Barber, 2009), resistividad cercana a los aislantes (Poon, 1992), eigenfunciones críticas, un espectro energético singular continuo (Sütto, 1994), entre otras. Este tipo de materiales ilustran claramente la trascendencia de las proposiciones realizadas por Feynman, debido a que, a comparación de un sistema “regular”, al introducir un mayor grado de “desorden” en la red estructural, se modifican fuertemente las propiedades macroscópicas del sistema. Realizando y estudiando diversos tipos de alteraciones en una red, es posible hallar comportamientos peculiares, no esperados, con un posible gran número de aplicaciones y utilidades.

Particularmente, en esta tesis, nos enfocaremos en cuasicristales cuya estructura se conforma por dos distintas subsecciones, A y B, las cuales poseen diferentes secciones transversales y diferentes secciones longitudinales, conectadas entre sí mediante el método recursivo de la matriz de dispersión (Ramírez & Medina-Amayo, 2017), siguiendo una secuencia tipo palabra de Fibonacci. Adicionalmente, proponemos un método para el cálculo de la matriz de dispersión de sistemas periódicos finitos, basado en la resolución de la ecuación de eigenvalores generalizada correspondiente al sistema.

A continuación, en el capítulo I, se desarrollan las nociones básicas y definiciones necesarias, relacionadas al estado sólido y al transporte electrónico. Explicamos los conceptos de teorema de Bloch, modelo de amarre fuerte, efecto de dispersión cuántica y relevancia de la matriz de dispersión, así como desarrollamos brevemente una derivación de la fórmula para conductividad de Landauer. Posteriormente, en el capítulo II, se explica a detalle el método recursivo de la matriz de dispersión, partiendo de las reglas de composición de estructuras y el cálculo de la matriz de dispersión resultante de una fusión. Se proponen las estructuras elementales, a partir de las cuales se construyen sistemas complejos, y se demuestra la forma de la matriz de dispersión en los saturadores. En el capítulo III, se plantean dos métodos para la construcción de sistemas periódicos finitos: el método de duplicación y el método de eigenvalores. Estos son validados al comparar la transmitancia calculada por cada uno de estos para tres distintos tipos de red: cuadrada, panal de abeja

tipo ZigZag y panal de abeja tipo silla de montar. Posteriormente, se aplican ambos métodos en la construcción de sistemas de longitud creciente, con el fin de comparar el tiempo requerido por cada método y determinar sus posibles ventajas, desventajas y particularidades. Seguido a esto, en el capítulo IV, se exhiben los espectros de transmitancia obtenidos para redes aperiódicas de distintas generaciones, con variaciones en sus secciones transversal y longitudinal, así como con defectos de sitio en las variaciones para los tres distintos tipos de red. Finalmente, en el capítulo V se presenta una breve síntesis de las singularidades exhibidas por los métodos recursivos de la matriz de dispersión, así como de los efectos observados en los espectros de transmitancia de las redes cuasiperiódicas.

# I

---

---

## ESTADO SÓLIDO Y CONDUCTANCIA

---

---

En el presente capítulo, estableceremos los conceptos básicos relacionados a estado sólido, como lo son el modelo de amarre fuerte y el teorema de Bloch, para posteriormente dar una breve descripción de conceptos relacionados al transporte electrónico, necesarios para la implementación de los métodos propuestos en los capítulos subsecuentes.

### 1.1 Teorema de Bloch

Al analizar el desplazamiento de un electrón a lo largo de un sólido, es necesario tomar en consideración múltiples interacciones que tiene la partícula con el medio, como lo son las interacciones electrón-electrón y las interacciones electrón-núcleo, de modo que la estructura presenta un problema de muchos cuerpos, imposible de tratar analíticamente. Para poder estudiar este tipo de sistemas, se han aplicado diversas suposiciones que simplifiquen su análisis, entre las que podemos mencionar: la aproximación de electrones independientes, en la cual despreciamos las interacciones electrón-electrón (Girvin & Yang, 2019); la aproximación de electrones libres, en la cual se desprecia la interacción electrón-núcleo; la aproximación de colisiones instantáneas, donde se considera que la interacción electrónica es instantánea y se da mediante colisiones elásticas (Tsymbal, 2008), etc. Este tipo de suposiciones dieron pie a distintos modelos que sirvieron como base para el estudio de las propiedades de los sólidos, entre los que destacan: el modelo de Drude, el modelo de Sommerfeld, el modelo de amarre fuerte, entre otros (Kittel, 2005). Este último, será desarrollado con mayor detenimiento y a mayor detalle en las secciones subsiguientes.

Por otro lado, sabemos que en la materia existen tres distintos tipos de sólidos: cristales, cuasicristales y amorfos. Si bien todos los anteriores se caracterizan por tener una estructura atómica ordenada, en la cual los núcleos oscilan en torno a posiciones de equilibrio, estos se diferencian principalmente por su periodicidad. Por ejemplo, en los cristales es posible definir una celda unitaria cuya reproducción genera totalmente al sistema macroscópico, a diferencia de los sólidos amorfos, donde no es posible determinar un patrón que reproduzca la estructura. Adicionalmente, y de forma muy simple, los cuasicristales se pueden entender como sistemas que se encuentran en un punto medio entre cristales y amorfos (Gellings & Bouwmeester, 1997), pero de estos hablaremos más detalladamente en el capítulo cuatro.

De entre los posibles sistemas sólidos, los cristales han sido mayormente estudiados debido a que la periodicidad en su estructura simplifica en gran manera el análisis de sus propiedades. Por ejemplo, consideremos un electrón trasladándose a través de una red cristalina, el cual no interactúa con otros electrones, pero que se encuentra sometido a un determinado potencial efectivo, dado por  $V(\mathbf{r})$ , que engloba las interacciones con otras partículas. Debido a que el sistema está construido mediante la repetición de un determinado patrón (celda unitaria), dicho potencial debe ser periódico, y debe cumplir que

$$V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = V(\mathbf{r}), \quad (1.1)$$

donde  $\mathbf{r}$  es un vector dentro de la celda unitaria y  $\mathbf{R}$  es un vector de traslación en la red real dado por

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 \quad \text{con } n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}, \quad (1.2)$$

siendo  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  los vectores base de la red real (Duang & Guojun, 2005). De esta manera, el Hamiltoniano correspondiente cumple que

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (1.3)$$

Partiendo de la ecuación anterior, el físico suizo Félix Bloch probó que las soluciones correspondientes debían estar dadas por el producto de una onda plana,  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ , con una función periódica,  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ , cuyo periodo es el igual al periodo de la red, es decir (Kittel, 2005)

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.4)$$

donde  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ . Las funciones en (1.4) se conocen como *funciones de Bloch*, y los electrones cuya función de onda es de esta forma se conocen como *electrones de Bloch*. Al tomar una combinación lineal de funciones de Bloch y aplicar la transformada de Fourier, es posible generar paquetes de ondas localizadas, es decir

$$w_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\text{ZB}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{k}, \quad (1.5)$$

donde la integral corre sobre la primera zona de Brillouin,  $V$  es el volumen de la celda primitiva en el espacio real y las funciones  $w_{\mathbf{R}}(\mathbf{r})$  se denominan *funciones de Wannier*, las cuales ahora dependen del vector de traslaciones en el espacio real,  $\mathbf{R}$ , a diferencia de las funciones de Bloch que tienen dependencia con el vector de onda,  $\mathbf{k}$ .

Como ejemplo, pensemos el caso particular de un electrón desplazándose hacia la derecha, en dirección del eje  $z$ , a través de una región periódica sin cambios en su sección transversal,

donde el potencial al que se encuentra sometido es independiente a la dirección de propagación, es decir, se tiene  $V(x, y)$ . Debido a la separabilidad del problema, las soluciones se pueden expresar de la forma

$$\psi_n(\mathbf{r}) = \phi_n(x, y)e^{ik_n z} \quad \text{con } n \in \mathbb{N}, \quad (1.6)$$

con  $\phi_n(x, y)$  la solución al Hamiltoniano transversal, dependiente únicamente de las coordenadas  $(x, y)$ , y  $k_n$  el número de onda dado por

$$k_n = \pm \frac{\sqrt{2m(E - E_n)}}{\hbar}, \quad (1.7)$$

donde  $E_n$  es una eigenenergía del Hamiltoniano transversal. De la anterior ecuación se pueden observar dos posibles situaciones: si  $E > E_n$ , el número de onda toma valores reales, de modo que las exponenciales en (1.4) generan un comportamiento oscilante y determinan a las soluciones  $\psi_n(\mathbf{r})$  como funciones de Bloch. En este caso, los estados electrónicos se extienden a lo largo de todo el sistema, permitiendo la conducción, por lo que se dice que los electrones se encuentran en un *canal abierto*. En contraparte, si  $E < E_n$ , el número de onda toma valores imaginarios, determinando a las soluciones  $\psi_n(\mathbf{r})$  como funciones evanescentes, las cuales no aportan modos de propagación debido a que las exponenciales en (1.4) divergen para  $z \rightarrow \pm\infty$ , por lo que no son soluciones físicas en sistemas infinitos. En este caso decimos que los electrones se encuentran en un canal cerrado.

## 1.2 Modelo de Amarre Fuerte

Como ya se mencionó, el estudio de la dinámica de una partícula en un medio sólido es un problema extremadamente complejo. Una primera aproximación que podemos hacer consta en suponer que los electrones se encuentran fuertemente ligados a sus respectivos núcleos, de modo que las interacciones interatómicas ocurren únicamente por el solapamiento de los orbitales atómicos de un sitio con sus vecinos más cercanos. A dicha aproximación se le conoce como *modelo de amarre fuerte* (Mervin, 2015).

Como se mencionó en la sección anterior, es posible obtener las funciones de Wannier mediante la transformada de Fourier de las funciones de Bloch, como se muestra en la ecuación (1.5), la cual en notación de Dirac es de la forma

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

donde  $N$  es un factor de normalización, correspondiente al número de sitios en la red. En la anterior ecuación se observa claramente la dependencia de las funciones de Wannier con el vector de traslación ( $\mathbf{R}$ ), y la dependencia de las funciones de Bloch con el vector de onda ( $\mathbf{k}$ ). De forma análoga, utilizando la transformada inversa de Fourier, es posible obtener una expresión para las funciones de Bloch en términos de las funciones de Wannier, de modo que

$$|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} |\mathbf{R}\rangle. \quad (1.9)$$

Es posible demostrar que las funciones de Wannier componen un set completo de funciones ortogonales, y por ende constituyen una base alternativa a aquella formada por las funciones de Bloch (Stangel, 2013). Adicionalmente, por su propiedad de ortogonalidad, las funciones de Wannier se pueden interpretar como funciones localizadas en cada sitio de la red (Duang & Guojun, 2005), a diferencia de las funciones de Bloch que se asocian a estados extendidos del sistema. Debido a lo anterior, la descripción mediante funciones de Wannier es muy similar a aquella expuesta por orbitales atómicos en cada sitio de la red.

En el estudio de las estructuras bajo el modelo de amarre fuerte, buscamos que las soluciones cumplan con la ecuación de eigenvalores

$$\hat{H}|\mathbf{k}\rangle = E(\mathbf{k})|\mathbf{k}\rangle, \quad (1.10)$$

con  $\hat{H}$  el operador hamiltoniano del sistema. Al sustituir las funciones de Bloch en la anterior ecuación, utilizando la relación en (1.9) y simplificando, se llega a que

$$E(\mathbf{k}) = \varepsilon_{\mathbf{R}_0} + \sum_{\mathbf{R} \neq \mathbf{R}_0} t_{\mathbf{R}_0\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}-\mathbf{R}_0)}, \quad (1.11)$$

conocida como la *relación de dispersión generalizada*, donde se definen

$$\varepsilon_{\mathbf{R}_0} = \langle \mathbf{R}_0 | \hat{H} | \mathbf{R}_0 \rangle, \quad (1.12)$$

la *energía de sitio* en  $\mathbf{R}_0$ , y

$$t_{\mathbf{R}_0\mathbf{R}} = \langle \mathbf{R}_0 | \hat{H} | \mathbf{R} \rangle, \quad (1.13)$$

la *integral de salto* entre los sitios  $\mathbf{R}_0$  y  $\mathbf{R}$  (Mervin, 2015).

De forma similar a como se desarrolló anteriormente, partiendo de la ecuación (1.10), sustituyendo las funciones de Bloch en términos de las funciones de Wannier mediante (1.8) se obtiene que

$$\hat{H} = \varepsilon_{\mathbf{R}_0} \sum_{\mathbf{R}_0} |\mathbf{R}_0\rangle\langle\mathbf{R}_0| + \sum_{\mathbf{R}_0 \neq \mathbf{R}} t_{\mathbf{R}_0, \mathbf{R}} |\mathbf{R}_0\rangle\langle\mathbf{R}|, \quad (1.14)$$

siendo esta la forma general de un Hamiltoniano bajo el modelo de amarre fuerte.

### 1.3 Conductancia de Landauer

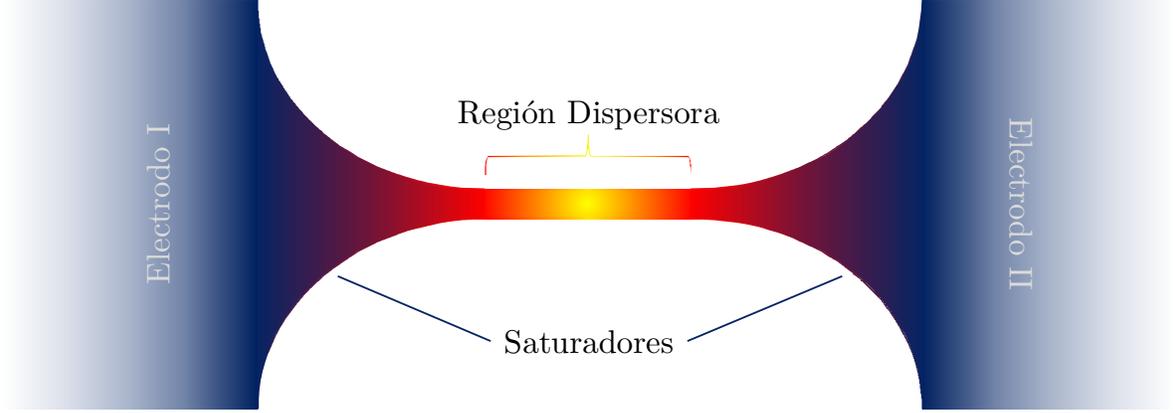
Las estructuras en las cuales buscamos analizar la conductancia se conocen como nanoconexiones, esquematizadas en la Fig. 1, y se componen esencialmente por una región de dispersión, dos electrodos (izquierdo y derecho) y dos saturadores (Ryndyk, 2016).

La región de dispersión corresponde a aquella sección en la que el sistema presenta defectos, ya sean de sitio, de enlace, estructurales, etc. Estos producen un efecto de dispersión electrónica el cual deriva en una variación en la conductancia, provocando que este segmento sea de gran interés. La región de dispersión se caracteriza por ser finita y de dimensiones nanométricas, por lo que se puede modelar siguiendo el método recursivo de la matriz de dispersión, desarrollado en el capítulo dos.

Los saturadores corresponden a las estructuras que conectan la región de dispersión con los electrodos. Su principal objetivo es servir como guías de onda para los electrones, y suponemos que tienen una estructura periódica que permite definir funciones de onda entrantes o salientes de la región de dispersión evitando reflexiones. Estas secciones suelen modelarse como sistemas semi infinitos debido a dos razones:

1. Los electrodos, a diferencia de la región de dispersión, son de dimensiones macroscópicas, por lo cual la sección transversal de los saturadores presenta variaciones. No obstante, un cambio abrupto en dicha sección provocaría efectos de reflexión de la función de onda. Para sortear este inconveniente, se requiere que el cambio en la sección transversal de los saturadores sea muy lento (adiabático) (Ryndyk, 2016).
2. Los electrodos son regiones donde la función de onda no preserva su información de fase (son incoherentes).

Supongamos una nanoconexión donde al electrodo izquierdo le corresponde un potencial químico  $\mu_i$ , mientras que para el electrodo derecho se tiene un potencial químico  $\mu_d$ . Para calcular la corriente que surge de cada electrodo, es necesario considerar que únicamente contribuyen a esta los electrones que logran atravesar la región de dispersión, por ello, la corriente va a depender directamente de la velocidad de grupo de la partícula,  $v(n, m, E)$ , y del coeficiente de transmisión,  $T(n, m, E)$ .



**Fig. 1:** Estructura general de una nanoconexión. En esta se ilustran los electrodos a los extremos y la región dispersora al centro. Los saturadores corresponden a las guías de onda que unen la región central con los extremos.

Debido a que ambos electrodos poseen múltiples canales de conducción, conviene definir una *función de transmisión* como

$$T(E) = \sum_{n,m} T(n,m,E), \quad (1.15)$$

donde  $T(n,m,E)$  indica la probabilidad de transmisión al  $m$ -ésimo canal del electrodo derecho (izquierdo) para una partícula que incide por el  $n$ -ésimo canal del electrodo izquierdo (derecho).

Por otro lado, dado que los electrones no se distribuyen de manera uniforme a lo largo de los canales de conducción, es necesario involucrar la función de distribución que estos siguen, denotada por  $f(E)$ . En el caso particular de los electrones, es bien sabido que estos obedecen una *distribución de Fermi-Dirac*, dada por

$$f(E, \mu, \Theta) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu}{k_B \Theta}\right) + 1}, \quad (1.16)$$

con  $\mu$  el potencial químico,  $k_B$  la constante de Boltzmann y  $\Theta$  la temperatura absoluta. Considerando lo anterior, se deduce que la corriente generada por un electrodo es de la forma (Datta, 1995)

$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} T(E) f(E, \mu, \Theta) dE, \quad (1.17)$$

donde se substituyó la velocidad de grupo mediante su definición

$$v(n, E) = \frac{1}{h} \frac{\partial E}{\partial k_z}. \quad (1.18)$$

De esta forma, la corriente neta entre los dos electrodos está dada por

$$I = |I_i - I_d| = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} T(E) |f(E, \mu_i, \Theta) - f(E, \mu_d, \Theta)| dE, \quad (1.19)$$

donde se utilizó el hecho de que  $T_{i \rightarrow d}(E) = T_{d \rightarrow i}(E) = T(E)$ , debido a que la transmitancia debe de ser independiente de la orientación del sistema, de tal forma que es equivalente si la partícula incide de derecha a izquierda, o si lo hace de izquierda a derecha.

Supongamos ahora que los dos saturadores tienen el mismo potencial químico ( $\mu_i = \mu_d = \mu$ ), pero se aplica una diferencia de potencial ( $V$ ) al electrodo izquierdo. Esto repercute en la función de distribución, la cual ahora se expresa

$$f_i(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu - eV}{k_B \Theta}\right) + 1}, \quad (1.20)$$

de modo que la ecuación (1.19) queda como

$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} T(E) [f_0(E - eV) - f_0(E)] dE, \quad (1.21)$$

con  $f_0(E)$  la función de distribución con  $\mu_i = \mu_d = \mu$ . A la anterior ecuación se le conoce como *fórmula de Landauer a temperatura finita* (Büttiker, Imry, Landauer, & Pinhas, 1985).

Al considerar el caso particular de temperatura cero, y debido a las propiedades de la función de distribución de Fermi, el potencial químico es exactamente igual a la energía de Fermi ( $E_F$ ), y las funciones de distribución  $f_0(E - eV)$ ,  $f_0(E)$  serán nulas para las energías mayores a  $E_F + eV$  y  $E_F$ . Es por ello que la ecuación (1.21) se reduce a

$$I = \frac{2e}{h} T(E_F) \int_{E_F}^{E_F + eV} dE = \frac{2e^2}{h} T(E_F) V. \quad (1.22)$$

Para potenciales ( $V$ ) pequeños, se espera que la función de transmisión sea aproximadamente constante en el intervalo de la integral, por lo que no supone un problema extraer  $T(E_F)$  de la integral en la anterior simplificación. Comparando el extremo derecho de la ecuación (1.22) con la bien conocida *ley de Ohm*

$$I = GV, \quad (1.23)$$

se llega fácilmente a la conclusión de que

$$G = \frac{2e^2}{h} T(E_F) = \frac{2e^2}{h} \sum_{n,m} T(n,m,E_F), \quad (1.24)$$

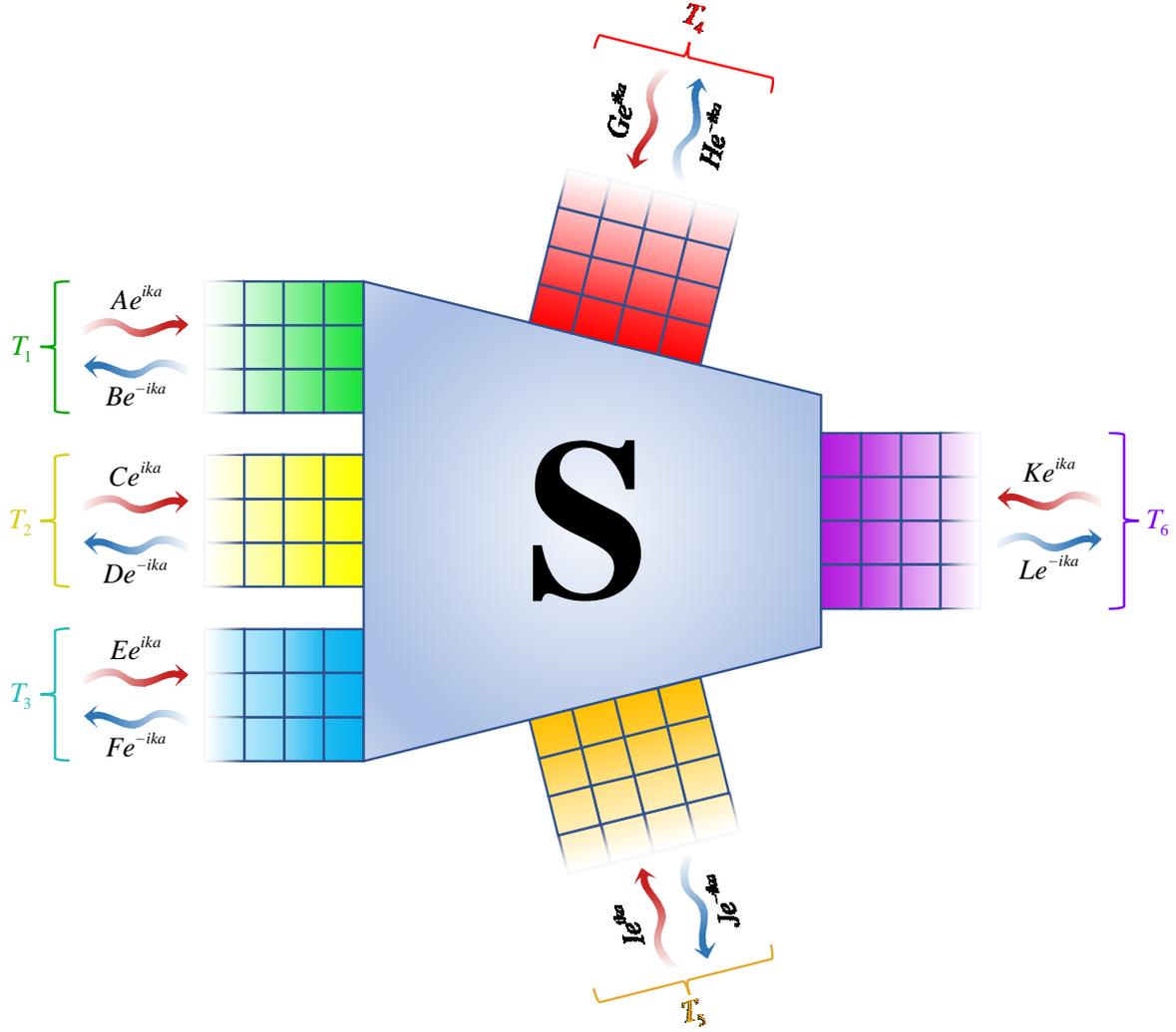
la cual es la conductancia a temperatura cero (Ryndyk, 2016).

## 1.4 Dispersión Cuántica

Supongamos un sistema multiterminal como el que se muestra en la Fig. 2, donde se esquematiza un caso simple, en el que todas las terminales tienen un único canal de conducción. La forma tradicional y directa de abordar el problema consiste en hallar las soluciones correspondientes a la ecuación de Schrödinger del sistema para una onda incidente por una de las terminales, aplicar condiciones de continuidad y de frontera, de manera que se obtengan relaciones entre los coeficientes de las funciones de onda, las cuales indican qué porción de la función incidente se transmite a cada una de las terminales, e incluso, que porción de esta se ve reflejada. Si se deseara estudiar un caso donde la onda incide por alguna otra terminal, sería necesario repetir el procedimiento anterior, y se tendría que resolver el Hamiltoniano tantas veces como terminales haya. Adicionalmente, si extendemos el problema al caso donde se tienen múltiples canales de transmisión activos en las terminales, el problema se complica, y naturalmente surge la pregunta: ¿Se debe realizar dicho análisis para cada canal de incidencia en cada terminal y para cada canal de transmisión posible? La respuesta es que no, pues basta con conocer el efecto dispersivo de la región central. Para ello, es necesario encontrar una expresión que relacione las amplitudes de onda de funciones incidentes sobre la región dispersora con aquellas salientes de la misma, es decir, en el caso particular donde las terminales solo tienen un canal de conducción, se tiene que

$$\begin{pmatrix} A \\ C \\ E \\ G \\ I \\ K \end{pmatrix} = \mathbf{S} \begin{pmatrix} B \\ D \\ F \\ H \\ J \\ L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & S_{14} & S_{15} & S_{16} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} & S_{24} & S_{25} & S_{26} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} & S_{34} & S_{35} & S_{36} \\ S_{41} & S_{42} & S_{43} & S_{44} & S_{45} & S_{46} \\ S_{51} & S_{52} & S_{53} & S_{54} & S_{55} & S_{56} \\ S_{61} & S_{62} & S_{63} & S_{64} & S_{65} & S_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B \\ D \\ F \\ H \\ J \\ L \end{pmatrix}, \quad (1.25)$$

donde  $\mathbf{S}$  se denomina la *matriz de dispersión* (Griffiths, 2005). Notemos que la anterior ecuación engloba los casos donde hay funciones de onda incidentes por todas las terminales. A partir de esta, es sencillo analizar el caso particular donde la onda incide únicamente por una determinada terminal; basta con hacer cero las demás amplitudes relacionadas a funciones de onda incidentes por otras terminales. Por ejemplo, en el caso particular donde suponemos que la onda incide por la terminal 1 (verde) de la Fig. 2, tendríamos que la amplitud de onda  $A \neq 0$ , y que  $C = E = G = I = K = 0$ .



**Fig. 2:** Sistema multiterminal. En este se considera el caso donde las terminales tienen un único canal de conducción, y se asocia a la región central una matriz de dispersión  $\mathbf{S}$ .

De la ecuación (1.25) es posible obtener los coeficientes de transmisión y reflexión para cada terminal, de tal forma que la matriz de dispersión se puede expresar como

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} r_1 & t_{2 \rightarrow 1} & t_{3 \rightarrow 1} & t_{4 \rightarrow 1} & t_{5 \rightarrow 1} & t_{6 \rightarrow 1} \\ t_{1 \rightarrow 2} & r_2 & t_{3 \rightarrow 2} & t_{4 \rightarrow 2} & t_{5 \rightarrow 2} & t_{6 \rightarrow 2} \\ t_{1 \rightarrow 3} & t_{2 \rightarrow 3} & r_3 & t_{4 \rightarrow 3} & t_{5 \rightarrow 3} & t_{6 \rightarrow 3} \\ t_{1 \rightarrow 4} & t_{2 \rightarrow 4} & t_{3 \rightarrow 4} & r_4 & t_{5 \rightarrow 4} & t_{6 \rightarrow 4} \\ t_{1 \rightarrow 5} & t_{2 \rightarrow 5} & t_{3 \rightarrow 5} & t_{4 \rightarrow 5} & r_5 & t_{6 \rightarrow 5} \\ t_{1 \rightarrow 6} & t_{2 \rightarrow 6} & t_{3 \rightarrow 6} & t_{4 \rightarrow 6} & t_{5 \rightarrow 6} & r_6 \end{pmatrix}, \quad (1.26)$$

donde  $|r_i|^2$  corresponde al coeficiente de reflexión de la  $i$ -ésima terminal, mientras que  $|t_{i \rightarrow j}|^2$  corresponde al coeficiente de transmisión de una partícula que se transmite de la  $i$ -ésima a la  $j$ -ésima terminal.

La estructura de la ecuación (1.26) es válida para sistemas donde las diversas terminales contienen múltiples canales de conducción. La única diferencia yace en que los coeficientes de la matriz de dispersión pasan de ser números complejos a matrices, cuya dimensión está determinada por el número de canales disponibles en cada terminal, de tal manera que la matriz  $\mathbf{S}$  se puede generalizar a

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \mathbf{r}_1 & \mathbf{t}_{2 \rightarrow 1} & \cdots & \mathbf{t}_{n \rightarrow 1} \\ \mathbf{t}_{1 \rightarrow 2} & \mathbf{r}_2 & \cdots & \mathbf{t}_{n \rightarrow 2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{t}_{1 \rightarrow n} & \mathbf{t}_{2 \rightarrow n} & \cdots & \mathbf{r}_n \end{pmatrix}, \quad (1.27)$$

donde la matriz  $\mathbf{r}_i$  representa la matriz de reflexión en la  $i$ -ésima terminal, mientras que  $\mathbf{t}_{i \rightarrow j}$  corresponde a la matriz de transmisión de un canal en la  $i$ -ésima terminal a algún canal de la  $j$ -ésima terminal

Se observa la gran utilidad de la matriz de dispersión,  $\mathbf{S}$ , dado que esta simplifica el análisis de estructuras multiterminales complejas, y a su vez, es útil para nuestro objetivo del cálculo de la conductancia, pues de sus componentes, se puede extraer la función de transmisión utilizada en la fórmula de Landauer descrita en (1.24).

En el siguiente capítulo se presenta un método recursivo basado en la matriz de dispersión, el cual permite obtener la matriz correspondiente a sistemas altamente complejos, con el fin de extraer su respectiva función de transmisión y calcular su conductancia.

# II

---

## MÉTODO RECURSIVO DE LA MATRIZ DE DISPERSIÓN

---

Como se comentó en el capítulo anterior, la matriz de dispersión relaciona las amplitudes de onda salientes del sistema con las entrantes. Utilizando esta propiedad, es posible considerar dos estructuras que, mediante su composición, generen la matriz de dispersión respectiva a una estructura más compleja.

En el presente capítulo, explicaremos la metodología para la obtención de la matriz de dispersión de un sistema compuesto por dos subestructuras, cada una de estas con su respectiva matriz de dispersión, estableciendo las bases del método recursivo. A su vez, plantaremos las estructuras elementales a partir de las cuales se van a producir todas las estructuras futuras, y finalmente desarrollaremos una técnica para la obtención de la matriz de dispersión de sistemas semi infinitos, la cual aplicaremos específicamente a los saturadores dentro de una nanoconexión.

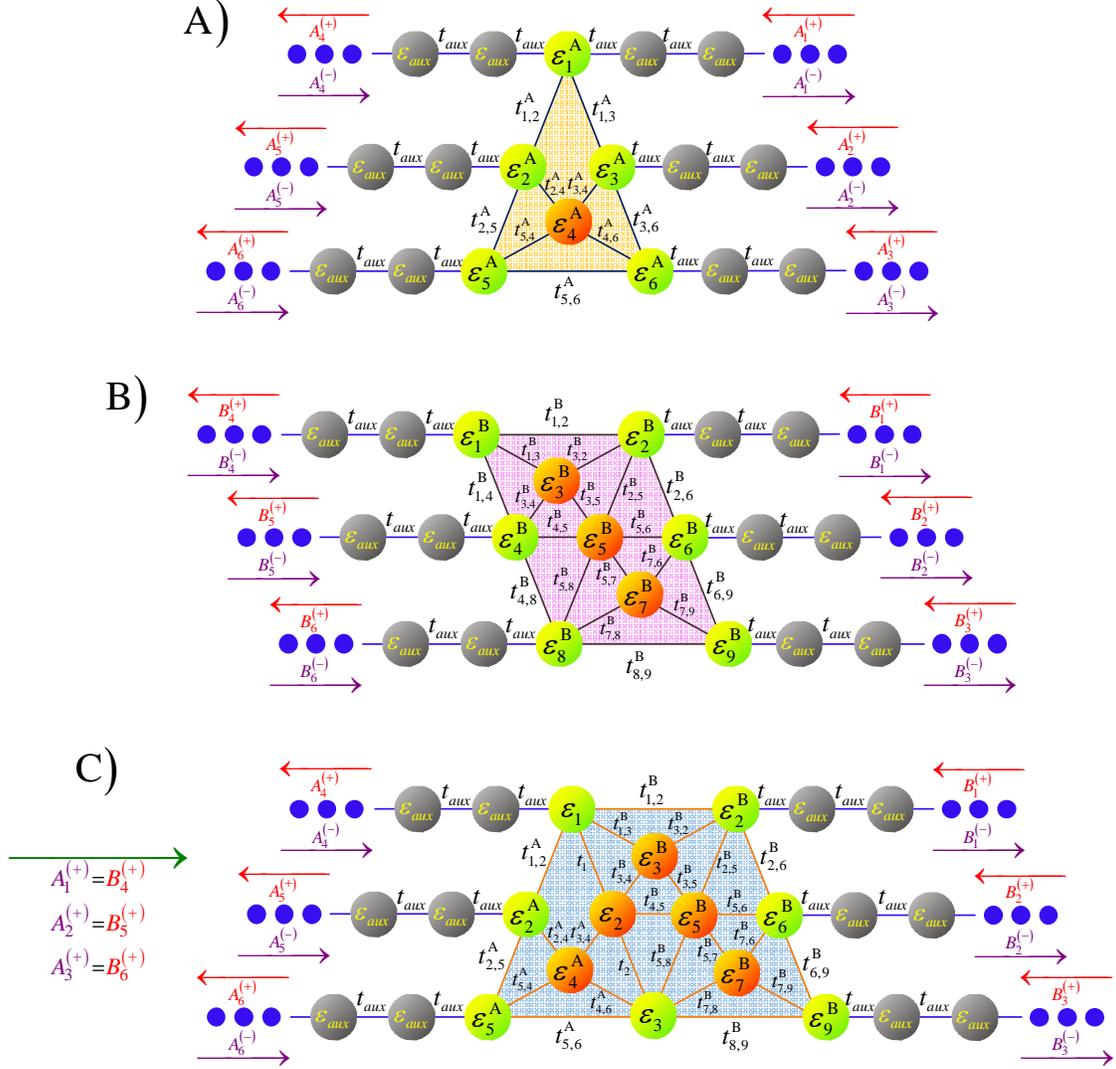
Las ideas y los cálculos aquí presentados fueron publicados previamente en los artículos “*Scattering Matrix of Arbitrary Tight-Binding Hamiltonians*” (Ramírez & Medina-Amayo, 2017) y “*Determining Transport Properties of Complex Multiterminal Systems: S-Matrix of General Tight-Binding Periodic Leads*” (Ramírez C. , 2018), los cuales pueden ser consultados en las referencias de la presente tesis.

### 2.1 Composición de Estructuras

Supongamos un determinado sistema de amarre fuerte  $S$ , como cualquiera de los mostrados en la Fig. 3, en el cual sabemos que las eigenfunciones están dadas por

$$|\Psi_S\rangle = \sum_{n=1}^{N_S} S_n |S_n\rangle + \sum_{n=1}^{P_S} \sum_{m=1}^{\infty} S_{n,m}^C |C_{n,m}\rangle, \quad (2.1)$$

donde  $|S_n\rangle$  son las funciones de Wannier en los sitios que componen la estructura (ya sean internos o de frontera), y  $|C_{n,m}\rangle$  corresponde a las funciones de Wannier en el  $m$ -ésimo sitio



**Fig. 3:** Composición de estructuras mediante el método recursivo de la matriz de dispersión. En A) se muestra un sistema A, al cual se le asocia la matriz de dispersión  $\mathbf{S}^A$ , compuesto por un sitio interno, cinco sitios frontera y seis cadenas auxiliares. En B) se ilustra una estructura B, asociado a la matriz de dispersión  $\mathbf{S}^B$ , conformado por tres sitios internos, seis sitios frontera y seis cadenas auxiliares. En la estructura C) se ilustra el sistema resultante de la composición de las estructuras A y B, cuya matriz de dispersión,  $\mathbf{S}^C$ , se encuentra determinada por la ecuación (2.8). En este caso, observamos que las energías de sitio de los sitios involucrados en la fusión de las estructuras se encuentran determinadas por  $\varepsilon_1 = \varepsilon_1^A + \varepsilon_1^B$ ,  $\varepsilon_2 = \varepsilon_3^A + \varepsilon_4^B$  y  $\varepsilon_3 = \varepsilon_6^A + \varepsilon_8^B$ , mientras que las integrales de salto implicadas en la composición están dadas por  $t_1 = t_{1,3}^A + t_{1,4}^B$  y  $t_2 = t_{3,6}^A + t_{4,8}^B$ . Adicionalmente, notemos que el sistema resultante posee seis cadenas auxiliares, obediendo la regla expuesta en el punto 3.

de la  $n$ -ésima cadena acoplada, comenzando el conteo de estos últimos a partir del sitio frontera donde está conectada la cadena auxiliar. Por otro lado, los coeficientes  $N_s$  y  $P_s$  representan el número total de sitios en la estructura y de cadenas acopladas, respectivamente, de tal forma que la matriz de dispersión asociada al sistema tendrá dimensiones  $(P_s \times P_s)$ . Cabe destacar que, para las cadenas auxiliares, por tratarse de

sistemas semi-infinitos, las soluciones a los coeficientes  $S_{n,m}^C$  corresponden a la combinación lineal de ondas entrantes y salientes al sistema, es decir

$$S_{n,m}^C = S_n^{(+)} e^{-ikma} + S_n^{(-)} e^{ikma}. \quad (2.2)$$

Pensemos ahora en dos estructuras, A y B, las cuales cuentan con un determinado número de sitios internos (esferas rojas) y de sitios frontera (esferas verdes). Estos últimos a su vez, se encuentran conectados a cadenas atómicas auxiliares (esferas grises) como se muestra en la Fig. 3. A cada una de estas estructuras le corresponde una matriz de dispersión, de modo que para la estructura A se cumple que

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_1^{(-)} \\ \mathbf{A}_2^{(-)} \end{pmatrix} = \mathbf{S}^A \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1^{(+)} \\ \mathbf{A}_2^{(+)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{11}^A & \mathbf{S}_{12}^A \\ \mathbf{S}_{21}^A & \mathbf{S}_{22}^A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1^{(+)} \\ \mathbf{A}_2^{(+)} \end{pmatrix}, \quad (2.3)$$

mientras que para la estructura B se tiene

$$\begin{pmatrix} \mathbf{B}_1^{(-)} \\ \mathbf{B}_2^{(-)} \end{pmatrix} = \mathbf{S}^B \begin{pmatrix} \mathbf{B}_1^{(+)} \\ \mathbf{B}_2^{(+)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{11}^B & \mathbf{S}_{12}^B \\ \mathbf{S}_{21}^B & \mathbf{S}_{22}^B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{B}_1^{(+)} \\ \mathbf{B}_2^{(+)} \end{pmatrix}, \quad (2.4)$$

en donde definimos

$$\mathbf{A}_1^{(\pm)} = \begin{pmatrix} A_1^{(\pm)} \\ A_2^{(\pm)} \\ \vdots \\ A_N^{(\pm)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}_2^{(\pm)} = \begin{pmatrix} A_{N+1}^{(\pm)} \\ A_{N+2}^{(\pm)} \\ \vdots \\ A_{M_A}^{(\pm)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B}_1^{(\pm)} = \begin{pmatrix} B_1^{(\pm)} \\ B_2^{(\pm)} \\ \vdots \\ B_N^{(\pm)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B}_2^{(\pm)} = \begin{pmatrix} B_{N+1}^{(\pm)} \\ B_{N+2}^{(\pm)} \\ \vdots \\ B_{M_B}^{(\pm)} \end{pmatrix}, \quad (2.5)$$

siendo  $N$  el número de cadenas auxiliares que se pretenden combinar de ambos sistemas.

Considerando que las amplitudes de onda entrantes al sistema B corresponden a aquellas salientes del sistema A, se obtiene un conjunto de igualdades dado por

$$A_i^{(\pm)} = B_i^{(\mp)} \quad \text{con } i = 1, \dots, N, \quad (2.6)$$

las cuales derivan en la combinación de ambas estructuras, cumpliendo las siguientes propiedades:

1. Las  $N$  cadenas involucradas en la composición se eliminan, y los sitios frontera a los que éstas se encuentran acopladas se suman. Por ejemplo, en la Fig. 3 C) se tiene que  $\varepsilon_1 = \varepsilon_1^A + \varepsilon_1^B$ ,  $\varepsilon_2 = \varepsilon_3^A + \varepsilon_4^B$  y  $\varepsilon_3 = \varepsilon_6^A + \varepsilon_8^B$ .
2. Las integrales de salto que conectan los sitios frontera involucrados en la composición, se suman. Por ejemplo, en la Fig. 3 C) se tiene que  $t_1 = t_{1,3}^A + t_{1,4}^B$  y  $t_2 = t_{3,6}^A + t_{4,8}^B$ .

3. Las integrales de salto y las energías de sitio que no se vean involucradas en la composición, permanecerán sin cambios
4. El ordenamiento en el número de cadenas acopladas depende del orden de composición. Es decir, el índice correspondiente a éstas dependerá de si se compone el sistema A con B, o B con A.

Como se muestra en el apéndice A, la matriz de dispersión resultante a la composición cumple que

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_2^{(-)} \\ \mathbf{B}_2^{(-)} \end{pmatrix} = \mathbf{S}^C \begin{pmatrix} \mathbf{A}_2^{(+)} \\ \mathbf{B}_2^{(+)} \end{pmatrix}, \quad (2.7)$$

siendo (Ramírez & Medina-Amayo, 2017)

$$\mathbf{S}^C = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{22}^A + \mathbf{S}_{21}^A (\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{S}_{11}^A)^{-1} \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{S}_{12}^A & \mathbf{S}_{21}^A (\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{S}_{11}^A)^{-1} \mathbf{S}_{12}^B \\ \mathbf{S}_{21}^B (\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{S}_{11}^B)^{-1} \mathbf{S}_{12}^A & \mathbf{S}_{22}^B + \mathbf{S}_{21}^B (\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{S}_{11}^B)^{-1} \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{S}_{12}^B \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

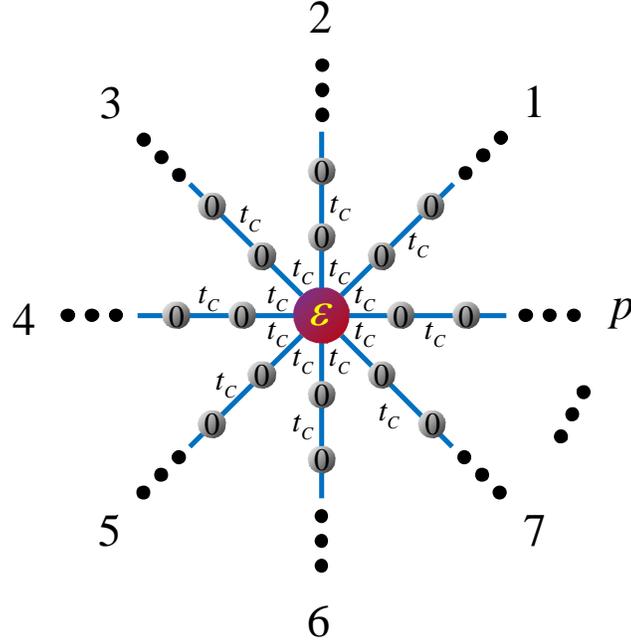
Dado que las matrices de dispersión de los sistemas A y B son de dimensiones  $P_A \times P_A$  y  $P_B \times P_B$ , respectivamente, la matriz de dispersión del sistema resultante será de dimensiones  $(P_A + P_B - 2N) \times (P_A + P_B - 2N)$ , siendo a su vez  $P_A + P_B - 2N$  el número de cadenas acopladas a la estructura.

## 2.2 Estructuras Elementales

En la sección anterior, se demostró que una estructura considerablemente compleja puede derivarse a partir de la composición reiterativa de estructuras más sencillas. Por ello, es conveniente tomar como base las estructuras más simples posibles, de las cuales se pueda derivar cualquier tipo de sistema. En nuestro caso proponemos las siguientes estructuras, mostradas en la Fig. 4 y la Fig 5, como la base elemental de la cual partirá la generación de sistemas. A estas estructuras se le conoce como **estructura de sitio** y **estructura de enlace**.

La estructura de sitio consta de un sitio con energía de sitio  $\varepsilon$  (esfera morada), el cual se encuentra acoplado a  $p$  cadenas auxiliares (esferas grises), como se muestra en Fig. 4, de modo que su matriz de dispersión es de dimensión  $p \times p$ , y está dada por (apéndice B) (Ramírez & Medina-Amayo, 2017)

$$\left( \mathbf{S}^{\text{sitio}} \right)_{nm} = \frac{2it_c \sin(ka)}{\varepsilon - E + pt_c e^{ika}} - \delta_{nm}. \quad (2.9)$$



**Fig. 4:** Estructura de Sitio. Compuesta por un sitio con energía  $\varepsilon$ , el cual tiene  $p$  cadenas auxiliares acopladas.

Por otro lado, la estructura de enlace consiste de dos sitios frontera con energía de sitio nula (esferas moradas) conectados cada uno a una cadena auxiliar (esferas grises). Los sitios frontera a su vez están unidos entre sí mediante una determinada integral de salto  $t$ , como se observa en Fig. 5. En el apéndice C se deriva la matriz de dispersión de este sistema, resultando (Ramírez & Medina-Amayo, 2017)

$$\mathbf{S}^{\text{enlace}} = \begin{pmatrix} r & \frac{t_c}{t}(e^{ika} + re^{-ika}) \\ \frac{t_c}{t}(e^{ika} + re^{-ika}) & r \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

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



**Fig. 5:** Estructura de enlace. Esta se compone por dos núcleos con energía de sitio nula, cada uno con una cadena auxiliar acoplada, y conectados entre sí por una integral de salto  $t$ .

## 2.3 Saturadores

Para entender cómo se debe modelar un sistema semi-infinito, es conveniente estudiar primero cómo se modela un sistema infinito, para ello, consideremos un sistema como el que se muestra en la Fig. 6 A). Siguiendo el método propuesto, esta estructura se puede formar mediante la composición recursiva (infinita) de subsistemas como el que se muestra en la Fig. 6 B). Sin embargo, este método resulta inadmisibles debido al esfuerzo y la memoria computacional que requiere, por lo que es necesario plantear una nueva metodología para el análisis de este tipo de sistemas.

Examinando la Fig. 6 B), podemos observar que a esta estructura le corresponden tanto ondas entrantes como salientes, por lo que se le puede asociar una matriz de dispersión tal que

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(-)} \\ \mathbf{B}^{(-)} \end{pmatrix} = \mathbf{S} \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(+)} \\ \mathbf{B}^{(+)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{11} & \mathbf{S}_{12} \\ \mathbf{S}_{21} & \mathbf{S}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(+)} \\ \mathbf{B}^{(+)} \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

donde

$$\mathbf{A}^{(\pm)} = \begin{pmatrix} A_1^{(\pm)} \\ A_2^{(\pm)} \\ \vdots \\ A_Q^{(\pm)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B}^{(\pm)} = \begin{pmatrix} B_1^{(\pm)} \\ B_2^{(\pm)} \\ \vdots \\ B_Q^{(\pm)} \end{pmatrix}, \quad (2.12)$$

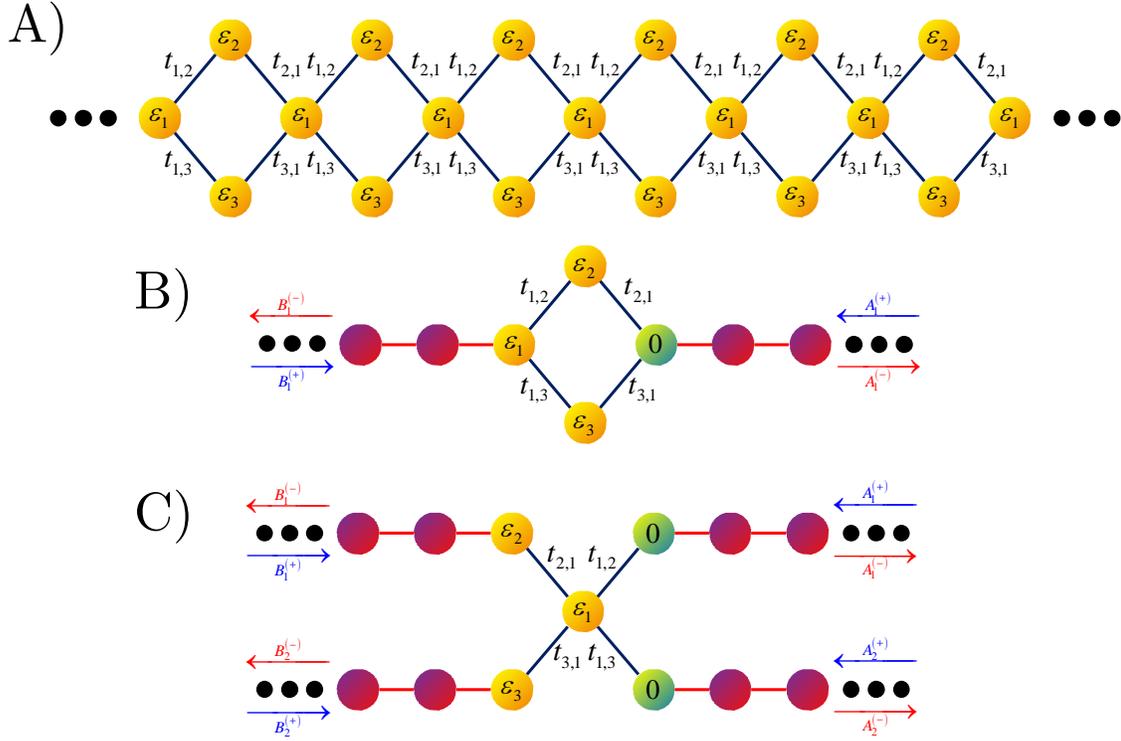
siendo  $Q$  el número de canales abiertos del sistema, el cual varía según lo indique la relación de dispersión.

Por el teorema de Bloch, sabemos que las funciones de onda de dos celdas contiguas se relacionan mediante un factor constante  $\lambda$ . Adicionalmente, ya vimos que en la composición de estructuras se igualan las ondas entrantes a un sistema con las salientes del otro, como se muestra en (2.6). Considerando lo anterior, es posible demostrar que las amplitudes de onda deben cumplir que (Ramírez C. , 2018)

$$\mathbf{B}^{(\pm)} = \lambda \mathbf{A}^{(\mp)}, \quad (2.13)$$

de modo que la ecuación (2.11) se escribe como

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(-)} \\ \lambda \mathbf{A}^{(+)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{11} & \mathbf{S}_{12} \\ \mathbf{S}_{21} & \mathbf{S}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(+)} \\ \lambda \mathbf{A}^{(-)} \end{pmatrix}, \quad (2.14)$$



**Fig. 6:** A) Ejemplo de sistema periódico infinito. B) Estructura propuesta, compuesta únicamente por dos cadenas auxiliares acopladas, cuya fusión recursiva reproduce al sistema ilustrado en A). En C) se ilustra una propuesta alternativa de una estructura cuya fusión recursiva reproduzca al sistema A). Notemos que, a diferencia del sistema en B), esta contiene un mayor número de cadenas acopladas, por lo que hay una mayor cantidad de modos de reflexión total

o lo que es lo mismo

$$\begin{cases} \mathbf{A}^{(-)} = \mathbf{S}_{11}\mathbf{A}^{(+)} + \lambda\mathbf{S}_{12}\mathbf{A}^{(-)} \\ \lambda\mathbf{A}^{(+)} = \mathbf{S}_{21}\mathbf{A}^{(+)} + \lambda\mathbf{S}_{22}\mathbf{A}^{(-)} \end{cases} \quad (2.15)$$

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

con  $\mathbf{I}$  la matriz identidad y  $\mathbf{0}$  la matriz cero, ambas de dimensiones  $(Q \times Q)$ . Este sistema de ecuaciones se puede escribir en forma matricial como

$$\begin{pmatrix} -\mathbf{S}_{11} & \mathbf{I} \\ -\mathbf{S}_{21} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(+)} \\ \mathbf{A}^{(-)} \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{S}_{12} \\ -\mathbf{I} & \mathbf{S}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(+)} \\ \mathbf{A}^{(-)} \end{pmatrix}, \quad (2.16)$$

la cual resulta ser una ecuación generalizada de eigenvalores de la forma  $\mathbf{Ax} = \lambda\mathbf{Bx}$ , resoluble mediante diversos métodos computacionales, donde  $\mathbf{x}$  es un eigenvector generalizado y  $\lambda$

es su eigenvalor asociado. Particularmente, si alguna de las matrices,  $\mathbf{A}$  o  $\mathbf{B}$ , resulta ser invertible, es posible reducir el análisis al problema tradicional de eigenvalores.

En el caso en que se cumpla que  $|\lambda|=1$ , los estados asociados corresponden a estados de Bloch (extendidos), mientras que en el caso contrario,  $|\lambda|\neq 1$ , las funciones son evanescentes, siendo aquellas con  $|\lambda|>1$  evanescentes por la derecha, y con  $|\lambda|<1$  evanescentes por la izquierda. Notemos que estas soluciones divergen a la derecha e izquierda, respectivamente, por lo que no representan soluciones físicas.

Utilizando el teorema de Bloch y considerando la simetría de la reversibilidad temporal en el problema de la dispersión, es posible demostrar que para los estados extendidos del sistema se cumple que  $\lambda_{\pm k} = e^{\pm ika}$ , cuyos eigenvectores asociados son (Ramírez C. , 2018)

$$v_k = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_k^{(+)} \\ \mathbf{A}_k^{(-)} \end{pmatrix}, \quad v_{-k} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{-k}^{(+)} \\ \mathbf{A}_{-k}^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_k^{(-)*} \\ \mathbf{A}_k^{(+)} \end{pmatrix}, \quad (2.17)$$

respectivamente. Calculando la densidad de corriente de probabilidad correspondiente al eigenestado  $v_k$  sobre una sección transversal en las cadenas acopladas del sistema, se establece que esta última se expresa como

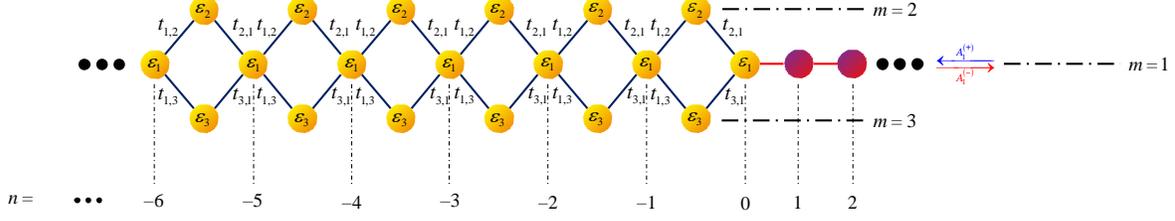
$$J_k = \frac{2bt_c}{\hbar} \sin(kb) \left[ \mathbf{A}_k^{(-)\dagger} \mathbf{A}_k^{(-)} - \mathbf{A}_k^{(+)\dagger} \mathbf{A}_k^{(+)} \right], \quad (2.18)$$

siendo  $b$  la distancia interatómica en la cadena auxiliar, y donde la notación  $\dagger$  indica el complejo conjugado. Adicionalmente, la relación de dispersión para dichas cadenas auxiliares es de la forma

$$E = 2t_c \cos(kb). \quad (2.19)$$

Para que el número de onda,  $k$ , sea real, se debe cumplir que  $|E/2t_c| \leq 1$ . De esta forma, se determina que los estados evanescentes cumplen con  $J = 0$ , mientras que para funciones de Bloch se tiene que: la onda se propaga a la derecha si  $J > 0$ , o la onda se propaga hacia la izquierda cuando  $J < 0$  (Ramírez C. , 2018). Debido a la forma de los eigenvalores asociados a los eigenvectores en (2.17), es posible determinar que el coeficiente de amplitud del  $n$ -ésimo átomo de la cadena estará modulado por el factor  $e^{\pm ikna}$ .

Finalmente, es necesario puntualizar que existen diversas celdas unitarias cuya composición genera al sistema de la Fig. 6 A), y que la celda en la Fig 6 B) es solo una propuesta particular. No obstante, es recomendado utilizar la estructura más simple posible debido a que, sea  $Q_{\min}$  el número mínimo de cadenas acopladas, para sistemas con  $Q = Q_{\min}$



**Fig. 7:** Estructura semi-infinita. El índice  $n$  enumera la posición longitudinal, mientras que el índice  $m$  indica la posición transversal.

se generan  $2Q$  eigenvalores, independientes de la celda seleccionada. Por otro lado, para aquellas estructuras con  $Q > Q_{\min}$ , como la que se ilustra en la Fig. 6 C), se generan  $Q - Q_{\min}$  pares de eigenvalores adicionales, determinados por  $\det \mathbf{S}_{12} = \det \mathbf{S}_{21} = 0$ , correspondientes a modos de reflexión total, los cuales es imposible que existan dentro del sistema. De este modo, el número de canales de la estructura está limitado por  $Q_{\min}$ , donde por cada par de ondas de Bloch viajeras a la izquierda y a la derecha se establece un canal de conducción (abierto). Así, para una energía dada, el máximo de canales de conducción posible está establecido por  $Q_{\min}$  (Ramírez C. , 2018).

Consideremos ahora una estructura semi infinita como la que se muestra en la Fig. 7, donde el sistema se extiende hacia el infinito únicamente hacia su lado izquierdo. Según lo desarrollado en los párrafos anteriores, podemos ordenar los eigenvalores de la ecuación (2.16) como sigue

$$\lambda_j = \begin{cases} e^{ik_j a} & \text{con } j = 1, \dots, \tilde{Q} \\ e^{k_j a} & \text{con } j = \tilde{Q} + 1, \dots, Q \end{cases}, \quad (2.20)$$

donde  $\tilde{Q}$  representa el número de canales abiertos para una determinada energía,  $Q$  es el número total de canales en el sistema,  $e^{k_j a}$  son los eigenvalores asociados a las ondas evanescentes hacia la izquierda,  $e^{ik_j a}$  los eigenvalores asociados a las ondas de Bloch viajeras a la derecha y cuyo eigenvector correspondiente está dado por (2.17). Adicionalmente, mediante la inversión temporal podemos encontrar que los eigenvalores asociados a ondas de Bloch viajeras a la izquierda corresponden a  $e^{-ik_j a}$ , cuyo eigenvector está dado por (2.17).

Del teorema de Bloch, como las funciones de onda entre celdas contiguas se relacionan mediante una constante  $\lambda$ , para la  $n$ -ésima celda se tendrá que éstas estarán relacionadas por medio del factor  $\lambda^n$ . Considerando lo anterior y utilizando (2.17) y (2.20), es posible escribir los coeficientes de amplitud del  $m$ -ésimo sitio en la  $n$ -ésima celda del saturador como

$$C_{nm} = \sum_{j=1}^{\tilde{Q}} L_j^{(+)} \left( \mathbf{A}_j^{(+)} + \mathbf{A}_j^{(-)} \right)_m e^{ik_jna} + \sum_{j=1}^{\tilde{Q}} L_j^{(-)} \left( \mathbf{A}_j^{(+)} + \mathbf{A}_j^{(-)} \right)_m^* e^{-ik_jna} + \sum_{j=\tilde{Q}+1}^Q L_j \left( \mathbf{A}_j^{(+)} + \mathbf{A}_j^{(-)} \right)_m e^{-k_jna}, \quad (2.21)$$

donde  $L_j^{(\pm)}$  corresponden a las amplitudes de las ondas entrantes y salientes, respectivamente, mientras que  $L_j$  son las amplitudes de las ondas evanescentes a la izquierda.

Adicionalmente, para la región  $n > 0$  únicamente se tienen ondas entrantes y salientes de las cadenas acopladas, por lo que la ecuación (2.21) se modifica y queda como

$$C_{nm} = \sum_{j=1}^{\tilde{Q}} L_j^{(+)} \left( \mathbf{A}_j^{(+)} e^{-ikna} + \mathbf{A}_j^{(-)} e^{ikna} \right)_m + \sum_{j=1}^{\tilde{Q}} L_j^{(-)} \left( \mathbf{A}_j^{(+)} e^{-ikna} + \mathbf{A}_j^{(-)} e^{ikna} \right)_m^* + \sum_{j=\tilde{Q}+1}^Q L_j \left( \mathbf{A}_j^{(+)} e^{-ikna} + \mathbf{A}_j^{(-)} e^{ikna} \right)_m. \quad (2.22)$$

Notemos a su vez que, considerando la solución de ondas viajeras, es posible escribir el coeficiente asociado al  $m$ -ésimo sitio de la  $n$ -ésima cadena como

$$C_{nm} = D_m^{(+)} e^{-ikna} + D_m^{(-)} e^{ikna}. \quad (2.23)$$

Igualando las ecuaciones (2.22) y (2.23) tenemos que

$$\begin{aligned} D_m^{(+)} e^{-ikna} + D_m^{(-)} e^{ikna} &= \sum_{j=1}^{\tilde{Q}} L_j^{(+)} \left( \mathbf{A}_j^{(+)} e^{-ikna} + \mathbf{A}_j^{(-)} e^{ikna} \right)_m + \sum_{j=1}^{\tilde{Q}} L_j^{(-)} \left( \mathbf{A}_j^{(+)} e^{-ikna} + \mathbf{A}_j^{(-)} e^{ikna} \right)_m^* \\ &\quad + \sum_{j=\tilde{Q}+1}^Q L_j \left( \mathbf{A}_j^{(+)} e^{-ikna} + \mathbf{A}_j^{(-)} e^{ikna} \right)_m \\ &= \left( \sum_{j=1}^{\tilde{Q}} L_j^{(+)} \mathbf{A}_j^{(+)} e^{-ikna} \right)_m + \left( \sum_{j=1}^{\tilde{Q}} L_j^{(+)} \mathbf{A}_j^{(-)} e^{ikna} \right)_m + \left( \sum_{j=1}^{\tilde{Q}} L_j^{(-)} \left( \mathbf{A}_j^{(+)} \right)_m^* e^{ikna} \right)_m \\ &\quad + \left( \sum_{j=1}^{\tilde{Q}} L_j^{(-)} \left( \mathbf{A}_j^{(-)} \right)_m^* e^{-ikna} \right)_m + \left( \sum_{j=\tilde{Q}+1}^Q L_j \mathbf{A}_j^{(+)} e^{-ikna} \right)_m + \left( \sum_{j=\tilde{Q}+1}^Q L_j \mathbf{A}_j^{(-)} e^{ikna} \right)_m, \end{aligned} \quad (2.24)$$

lo cual implica que

$$\begin{cases} D_m^{(+)} = \left( \sum_{j=1}^{\tilde{Q}} L_j^{(+)} \mathbf{A}_j^{(+)} + \sum_{j=1}^{\tilde{Q}} L_j^{(-)} \left( \mathbf{A}_j^{(-)} \right)_m^* + \sum_{j=\tilde{Q}+1}^Q L_j \mathbf{A}_j^{(+)} \right)_m \\ D_m^{(-)} = \left( \sum_{j=1}^{\tilde{Q}} L_j^{(+)} \mathbf{A}_j^{(-)} + \sum_{j=1}^{\tilde{Q}} L_j^{(-)} \left( \mathbf{A}_j^{(+)} \right)_m^* + \sum_{j=\tilde{Q}+1}^Q L_j \mathbf{A}_j^{(-)} \right)_m \end{cases}. \quad (2.25)$$

Definiendo

$$\mathbf{D}^{(\pm)} = \begin{pmatrix} D_1^{(\pm)} \\ D_2^{(\pm)} \\ \vdots \\ D_\varrho^{(\pm)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{L}^{(\pm)} = \begin{pmatrix} L_1^{(\pm)} \\ L_2^{(\pm)} \\ \vdots \\ L_\varrho^{(\pm)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{L} = \begin{pmatrix} L_{\tilde{\varrho}+1} \\ L_{\tilde{\varrho}+2} \\ \vdots \\ L_\varrho \end{pmatrix}, \quad (2.26)$$

es posible escribir la ecuación (2.25) como

$$\begin{pmatrix} \mathbf{D}^{(+)} \\ \mathbf{D}^{(-)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_1^{(+)} & \mathbf{M}_2^{(+)} & \mathbf{M}_3^{(+)} \\ \mathbf{M}_1^{(-)} & \mathbf{M}_2^{(-)} & \mathbf{M}_3^{(-)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{L}^{(+)} \\ \mathbf{L}^{(-)} \\ \mathbf{L} \end{pmatrix}, \quad (2.27)$$

o lo que es lo mismo

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

donde

$$\begin{cases} \mathbf{M}_1^{(\pm)} = \left( \mathbf{A}_1^{(\pm)} & \mathbf{A}_2^{(\pm)} & \cdots & \mathbf{A}_{\tilde{\varrho}}^{(\pm)} \right) \\ \mathbf{M}_2^{(\pm)} = \left( \mathbf{A}_1^{(\mp)} & \mathbf{A}_2^{(\mp)} & \cdots & \mathbf{A}_{\tilde{\varrho}}^{(\mp)} \right)^* \\ \mathbf{M}_3^{(\pm)} = \left( \mathbf{A}_{\tilde{\varrho}+1}^{(\pm)} & \mathbf{A}_{\tilde{\varrho}+2}^{(\pm)} & \cdots & \mathbf{A}_{\varrho}^{(\pm)} \right) \end{cases}. \quad (2.29)$$

Sea  $\tilde{\mathbf{M}}_2^{(\pm)} = \left( \mathbf{M}_2^{(\pm)} \quad \mathbf{M}_3^{(\pm)} \right)$ , es posible reescribir la ecuación (2.28) como

$$\begin{cases} \mathbf{D}^{(+)} = \mathbf{M}_1^{(+)}\mathbf{L}^{(+)} + \tilde{\mathbf{M}}_2^{(+)} \begin{pmatrix} \mathbf{L}^{(-)} \\ \mathbf{L} \end{pmatrix} \\ \mathbf{D}^{(-)} = \mathbf{M}_1^{(-)}\mathbf{L}^{(+)} + \tilde{\mathbf{M}}_2^{(-)} \begin{pmatrix} \mathbf{L}^{(-)} \\ \mathbf{L} \end{pmatrix} \end{cases}. \quad (2.30)$$

De la primera ecuación del anterior sistema, se obtiene que

$$\begin{pmatrix} \mathbf{L}^{(-)} \\ \mathbf{L} \end{pmatrix} = \left[ \tilde{\mathbf{M}}_2^{(+)} \right]^{-1} \mathbf{D}^{(+)} - \left[ \tilde{\mathbf{M}}_2^{(+)} \right]^{-1} \mathbf{M}_1^{(+)}\mathbf{L}^{(+)}, \quad (2.31)$$

y sustituyendo en la segunda ecuación llegamos a que

$$\begin{aligned}
\mathbf{D}^{(-)} &= \mathbf{M}_1^{(-)} \mathbf{L}^{(+)} + \tilde{\mathbf{M}}_2^{(-)} \left[ \tilde{\mathbf{M}}_2^{(+)} \right]^{-1} \mathbf{D}^{(+)} - \tilde{\mathbf{M}}_2^{(-)} \left[ \tilde{\mathbf{M}}_2^{(+)} \right]^{-1} \mathbf{M}_1^{(+)} \mathbf{L}^{(+)} \\
&= \tilde{\mathbf{M}}_2^{(-)} \left[ \tilde{\mathbf{M}}_2^{(+)} \right]^{-1} \mathbf{D}^{(+)} + \left\{ \mathbf{M}_1^{(-)} - \tilde{\mathbf{M}}_2^{(-)} \left[ \tilde{\mathbf{M}}_2^{(+)} \right]^{-1} \mathbf{M}_1^{(+)} \right\} \mathbf{L}^{(+)} .
\end{aligned} \tag{2.32}$$

De esta forma, la ecuación (2.30) se expresa como

$$\begin{cases} \mathbf{D}^{(+)} = \mathbf{M}_1^{(+)} \mathbf{L}^{(+)} + \tilde{\mathbf{M}}_2^{(+)} \begin{pmatrix} \mathbf{L}^{(-)} \\ \mathbf{L} \end{pmatrix} \\ \mathbf{D}^{(-)} = \tilde{\mathbf{M}}_2^{(-)} \left[ \tilde{\mathbf{M}}_2^{(+)} \right]^{-1} \mathbf{D}^{(+)} + \left\{ \mathbf{M}_1^{(-)} - \tilde{\mathbf{M}}_2^{(-)} \left[ \tilde{\mathbf{M}}_2^{(+)} \right]^{-1} \mathbf{M}_1^{(+)} \right\} \mathbf{L}^{(+)} \end{cases} \tag{2.33}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \begin{pmatrix} \mathbf{L}^{(-)} \\ \mathbf{L} \end{pmatrix} = \left[ \tilde{\mathbf{M}}_2^{(+)} \right]^{-1} \mathbf{D}^{(+)} - \left[ \tilde{\mathbf{M}}_2^{(+)} \right]^{-1} \mathbf{M}_1^{(+)} \mathbf{L}^{(+)} \\ \mathbf{D}^{(-)} = \tilde{\mathbf{M}}_2^{(-)} \left[ \tilde{\mathbf{M}}_2^{(+)} \right]^{-1} \mathbf{D}^{(+)} + \left\{ \mathbf{M}_1^{(-)} - \tilde{\mathbf{M}}_2^{(-)} \left[ \tilde{\mathbf{M}}_2^{(+)} \right]^{-1} \mathbf{M}_1^{(+)} \right\} \mathbf{L}^{(+)} \end{cases} ,$$

o lo que es lo mismo

$$\begin{pmatrix} \mathbf{D}^{(-)} \\ \mathbf{L}^{(-)} \\ \mathbf{L} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{P}_{11} & \mathbf{P}_{12} \\ \mathbf{P}_{21} & \mathbf{P}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{D}^{(+)} \\ \mathbf{L}^{(+)} \end{pmatrix}, \tag{2.34}$$

donde

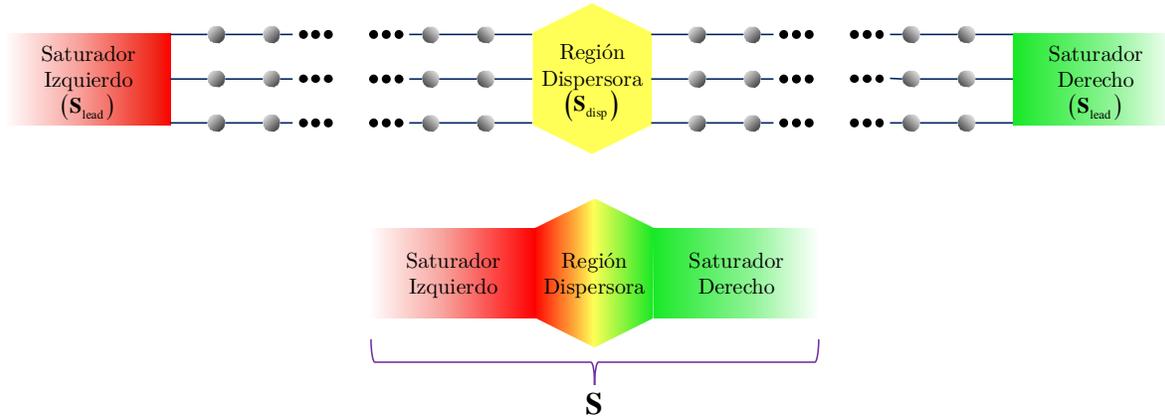
$$\begin{cases} \mathbf{P}_{11} = \tilde{\mathbf{M}}_2^{(-)} \left[ \tilde{\mathbf{M}}_2^{(+)} \right]^{-1} \\ \mathbf{P}_{12} = \mathbf{M}_1^{(-)} - \tilde{\mathbf{M}}_2^{(-)} \left[ \tilde{\mathbf{M}}_2^{(+)} \right]^{-1} \mathbf{M}_1^{(+)} \\ \mathbf{P}_{21} = \left[ \tilde{\mathbf{M}}_2^{(+)} \right]^{-1} \\ \mathbf{P}_{22} = - \left[ \tilde{\mathbf{M}}_2^{(+)} \right]^{-1} \mathbf{M}_1^{(+)} \end{cases} . \tag{2.35}$$

Podemos notar que de la ecuación (2.34), al no considerar las entradas relacionadas a las funciones evanescentes del sistema, es posible extraer una matriz que relacione las funciones de onda entrantes con las salientes. De este modo obtenemos que

$$\begin{pmatrix} \mathbf{D}^{(-)} \\ \mathbf{L}^{(-)} \end{pmatrix} = \mathbf{S}_{\text{lead}} \begin{pmatrix} \mathbf{D}^{(+)} \\ \mathbf{L}^{(+)} \end{pmatrix}, \tag{2.36}$$

siendo  $\mathbf{S}_{\text{lead}}$  la matriz de dispersión asociada a la estructura semi infinita, la cual corresponde a las primeras  $(Q + \tilde{Q}) \times (Q + \tilde{Q})$  entradas de la matriz en (2.34).

Utilizando la matriz de dispersión expuesta en la ecuación (2.36) junto con el método recursivo de la matriz de dispersión, es posible construir una nanoestructura como la que se ilustra en la Fig. 1. Basta con ensamblar una determinada región dispersora, partiendo de las estructuras elementales propuestas en la sección 2.2, y componer este sistema junto con las estructuras semi-infinitas, según se muestra en la ecuación (2.8), y como se ilustra en la Fig. 8.



**Fig. 8:** Modelo de composición de una nanoestructura utilizando el método recursivo de la matriz de dispersión. En este caso, la matriz del sistema resultante,  $\mathbf{S}$ , resulta de la composición de las matrices asociadas a la región de dispersión y a los saturadores,  $\mathbf{S}_{\text{disp}}$  y  $\mathbf{S}_{\text{lead}}$ , respectivamente, según se indica en (2.8).

# III

---

## MÉTODOS DE RENORMALIZACIÓN APLICADOS A LA MATRIZ DE DISPERSIÓN PARA SISTEMAS PERIÓDICOS

---

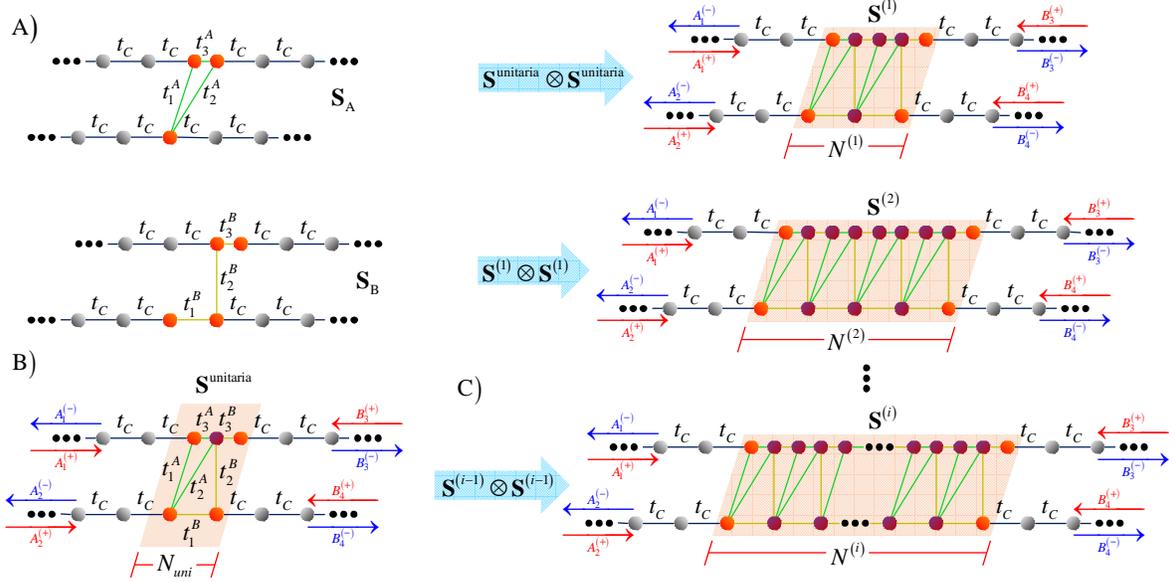
Como ya vimos, el método recursivo de la matriz de dispersión permite modelar estructuras finitas mediante la composición de subestructuras simples. No obstante, es posible minimizar los recursos computacionales requeridos para modelar un sistema extenso al explotar ciertas particularidades teóricas, dando pie así a dos técnicas fundamentales: de duplicación y de eigenvalores.

Primeramente, desarrollaremos y explicaremos los principios en los que se basan estas metodologías, y posteriormente validaremos los procedimientos analizando y comparando las matrices de dispersión de diversas estructuras, obtenidas mediante ambos métodos. Finalmente, discutiremos los atributos computacionales que presenta cada técnica con el fin de determinar sus posibles ventajas o deficiencias.

### 3.1 Renormalización y Método de Duplicación

Supongamos un sistema finito, como el que se muestra en la Fig. 9 C), el cual se puede generar mediante la fusión recursiva de la celda unitaria mostrada en B), cuya matriz de dispersión ( $\mathbf{S}^{\text{unitaria}}$ ) está determinada por (2.8). Esto último se debe a que dicha celda es resultado de la composición de las estructuras que se muestran en A), a las cuales les corresponden matrices de dispersión  $\mathbf{S}_A$  y  $\mathbf{S}_B$ , respectivamente.

La forma más directa de producir el sistema en C) consiste en la composición de  $N$  celdas unitarias por medio de la técnica desarrollada en el capítulo dos. No obstante, el tiempo computacional que supone este procedimiento se escala linealmente conforme la estructura se extiende, de manera que para estructuras macroscópicas ( $N \sim 10^{23}$ ) se necesitan fusionar  $10^{23}$  subsistemas, lo cual implica un gran esfuerzo computacional.



**Fig. 9:** A) Se muestran las estructuras utilizadas para la construcción de la celda unitaria en B), siendo sus matrices asociadas,  $\mathbf{S}_A$  y  $\mathbf{S}_B$ , respectivamente. En B) se esquematiza la celda base, de longitud  $N_{umi}$ , cuya composición recursiva forma la estructura finita en C). Se ilustra en las figuras posteriores, los resultados de la fusión recursiva de la celda base, de tal manera que la longitud se va aumentando en potencias de dos, donde  $N^{(1)} = 2N_{umi}$  y  $N^{(2)} = 2^2 N_{umi}$ . Finalmente, se ilustra en el inciso C) el sistema deseado, cuya longitud está dada por  $N^{(i)} = 2^i N_{umi}$ .

Para sortear este inconveniente, es posible aprovechar la renormalización de las estructuras y aplicar el *método de duplicación* (Rumpf, 2011), que se explica a continuación.

Consideremos una determinada celda unitaria de longitud  $N_{umi}$ , como se muestra en la Fig. 9 B). Al fusionar este sistema consigo mismo, se genera una estructura de largo  $N^{(1)} = 2N_{umi}$ , con matriz de dispersión  $\mathbf{S}^{(1)}$ . Si este sistema resultante se fusiona nuevamente consigo mismo, se produce una nueva estructura de longitud  $N^{(2)} = 2N^{(1)} = 2^2 N_{umi}$ , y cuya matriz de dispersión asociada está dada por  $\mathbf{S}^{(2)}$ . Siguiendo con este procedimiento, es posible inferir que el largo del  $i$ -ésimo sistema resultante estará determinado por  $N^{(i)} = 2^i N_{umi}$ , como se muestra en la Fig. 9 C).

Si bien podemos notar que este procedimiento genera estructuras con longitudes en potencias de 2, es necesario puntualizar que la técnica se puede generalizar para construir una estructura de cualquier longitud, basta con convertir dicho valor a sistema binario y fusionar las matrices de dispersión apropiadas, indicadas por los coeficientes.

Pensemos ahora en el caso específico de una estructura con largo  $N = 157$  y matriz asociada  $\mathbf{S}^{(157)}$ . En sistema binario, este número es  $10011101_2$ , de modo que la estructura se puede formar como

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}^{(157)} &= (1)\mathbf{S}^{(7)} \otimes \cancel{(0)\mathbf{S}^{(6)}} \otimes \cancel{(0)\mathbf{S}^{(5)}} \otimes (1)\mathbf{S}^{(4)} \otimes (1)\mathbf{S}^{(3)} \otimes (1)\mathbf{S}^{(2)} \otimes \cancel{(0)\mathbf{S}^{(1)}} \otimes (1)\mathbf{S}^{(0)} \\
&= \mathbf{S}^{(7)} \otimes \mathbf{S}^{(4)} \otimes \mathbf{S}^{(3)} \otimes \mathbf{S}^{(2)} \otimes \mathbf{S}^{(0)}
\end{aligned} \tag{3.1}$$

donde el producto directo indica la fusión de matrices de dispersión, dado por (2.8),  $\mathbf{S}^{(0)}$  corresponde a la matriz de dispersión de la estructura unitaria, y  $\mathbf{S}^{(i \neq 0)}$  son las matrices asociadas a las estructuras resultantes del proceso de duplicación, definidas y esquematizadas en la Fig. 9.

Cabe mencionar que para la conversión de un sistema numérico a otro (en nuestro caso, de decimal a binario), se utilizó el algoritmo presentado por (Olagunju, 1995), en el cual, sea  $n$  el número en la base original,  $b$  la base a la cual se desea transformar y  $m$  el número  $n$  en la base deseada, se calcula la operación  $\%_b$ , donde el cociente se reasigna al valor  $n$ , y el residuo ( $r$ ) se almacena en el valor  $m$  de derecha a izquierda hasta que  $n=0$ . Computacionalmente, dado que  $n$  y  $b$  son parámetros de tipo entero, la división  $\%_b$  devuelve la parte entera de la operación, mientras que el residuo correspondiente se puede calcular mediante la función módulo (MOD). Un ejemplo de la aplicación de este algoritmo se muestra en la siguiente ecuación

$n$	$b$	$\%_b$	$r$	$m$
357	7	51	0	0
51	7	7	2	20
7	7	1	0	020
1	7	0	1	1020

(3.2)

Este caso se trata de la conversión del número  $357_{10}$  en base decimal a su respectiva representación en base siete, la cual resulta ser  $1020_7$ .

## 3.2 Método de Eigenvalores

En la sección anterior se expuso el método de duplicación, desarrollado por (Rumpf, 2011), el cual se basa en la explotación de la propiedad de renormalización de las matrices de dispersión. No obstante, es posible darle un nuevo enfoque al problema al considerar las propiedades de periodicidad de las funciones de Bloch. Esto da pie a un nuevo método denominado *método de eigenvalores*, el cual se explica a continuación.

Pensemos una celda unitaria de referencia como la que se muestra en la Fig. 9 B), a la cual le corresponde una matriz de dispersión ( $\mathbf{S}^{\text{unitaria}}$ ) tal que

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(-)} \\ \mathbf{B}^{(-)} \end{pmatrix} = \mathbf{S}^{\text{unitaria}} \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(+)} \\ \mathbf{B}^{(+)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{11}^{\text{unitaria}} & \mathbf{S}_{12}^{\text{unitaria}} \\ \mathbf{S}_{21}^{\text{unitaria}} & \mathbf{S}_{22}^{\text{unitaria}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(+)} \\ \mathbf{B}^{(+)} \end{pmatrix}, \quad (3.3)$$

donde  $\mathbf{A}^{(\pm)}$  y  $\mathbf{B}^{(\pm)}$  están dados por

$$\mathbf{A}^{(\pm)} = \begin{pmatrix} A_1^{(\pm)} \\ A_2^{(\pm)} \\ \vdots \\ A_N^{(\pm)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B}^{(\pm)} = \begin{pmatrix} B_{N+1}^{(\pm)} \\ B_{N+2}^{(\pm)} \\ \vdots \\ B_{2N}^{(\pm)} \end{pmatrix}, \quad (3.4)$$

siendo  $2N$  el número de cadenas acopladas al sistema.

Utilizando el método mostrado en la tercera sección del capítulo dos, y aplicando la condición (2.13), podemos determinar los valores  $\lambda$  mediante la ecuación de eigenvalores generalizada (2.16). Dado que  $\mathbf{A}^{(\pm)}$  tiene dimensiones  $(N \times 1)$ , obtendremos como resultado  $2N$  posibles eigenvalores, cuyos eigenvectores asociados están dados por

$$\mathbf{v}_i = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_i^{(+)} \\ \mathbf{A}_i^{(-)} \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

donde el subíndice  $i$  indica que este eigenvector corresponde al  $i$ -ésimo eigenvalor.

Adicionalmente, sea  $\Psi_0$  la función de onda en la celda de referencia, por el teorema de Bloch se debe cumplir que

$$\Psi_1(\mathbf{r}) = \lambda \Psi_0(\mathbf{r}) \quad (3.6)$$

con  $\Psi_1(\mathbf{r})$  la función de onda en la primera celda contigua. Si a continuación consideramos la segunda celda vecina y aplicamos nuevamente el teorema de Bloch, obtenemos la siguiente condición

$$\Psi_2(\mathbf{r}) = \lambda \Psi_1(\mathbf{r}). \quad (3.7)$$

Sustituyendo  $\Psi_1(\mathbf{r})$  en la anterior expresión, resulta que

$$\Psi_2(\mathbf{r}) = \lambda^2 \Psi_0(\mathbf{r}), \quad (3.8)$$

y así sucesivamente, de modo que para la  $n$ -ésima celda se obtiene

$$\Psi_n(\mathbf{r}) = \lambda^n \Psi_0(\mathbf{r}). \quad (3.9)$$

Utilizando ahora la condición (2.13), podemos deducir que, entre la celda de referencia y la  $n$ -ésima celda, las amplitudes de onda se relacionan como

$$\mathbf{B}_i^{(\pm)} = \lambda_i^n \mathbf{A}_i^{(\mp)} \quad \text{con } i=1, \dots, 2N. \quad (3.10)$$

Pensemos ahora en una estructura periódica finita, como la que se muestra en la Fig. 10, la cual se puede construir mediante la composición de  $n$  celdas unitarias. La matriz de dispersión asociada a este sistema es tal que

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_i^{(-)} \\ \mathbf{B}_i^{(-)} \end{pmatrix} = \mathbf{S}^{(n)} \begin{pmatrix} \mathbf{A}_i^{(+)} \\ \mathbf{B}_i^{(+)} \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Sustituyendo la condición (3.10) en la anterior ecuación, obtenemos que

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_i^{(-)} \\ \lambda_i^n \mathbf{A}_i^{(+)} \end{pmatrix} = \mathbf{S}^{(n)} \begin{pmatrix} \mathbf{A}_i^{(+)} \\ \lambda_i^n \mathbf{A}_i^{(-)} \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

o lo que es lo mismo

$$\mathbf{U} = \mathbf{S}^{(n)} \mathbf{V}, \quad (3.13)$$

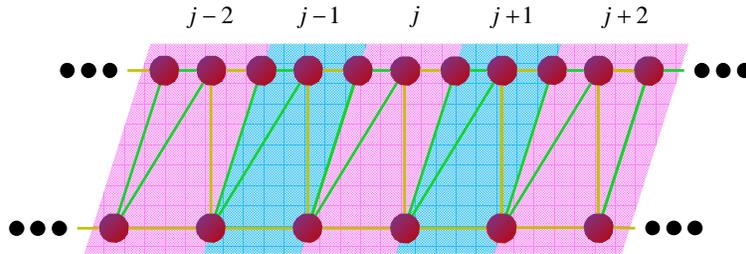
con  $\mathbf{U}$  y  $\mathbf{V}$  matrices cuadradas de dimensiones  $(2N \times 2N)$ , dadas por

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1^{(-)} & \mathbf{A}_2^{(-)} & \dots & \mathbf{A}_{2N}^{(-)} \\ \lambda_1^n \mathbf{A}_1^{(+)} & \lambda_2^n \mathbf{A}_2^{(+)} & \dots & \lambda_{2N}^n \mathbf{A}_{2N}^{(+)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{V} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1^{(+)} & \mathbf{A}_2^{(+)} & \dots & \mathbf{A}_{2N}^{(+)} \\ \lambda_1^n \mathbf{A}_1^{(-)} & \lambda_2^n \mathbf{A}_2^{(-)} & \dots & \lambda_{2N}^n \mathbf{A}_{2N}^{(-)} \end{pmatrix}. \quad (3.14)$$

Finalmente, de la ecuación (3.13) podemos obtener la matriz de la estructura finita periódica como

$$\mathbf{S}^{(n)} = \mathbf{U} \mathbf{V}^{-1}. \quad (3.15)$$

donde la extensión de la estructura se manifiesta únicamente en las dimensiones de las matrices  $\mathbf{U}$  y  $\mathbf{V}$ .

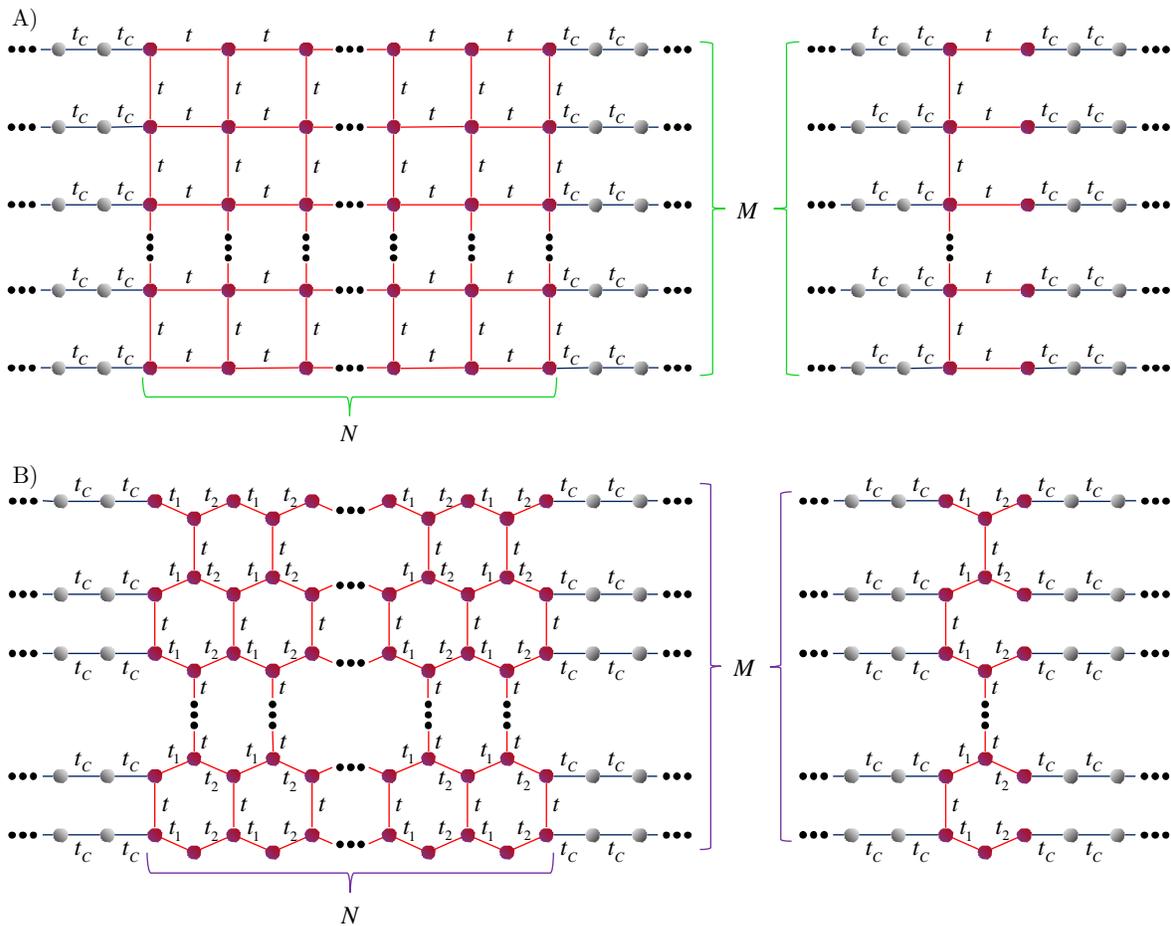


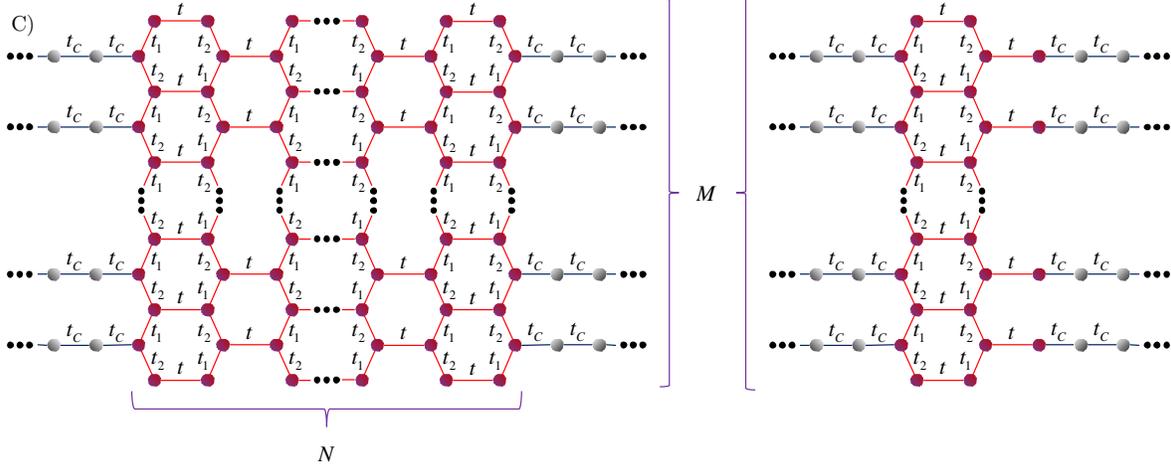
**Fig. 10:** Sistema periódico infinito basado en la estructura de la Fig. 9 B). El índice superior enumera las celdas unitarias, ilustradas en color rosa y turquesa.

### 3.3 Validación de los Métodos

Una vez establecidos ambos métodos para el cálculo de la matriz de dispersión, es necesario analizar los resultados devueltos por estos para corroborar que sean correctos, y que el funcionamiento de las metodologías es el adecuado. Adicionalmente, buscamos comparar ambas técnicas para encontrar sus posibles ventajas y desventajas, con el fin de enfocar cada método a problemas particulares donde funcionen más eficientemente. Para ello, consideremos las estructuras mostradas en la Fig. 11, donde se muestra un sistema periódico con sección transversal  $M$  y longitud  $N$  (izquierda), el cual es obtenido mediante la composición recursiva de una determinada celda unitaria (derecha).

La validación de los métodos consiste en la construcción de los sistemas finitos, esquematizados en la Fig 11, primeramente sin defectos, con el fin de observar la cuantización de la conductancia resultante en ambos casos. Habiendo analizado los resultados, y habiendo comprobado que los programas forman las estructuras deseadas, procedemos a comparar el tiempo de cómputo requerido por cada método.





**Fig. 11:** A la derecha, se ilustran las celdas unitarias utilizadas para la construcción de sistemas periódicos finitos mediante su composición recursiva. A la izquierda, se ilustran sistemas periódicos finitos de sección transversal  $M$ , y sección longitudinal  $N$ . Se esquematizan los casos particulares de: A) red cuadrada, B) red panal de abeja tipo ZigZag, C) red panal de abeja tipo Silla de Montar.

En la Fig. 12, se muestra la transmitancia obtenida para distintos tipos de redes (cuadrada, panal de abeja tipo ZigZag y panal de abeja tipo silla de montar), todas con sección transversal  $M = 100$  y sección longitudinal  $N = 10^8$ , donde únicamente se consideran interacciones a primeros vecinos, siendo las energías de sitio  $\varepsilon_i = 0$  y las integrales de salto  $t_{ij} = t$ , para  $i, j$  enteros.

Primeramente, para los tres casos analizados, se observa que las funciones de transmisión son equivalentes a la curva descrita por el número de canales abiertos. Esto se debe a que, tanto los saturadores como la región de dispersión, se modelan a partir de la composición recursiva de una determinada celda unitaria (cuadrada, panal de abeja tipo silla de montar o panal de abeja tipo ZigZag, según sea el caso). Esto último nos sirve para corroborar que la construcción de los sistemas es adecuada y no se presentan defectos estructurales.

En el caso de la red cuadrada con  $N, M \rightarrow \infty$  (Fig. 11 A), sabemos que la relación de dispersión correspondiente está dada por (Sutton, 2004)

$$E(\mathbf{k}) = \varepsilon + 2t \left[ \cos(k_x a) + \cos(k_y a) \right] \quad (3.16)$$

siendo  $a$  la distancia interatómica y  $k_x, k_y$  las componentes del vector de onda en las direcciones longitudinal y transversal, respectivamente.

De la gráfica en la Fig. 12 A), podemos observar que para  $E \in [-4t, 4t]$  existe transmitancia en el sistema puesto que a dichas energías les corresponden soluciones oscilantes, consistente con lo demostrado en la ecuación (3.16). Por otro lado, para el caso

en que  $E \notin [-4t, 4t]$ , las funciones de onda resultan evanescentes y no es posible hallar estados que aporten a la conductancia del sistema.

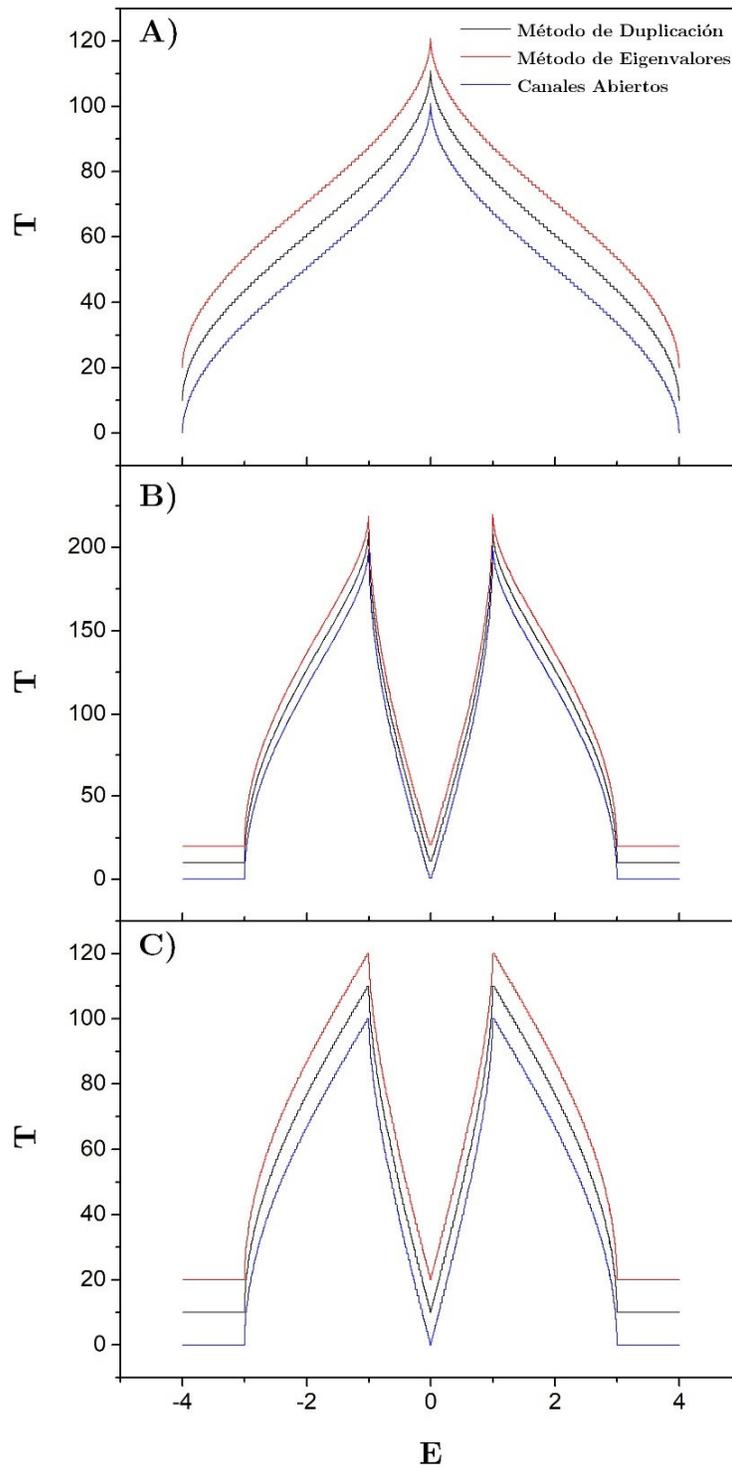
Cabe destacar que, en este caso, la cuantización de la conductancia se encuentra implícita en los valores discretos que puede tomar el vector de onda transversal,  $k_y$ , debido a que, por un lado, el Hamiltoniano del sistema es separable y, por otro lado, la cadena es finita en esta dirección. A su vez, podemos notar que el máximo de la transmitancia se alcanza en energías para las cuales todos los canales de transmisión están abiertos, limitados estos por la sección transversal del sistema. En este caso, dado que la sección transversal consta de 100 sitios, el máximo número de canales disponibles corresponde a 100.

Para el caso de la red panal de abeja se tienen dos relaciones de dispersión debido a las posibles configuraciones de la estructura. Éstas son (Wakabayashi, Sasaki, Nakanishi, & Enoki, 2010)

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \begin{cases} \pm t \sqrt{1 + 2\varepsilon_{k_y} \cos\left(\frac{k_x}{2}\right) + \varepsilon_{k_y}^2} & \text{con } \varepsilon_{k_y} = 2 \cos(k_y) \\ \pm t \sqrt{1 + 2g_{k_x} \cos(k_y) + g_{k_x}^2} & \text{con } g_{k_x} = 2 \cos\left(\frac{k_x}{2}\right) \end{cases} \quad (3.17)$$

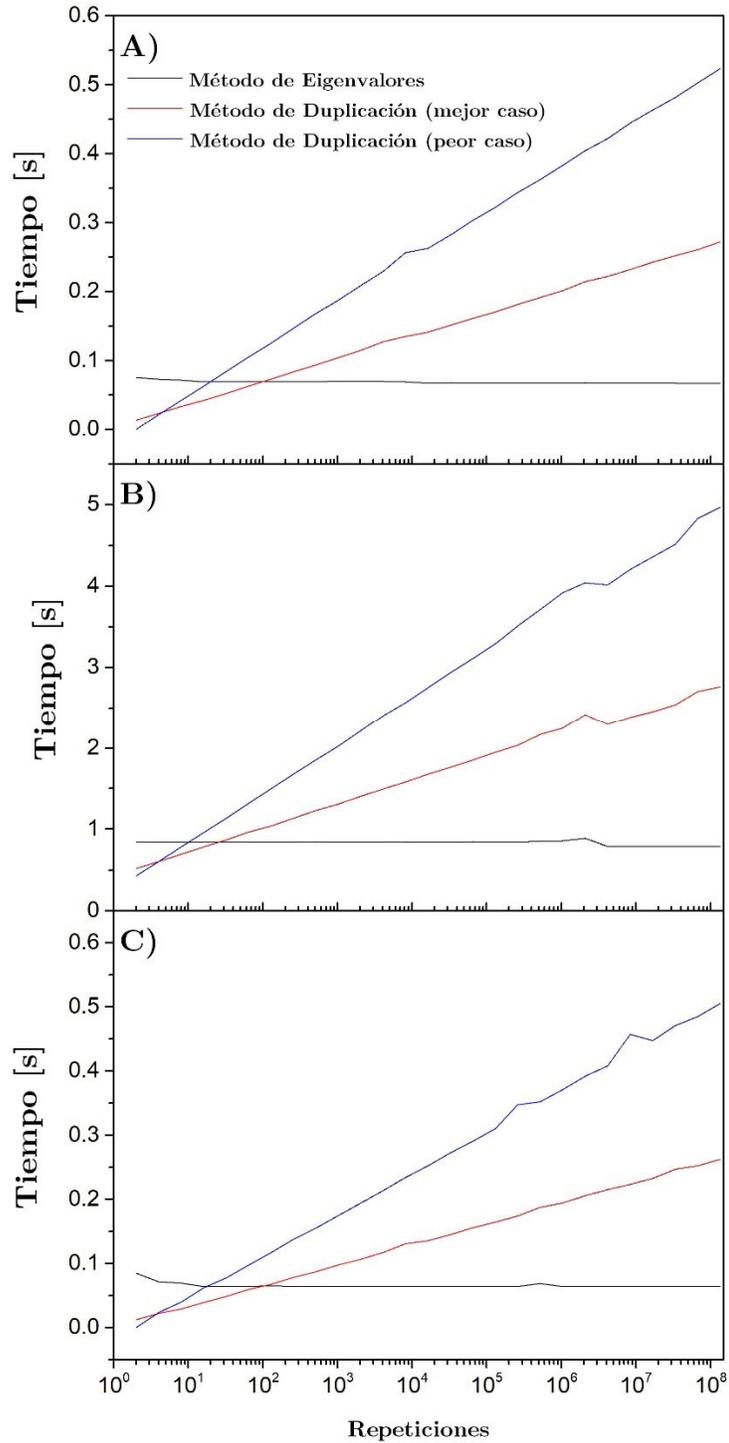
donde la primera corresponde a una red panal de abeja tipo silla de montar, mientras que la segunda se asocia a la variante de red tipo ZigZag. Cabe destacar que en estas, el signo positivo corresponde a la banda de conducción de la estructura, mientras que el signo negativo se refiere a la banda de valencia de la misma. Adicionalmente, podemos notar que el máximo y el mínimo energético de estas relaciones se alcanzan cuando los cosenos en (3.17) son iguales a  $\pm 1$ , estando el máximo en la banda de conducción y el mínimo en la banda de valencia, de modo que el espectro energético abarca el intervalo  $[-3t, 3t]$ . Es posible corroborar este resultado con el espectro de transmitancia ilustrado en las gráficas de la Fig. 12 B) y C), correspondientes a la red panal de abeja tipo ZigZag y a la red panal de abeja tipo silla de montar, respectivamente.

Al igual que en el caso de red cuadrada, podemos observar que el máximo de transmitancia del sistema depende directamente del ancho de la sección transversal. No obstante, aunque en esencia ambas redes tienen una configuración similar y la misma sección transversal, éstas difieren en su orientación y, por ende, en los bordes del nanoalambre, lo cual influye en la transmitancia y provoca que ésta sea mayor para la red panal de abeja tipo ZigZag (aproximadamente el doble). Este hecho prueba contundentemente la anisotropía característica de la red panal de abeja, la cual también se puede observar en las relaciones de la ecuación (3.17)



**Fig. 12:** Transmitancia de estructuras periódicas para: A) red cuadrada, B) red panal de abeja tipo ZigZag, y C) red panal de abeja tipo Silla de Montar. La línea roja representa la transmitancia calculada usando el método de eigenvalores; la línea negra esquematiza la transmitancia calculada por medio de la técnica de duplicación, y la línea azul ilustra el número de canales disponibles en la red. Nótese que las gráficas son iguales excepto por

una constante,  $c$ , introducida intencionalmente para distinguir entre las curvas, donde  $c=10$  para el método de duplicación, mientras que  $c=20$  para el método de eigenvalores.



**Fig. 13:** Tiempo promedio requerido para construir una estructura: A) cuadrada, B) panel de abeja tipo ZigZag, y C) panel de abeja tipo silla de montar, utilizando los métodos de eigenvalores (línea negra) y duplicación. En este último modelo se analizaron dos posibles casos, donde la longitud de la estructura se escribe como una potencia de dos (mejor caso), correspondiente a la línea roja, y otro donde la longitud se calcula como la suma

de distintas potencias de dos (peor caso), correspondiente a la línea azul. Por ejemplo, un caso óptimo para el método de duplicación correspondería a una estructura de longitud  $2^4 = 16$ , mientras que un caso menos favorable sería el de una estructura con longitud  $2^3 + 2^2 + 2^1 + 2^0 = 15$ .

Ya que hemos constatado que los métodos propuestos son consistentes entre sí y reproducen lo expuesto por las relaciones de dispersión correspondientes, procederemos a comparar su eficiencia al analizar el tiempo que toma a cada método armar las estructuras que se muestran en la parte izquierda de la Fig. 11 para diferentes longitudes, partiendo de las celdas unitarias ilustradas a la derecha de la Fig. 11. Para ello, se analizaron dos posibles escenarios principales: uno corresponde a aquel en el que la longitud del sistema se puede expresar como potencia de dos, es decir  $2^n$ , con  $n$  un entero, de modo que, en sistema binario, la longitud se expresa como un número donde únicamente una entrada es igual a 1 y el resto son ceros (mejor caso), lo cual minimiza el número de composiciones requeridas por el método de duplicación. En el otro escenario, se plantea una estructura cuya longitud resulte del máximo número de composiciones requeridas por el método de duplicación. Esto es, en sistema binario, que el número deseado tenga todas las entradas posibles iguales a 1 (peor caso).

Los resultados mostrados en la Fig. 13 corresponden al promedio temporal que le toma a cada método construir 100 veces la estructura deseada para secciones longitudinales desde dos hasta  $10^8$  repeticiones. En general, podemos observar que el método de duplicación tiene un comportamiento logarítmico tanto para el mejor caso como para el peor caso, el cual se escala conforme aumenta la longitud del sistema que se desea construir. En contraparte, podemos observar que el método de eigenvalores tiene una tendencia constante, independiente de la longitud del sistema que se está analizando. Esto es congruente con lo descrito en la sección 3.2 puesto que la longitud del sistema se utiliza únicamente como el exponente  $n$  al cual se elevan los eigenvalores  $\lambda_i$  en la ecuación (3.12), de modo que el tiempo requerido para el cálculo es constante.

Adicionalmente, al comparar ambas técnicas, pudimos observar que el método de duplicación es el más eficiente para estructuras cuya longitud es de orden entre  $10^1$  y  $10^2$ , mientras que, para longitudes mayores, el método de eigenvalores resulta ser el más efectivo. Es claro ver que para sistemas cuya longitud maximiza el número de composiciones requeridas por el método de duplicación (peor caso), el tiempo de cómputo requerido aumenta, y el método de eigenvalores resulta ser más adecuado anticipadamente.

# IV

---

## TRANSMITANCIA DE ESTRUCTURAS CUASIPERIÓDICAS

---

Una vez estudiadas las propiedades de las metodologías de duplicación y de eigenvalores, y habiendo verificado su correcto funcionamiento, procederemos a aplicarlas en la construcción de redes cuasiperiódicas con distintos tipos de defectos, con el fin de analizar la transmitancia de dichos sistemas.

Primeramente, explicaremos el procedimiento seguido para la construcción del sistema cuasiperiódico, en la cual se utiliza una secuencia de Fibonacci donde los dos primeros términos se determinan mediante los métodos expuestos en el capítulo dos. Seguido de esto, nos enfocaremos en la construcción de los casos particulares de red cuadrada, panal de abeja tipo silla de montar y panal de abeja tipo ZigZag, las cuales presentan defectos de estructura. Finalmente, analizaremos la conductancia de dichos sistemas y discutiremos el comportamiento de esta, según el tipo de defectos que se esté tratando.

### 4.1 Estructura Cuasiperiódica tipo Fibonacci

Dentro del estado sólido es posible clasificar a la materia, según su configuración, en tres principales categorías: cristales, cuasicristales y sólidos amorfos. Como su nombre lo indica, los sólidos amorfos son sistemas carentes de un orden en su estructura interna, siendo por ello los sistemas más complejos para el estudio de sus propiedades. En contraparte, los sólidos cristalinos se caracterizan por presentar periodicidad y orden. Estas cualidades simplifican su análisis y hacen de éstos los sistemas mayormente estudiados. Finalmente, los cuasicristales corresponden a sistemas que se encuentran en un punto medio entre cristales y sólidos amorfos, es decir, cuentan con un orden bien definido, más no con periodicidad (Janot, 1994). Este tipo de estructuras llamó la atención de la comunidad científica debido a que, en los años 60's, se consideraba que únicamente era posible la existencia de cristales con simetrías rotacionales 2, 3, 4 o 6 (y múltiplos enteros de estas), observadas en los patrones de difracción correspondientes, mientras que simetrías de orden 5 o superiores a 6 eran prohibidas (Yale, 1968). No obstante, en 1984, Dan Shechtman *et al* reportaron el

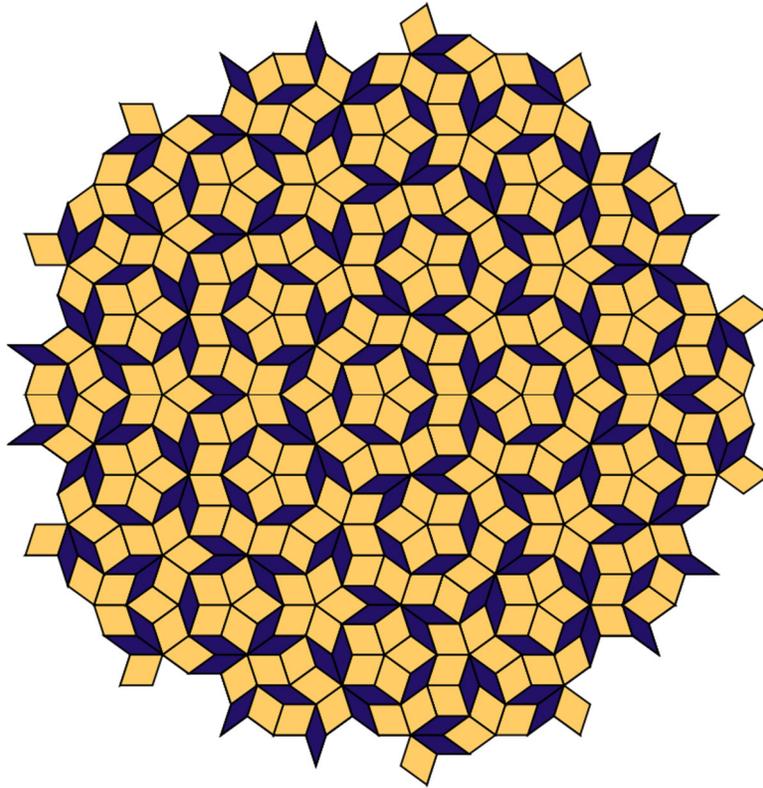


Fig. 14: Mosaico de Penrose. Sin autor. Tomado de: <https://www.pngegg.com/es/png-ehzud>.

patrón de difracción de una aleación metálica de aluminio y manganeso, debido a que este estaba conformado por una serie de puntos luminosos discretos (propia de los cristales) que obedecían una simetría de orden 5 (Shechtman, Blech, Gratias, & Cahn, 1984). Lo anterior rompió con las creencias establecidas sobre los cristales, e hizo que la comunidad científica se enfocara más en este tipo de materiales.

Cabe destacar que la existencia de este tipo de estructuras fue propuesta inicialmente por el matemático Roger Penrose, en 1974, cuando se planteó si era posible teselar el plano bidimensional mediante estructuras con simetría 5, y si a su vez esto anularía la posibilidad de que el arreglo resultante fuera periódico. Para lo anterior, utilizó dos tipos de rombos, delgado y grueso, con los cuales obtuvo una estructura aperiódica, conocida hoy día como *mosaico de Penrose* (Fig. 14) (Penrose, 1974). El desarrollo propuesto por Penrose, a pesar de tratarse de un modelo puramente matemático, conformó las bases para la comprensión de las propiedades de las estructuras cuasicristalinas posteriormente descubiertas, y de estructuras aperiódicas en general (Sen & Perelman, 2020).

Hoy en día, los cuasicristales han sido altamente estudiados por ser una buena primera aproximación al entendimiento de los sólidos amorfos y por sus propiedades exóticas. Por ejemplo: por un lado, sabemos que para sistemas periódicos, los eigenestados correspondientes resultan ser estados extendidos que generan un espectro energético continuo

en bandas. En contraparte, para los sistemas amorfos las eigenfunciones correspondientes son estados localizados que producen un espectro energético puramente puntual, cuyas funciones de onda decaen en forma exponencial. En el caso de cuasicristales, los eigenestados no son ni extendidos ni localizados, sino que se denominan *estados críticos*, y estos generan un espectro energético singular continuo (Wang, Oviedo-Roa, Pérez, & Sánchez, 2001). A su vez, si bien los materiales metálicos son conocidos por ser buenos conductores térmicos y eléctricos, se ha observado que cuasicristales compuestos puramente por dichos materiales (aleaciones FK), muestran una alta resistividad a bajas temperaturas, la cual disminuye conforme la temperatura aumenta (Fujiwara & Ishii, 2008). Lo anterior sugiere la posible existencia de una transición metal-aislante en cuasicristales con simetría icosaédrica de gran calidad a bajas temperaturas (Maciá Barber, 2009). Así mismo, se ha observado que estos materiales poseen una baja conductividad térmica, menor a la observada en aislantes térmicos usados en la industria aeronáutica (Dubois, Kang, Archambault, & et al., 1993), y una difusividad térmica extremadamente baja (Dubois J.-M. , 2001). Éstas y otras propiedades hacen de los cuasicristales materiales muy útiles y con muchas potenciales aplicaciones

Si bien las estructuras cuasiperiódicas pueden resultar tan complejas como uno se imagine, uno de los casos más sencillos para la construcción de este tipo de sistemas se basa en la *palabra de Fibonacci*, la cual es una secuencia finita de dos letras del alfabeto que obedece la siguiente regla (Lothaire, 2009)

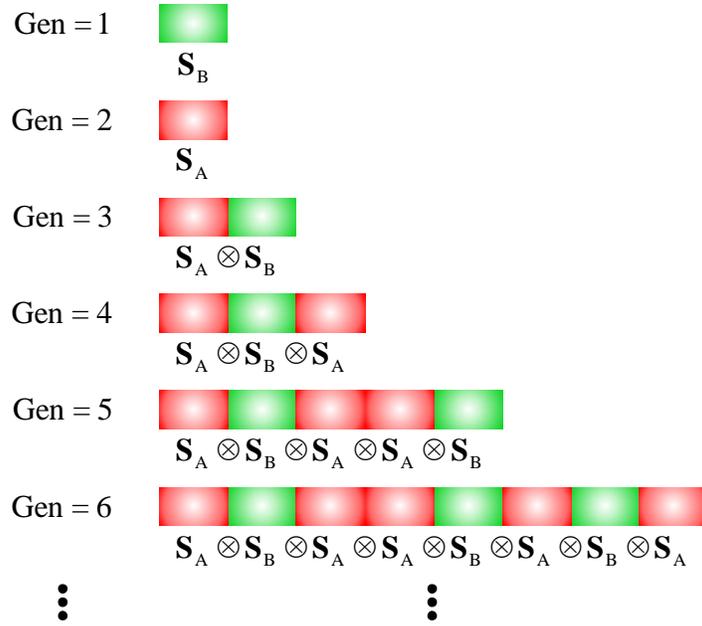
$$F_n = F_{n-1}F_{n-2} \quad (4.1)$$

donde  $F(i)$  es la  $i$ -ésima generación ó palabra de Fibonacci.

Supongamos dos estructuras, A y B, con matrices de dispersión asociadas  $\mathbf{S}_A$  y  $\mathbf{S}_B$ , respectivamente. Definiendo  $F(1)=B$  y  $F(2)=A$ , es posible construir secuencias aperiódicas, según la ecuación (4.1), donde la concatenación de las estructuras está dada por el método desarrollado en el capítulo dos, como se muestra en la tabla 1 y en la Fig. 15.

Generación	Estructura
1	B
2	A
3	AB
4	ABA
5	ABAAB
6	ABAABABA
7	ABAABABAABAAB
8	ABAABABAABAABABAABAABABA

**Tabla 1.** Secuencia de ocho generaciones de palabras de Fibonacci, donde la primera generación se asocia al sistema B, mientras que la segunda generación corresponde al sistema A.

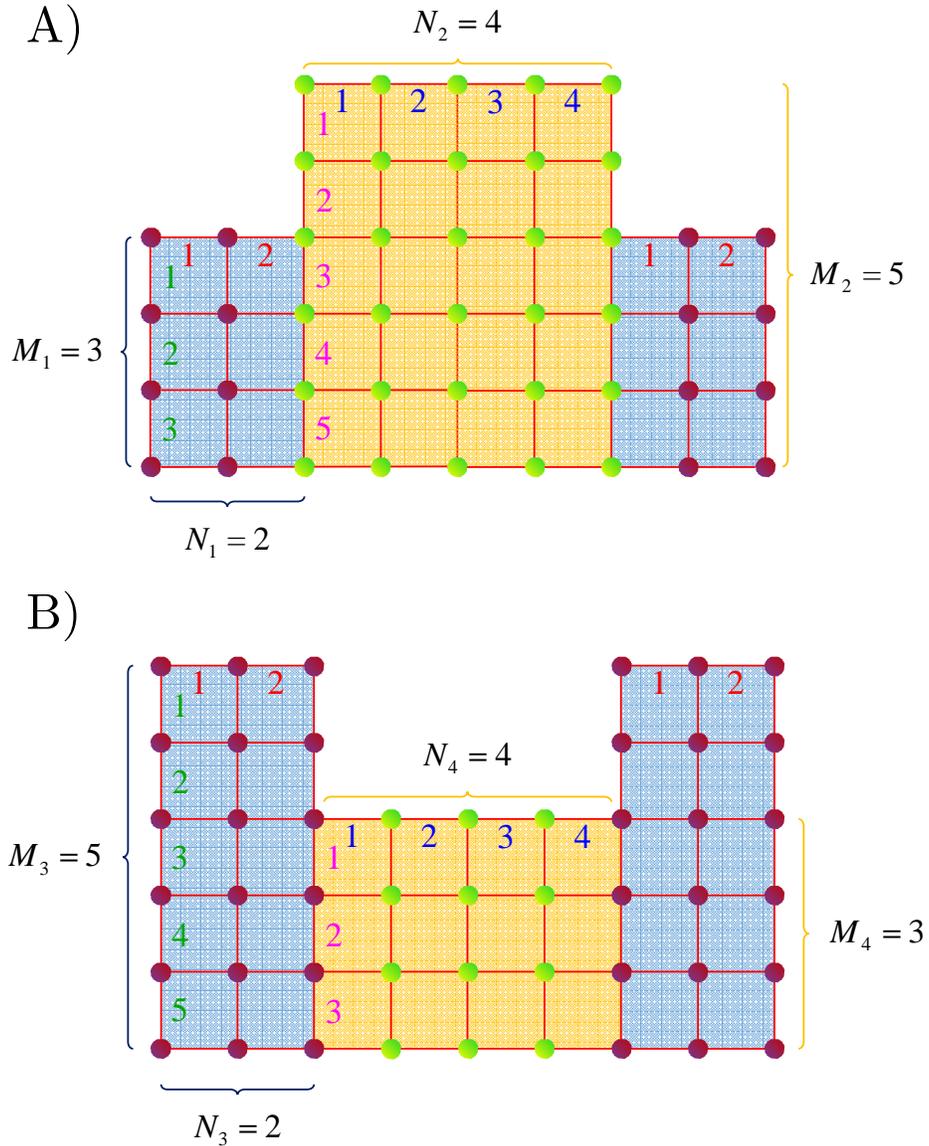


**Fig. 15:** Construcción de una estructura cuasi-periódica utilizando palabras de Fibonacci. En este ejemplo, se concatenan dos estructuras, A y B, con matrices de dispersión  $\mathbf{S}_A$  y  $\mathbf{S}_B$ , respectivamente, y donde el producto directo indica la composición de estructuras utilizando el método recursivo de la matriz de dispersión, explicado en el capítulo dos. A la izquierda, se precisa el grado de aperiódicidad del sistema según la generación de la palabra.

En las siguientes secciones, analizaremos la transmitancia correspondiente a las estructuras aperiódicas que presenten los siguientes defectos: variaciones en la sección transversal y/o defectos de sitio. Dentro del caso de la red con variaciones en la sección transversal, existen dos posibles escenarios: que la sección transversal aumente respecto a los saturadores, o que disminuya. Dichos defectos serán estudiados para tres distintas variantes de red: cuadrada, panal de abeja tipo ZigZag y panal de abeja tipo silla de montar.

## 4.2 Red Cuadrada Aperiódica

A continuación, analizaremos las estructuras aperiódicas de red cuadrada esquematizadas en la Fig. 16, donde A) y B) corresponden a los sistemas que presentan aumentos y disminuciones en la sección transversal, respectivamente. Cabe mencionar que, en esta sección, consideraremos la medida de secciones longitudinales y transversales respecto al número de integrales de salto en dichas direcciones, de tal forma que la sección transversal uno corresponde a un sistema con una sola integral de salto vertical, mientras que la sección longitudinal uno se asocia a un sistema con una sola integral de salto horizontal. A su vez, introducimos los parámetros  $N$  y  $M$ , los cuales hacen referencia a las secciones longitudinal y transversal de una determinada sección, respectivamente.

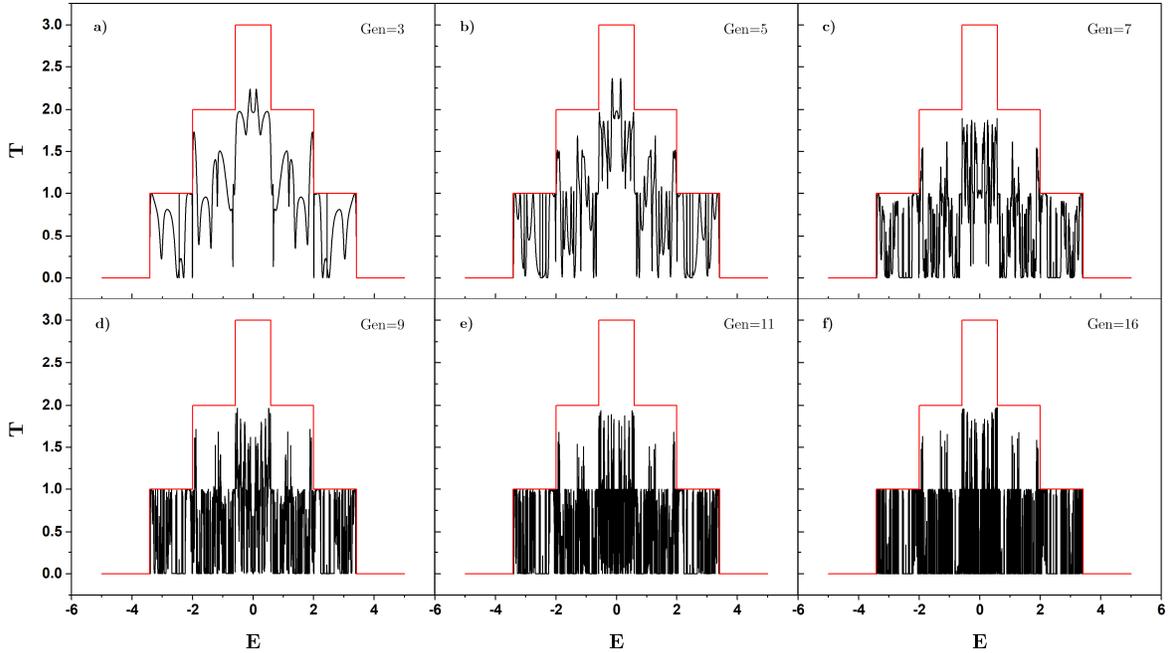


**Fig. 16:** Red cuadrada con A) aumentos, y B) disminuciones en su sección transversal. En estos casos, los índices  $M_1$  y  $M_3$  representan la sección transversal regular de la estructura en los casos de aumentos y disminuciones, respectivamente, correspondiendo estas con sección longitudinal  $N_1$  y  $N_3$ . A su vez, los parámetros  $M_2$  y  $M_4$  indican la sección transversal de la variación, la cual tiene una sección longitudinal  $N_2$  y  $N_4$ , respectivamente. En este caso particular se esquematiza en A) una estructura con sección transversal  $M_1 = 3$  y ancho  $N_1 = 2$  que presenta variaciones a sistemas con  $M_2 = 5$  y ancho  $N_2 = 4$ , mientras que en B) se muestra un sistema de sección transversal  $M_3 = 5$  y ancho  $N_3 = 2$ , el cual pasa por secciones a estructuras con  $M_4 = 3$  y ancho  $N_4 = 4$ .

En la Fig. 17 se exhiben las transmitancias obtenidas para sistemas con  $M_1 = 2$  que presentan variaciones (aumentos) a secciones transversales  $M_2 = 8$  con  $N_2 = 5$  (estructura B), cada una de estas intercaladas con sistemas de secciones  $M_1 = 2$  y  $N_1 = 3$  (estructura A) para generaciones 3, 5, 7, 9, 11 y 16 (gráficas a-f, respectivamente). De las gráficas expuestas,

destaca en un inicio que el número de canales disponibles difiere con lo predicho por la relación de dispersión (3.16), debido a que esta última indica la presencia de canales de conducción abiertos en el intervalo  $[-4t, 4t]$ , pero en los resultados no se observa la cobertura total del dominio. La razón proviene del hecho de que la estructura es finita en la dirección transversal, por lo cual el vector de onda en dicha dirección ( $k_y$ ) se encuentra cuantizado, mientras que en la sección longitudinal, dado que esta se extiende hacia infinito (y menos infinito), los valores permitidos para el vector de onda en dirección longitudinal ( $k_x$ ) forman un continuo, pero no se alcanzan a tomar valores que conduzcan al máximo (mínimo) indicado por la ecuación (3.16).

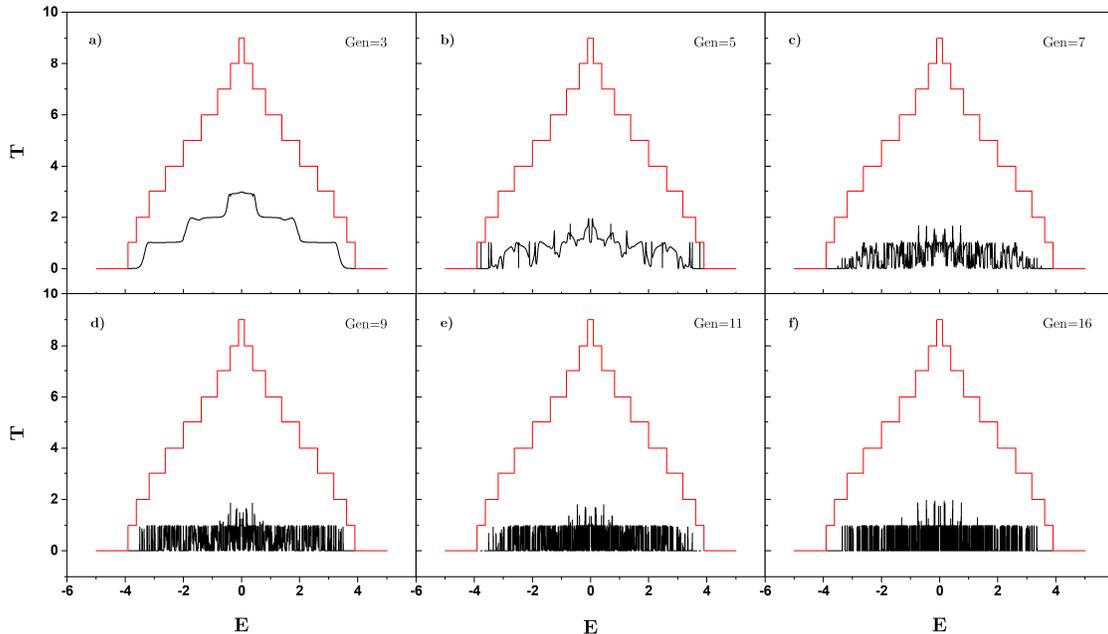
Asimismo, para la estructura de generación tres (gráfica a, Fig. 17) podemos observar un espectro de transmitancia continuo, el cual se va discretizando conforme la generación aumenta y se incrementa la aperiodicidad del sistema. Nótese que para estructuras de mayor generación (mayor aperiodicidad), se van generando brechas para las cuales la transmitancia se hace despreciable y el máximo de los picos en el espectro disminuye respecto a aquellos en sistemas de menor generación (menor aperiodicidad). Lo anterior concuerda con lo predicho experimentalmente, debido a que la conductancia eléctrica de un sistema periódico (metal) resulta ser mayor a la de una estructura aperiódica (cuasicristal) (Dubois J.-M. , 2001).



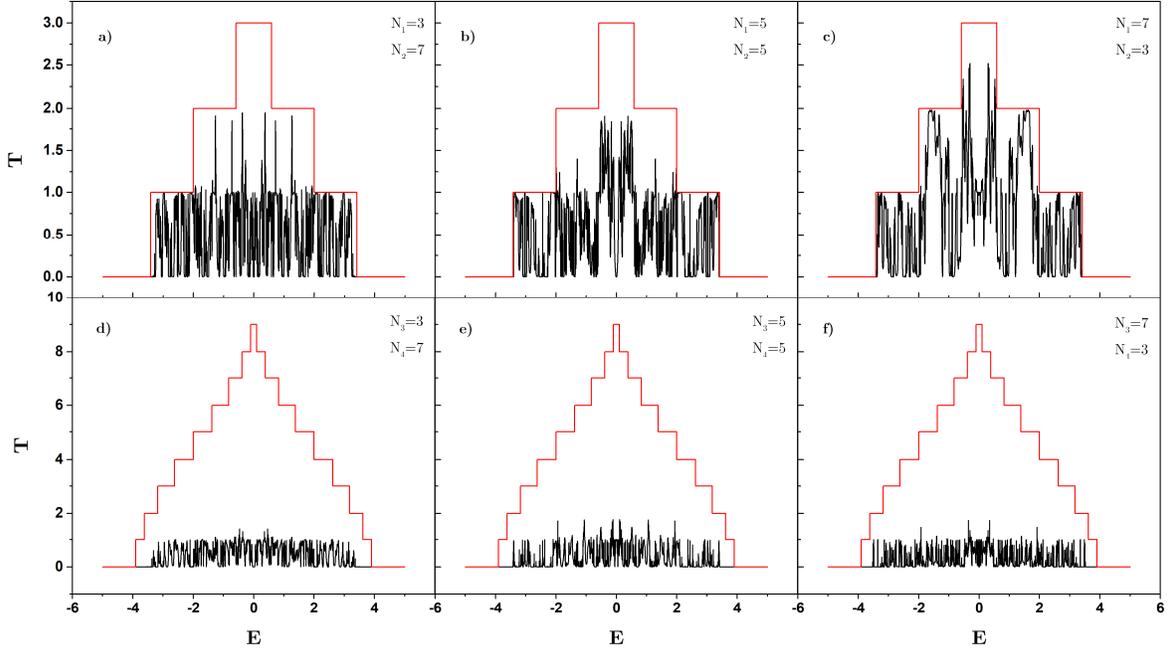
**Fig. 17:** Transmitancia de una red cuadrada con aumentos en su sección transversal para: a) generación 3, b) generación 5, c) generación 7, d) generación 9, e) generación 11, f) generación 16. La estructura A de la palabra de Fibonacci tiene parámetros  $M_1 = 2, N_1 = 3$ , mientras que a la estructura B se le asocian los parámetros  $M_2 = 8, N_2 = 5$ .

En la Fig. 18 se muestran las transmitancias de sistemas con  $M_3=8$  que presentan variaciones (disminuciones) a estructuras con secciones  $M_4=2$  y  $N_4=5$  (estructura B), intercaladas con sistemas de sección transversal  $M_3=8$  y  $N_3=3$  (estructura A) para generaciones 3, 5, 7, 9, 11 y 16 (gráficas a-f, respectivamente). Al igual que en el caso de incrementos en la sección transversal, podemos observar que, para mayores generaciones y mayor aperiodicidad, el espectro de transmitancia, antes continuo, se va discretizando, conformando brechas bien localizadas y disminuyendo el máximo que alcanzan los picos, así como la cantidad de estos. Particularmente, en la estructura de generación tres es posible observar en las colas del espectro de transmitancia la presencia de modos evanescentes, los cuales permiten la transmisión de partículas mediante efecto túnel. Se observa a su vez que, para estructuras de mayor generación, dichos modos no figuran debido a que la longitud de la estructura aumenta y la transmisión por tunelaje deja de ser posible.

Una peculiaridad que presenta este caso de decrementos yace en que, el rango de energías para las cuales hay canales de conducción abiertos se asemeja en mayor forma a lo predicho por la ecuación (3.16). Esto se debe a que, como la sección transversal es mayor a la tratada en el caso de red con incrementos, el sistema se asemeja más a un cuasicristal bidimensional y permite que el vector de onda en dirección transversal tome una mayor cantidad de valores, compensando aquellos que no puede tomar el vector de onda en la dirección longitudinal debido a la longitud infinita de esta.



**Fig. 18:** Transmitancia de una red cuadrada con disminuciones en su sección transversal para: a) generación 3, b) generación 5, c) generación 7, d) generación 9, e) generación 11, f) generación 16. La estructura A de la palabra de Fibonacci tiene parámetros  $M_3=8, N_3=3$ , mientras que a la estructura B se le asocian los parámetros  $M_4=2, N_4=5$ .



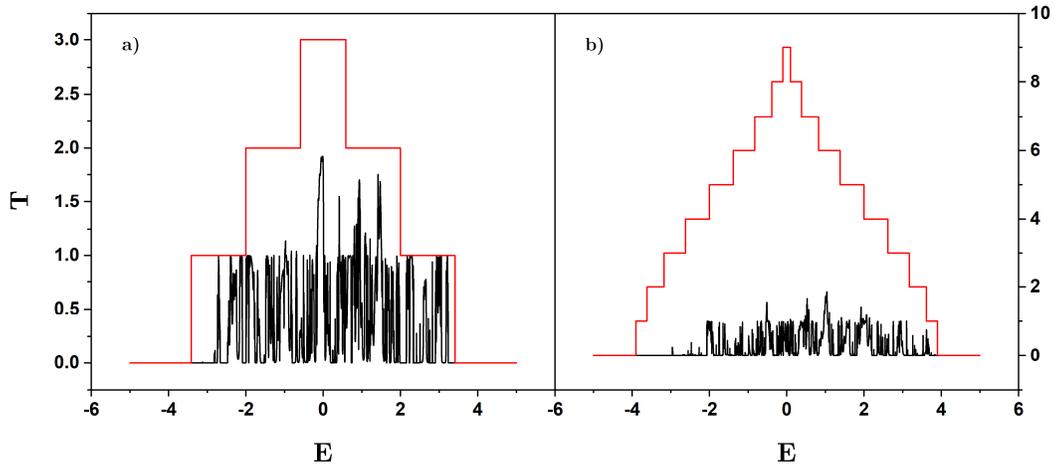
**Fig. 19:** Espectro de transmitancia de una red cuadrada aperiódica, de generación 7, con variaciones en la sección transversal para diversas longitudes. En la parte superior se ilustra el caso de aumentos, con parámetros  $M_1 = 2$  y  $M_2 = 8$  para: a)  $N_1 = 3, N_2 = 7$ , b)  $N_1 = N_2 = 5$ , c)  $N_1 = 7, N_2 = 3$ . En la parte inferior se esquematizan los espectros de transmitancia para un sistema que presenta disminuciones, con parámetros  $M_3 = 8$  y  $M_4 = 2$  para: a)  $N_3 = 3, N_4 = 7$ , b)  $N_3 = N_4 = 5$ , c)  $N_3 = 7, N_4 = 3$ .

Habiendo visto como modifica la aperiodicidad del sistema al espectro de transmitancia, estudiaremos ahora los efectos de alteraciones en la sección longitudinal de los sistemas A y B en la cadena tipo Fibonacci. Para ello trataremos los casos donde la variación en la sección transversal tiene mayor, menor e igual longitud que la región de sección original. En la parte superior de la Fig. 19 se ilustran los espectros de transmitancia para sistemas de séptima generación que incrementan su sección transversal de  $M_1 = 2$  a  $M_2 = 8$ , con secciones longitudinales  $N_1 = 3, N_2 = 7$  (gráfica a),  $N_1 = N_2 = 5$  (gráfica b) y  $N_1 = 7, N_2 = 3$  (gráfica c), mientras que las gráficas en la parte inferior corresponden a una estructura de séptima generación con sección transversal  $M_3 = 8$  que disminuye a  $M_4 = 2$  para secciones longitudinales  $N_3 = 7, N_4 = 3$  (gráfica d),  $N_3 = N_4 = 5$  (gráfica e) y  $N_3 = 3, N_4 = 7$  (gráfica f).

Cuando la estructura presenta incrementos en la sección transversal, se observa que la mayor transmitancia ocurre en el sistema donde la variación es más delgada que la región con sección transversal inicial. Lo anterior es coherente debido a que, en este caso, las variaciones causan un menor efecto de dispersión, a comparación del caso donde éstas son más anchas y generan una menor transmitancia. Asimismo, de las tres gráficas superiores podemos observar que conforme se reduce el ancho de las variaciones (gráficas a-c) el espectro

recupera su continuidad y disminuye el número de brechas en el mismo. Si bien se esperaría un comportamiento análogo para sistemas con reducciones en la sección transversal, no se nota una gran diferencia entre los espectros de las gráficas d-f en la Fig. 19. Particularmente, podemos ver que para sistemas donde la variación es gruesa, los picos del espectro se reducen y la transmitancia decrece. No es posible mencionar un caso donde ésta se maximice debido a que los picos de los sistemas con  $N_2 \leq N_1$  alcanzan un mismo valor máximo. Sin embargo, podemos destacar que para el caso con  $N_2 = N_1$  el espectro presenta una mayor cantidad de picos, mientras que el sistema con  $N_2 < N_1$  exhibe bandas de transmitancia más amplias en torno a la energía cero. Cabe destacar que este último caso sobresale de los otros dos debido a que, en él, el espectro de transmitancia correspondiente abarca en mayor parte el rango energético predicho por la ecuación (3.16). En contraparte, el caso donde el espectro comprende la menor porción de dicho rango, corresponde a aquel donde el sistema presenta variaciones más anchas (gráfica d).

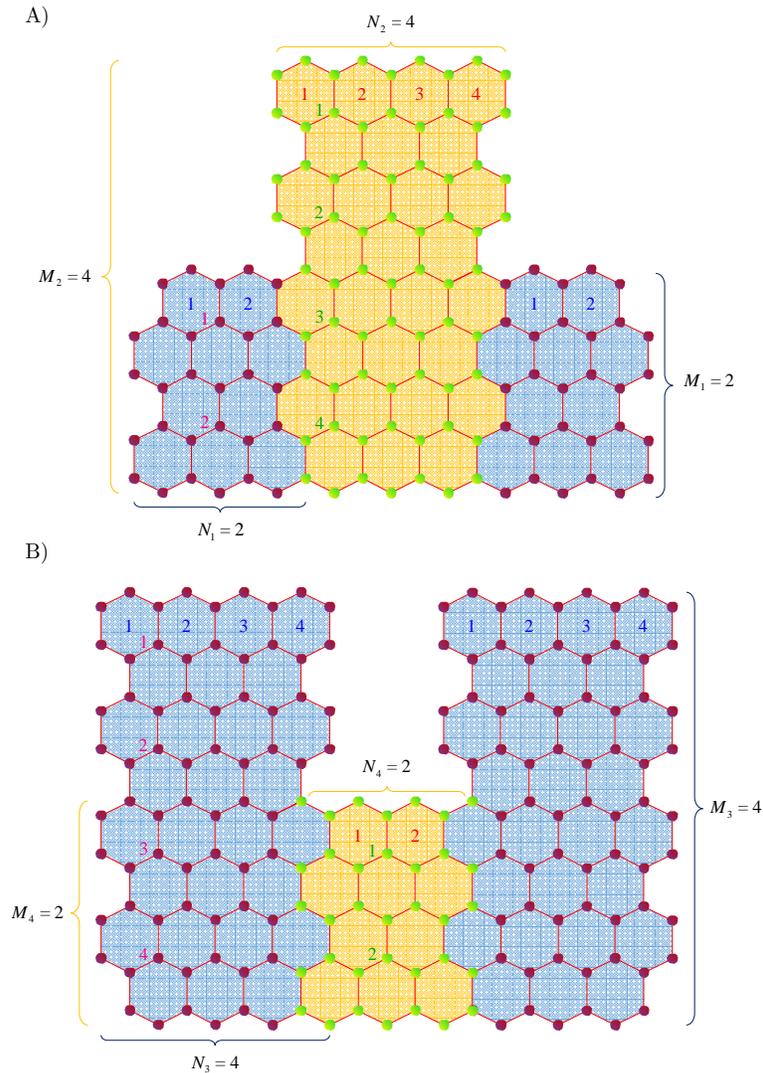
Finalmente, en las gráficas de la Fig. 20, se muestran las transmitancias para estructuras aperiódicas de generación siete con defectos de energía de sitio ( $\varepsilon = 1$ ) en las regiones donde se modifica la sección transversal (Fig. 20), siendo los parámetros  $M_1 = 2$ ,  $N_1 = N_2 = 5$ ,  $M_2 = 8$  (gráfica a) y  $M_3 = 8$ ,  $N_3 = N_4 = 5$ ,  $M_4 = 2$  (gráfica b). En ambos casos podemos observar que el principal efecto de este cambio en la energía de sitio resulta en que el espectro de transmitancia deja de ser simétrico y se desplaza a la derecha, según la relación de dispersión (3.16). A su vez, podemos notar que se reduce el número de picos donde la transmitancia es máxima, pero el valor que estos alcanzan se ve prácticamente inalterado.



**Fig. 20:** Espectro de transmitancia para sistemas que presentan defectos de sitio, adicionales a las variaciones en su sección transversal. En este caso, los sitios verdes de las estructuras en la Fig. 14 pasan a tener una energía de sitio  $\varepsilon = 1$ , mientras que los sitios púrpuras poseen energía de sitio nula. En a) se muestra el espectro de un sistema de generación siete, con aumentos en la sección transversal, siendo sus secciones transversales  $M_1 = 2$ ,  $M_2 = 8$ , y secciones longitudinales  $N_1 = N_2 = 5$ . En b), la transmitancia de un sistema de generación siete, con disminuciones en la sección transversal y parámetros  $M_3 = 8$ ,  $M_4 = 2$ ,  $N_3 = N_4 = 5$ .

### 4.3 Red Panal de Abeja Tipo ZigZag Aperiódica

Las estructuras a analizar en esta sección se muestran en la Fig. 21. Si bien, en el caso cuadrado, las secciones longitudinal y transversal se cuantificaban respecto a las integrales de salto en dichas direcciones, en panales de abeja la medición de estos parámetros es un poco más compleja. Para este trabajo, la sección transversal se cuantificará por el número de hexágonos, paralelos entre sí, que conformen la sección mayor (Fig. 21), la cual estará denotada por la variable  $M$ , mientras que la sección longitudinal se cuantificará por el número de hexágonos en la fila superior de la estructura y será indicada por la variable  $N$ .

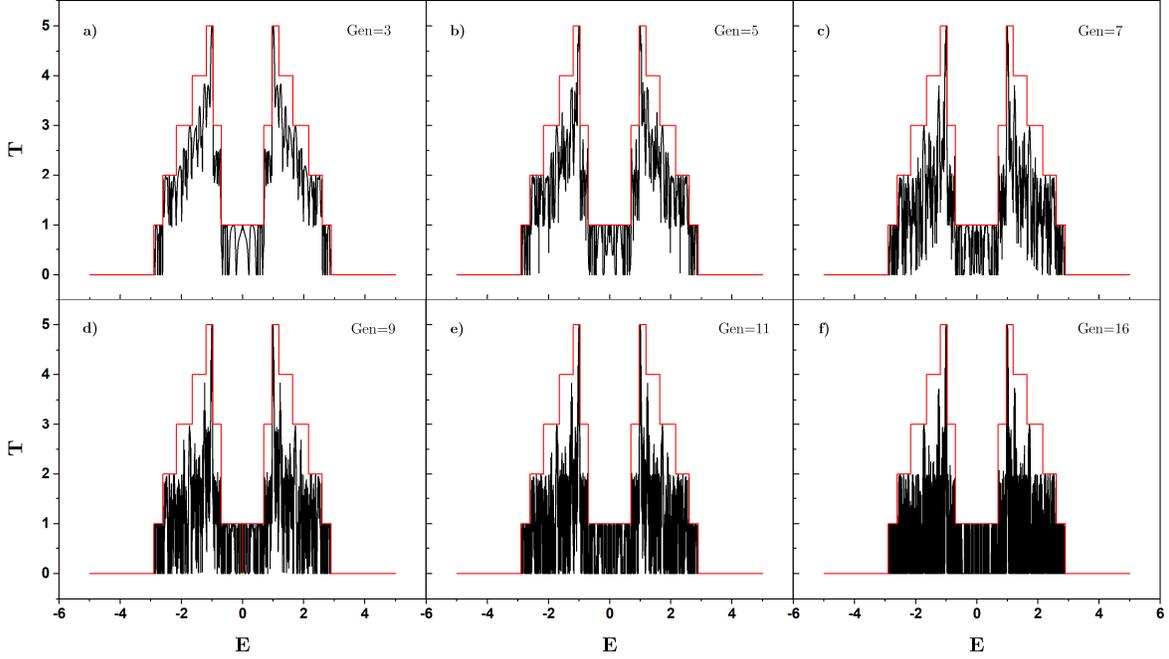


**Fig. 21:** Red panal de abeja tipo ZigZag con A) aumentos y B) disminuciones en su sección transversal. Al igual que en el caso de red cuadrada, los índices  $M_1$  y  $M_3$  representan la sección transversal regular de la estructura, mientras que los parámetros  $M_2$  y  $M_4$  se asocian a las secciones transversales de las variaciones para aumentos y disminuciones, respectivamente. A su vez, estas se corresponden con las secciones longitudinales  $N_1$  a  $N_4$ , según indica el subíndice.

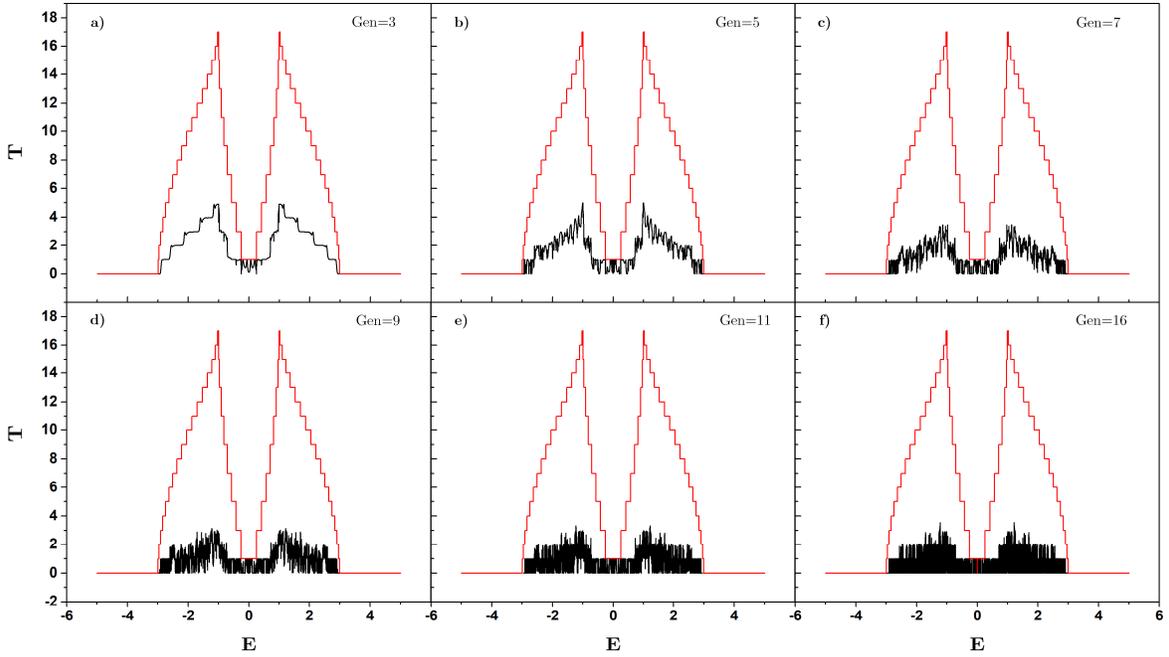
Analizaremos primeramente las transmitancias mostradas en la Fig. 22, correspondientes a sistemas con secciones  $M_1 = 2$ ,  $N_1 = 3$  (estructura A) que presentan aumentos en su sección transversal a sistemas con  $M_2 = 8$ ,  $N_2 = 5$  (estructura B) para generaciones 3, 5, 7, 9, 11 y 16 (gráficas a-f, respectivamente). En primer lugar, se observa nuevamente el efecto de la dimensión infinita en la sección longitudinal del sistema, dado que el espectro de transmitancia difiere ligeramente con el intervalo  $[-3t, 3t]$ , determinado por la segunda ecuación de la expresión en (3.17), mas logra abarcar gran parte de este. Esto se debe principalmente a la forma en la que se cuantifica la sección transversal para este tipo de red, pues por ejemplo, una red cuadrada de sección transversal cinco estará conformada por seis sitios, mientras que una red panal de abeja tipo ZigZag con la misma sección transversal tendrá nueve sitios en esta dirección, asemejando más el sistema a una red bidimensional y, por ello, permitiendo que el vector de onda en dirección transversal tome más valores y compense aquellos que no puede tomar el vector de onda en dirección longitudinal.

De igual forma a como se vio en el caso de red cuadrada con disminuciones, podemos notar que el aumento de la aperiodicidad del sistema produce la aparición de brechas y la discretización de la transmitancia. Enfocándonos particularmente en torno a la región central del espectro, podemos ver que, conforme aumenta la generación, hay una disminución del número de picos, como sucedió anteriormente, pero los valores máximos que toman estos permanecen inmutables, sin importar el grado de aperiodicidad de la estructura. Lo anterior se puede deber a que la sección transversal de las variaciones no está conformada únicamente por nueve átomos, como en el caso de la red cuadrada, si no que esta está conformada por diecisiete sitios, de modo que se tiene un mayor número de canales abiertos y la transmitancia puede alcanzar valores más grandes. Es posible que la disminución en los máximos de los picos ocurra, pero no sea perceptible debido a que la transmitancia se encuentra delimitada por el número de canales admitidos en la menor sección transversal.

Analicemos ahora la transmitancia de redes de panal de abeja tipo ZigZag con aumentos en la sección transversal (Fig. 23), para generaciones 3, 5, 7, 9, 11 y 16 (gráficas a-f, respectivamente), donde la estructura A de la palabra de Fibonacci corresponde a un sistema con  $M_3 = 8$ ,  $N_3 = 3$ , mientras que la estructura B tiene secciones  $M_4 = 2$ ,  $N_4 = 5$ . Observamos un comportamiento muy similar al presentado en el caso de red cuadrada, donde el espectro se discretiza, el valor máximo de los picos de transmitancia decrece y hay una aparición paulatina de brechas con transmitancia nula conforme la aperiodicidad del sistema aumenta. Destacamos nuevamente la existencia de modos evanescentes en las colas del espectro correspondiente a generación tres, las cuales podemos ver desaparecen para estructuras de mayor generación, e inclusive, se observa como el rango energético abarcado por el espectro comienza a diferir con el intervalo determinado mediante la segunda ecuación en (3.17); esto es, que la transmitancia tiende a anularse en los extremos de dicho intervalo.



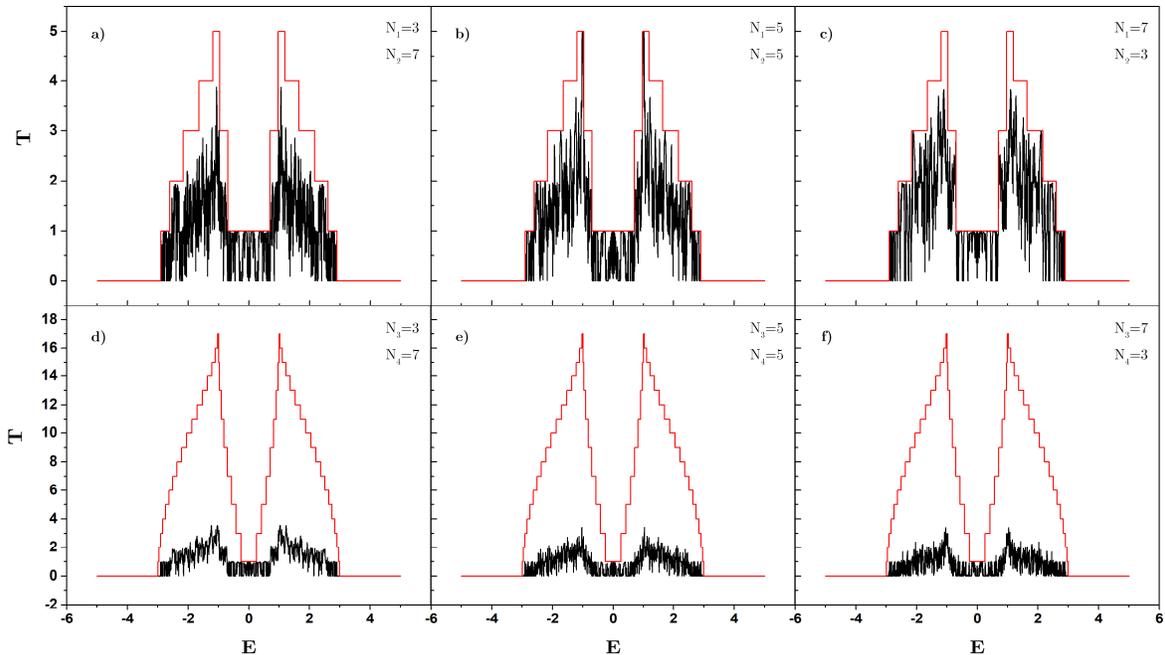
**Fig. 22:** Transmitancia de una red panel de abeja con aumentos en su sección transversal para: a) generación 3, b) generación 5, c) generación 7, d) generación 9, e) generación 11, f) generación 16. La estructura A de la palabra de Fibonacci tiene parámetros  $M_1 = 2, N_1 = 3$ , mientras que a la estructura B se le asocian los parámetros  $M_2 = 8, N_2 = 5$ .



**Fig. 23:** Transmitancia de una red panel de abeja tipo ZigZag con disminuciones en su sección transversal para: a) generación 3, b) generación 5, c) generación 7, d) generación 9, e) generación 11, f) generación 16. La estructura A de la palabra de Fibonacci tiene parámetros  $M_3 = 8, N_3 = 3$ , mientras que a la estructura B se le asocian los parámetros  $M_4 = 2, N_4 = 5$ .

Para los casos donde las variaciones de la sección transversal presentan distintas secciones longitudinales, consideramos dos tipos de estructuras aperiódicas de séptima generación: unas que exhiben aumentos y otras que presentan disminuciones. En las tres gráficas superiores de la Fig 24, se estudiaron sistemas con aumentos de  $M_1=2$  a  $M_2=8$  para longitudes  $N_1=3$ ,  $N_2=7$  (gráfica a),  $N_1=N_2=5$  (gráfica b) y  $N_1=7$ ,  $N_2=3$  (gráfica c), mientras que en las tres gráficas inferiores se analizaron estructuras con disminuciones de  $M_3=8$  a  $M_4=2$  para longitudes  $N_3=3$ ,  $N_4=7$  (gráfica d),  $N_3=N_4=5$  (gráfica e) y  $N_3=7$ ,  $N_4=3$  (gráfica f).

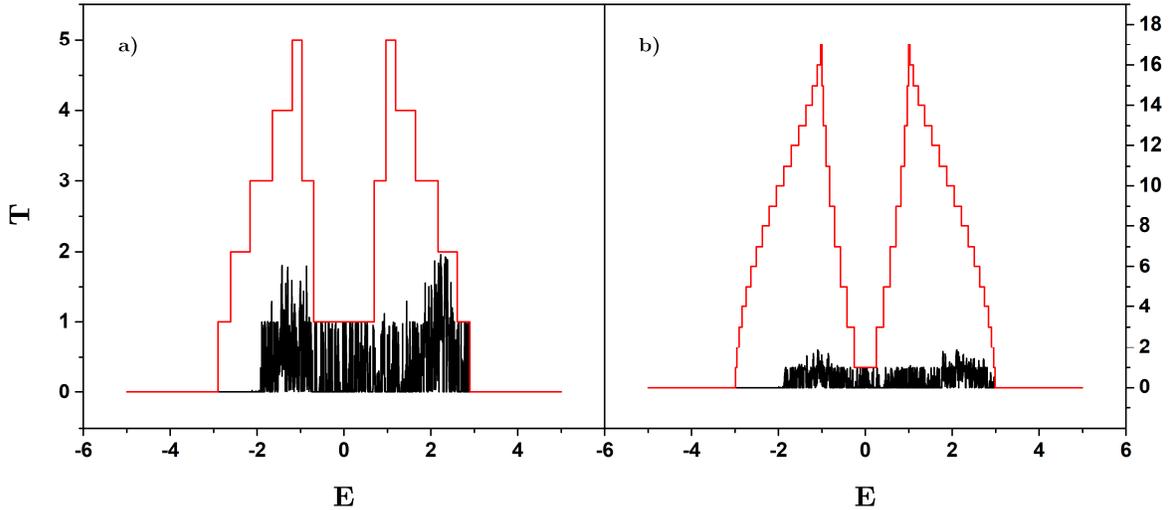
En los casos con incrementos, observamos que el espectro está mayormente discretizado cuando el ancho de la variación es mayor al de la estructura regular, lo cual se esperaba puesto que el efecto de dispersión es mayor. A su vez, podemos observar que al centro del espectro se generan dos bandas, las cuales resultan ser más anchas cuando la longitud de la región con sección inicial es mayor a la longitud de la variación. Notemos que los espectros de las gráficas b y c son muy similares, sin embargo, se destacan dos principales disparidades: una es que los picos con mayor transmitancia ocurren en el caso donde las secciones longitudinales son iguales, e incluso estos logran el régimen balístico; y dos, que el centro del espectro posee una única banda de transmitancia para sistemas con  $N_1=N_2$ , mientras que en los otros casos se generan dos bandas simétricas.



**Fig. 24:** Espectro de transmitancia de una red panel de abeja tipo ZigZag aperiódica, de generación 7, con variaciones en la sección transversal para diversas longitudes. En la parte superior se ilustra el caso de aumentos, con parámetros  $M_1=2$  y  $M_2=8$  para: a)  $N_1=3$ ,  $N_2=7$ , b)  $N_1=N_2=5$ , c)  $N_1=7$ ,  $N_2=3$ . En la parte inferior se esquematizan los espectros de transmitancia para un sistema que presenta disminuciones, con parámetros  $M_3=8$  y  $M_4=2$  para: a)  $N_3=3$ ,  $N_4=7$ , b)  $N_3=N_4=5$ , c)  $N_3=7$ ,  $N_4=3$ .

Una diferencia que podemos recalcar es que, si bien las transmitancias en las gráficas a y c son muy similares, estas difieren esencialmente por su parte central. Para sistemas donde las variaciones son más gruesas que las regiones con sección original, se presenta la formación de brechas junto con el adelgazamiento de las bandas de transmitancia. Por otro lado, en el caso contrario donde las variaciones son más delgadas que las regiones con sección original, la parte central del espectro exhibe bandas de transmitancia más gruesas y menos regiones con transmitancia nula. De lo anterior, es posible concluir que el caso que muestra mayor transmitancia corresponde a aquel en el que las variaciones son delgadas a comparación de las regiones con sección transversal inicial, lo cual ya se esperaba.

En las tres gráficas inferiores en la Fig. 24, se observa un efecto no esperado, en el cual el espectro de transmitancia está menos discretizado para el sistema donde la variación es más ancha que la estructura con sección transversal regular. A su vez, podemos ver al centro de dicho espectro un mayor número de bandas de transmitancia, cuyo máximo es mayor a aquellos en los otros casos. Si bien los espectros de los sistemas con  $N_3 \geq N_4$  son bastante similares, se puede notar una mayor cantidad de puntos con transmitancia nula para el caso donde la variación es más angosta, rompiendo nuevamente con lo esperado, indicando que en este caso se genera un mayor efecto de dispersión.

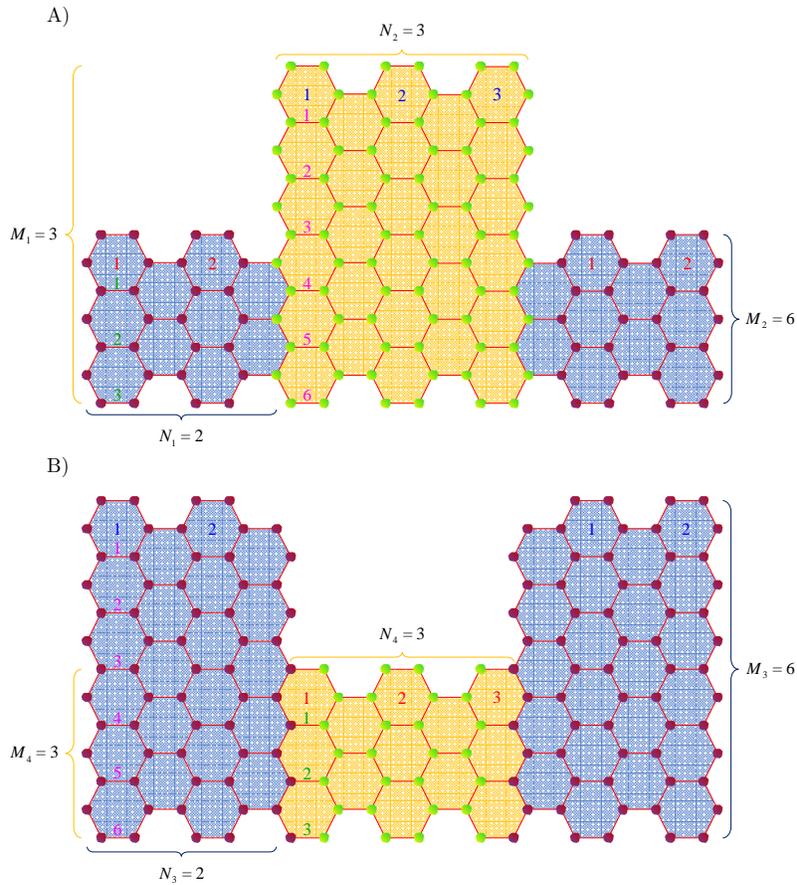


**Fig. 25:** Espectro de transmitancia para sistemas que presentan defectos de sitio, adicionales a las variaciones en su sección transversal. En este caso, los sitios verdes de las estructuras en la Fig. 19 pasan a tener una energía de sitio  $\varepsilon = 1$ , mientras que los sitios púrpuras poseen energía de sitio nula. Se muestra en: a) el espectro de un sistema de generación siete, con aumentos en la sección transversal, siendo sus secciones transversales  $M_1 = 2$ ,  $M_2 = 8$ , y secciones longitudinales  $N_1 = N_2 = 5$ , mientras que en b) se ilustra la transmitancia de un sistema de generación siete, con disminuciones en la sección transversal y parámetros  $M_3 = 8$ ,  $M_4 = 2$ ,  $N_3 = N_4 = 5$ .

Finalmente, analicemos los casos donde las variaciones presentan además una modificación en las energías de sitio, dadas por  $\varepsilon = 1$ . En la Fig. 25 se muestran los espectros de transmitancia para sistemas de séptima generación que presentan aumentos (gráfica a) y disminuciones (gráfica b) en su sección transversal, siendo  $M_1 = 2$ ,  $M_2 = 8$ ,  $N_1 = N_2 = 5$  los parámetros de la gráfica izquierda, y  $M_3 = 8$ ,  $M_4 = 2$ ,  $N_3 = N_4 = 5$  los parámetros de la gráfica derecha. Al igual que en el caso cuadrado, podemos ver que la consecuencia de los defectos de sitio recae en el desplazamiento del espectro hacia la derecha, según (3.17), y en la atenuación de los picos de transmitancia, debido al incremento en el efecto dispersivo.

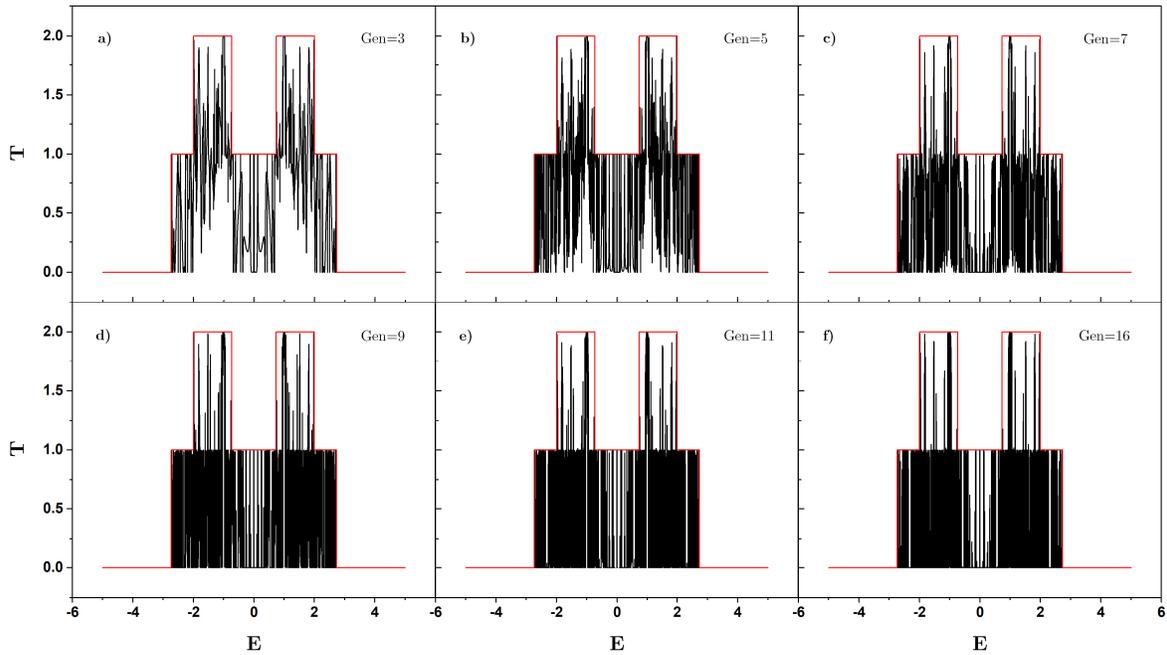
#### 4.4 Red Panal de Abeja Tipo Silla de Montar Aperiódica

Las estructuras a estudiar en esta sección se ilustran en la Fig. 26, donde establecemos que la sección transversal estará dada por el número de hexágonos en dicha dirección, y estará denotada por el índice  $M$ , mientras que la sección longitudinal, asociada a la variable  $N$ , estará determinada por el número de hexágonos paralelos entre sí.



**Fig. 26:** Red panal de abeja tipo silla de montar con: A) aumentos, y B) disminuciones en su sección transversal.

Al igual que en las dos secciones anteriores, comenzaremos por analizar sistemas de generación 3, 5, 7, 9, 11 y 16 (Fig. 27, gráficas a-f, correspondientemente) que presenten aumentos en su sección transversal, pasando de una sección regular  $M_1 = 2$  a una sección  $M_2 = 8$ . En este caso, las estructuras A y B de la palabra de Fibonacci se asocian a sistemas con parámetros  $M_1 = 2$ ,  $N_1 = 3$  y  $M_2 = 8$ ,  $N_2 = 5$ , respectivamente. Una vez más, es posible notar los efectos de la aperiodicidad del sistema en la continuidad del espectro dado que, a mayor grado de aperiodicidad, mayor discretización, menor cantidad de picos y mayor generación de brechas. Para este caso particular, se puede observar la creación de brechas muy bien localizadas, específicamente en el centro del espectro, donde la transmisión decrece pronunciadamente, exceptuando por ciertas energías para las cuales se conserva el régimen balístico. De hecho, es necesario puntualizar que el valor máximo de los picos aparenta mantenerse inmutable sin importar el grado de aperiodicidad. No obstante, puede ocurrir el mismo efecto que en el caso de red panal de abeja tipo ZigZag con disminuciones, donde se explicó que la disminución en el máximo puede estar presente, más puede ser inapreciable debido a que la transmitancia está limitada por el número de canales permitidos por la región de menor sección transversal.



**Fig. 27:** Transmitancia de una red panal de abeja tipo silla de montar con aumentos en su sección transversal para: a) generación 3, b) generación 5, c) generación 7, d) generación 9, e) generación 11, f) generación 16. Los parámetros de las estructuras son  $M_1 = 2$ ,  $N_1 = 3$  y  $M_2 = 8$ ,  $N_2 = 5$ .

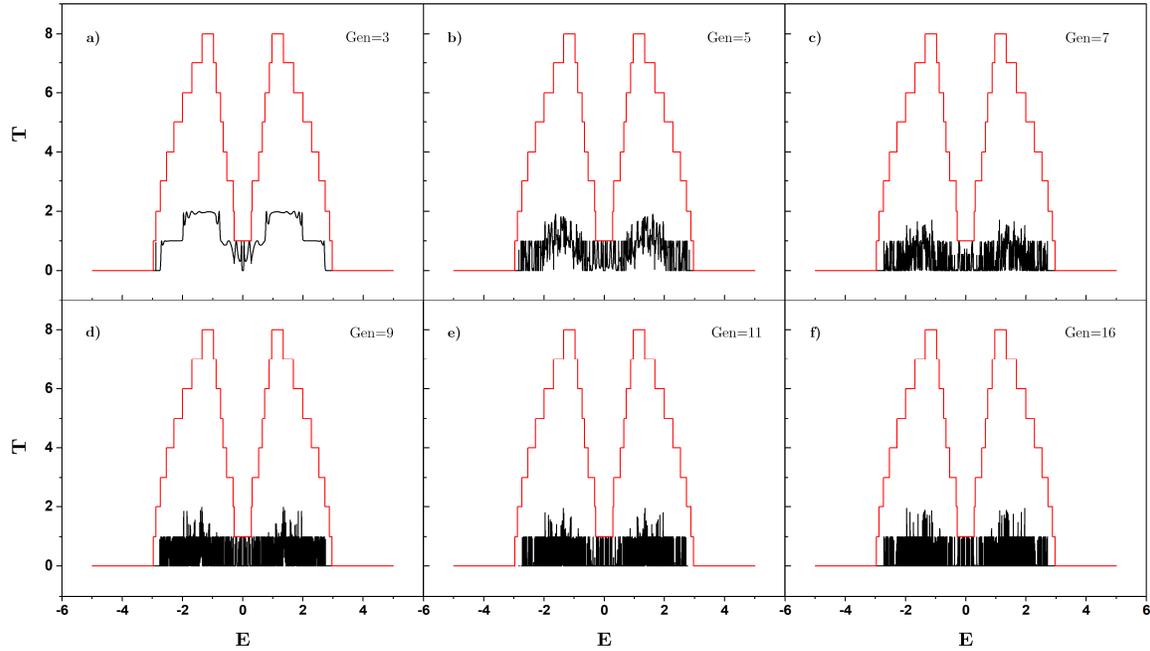
Ahora, para el caso de sistemas que presenten disminuciones, se analizan estructuras que pasan de una sección transversal con  $M_3 = 8$  a  $M_4 = 2$ , cuyas transmitancias se esquematizan en la Fig. 28, y corresponden a sistemas de generación 3, 5, 7, 9, 11 y 16 (gráficas a-f, respectivamente), donde la estructura A de la palabra de Fibonacci se asocia a un sistema con parámetros  $M_3 = 8$ ,  $N_3 = 3$ , mientras que B tiene valores  $M_4 = 2$ ,  $N_4 = 5$ . En general, podemos observar un comportamiento similar al de las secciones anteriores donde, para sistemas de baja generación, se advierte la presencia de modos evanescentes en las colas del espectro, los cuales tienen menor contribución conforme aumenta la aperiodicidad. A su vez, es posible notar nuevamente que, a mayor generación, mayor discretización del espectro y mayor localización de brechas en el mismo. Notemos que, para las disminuciones en este tipo de red, el máximo de los picos de transmitancia se reduce conforme crece la generación, y que la distribución de dichos picos varía ligeramente de acuerdo a la generación del sistema, mas éstos se encuentran siempre en el intervalo energético donde hay mayor cantidad de canales disponibles.

Para los casos donde consideramos distintos anchos en las secciones longitudinales de las estructuras A y B en la palabra Fibonacci, se consideraron dos tipos de sistemas, ambos ilustrados en la Fig. 29, donde las tres gráficas superiores corresponden a estructuras de séptima generación que presentan aumentos en la sección transversal, pasando de  $M_1 = 2$  a  $M_2 = 8$  para  $N_1 = 3$ ,  $N_2 = 7$  (gráfica a),  $N_1 = N_2 = 5$  (gráfica b) y  $N_1 = 7$ ,  $N_2 = 3$  (gráfica c). Por otro lado, las tres gráficas inferiores ilustran las transmitancias de sistemas de séptima generación que exhiben disminuciones en su sección transversal, pasando de  $M_3 = 8$  a  $M_4 = 2$  con  $N_3 = 3$ ,  $N_4 = 7$  (gráfica d),  $N_3 = N_4 = 5$  (gráfica e) y  $N_3 = 7$ ,  $N_4 = 3$  (gráfica f).

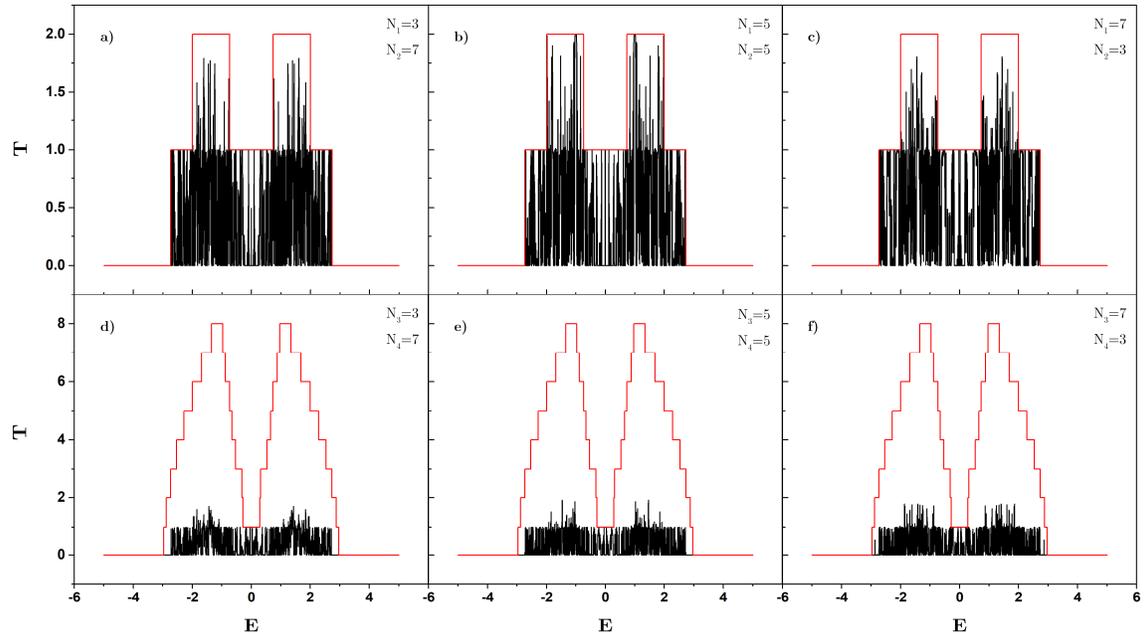
Considerando los espectros en las gráficas superiores de la Fig. 29, notamos que estos son sumamente similares entre sí, sin embargo, se diferencian principalmente por su región central y por los máximos de los picos de transmitancia. Se observa que, en los intervalos energéticos donde se tiene el máximo número de canales disponibles, para los casos donde  $N_1 \neq N_2$ , los picos de transmitancia son menores a aquellos en el caso con  $N_1 = N_2$ , donde se alcanza el régimen balístico. Analizando las regiones centrales, vemos que la densidad de picos en dicha región resulta ser menor en el caso donde  $N_1 > N_2$ , mientras que para el caso con  $N_1 < N_2$  los picos alcanzan el régimen balístico, en contraparte con el sistema  $N_1 = N_2$ , donde estos disminuyen su valor máximo.

Examinando ahora las gráficas inferiores de la Fig. 29, podemos notar diferencias entre los espectros de manera más directa, empezando por el hecho de que la transmitancia del sistema con  $N_3 < N_4$  se encuentra ligeramente menos discretizada, y que los picos del espectro son sutilmente menores, a comparación de las otras dos estructuras. Se observa a

su vez que, para las regiones donde se tiene el máximo de canales disponibles, el sistema con  $N_3 > N_4$  presenta la mayor densidad de picos.



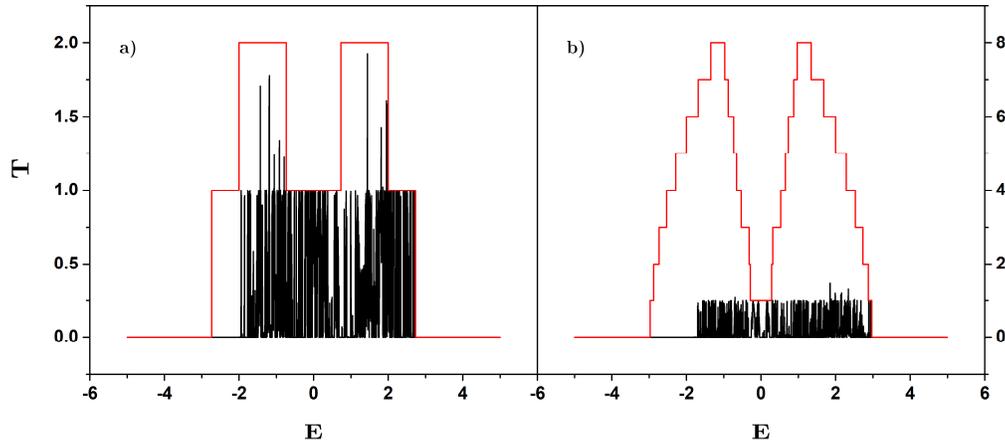
**Fig. 28:** Transmitancia de una red panel de abeja tipo silla de montar con disminuciones en su sección transversal para: a) generación 3, b) generación 5, c) generación 7, d) generación 9, e) generación 11, f) generación 16. La estructura A de la palabra de Fibonacci tiene parámetros  $M_3 = 8, N_3 = 3$ , mientras que a la estructura B se le asocian los parámetros  $M_4 = 2, N_4 = 5$ .



**Fig. 29:** Espectro de transmitancia de una red panel de abeja tipo silla de montar aperiódica, de generación 7, con variaciones en la sección transversal para diversas longitudes. En la parte superior se ilustra el caso de aumentos, con parámetros  $M_1 = 2$  y  $M_2 = 8$  para: a)  $N_1 = 3, N_2 = 7$ , b)  $N_1 = N_2 = 5$ , c)  $N_1 = 7, N_2 = 3$ . En la parte inferior se esquematizan los espectros de transmitancia para un sistema que presenta disminuciones, con parámetros  $M_3 = 8$  y  $M_4 = 2$  para: a)  $N_3 = 3, N_4 = 7$ , b)  $N_3 = N_4 = 5$ , c)  $N_3 = 7, N_4 = 3$ .

Enfocándonos ahora en la región central del espectro, advertimos que en general los espectros presentan un mismo comportamiento, excepto por la distribución de picos dentro de este intervalo. Por ejemplo, en el caso donde  $N_3 < N_4$ , se puede ver una distribución más extendida hacia los extremos, ensanchando ligeramente los picos centrales y generando brechas entre la región central y sus extremos, mientras que para el caso con  $N_3 > N_4$  la distribución de picos se encuentra más centralizada, adelgazando ligeramente los picos de transmitancia y generando pequeñas bandas en los extremos del intervalo central. Esto último, provoca que las bandas se localicen donde se tenían brechas en el caso con  $N_3 < N_4$ . Es necesario mencionar que la distribución de picos es más uniforme en el caso donde las secciones transversales son iguales, generando un pequeño par de bandas simétricas al centro del espectro y abarcando de manera más completa el intervalo central.

Considerando finalmente el caso en que los sistemas no solo presentan variaciones en su sección transversal, sino que además dichas variaciones exhiben una modificación en la energía de sitio de los átomos que la componen (esferas verdes en Fig. 30), dada por  $\varepsilon = 1$ , analizamos los casos correspondientes a aumentos y disminuciones, donde sistemas de séptima generación contienen secciones transversales  $M_1 = 2$  a  $M_2 = 8$ , para el caso de incrementos (gráfica a, Fig. 30), y  $M_3 = 8$  a  $M_4 = 2$ , para el caso de reducciones (gráfica b, Fig. 30), siendo las secciones longitudinales iguales en todos los casos, es decir  $N_1 = N_2 = N_3 = N_4 = 5$ . De forma análoga a los casos anteriores, se observa que el efecto de la variación en la energía de sitio recae en el desplazamiento de los espectros a la derecha, según las relaciones de dispersión correspondientes, y en la atenuación de los picos de transmitancia.



**Fig. 30:** Espectro de transmitancia para sistemas que presentan defectos de sitio, adicionales a las variaciones en su sección transversal. En este caso, los sitios verdes de las estructuras en la Fig. 24 pasan a tener una energía de sitio  $\varepsilon = 1$ , mientras que los sitios púrpuras poseen energía de sitio nula. Se muestra en: a) el espectro de un sistema de generación siete, con aumentos en la sección transversal, siendo sus secciones transversales  $M_1 = 2$ ,  $M_2 = 8$ , y secciones longitudinales  $N_1 = N_2 = 5$ , mientras que en b) se ilustra la transmitancia de un sistema de generación siete, con disminuciones en la sección transversal y parámetros  $M_3 = 8$ ,  $M_4 = 2$ ,  $N_3 = N_4 = 5$ .

# V

---

---

## CONCLUSIONES

---

---

En esta tesis se propone un nuevo método para el cálculo de la matriz de dispersión de sistemas finitos, alternativo al ya conocido método de duplicación (Rumpf, 2011), denominado *método de eigenvalores*. Este se basa en la explotación del teorema de Bloch y sus propiedades, aplicable a sistemas periódicos y finitos, de manera que se puede calcular la matriz de dispersión de un sistema complejo, de grandes dimensiones, simplemente al resolver la ecuación de eigenvalores generalizada correspondiente al sistema. Cabe destacar que, la dimensión de la estructura es introducida únicamente como un exponente al cual se elevan los eigenvalores, de modo que la memoria computacional y el tiempo computacional requeridos, son independientes de las dimensiones del sistema, y por lo tanto, se mantienen constantes.

Se analizó el tiempo requerido por el método de duplicación y por el método de eigenvalores para la construcción de tres tipos de redes con longitudes crecientes: cuadrada, panal de abeja tipo ZigZag y panal de abeja tipo silla de montar. De dicho análisis se apreció que, para el método de duplicación, el tiempo requerido para la modelación de una estructura finita se escala logarítmicamente conforme a la longitud de la misma, mientras que, para el método de eigenvalores, se observó un tiempo computacional constante, afirmando la independencia del tiempo computacional requerido respecto a la dimensión del sistema. Adicionalmente, fue posible apreciar que para sistemas cuya longitud es de orden menor a  $\approx 10^2$ , el método de duplicación resulta ser más eficiente debido a que el tiempo requerido por este es menor a aquel requerido por el método de eigenvalores. Una vez que el sistema supera estas dimensiones, es más conveniente hacer uso del método de eigenvalores.

Habiendo destacado las particularidades, ventajas y desventajas de ambos métodos, se procedió a aplicarlos en el estudio de sistemas quasiperiódicos, siguiendo la estructura de la palabra de Fibonacci, donde se alternan dos estructuras con secciones transversales distintas para los casos de: red cuadrada, red panal de abeja tipo ZigZag y red panal de abeja tipo silla de montar. En general, se observó que el efecto del grado de aperiodicidad del sistema se ve reflejado en la discretización del espectro de transmitancia, la disminución en los picos máximos de este y en la aparición de brechas sobre el mismo, de modo que, a mayor aperiodicidad, mayor discretización, menor valor alcanzado en los picos de transmitancia y mayor número de brechas en el espectro.

Posteriormente, se analizó el espectro de transmitancia de las tres distintas redes para sistemas aperiódicos donde se varía el ancho de las componentes de la palabra de Fibonacci. En este caso no se pudo observar un efecto generalizado, excepto por cambios en los máximos de los picos de transmitancia y variaciones en la distribución de las brechas, así como alteraciones en la continuidad del espectro. Sin embargo, estos efectos aparentan ser propios de la red, debido a que en cada caso se presentó un comportamiento distinto.

Finalmente, se estudiaron los casos donde las componentes de la palabra de Fibonacci poseían una misma longitud, pero la estructura con sección transversal distinta a aquella en los saturadores posee átomos con distinta energía de sitio. En general, se apreció que este tipo de defectos reducen el valor máximo de los picos de transmitancia y desplazan el espectro, dependiendo la diferencia entre energías de sitio, produciendo un espectro ahora asimétrico.

## Apéndice A

De las ecuaciones (2.3) y (2.4) se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{cases} \mathbf{A}_1^{(-)} = \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{A}_1^{(+)} + \mathbf{S}_{12}^A \mathbf{A}_2^{(+)} \\ \mathbf{A}_2^{(-)} = \mathbf{S}_{21}^A \mathbf{A}_1^{(+)} + \mathbf{S}_{22}^A \mathbf{A}_2^{(+)} \\ \mathbf{B}_1^{(-)} = \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{B}_1^{(+)} + \mathbf{S}_{12}^B \mathbf{B}_2^{(+)} \\ \mathbf{B}_2^{(-)} = \mathbf{S}_{21}^B \mathbf{B}_1^{(+)} + \mathbf{S}_{22}^B \mathbf{B}_2^{(+)} \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

Por otro lado, de las condiciones en (2.6) se deriva que

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

de modo que el sistema en (A.1) se expresa como

$$\begin{cases} \mathbf{C} = \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{D} + \mathbf{S}_{12}^A \mathbf{A}_2^{(+)} \\ \mathbf{A}_2^{(-)} = \mathbf{S}_{21}^A \mathbf{D} + \mathbf{S}_{22}^A \mathbf{A}_2^{(+)} \\ \mathbf{D} = \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{C} + \mathbf{S}_{12}^B \mathbf{B}_2^{(+)} \\ \mathbf{B}_2^{(-)} = \mathbf{S}_{21}^B \mathbf{C} + \mathbf{S}_{22}^B \mathbf{B}_2^{(+)} \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

Sustituyendo  $\mathbf{C}$  en la tercera ecuación del sistema anterior se obtiene que

$$\mathbf{D} = \mathbf{S}_{11}^B \left[ \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{D} + \mathbf{S}_{12}^A \mathbf{A}_2^{(+)} \right] + \mathbf{S}_{12}^B \mathbf{B}_2^{(+)} \quad (\text{A.4})$$

de donde resulta

$$\mathbf{D} = \left( \mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{S}_{11}^A \right)^{-1} \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{S}_{12}^A \mathbf{A}_2^{(+)} + \left( \mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{S}_{11}^A \right)^{-1} \mathbf{S}_{12}^B \mathbf{B}_2^{(+)} \quad (\text{A.5})$$

Análogamente, al sustituir  $\mathbf{D}$  en la primera ecuación de (A.3) obtenemos que

$$\mathbf{C} = \left( \mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{S}_{11}^B \right)^{-1} \mathbf{S}_{12}^A \mathbf{A}_2^{(+)} + \left( \mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{S}_{11}^B \right)^{-1} \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{S}_{12}^B \mathbf{B}_2^{(+)} \quad (\text{A.6})$$

Así, al remplazar las expresiones de las matrices  $\mathbf{C}$  y  $\mathbf{D}$  en la segunda y cuarta ecuación del sistema en (A.3), llegamos a que

$$\begin{cases} \mathbf{A}_2^{(-)} = \left[ \mathbf{S}_{21}^A \left( \mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{S}_{11}^A \right)^{-1} \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{S}_{12}^A + \mathbf{S}_{22}^A \right] \mathbf{A}_2^{(+)} + \left[ \mathbf{S}_{21}^A \left( \mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{S}_{11}^A \right)^{-1} \mathbf{S}_{12}^B \right] \mathbf{B}_2^{(+)} \\ \mathbf{B}_2^{(-)} = \left[ \mathbf{S}_{21}^B \left( \mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{S}_{11}^B \right)^{-1} \mathbf{S}_{12}^A \right] \mathbf{A}_2^{(+)} + \left[ \mathbf{S}_{21}^B \left( \mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{S}_{11}^B \right)^{-1} \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{S}_{12}^B + \mathbf{S}_{22}^B \right] \mathbf{B}_2^{(+)} \end{cases} \quad (\text{A.7})$$

de modo que la matriz de dispersión del sistema C, resultante de la composición de los sistemas A y B, está dada por

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}_{11}^C &= \mathbf{S}_{22}^A + \mathbf{S}_{21}^A (\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{S}_{11}^A)^{-1} \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{S}_{12}^A \\
\mathbf{S}_{12}^C &= \mathbf{S}_{21}^A (\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^B \mathbf{S}_{11}^A)^{-1} \mathbf{S}_{12}^B \\
\mathbf{S}_{21}^C &= \mathbf{S}_{21}^B (\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{S}_{11}^B)^{-1} \mathbf{S}_{12}^A \\
\mathbf{S}_{22}^C &= \mathbf{S}_{22}^B + \mathbf{S}_{21}^B (\mathbf{I} - \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{S}_{11}^B)^{-1} \mathbf{S}_{11}^A \mathbf{S}_{12}^B
\end{aligned} \tag{A.8}$$

## Apéndice B

Para la estructura en la Fig. 4, donde se ilustra un átomo con energía de sitio  $\varepsilon$ , al cual se le acoplan  $p$  cadenas auxiliares con integrales de salto  $t_c$ , la función de onda tiene la forma

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

con los coeficientes  $C_n^{(s)}$  dados por

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

donde el superíndice  $s$  denota a la cadena auxiliar del sistema,  $n$  enumera los átomos en dichas cadenas, y  $A_+^{(s)}$ ,  $A_-^{(s)}$  corresponden a las amplitudes de las ondas entrantes y salientes del sistema por la  $s$ -ésima cadena, respectivamente.

Asignando el índice  $n=0$  al sitio central con energía  $\varepsilon$ , al cual se encuentran acopladas las cadenas, tenemos que se debe cumplir que

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

donde el coeficiente  $C_0$  es tal que

$$\begin{aligned} C_0 &= C_0^{(1)} = C_0^{(2)} = \dots = C_0^{(p)} \\ &= A_+^{(1)} + A_-^{(1)} = A_+^{(2)} + A_-^{(2)} = \dots = A_+^{(p)} + A_-^{(p)} \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Sustituyendo (B.2) y (B.4) en (B.3), obtenemos que

$$\begin{aligned} &(\varepsilon - E)(A_+^{(p)} + A_-^{(p)}) + t_c \sum_{s=1}^p (A_+^{(s)} e^{-ika} + A_-^{(s)} e^{ika}) = 0 \\ \Rightarrow &(\varepsilon - E)(A_+^{(p)} + A_-^{(p)}) + t_c (A_+^{(p)} e^{-ika} + A_-^{(p)} e^{ika}) + t_c \sum_{s \neq p} (A_+^{(s)} e^{-ika} + A_-^{(s)} e^{ika}) = 0 \quad (\text{B.5}) \\ \Rightarrow &A_-^{(p)} (\varepsilon - E + t_c e^{ika}) + t_c e^{ika} \sum_{s \neq p} A_-^{(s)} = -A_+^{(p)} (\varepsilon - E + t_c e^{-ika}) - t_c e^{-ika} \sum_{s \neq p} A_+^{(s)} \end{aligned}$$

No obstante, de las igualdades en (B.4) se tiene que

$$A_-^{(s)} = A_-^{(p)} + A_-^{(p)} - A_+^{(s)} \quad (\text{B.6})$$

por lo que la ecuación (B.5) se escribe como

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}_-^{(p)}(\varepsilon - E + t_c e^{ika}) + t_c e^{ika} \sum_{s \neq p} (\mathbf{A}_+^{(p)} + \mathbf{A}_-^{(p)} - \mathbf{A}_+^{(s)}) &= -\mathbf{A}_+^{(p)}(\varepsilon - E + t_c e^{-ika}) - t_c e^{-ika} \sum_{s \neq p} \mathbf{A}_+^{(s)} \\
\Rightarrow \mathbf{A}_-^{(p)}(\varepsilon - E + pt_c e^{ika}) &= -\mathbf{A}_+^{(p)}[\varepsilon - E + pt_c e^{ika} - 2it_c \sin(ka)] + 2it_c \sin(ka) \sum_{s \neq p} \mathbf{A}_+^{(s)} \\
\Rightarrow \mathbf{A}_-^{(p)} &= \mathbf{A}_+^{(p)} \left[ \frac{2it_c \sin(ka)}{\varepsilon - E + pt_c e^{ika}} - 1 \right] + \left[ \frac{2t_c \sin(ka)}{\varepsilon - E + pt_c e^{ika}} \right] \sum_{s \neq p} \mathbf{A}_+^{(s)}
\end{aligned}
\tag{B.7}$$

la cual, expresada en forma matricial, resulta ser la expresión escrita en (2.9) (Ramírez & Medina-Amayo, 2017)

## Apéndice C

Consideremos una estructura compuesta por dos sitios, con energía de sitio nula, cada uno de estos con una cadena auxiliar acoplada, y unidos entre sí por medio de una integral de salto  $t$ , como se muestra en la Fig. 5. En este caso, la función de onda se escribe como

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

donde los superíndices en  $n$  indican la cadena auxiliar, y los coeficientes  $C_n, D_n$  están dados por

$$\begin{aligned} C_n &= A^{(+)} e^{-ikna} + A^{(-)} e^{ikna} \\ D_n &= B^{(+)} e^{-ikna} + B^{(-)} e^{ikna} \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

De esta forma, considerando las ecuaciones en torno a los dos sitios, obtenemos que se debe cumplir que

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

Sustituyendo (C.2) en (C.3) obtenemos que

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

lo cual se simplifica como

$$\begin{cases} A^{(-)}(-E + t_C e^{ika}) + t B^{(-)} = A^{(+)}(E - t_C e^{-ika}) - t B^{(+)} \\ t A^{(-)} + B^{(-)}(-E + t_C e^{ika}) = -t A^{(+)} + B^{(+)}(E - t_C e^{-ika}) \end{cases} \quad (\text{C.5})$$

Del anterior sistema, suponemos el caso de onda incidente por la cadena con coeficientes  $C_n$ , por lo que  $B^{(+)} = 0$ , y el sistema en (C.5) se reduce a

$$\begin{cases} A^{(-)}(-E + t_C e^{ika}) + t B^{(-)} = A^{(+)}(E - t_C e^{-ika}) \\ t A^{(-)} + B^{(-)}(-E + t_C e^{ika}) = -t A^{(+)} \end{cases} \quad (\text{C.6})$$

De la segunda ecuación obtenemos que

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

Sustituyendo este valor en la primera ecuación de (C.6) obtenemos que

$$\mathbf{A}^{(-)} = r\mathbf{A}^{(+)} \quad (\text{C.8})$$

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

Por otro lado, de la segunda ecuación en (C.6) podemos expresar

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

Sustituyendo (C.8) resulta que

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

Considerando ahora el caso en que la onda incidente proviene de la cadena auxiliar con coeficientes  $D_n$ , es decir  $\mathbf{A}^{(+)} = 0$ , el sistema de ecuaciones en (C.5) se reduce a

$$\begin{cases} \mathbf{A}^{(-)} \left( -E + t_C e^{ika} \right) + t \mathbf{B}^{(-)} = -t \mathbf{B}^{(+)} \\ t \mathbf{A}^{(-)} + \mathbf{B}^{(-)} \left( -E + t_C e^{ika} \right) = +\mathbf{B}^{(+)} \left( E - t_C e^{-ika} \right) \end{cases} \quad (\text{C.11})$$

De forma análoga a como se demostró anteriormente, se calcula que

$$\begin{cases} \mathbf{B}^{(-)} = -\frac{t^2 - t_C^2}{t^2 - t_C^2 e^{-2ika}} \mathbf{B}^{(+)} = r \mathbf{B}^{(+)} \\ \mathbf{A}^{(-)} = \frac{t_C}{t} \left( e^{ika} + r e^{-ika} \right) \mathbf{B}^{(+)} \end{cases} \quad (\text{C.12})$$

de modo que la matriz de dispersión se puede escribir como

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

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

# Referencias

- Büttiker, M., Imry, Y., Landauer, R., & Pinhas, S. (1985). Generalized many-channel conductance formula with application to small rings. *Physical Review B*, *31*(10), 6207-6215. doi:10.1103/PhysRevB.31.6207
- Chen, H., Rocco, M. C., Son, J., Jiang, S., Larson, C. A., & Gao, Q. (2013). Global nanotechnology development from 1991 to 2012: patents, scientific publications, and effect of NSF funding. *Journal of Nanoparticle Research*, *15*. doi:10.1007/s11051-013-1951-4
- Datta, S. (1995). *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge, United Kingdom: Cambridge University Press.
- Dickherber, A., Morris, S. A., & Grodzinski, P. (2014). NCI investment in nanotechnology: achievements and challenges for the future. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Nanomedicine and Nanobiotechnology*, *7*, 251-265. doi:10.1002/wnan.1318
- Duang, F., & Guojun, J. (2005). *Introduction to Condensed Matter Physics* (Vol. 1). Singapore: World Scientific.
- Dubois, J., Kang, S., Archambault, P., & et al. (1993). Thermal diffusivity of quasicrystalline and related crystalline alloys. *Journal of Materials Research*, *8*, 38-43. doi:10.1557/JMR.1993.0038
- Dubois, J.-M. (2001). Quasicrystals. *Journal of Physics: Condensed Matter*, *13*(34), 7754-7763. doi:10.1088/0953-8984/13/34/318
- Fornari, R. (2018). *Single Crystals of Electronic Materials*. United Kingdom: Woodhead Publishing.
- Freitas, R. A. (2005). What is nanomedicine? *Nanomedicine: NANotechnology, Biology and Medicine*, *1*, 2-9.
- Fujiwara, T., & Ishii, Y. (2008). *Handbook of Metal Physics: Quasicrystals*. Elsevier.
- Gellings, P., & Bouwmeester, H. (1997). *The CRC Handbook of Solid State Electrochemistry*. Boca Raton, Florida, USA: CRC Press.
- Girvin, S. M., & Yang, K. (2019). *Modern Condensed Matter Physics*. Cambridge, United Kingdom: Cambridge University Press.
- Gmeiner, W. H., & Ghosh, S. (n.d.). Nanotechnology for cancer treatment. *Nanotechnology Reviews*, *3*. doi:10.1515/ntrev-2013-0013

- Griffiths, D. J. (2005). *Introduction to Quantum Mechanics*. USA: Pearson: Prentice Hall.
- Hey, A. G. (1998). *Feynman and Computation: Exploring the Limits of Computers*. Massachusetts: Westview Press.
- Janot, C. (1994). *Quasicrystals: A Primer*. Oxford: Clarendon Press.
- Kawasaki, E. S., & Player, A. (2005). Nanotechnology, nanomedicine, and the development of new, effective therapies for cancer. *Nanomedicine: Nanotechnology, Biology and Medicine*, 1, 101-109. doi:10.1016/j.nano.2005.03.002
- Kittel, C. (2005). *Introduction to Solid State Physics* (8 ed.). EUA: John Wiley & Sons, Inc.
- Lothaire, M. (2009). *Combinatorics on Words*. Cambridge, Reino Unido: Cambridge University Press.
- M. Zwierzycki, P. A. Khomyakov, A. A. Starikov, K. Xia, M. Talanana, P. X. Xu, . . . P. J. Kelly. (2008). Calculating scattering matrices by wave function matching. *Phys. Stat. Sol. (b)*, 245, 623-640.
- Maciá Barber, E. (2009). *Aperiodic Structures in Condensed Matter: Fundamentals and Applications*. EUA: CRC Press: Taylor & Francis Group.
- Madan, A., & Shaw, M. P. (1988). *The Physics and Applications of Amorphous Semiconductors*. USA: Academic Press.
- Mahan, G. D., & Widom, M. (2016). *Quasicrystal*. Encyclopedia Britannica. Retrieved from <https://www.britannica.com/science/quasicrystal>
- Markoš, P., & Soukoulis, C. M. (2008). *Wave Propagation: From Electrons to Photonic Crystals and Left-Handed Materials*. USA: Princeton University Press.
- Mervin, R. (2015). *The Tight Binding Method*. England: University of Leicester.
- Mort, J. (1980). Applications of Amorphous Materials. *Physics in Technology*.
- Naumis, G. (2007). Simetrías exóticas: de cuasi-cristales y otros sistemas políticamente incorrectos. *Revista Iberoamericana de Física*, 2, 40-47.
- Olagunju, A. O. (1995). A Generalized Base Conversion Algorithm. *Journal of the Elisha Mitchell Scientific Society*, 111(2), 132-136.
- Penrose, R. (1974). The role of aesthetics in pure and applied mathematical research. *Bulletin of the Institute of Mathematics and Its Applications*, 10, 266-271.
- Poon, S. J. (1992). Electronic properties of quasicrystals: An experimental review. *Advances in Physics*, 41, 303-363. doi:10.1080/00018739200101513

- Ramírez, C. (2018). Determining Transport Properties of Complex Multiterminal Systems: S-Matrix of General Tight-Binding Periodic Leads. *Annalen der Physik*, 530, 1700170. doi:10.1002/andp.201700170
- Ramírez, C., & Medina-Amayo, L. A. (2017, Marzo). Scattering matrix of arbitrary tight-binding Hamiltonians. *Annals of Physics*, 378, 303-316. doi:10.1016/j.aop.2017.01.015
- Rumpf, R. (2011). Improved Formulation of Scattering Matrices for Semi-analytical Methods that is Consistent with Convention. *Progress In Electromagnetics Research B*, 35, 241-261. doi:10.2528/pierb11083107
- Ryndyk, D. A. (2016). *Theory of Quantum Transport at Nanoscale: An Introduction*. Switzerland: Springer.
- Sen, A., & Perelman, C. C. (2020). A Hamiltonian model of the Fibonacci quasicrystal using non-local interactions: simulations and spectral analysis. *The European Physical Journal B*, 93.
- Shechtman, D., Blech, I., Gratias, D., & Cahn, J. W. (1984). Metallic Phase with Long-Range Orientational Order and No Translational Symmetry. *Physical Review Letters*, 53(20), 1951-1953. doi:10.1103/PhysRevLett.53.1951
- Stangel, A. (2013). *Wannier Functions from Bloch Orbitals in Solids*. Suecia: Uppsala Universitet.
- Sütto, A. (1994). *Beyond Quasicrystals*. (F. Axel, & D. Gratias, Eds.) France: Les Editions de Physique.
- Sutton, A. (2004). *Electronic Structure of Materials*. Oxford, United Kingdom: Oxford University Press.
- Tsymbal, E. (2008). *Electronic Transport*. USA: University of Nebraska-Lincoln.
- Van Iwaarden, J. L. (1985). *Ordinary Differential Equations with Numerical Techniques*. San Diego: Harcourt Brace Jovanovich.
- Wakabayashi, K., Sasaki, K.-i., Nakanishi, T., & Enoki, T. (2010). Electronic states of graphene nanoribbons and analytical solutions. *Science and Technology of Advanced Materials*, 11(5), 054504.
- Wang, C., Oviedo-Roa, R., Pérez, L. A., & Sánchez, V. (2001). Electrical Conductivity and Localization in Quasiperiodic Lattices. *Ferroelectrics*, 250, 305-308.