Proyecto

Novoa Gastaldi Alejandro Silvestre

(silvestre.novoa@ciencias.unam.mx)

------CASO SENCILLO PARA COMPARAR ANALITICAMENTE. Cadena de 3 átomos

NOTAS :
*Los comandos DensityPlot VectorPlot necesitan más datos o no sólo valores en una recta, por lo que dan error.

```
Clear["Global`*"]
borra


Zigzag = 1.;
Armchair = 1.;

NZigzag = 1. + 2 * Zigzag;
NArmchair = 2 * Armchair;

NEdos = 1 * NZigzag * NArmchair;

t = -1.;




(*   Notacion {n;...} ={0,...,0,1,0,...,0;...}  *)

Base = Table[ Table[ -0. , {i, 1, 6}] , {j, 1, 1}];
       tabla    tabla

Base = Flatten[ Table[  Base  , {i, 1, NZigzag * NArmchair , 1}]  , 1];
       aplana    tabla
Do[    Do[   Base[[i, 1]] = j   , {i, 1 + 1 * (j - 1), 1 + 1 * (j - 1), 1}]     ,
repite  repite
  {j, 1., NZigzag * NArmchair , 1.}];

Print[  Style["Base ", 18, Bold, Purple]   ]
escribe  estilo                negrita púrpura
MatrixForm[ Base[[1 ;; 3]] ]
forma de matriz
```

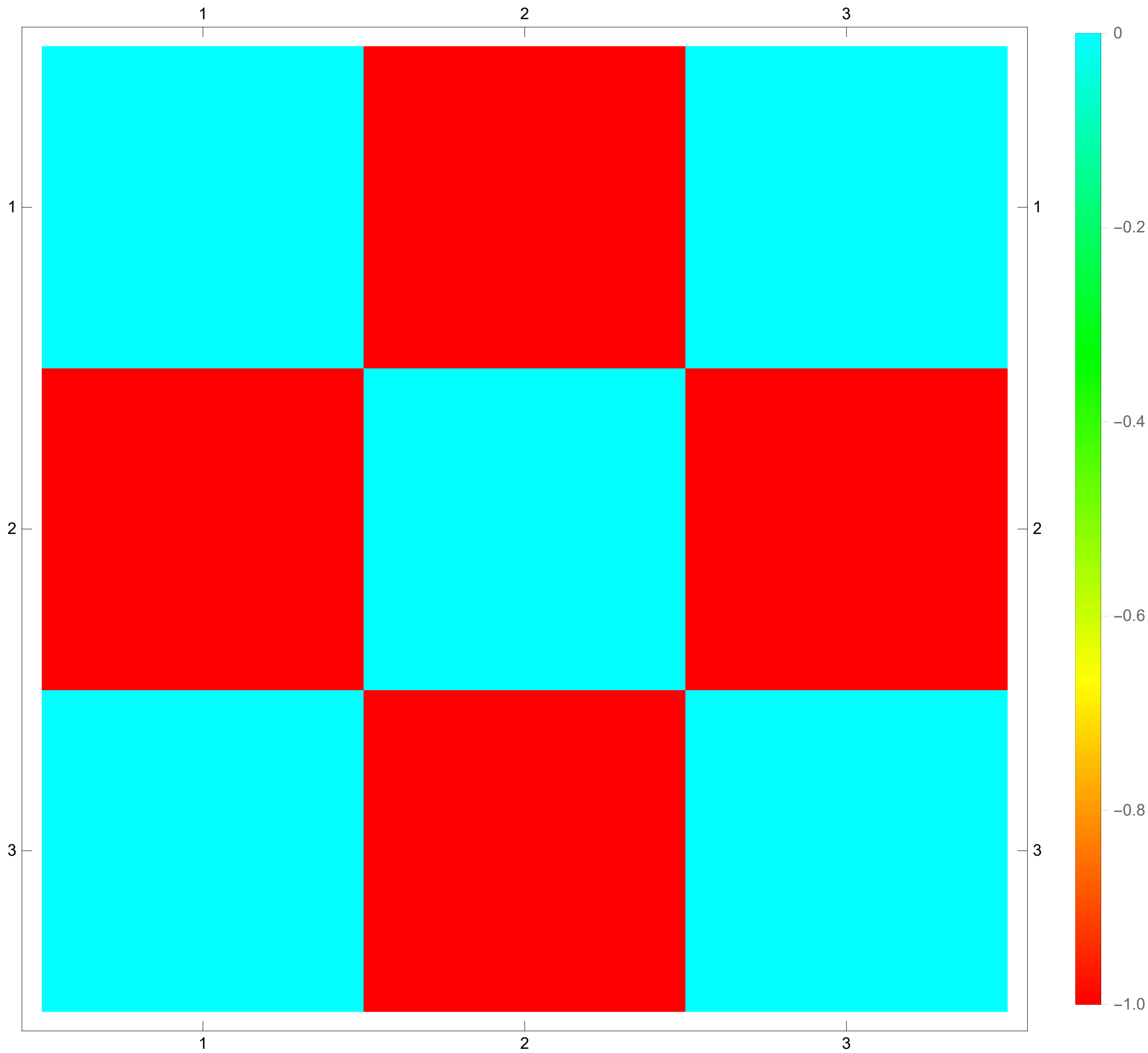
Base

$$\begin{pmatrix} 1. & 0. & 0. & 0. & 0. & 0. \\ 2. & 0. & 0. & 0. & 0. & 0. \\ 3. & 0. & 0. & 0. & 0. & 0. \end{pmatrix}$$

```
(******************** ----- HAMILTONIANO
  en Espacio de Estados ----- ********************)
```

```
HEdoBase = Table[Table[ 0. , {i, 1, NEdos, 1}], {j, 1, NEdos, 1}];
           tabla   tabla



(* NO DIAGONAL:  Transicion entre sitios*)

(*Transporte entre sitios*)
Base[[1]];
Base[[1 + 1]];
Base[[1]] + UnitVector[6, 1] ;
            vector unidad
(*   Notacion:  bn+1† bn {n;...} = √1 √0+1 {0,...,0,1-1,0+1,...,0;...} = {n+1;...} *)


Do[ Do[ HEdoBase[[i, i + 1]] = t , {i,   1 + 1 * NZigzag * (j - 1) ,
rep··repite
   1 * (  NZigzag - 1 + (j - 1) * NZigzag  )   , 1}] , {j, 1, NArmchair, 1} ]
(*Para interacciones entre filas  {n;...} y {n+1;...} en direccion zigzag *)


Do[ Do[ HEdoBase[[  i + 1 * (j - 1),  i + 1 * (j - 1 + NZigzag) ]] = t , {i,  1 ,  1  , 1}] ,
rep··repite
 {j, 1,   (NArmchair - 1) * NZigzag  , 2} ]
(*Para interacciones entre filas  {n;...} y {n+1;...} en direccion zigzag *)



HEdoBase  = (HEdoBase + ConjugateTranspose[HEdoBase]);
                        transpuesto conjugado
(*** CASO SIMPLE: Cadena de 3 atomos ***)
HEdoBase = HEdoBase[[1 ;; 3, 1 ;; 3]];
NEdos = 3;
(**)



HEdoBase // MatrixForm;
            forma de matriz
MatrixPlot[HEdoBase , PlotTheme → "Detailed", ImageSize → Large, ColorFunction → Hue]
representación de matriz   tema de representación   tamaño de i···  grande  función de color  tonalidad


(*  Solución Numerica   *)
{eval, evec} = Eigensystem[HEdoBase ]
               autovalores y autovectores

Print[  Style["Energias Numericas ", 18, Bold, Purple]   ]
escribe  estilo                          negrita púrpura
```

```
escribe     estilo                                   negrita púrpura
Style[  MatrixForm[ eval ]  , {Medium, Bold, Purple}]
estilo      forma de matriz                  tamaño··· negrita púrpura



(*  Solución Exacta:    Usa el mismo hamiltoniano de interacción   *)

t1 * HEdoBase  // MatrixForm
                  forma de matriz

Print[  Style["Energias Exactas ", 18, Bold, Purple]   ]
escribe  estilo                                negrita púrpura
Quiet[
silencioso
 Solve[ Det[     t1 * HEdoBase - En * IdentityMatrix[  Round[NEdos]  ]     ] == 0  , En]     ]
 resuelve determinante                 matriz identidad    entero más próximo

(*Eigenfunction*)
```



$\{\{1.41421, -1.41421, 1.33227\times 10^{-15}\},$
$\{\{-0.5, 0.707107, -0.5\}, \{0.5, 0.707107, 0.5\}, \{0.707107, -7.85046\times 10^{-16}, -0.707107\}\}\}$

Energias Numericas

$$\begin{pmatrix} 1.41421 \\ -1.41421 \\ 1.33227\times 10^{-15} \end{pmatrix}$$

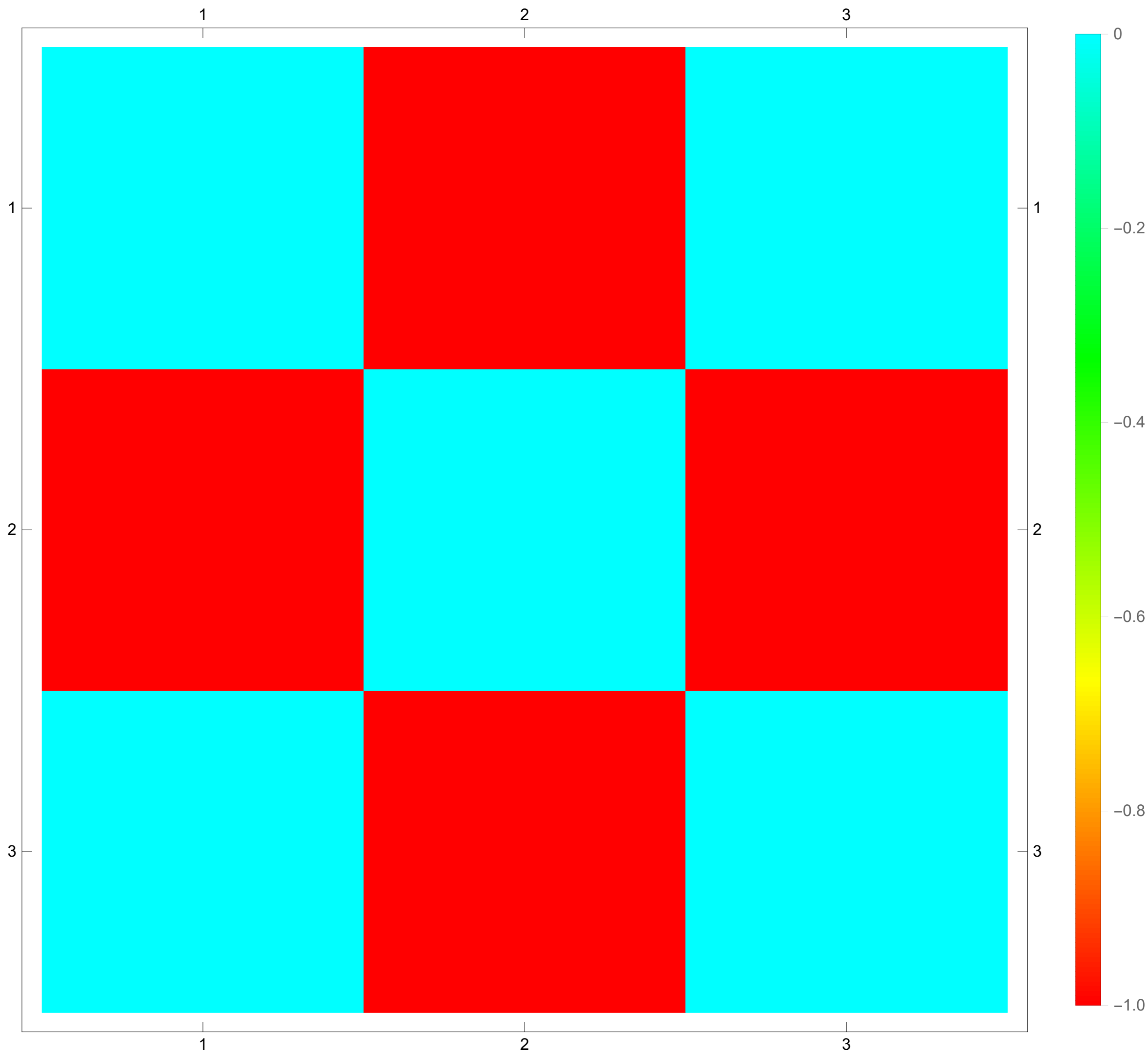
$$\begin{pmatrix} 0. & -1.\,t1 & 0. \\ -1.\,t1 & 0. & -1.\,t1 \\ 0. & -1.\,t1 & 0. \end{pmatrix}$$

Energias Exactas

$\{\{En \to 0.\}, \{En \to -1.41421\,t1\}, \{En \to 1.41421\,t1\}\}$

```
(******************** ----- HAMILTONIANO
  en Espacio Real ----- ********************)
                |real

(*Para este problema simplificado queda identico*)

HReal = HEdoBase ;
HEdoBase // MatrixForm;
               |forma de matriz
MatrixPlot[HEdoBase , PlotTheme → "Detailed", ImageSize → Large, ColorFunction → Hue]
|representación de matriz  |tema de representación  |tamaño de i···  |grande  |función de color  |tonalidad


(* Para usar Green se requiere el
                |verde
 Hamiltoniano discretiado (Matriz) en el espacio Real *)
                                                 |real


(* Con Green obtendremos observables en función de la energía *)
      |verde
Energia = En * IdentityMatrix[  Round[NEdos]  ];
                |matriz identidad  |entero más próximo


(* Se ingresa las posiciones atomicas que actuaran de Fuente y Drenante *)
PosicionFuente = {  1.  };
PosicionDrentante = {3.  };

PosicionFuente =  Table  [  Round[{PosicionFuente[[i]] , PosicionFuente[[i]] }]   ,
                  |tabla    |entero más próximo
   {i, 1, Length[PosicionFuente], 1}];
          |longitud
(* Genera las posiciones correspondientes a la matriz *)
PosicionDrentante =  Table  [  Round[{PosicionDrentante[[i]] , PosicionDrentante[[i]] }]   ,
                     |tabla    |entero más próximo
   {i, 1, Length[PosicionDrentante], 1}];
          |longitud

(* Matrices de Autoenergías *)
   |matrices
SigmaFuente = -i * tF *
   SparseArray[{    PosicionFuente → Table[1. , {i, 1, Length[PosicionFuente], 1} ]    },
   |array disperso                     |tabla          |longitud
    {NEdos, NEdos}];
SigmaDrenante =  -i * tD * SparseArray[{    PosicionDrentante →
                           |array disperso
      Table[1. , {i, 1, Length[PosicionDrentante], 1} ]    }, {NEdos, NEdos}];
      |tabla          |longitud
```

```
Energia - t1 * HEdoBase - SigmaFuente - SigmaDrenante  // MatrixForm
                                                          forma de matriz
```



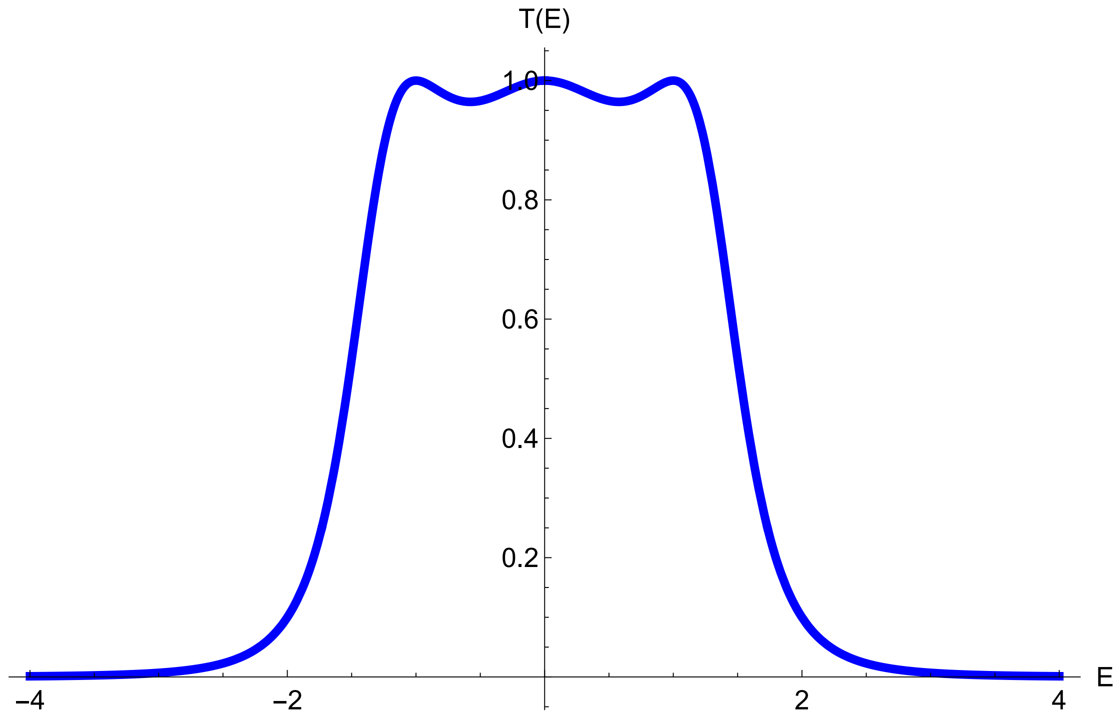
$$\begin{pmatrix} (0.+0.\,i)+\text{En}+(0.+1.\,i)\,\text{tF} & (0.+0.\,i)+1.\,\text{t1} & 0.+0.\,i \\ (0.+0.\,i)+1.\,\text{t1} & (0.+0.\,i)+\text{En} & (0.+0.\,i)+1.\,\text{t1} \\ 0.+0.\,i & (0.+0.\,i)+1.\,\text{t1} & (0.+0.\,i)+\text{En}+(0.+1.\,i)\,\text{tD} \end{pmatrix}$$

```
(*Broadening Matrix*)
GammaFuente = i * ( SigmaFuente - ConjugateTranspose[ SigmaFuente ]);
                                  transpuesto conjugado
GammaDrenante = i * ( SigmaDrenante - ConjugateTranspose[ SigmaDrenante ]);
                                      transpuesto conjugado


(*Funcion de Green del Nanosistema*)
              verde
FGreenE = Inverse[Energia - t1 * HEdoBase - SigmaFuente - SigmaDrenante];
          matriz inversa


(*Funcion de Transmision*)
Print[  Style["Función de Transmisión", 18, Bold, Purple]  ]
        estilo                              negrita púrpura
FTranmisionE = Tr[  GammaDrenante.FGreenE.GammaFuente.ConjugateTranspose[ FGreenE ]  ]
               traza                                  transpuesto conjugado


tF = 1.;
tD = 1.;
t1 = 1.;


Plot[  FTranmisionE  , {En, -4., 4.}, PlotStyle → {{Thickness[0.008], Blue}},
representación gráfica                 estilo de represe··· grosor        azul
 LabelStyle → {14, Black}, AxesLabel → {"E" , "T(E)"}, ImageSize → Large]
                    negro  etiqueta de ejes  númer··· núme··· tamaño de i···  grande


(*Función Espectral*)
A = i * ( FGreenE - ConjugateTranspose[ FGreenE ] );
                    transpuesto conjugado


(*DOS: Densidad de Estados*)
Print[  Style["DOS", 18, Bold, Purple]  ]
        estilo           negrita púrpura
DOS = Tr[ A ] / (2 * π)
      traza
```

```
traza
Plot[ DOS , {En, -4., 4.}, PlotStyle → {{Thickness[0.008], Blue}},
represe··                   estilo de represe··· grosor          azul
 LabelStyle → {14, Black}, AxesLabel → {"E" , "DOS(E)"}, ImageSize → Large]
                   negro      etiqueta de ejes  número e  núme··· tamaño de i··· grande


(*LDOS: Densidad Local de Estados*)
Print[  Style["LDOS", 18, Bold, Purple]   ]
        estilo                negrita púrpura
LDOS = Diagonal[ A ] / (2 * π);  (*Los elementos de la Diagonal de A *)
       diagonal                                         diagonal
LDOS  // MatrixForm
         forma de matriz
Plot[  LDOS  , {En, -4., 4.},
representación gráfica
 PlotStyle → {{Thickness[0.010], Blue}, {Thickness[0.004], Red}, {Thickness[0.009], Green},
               grosor             azul    grosor             rojo  grosor              verde
   {Thickness[0.005], Orange}, {Thickness[0.002], Yellow}, {Thickness[0.004], Pink}},
    grosor             naranja   grosor             amarillo  grosor             rosa
 LabelStyle → {14, Black}, AxesLabel → {"E" , "LDOS(E)"}, ImageSize → Large  ,
                   negro     etiqueta de ejes número e  núme··· tamaño de i··· grande
 PlotLegends → {"1° átomo", "2° átomo"}]
 leyendas de representación
```

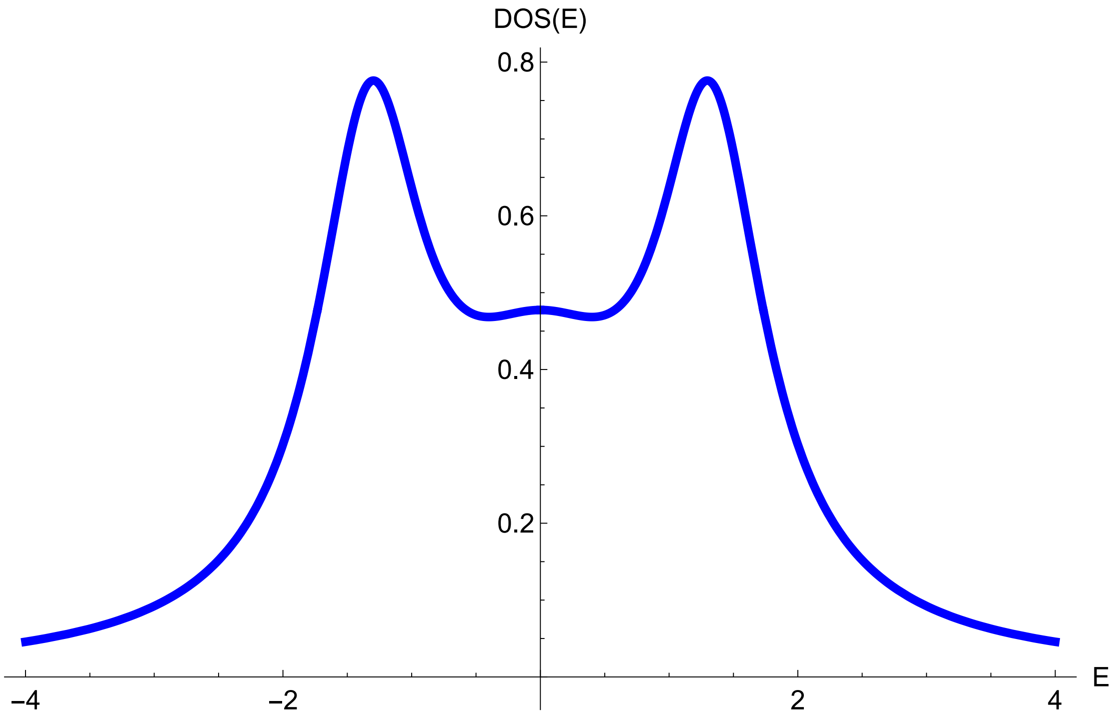
Función de Transmisión

```
-((((0. + 0. i) + 1. t1^2) ((0. + 0. i) + 1. Conjugate[t1]^2)
     ((0. - 1. i) tD - (0. + 1. i) Conjugate[tD]) ((0. - 1. i) tF - (0. + 1. i) Conjugate[tF])) /
   (((0. + 0. i) + En^3 - 2. En t1^2 + (0. + 1. i) En^2 tD - (0. + 1. i) t1^2 tD +
       (0. + 1. i) En^2 tF - (0. + 1. i) t1^2 tF - (1. + 0. i) En tD tF)
     ((0. + 0. i) + Conjugate[En]^3 + Conjugate[-2. En t1^2 + (0. + 1. i) En^2 tD -
         (0. + 1. i) t1^2 tD + (0. + 1. i) En^2 tF - (0. + 1. i) t1^2 tF - (1. + 0. i) En tD tF])))
```



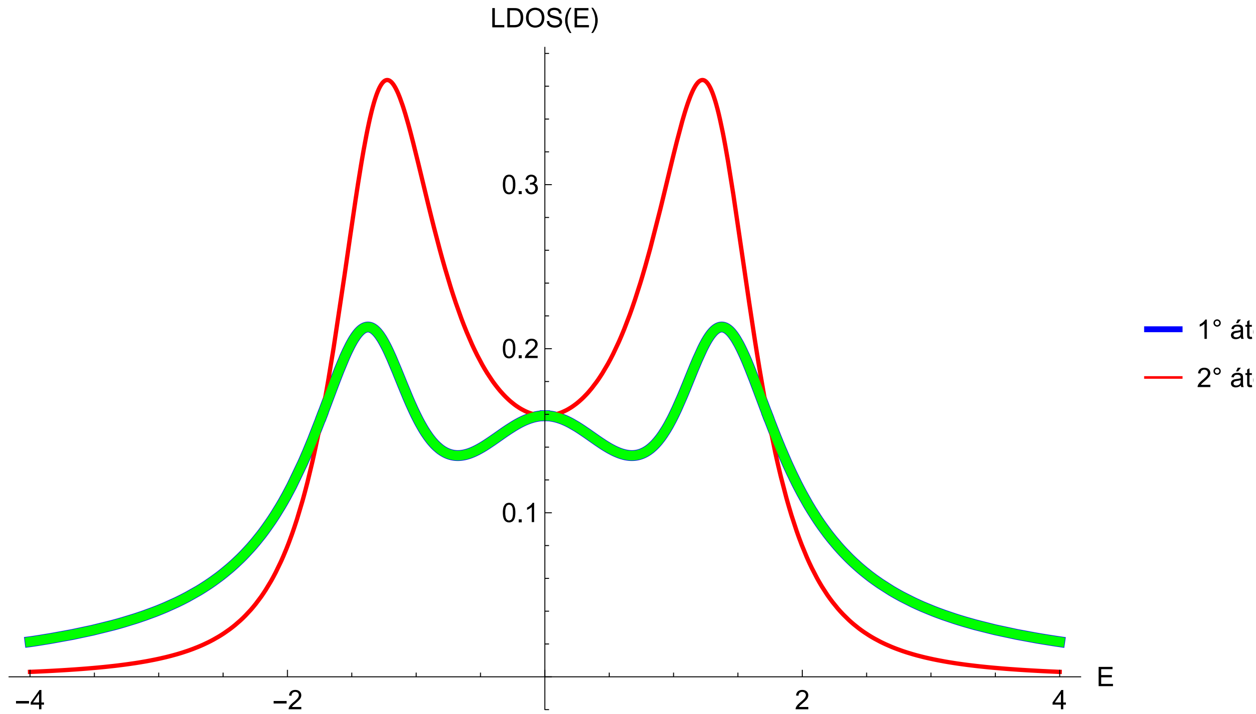
DOS

$$\frac{1}{2\pi}\left(2\,i\left(\frac{(-1.+0.\,i)+(0.+1.\,i)\,En+En^2}{(0.-2.\,i)-(3.+0.\,i)\,En+(0.+2.\,i)\,En^2+En^3}-\left((-1.+0.\,i)-(0.+1.\,i)\,\text{Conjugate}[En]+\text{Conjugate}[En]^2\right)\Big/\left((0.+2.\,i)-(3.+0.\,i)\,\text{Conjugate}[En]-(0.+2.\,i)\,\text{Conjugate}[En]^2+\text{Conjugate}[En]^3\right)\right)+i\left(\frac{(-1.+0.\,i)+(0.+2.\,i)\,En+En^2}{(0.-2.\,i)-(3.+0.\,i)\,En+(0.+2.\,i)\,En^2+En^3}-\left((-1.+0.\,i)-(0.+2.\,i)\,\text{Conjugate}[En]+\text{Conjugate}[En]^2\right)\Big/\left((0.+2.\,i)-(3.+0.\,i)\,\text{Conjugate}[En]-(0.+2.\,i)\,\text{Conjugate}[En]^2+\text{Conjugate}[En]^3\right)\right)\right)$$



LDOS

$$\begin{pmatrix} \dfrac{i\left(\dfrac{(-1.+0.\,i)+(0.+1.\,i)\,\text{En}+\text{En}^2}{(0.-2.\,i)-(3.+0.\,i)\,\text{En}+(0.+2.\,i)\,\text{En}^2+\text{En}^3}-\dfrac{(-1.+0.\,i)-(0.+1.\,i)\,\text{Conjugate}[\text{En}]+\text{Conjugate}[\text{En}]^2}{(0.+2.\,i)-(3.+0.\,i)\,\text{Conjugate}[\text{En}]-(0.+2.\,i)\,\text{Conjugate}[\text{En}]^2+\text{Conjugate}[\text{En}]^3}\right)}{2\pi} \\ \dfrac{i\left(\dfrac{(-1.+0.\,i)+(0.+2.\,i)\,\text{En}+\text{En}^2}{(0.-2.\,i)-(3.+0.\,i)\,\text{En}+(0.+2.\,i)\,\text{En}^2+\text{En}^3}-\dfrac{(-1.+0.\,i)-(0.+2.\,i)\,\text{Conjugate}[\text{En}]+\text{Conjugate}[\text{En}]^2}{(0.+2.\,i)-(3.+0.\,i)\,\text{Conjugate}[\text{En}]-(0.+2.\,i)\,\text{Conjugate}[\text{En}]^2+\text{Conjugate}[\text{En}]^3}\right)}{2\pi} \\ \dfrac{i\left(\dfrac{(-1.+0.\,i)+(0.+1.\,i)\,\text{En}+\text{En}^2}{(0.-2.\,i)-(3.+0.\,i)\,\text{En}+(0.+2.\,i)\,\text{En}^2+\text{En}^3}-\dfrac{(-1.+0.\,i)-(0.+1.\,i)\,\text{Conjugate}[\text{En}]+\text{Conjugate}[\text{En}]^2}{(0.+2.\,i)-(3.+0.\,i)\,\text{Conjugate}[\text{En}]-(0.+2.\,i)\,\text{Conjugate}[\text{En}]^2+\text{Conjugate}[\text{En}]^3}\right)}{2\pi} \end{pmatrix}$$


LDOS(E)
0.3
0.2
0.1
−4
−2
2
4
E
1° át
2° át

```
(*  Solución Numerica   *)
{eval, evec} = Eigensystem[HEdoBase + SigmaFuente + SigmaDrenante]
               autovalores y autovectores

Print[  Style["Energias Numericas ", 18, Bold, Purple]   ]
escribe estilo                           negrita púrpura
Style[  MatrixForm[ eval ]  , {Medium, Bold, Purple}]
estilo  forma de matriz       tamaño··· negrita púrpura
```

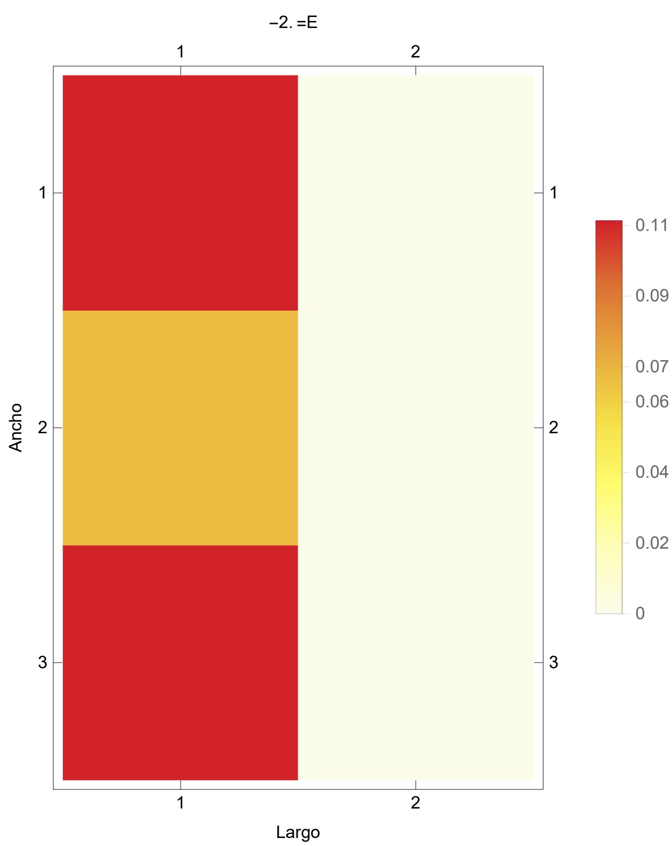
$\{\{1.32288 - 0.5\,i, -1.32288 - 0.5\,i, -2.76743 \times 10^{-17} - 1.\,i\},$
$\{\{-0.467707 + 0.176777\,i, 0.707107 + 0.\,i, -0.467707 + 0.176777\,i\},$
$\{0.467707 + 0.176777\,i, 0.707107 + 0.\,i, 0.467707 + 0.176777\,i\},$
$\{-0.707107 - 6.78586 \times 10^{-16}\,i, -3.22151 \times 10^{-16} + 2.33898 \times 10^{-16}\,i, 0.707107 + 0.\,i\}\}\}$

Energias Numericas

$$\begin{pmatrix} 1.32288 - 0.5\,i \\ -1.32288 - 0.5\,i \\ -2.76743 \times 10^{-17} - 1.\,i \end{pmatrix}$$

```
(*LDOS en Espacio REAL*)
Print[  Style["LDOS", 18, Bold, Purple]   ]
escribe  estilo                 negrita púrpura
En = -2.;

LDOSRealMatrix = SparseArray[ {{i_, i_} → 0.}, {NZigzag, NArmchair} ];
                 array disperso
Do[   LDOSRealMatrix [[   Mod[ i, NZigzag, 1.] ,
                          operación módulo
    1. + IntegerPart[  (i - 1) / NZigzag ]  ]] = Re[ LDOS [[i]] ]   ,   {i, 1, NEdos, 1.}];
         parte entera                              parte real

MatrixPlot[   LDOSRealMatrix   , PlotTheme → "Detailed", ColorFunction -> "TemperatureMap",
representación de matriz         tema de representación  función de color
 FrameLabel → {{"Largo", HoldForm["=E   "] En}, {"Ancho", None}}]
 etiqueta de marco        forma sin eva·· número e        ninguno
```

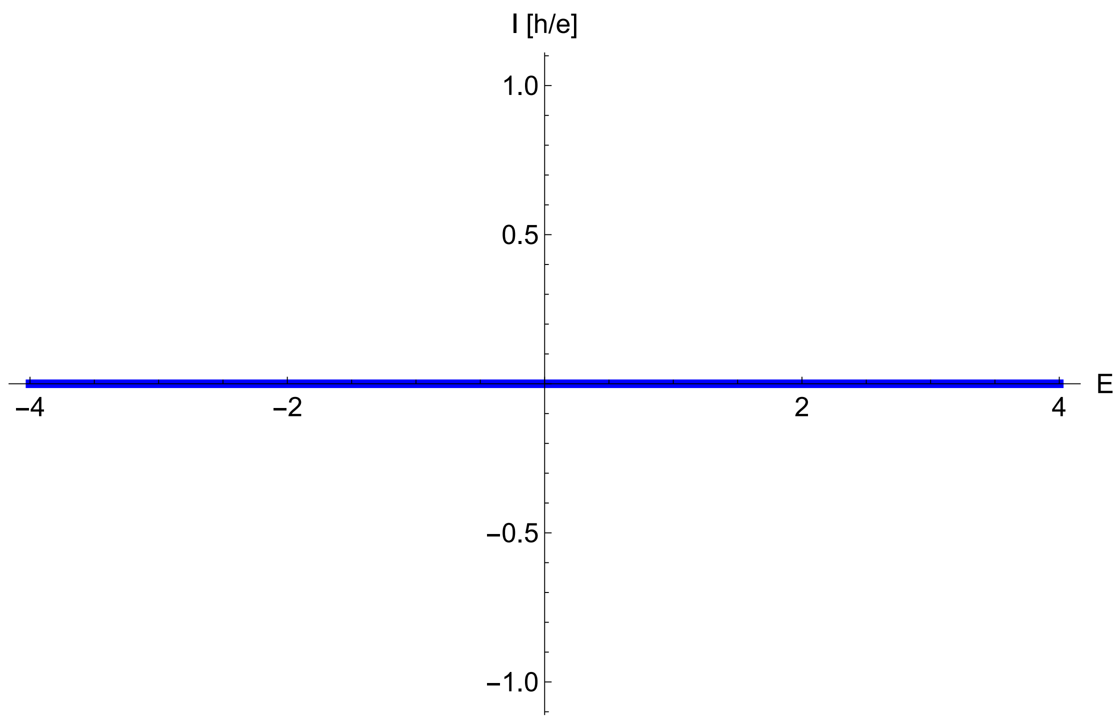
LDOS



```
(********** -------- Corriente -------- **********)
Print[  Style["Corriente Total", 18, Bold, Purple]   ]
escribe  estilo               total        negrita púrpura
fFermi2 = 1;     (*Suponiendo Funciones de Fermi iguales a 1*)
SigmaDispersiva = GammaDrenante + GammaFuente;
(*Energías de Dispersión, In-Scattering*)
                                   entrada
FGreenInE =  FGreenE. SigmaDispersiva. ConjugateTranspose[  FGreenE ];
                                       transpuesto conjugado
(*Funcion de Green de Dispersión*)
                  verde
IVal = Im[ 2 * FGreenInE * fFermi2 ];   (*Matrices con los valores de las corrientes*)
        parte imaginaria                  matrices
ITotal = Tr[ IVal ]   (*Corriente Total en Función de la Energía: Unidades (h/e) *)
           traza                       total

Plot[  ITotal   , {En, -4., 4.}, PlotStyle → {{Thickness[0.008], Blue}},
representación gráfica               estilo de represe··· grosor           azul
 LabelStyle → {14, Black}, AxesLabel → {"E" , "I  [h/e]"}, ImageSize → Large]
                     negro     etiqueta de ejes  nú···  número i     tamaño de i···  grande

En = 2.;
 Style[MatrixForm[ IVal ], {Large, Bold, Purple}]
 estilo  forma de matriz          grande  negrita púrpura

Print[ Style[ "La corriente total entre sitios 1-2: ", {Large, Bold, Purple}] ,
escribe  estilo                                           grande  negrita púrpura
 Style[ IVal[[1, 2]] , {Large, Bold, Purple}]]
                         grande  negrita púrpura
Print[ Style[ "La corriente total entre sitios 2-3: ", {Large, Bold, Purple}] ,
        estilo                                            grande  negrita púrpura
 Style[ IVal[[2, 3]] , {Large, Bold, Purple}]]
                         grande  negrita púrpura
Clear[
borra
 En]
```

Corriente Total

0.



$$\begin{pmatrix} 0. & 2.77556\times 10^{-17} & 0. \\ -2.77556\times 10^{-17} & 0. & -2.77556\times 10^{-17} \\ 0. & 2.77556\times 10^{-17} & 0. \end{pmatrix}$$

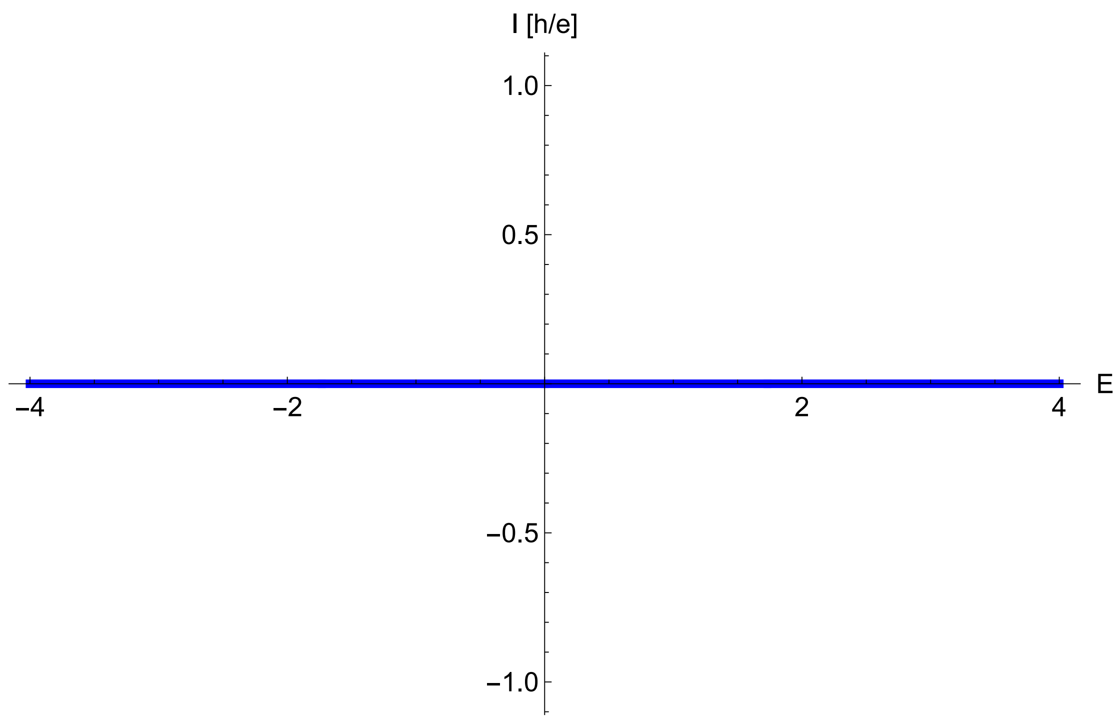
La corriente total entre sitios 1-2:
2.77556×10^{-17}

La corriente total entre sitios 2-3:
-2.77556×10^{-17}

```
(********** -------- Corriente -------- **********)
Print[  Style["Corriente Total", 18, Bold, Purple]   ]
escribe  estilo                  total   negrita púrpura
fFermi2 = 1;     (*Suponiendo Funciones de Fermi iguales a 1*)
SigmaDispersiva = GammaDrenante;    (*Energías de Dispersión, In-Scattering*)
                                                          entrada
FGreenInE =  FGreenE. SigmaDispersiva. ConjugateTranspose[ FGreenE ];
                                       transpuesto conjugado
(*Funcion de Green de Dispersión*)
             verde
IVal = Im[ 2 * FGreenInE * fFermi2 ];   (*Matrices con los valores de las corrientes*)
       parte imaginaria                   matrices
ITotal = Tr[ IVal ]   (*Corriente Total en Función de la Energía: Unidades (h/e) *)
         traza                  total

Plot[  ITotal  , {En, -4., 4.}, PlotStyle → {{Thickness[0.008], Blue}},
representación gráfica            estilo de represe··· grosor     azul
 LabelStyle → {14, Black}, AxesLabel → {"E" , "I  [h/e]"}, ImageSize → Large]
                   negro    etiqueta de ejes  nú···  número i   tamaño de i···  grande

En = 2.;
 Style[MatrixForm[ IVal ], {Large, Bold, Purple}]
 estilo  forma de matriz     grande  negrita púrpura

Print[ Style[ "La corriente local drenante entre sitios 1-2: ", {Large, Bold, Purple}] ,
escribe  estilo                                                  grande  negrita púrpura
 Style[ IVal[[1, 2]] , {Large, Bold, Purple}]]
                        grande  negrita púrpura
Print[ Style[ "La corriente local drenante entre sitios 2-3: ", {Large, Bold, Purple}] ,
        estilo                                                   grande  negrita púrpura
 Style[ IVal[[2, 3]] , {Large, Bold, Purple}]]
                        grande  negrita púrpura
Clear[
borra
 En]
```

Corriente Total

```
Im[ (4. + 0. ⅈ) / (((0. - 2. ⅈ) - (3. + 0. ⅈ) En + (0. + 2. ⅈ) En^2 + En^3)
     ((0. + 2. ⅈ) - (3. + 0. ⅈ) Conjugate[En] - (0. + 2. ⅈ) Conjugate[En]^2 + Conjugate[En]^3)) ] +
 Im[ ((4. + 0. ⅈ) ((0. - 1. ⅈ) - 1. En) ((0. + 1. ⅈ) - 1. Conjugate[En])) /
    (((0. - 2. ⅈ) - (3. + 0. ⅈ) En + (0. + 2. ⅈ) En^2 + En^3)
     ((0. + 2. ⅈ) - (3. + 0. ⅈ) Conjugate[En] - (0. + 2. ⅈ) Conjugate[En]^2 + Conjugate[En]^3)) ] +
 2 (0. + Im[ ((2. + 0. ⅈ) ((-1. + 0. ⅈ) + (0. + 1. ⅈ) En + En^2)
          ((-1. + 0. ⅈ) - (0. + 1. ⅈ) Conjugate[En] + Conjugate[En]^2)) /
        (((0. - 2. ⅈ) - (3. + 0. ⅈ) En + (0. + 2. ⅈ) En^2 + En^3) ((0. + 2. ⅈ) -
          (3. + 0. ⅈ) Conjugate[En] - (0. + 2. ⅈ) Conjugate[En]^2 + Conjugate[En]^3)) ])
```



$$\begin{pmatrix} 0. & 0.1 & -0.2 \\ -0.1 & 0. & 0.1 \\ 0.2 & -0.1 & 0. \end{pmatrix}$$

La corriente local drenante entre sitios 1-2:
0.1

La corriente local drenante entre sitios 2-3:
0.1