Universidad Nacional Autónoma de México Instituto de Ciencias Físicas Dr. Thomas Stegmann



Cuernavaca, 04.09.2018

Ejercicios para el curso "Física de Nanosistemas"

Proyecto 1

Estudiamos cadenas, cintas y redes cuadráticas de amarre-fuerte de longitud N y anchura M, véase Figure 1. Los sitos de energía ε_i están acoplados con la energía t.

Estructura electrónica:

- a) Determinar las unidades naturales del sistema.
- b) Dibujar el resultado analítico para la estructura de bandas y la densidad de estados (DOS) de la cadena $(N=\infty)$, la cinta $(N=\infty, M=3)$ y la red $(N=\infty, M=\infty)$. Comparar con la DOS de gases de electrones.
- c) Calcular numéricamente la densidad de los estados para una cadena (N=200) y una cinta $(N=100,\,M=3)$. Comparar con el resultado analítico.

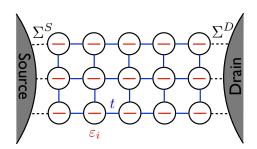


Figura 1: Una cinta amarre-fuerte de longitud N=5 y anchura M=3. Los primeros tres sitios están acoplados a la fuente $s=\{1,2,3\}$, los últimos tres al drenaje $d=\{-1,-2,-3\}$.

Transporte electrónico:

Conectamos dos depósitos (fuente S y drenaje D) al sistema para estudiar el transporte electrónico. Estos depósitos están modelados por el modelo de banda ancha, es decir las auto-energías están dadas por $\Sigma_{ij}^{S/D} = -\mathrm{i} t_0 \delta_{i,s/d} \delta_{ij}$ donde s y d indican los sitios acoplados a los depósitos.

- d) Dibujar la transmisión T(E) de cadenas homogéneas ($\varepsilon_i = 0$) de varias longitudes $N = \{5, 10, 20\}$. ¿Qué determina el número de maximos en la transmisión? En cuales energías la transmisión llega a su máximo?
- e) Dibujar T(E=0) como función de N. ¿Cómo cambia la transmisión con N?

f) Consideramos una cadena con el potencial periodico

$$\varepsilon_i = \begin{cases} +\delta & \text{si } i \text{ es impar,} \\ -\delta & \text{si } i \text{ es par.} \end{cases}$$
 (1)

Dibujar la transmisión T(E) para una cadena de la longitud N=20 y varios δ .

- g) Consideramos una cadena con desorden en el diagonal. (Es decir los elementos diagonales se eligen aleatoriamente en un rango de energías $[-\sigma,\sigma]$.) Calcular la resistencia $R \equiv \langle 1/T(E=0) \rangle$ donde $\langle \ldots \rangle$ indica el promedio sobre el desorden. Dibujar R como función de N. ¿Cómo cambia la resistencia? Se observa transporte Ohmico?
- h) Dibujar T(E) para cintas de anchura $M = \{3, 5\}$ y longitud N = 20.