Reporte de Resultados

Presentado por: Dr. Carlos Ramírez Ramos

Estudio del transporte cuántico en sistemas macroscópicos no-periódicos con y sin correlación electrónica en espacio real por medio de los métodos de renormalización

1. Resumen

Durante este proyecto se analizó el transporte cuántico en sistemas aperiódicos por medio de la fórmula de Landauer,

$$G = \frac{e^2}{\pi\hbar} T \quad . \tag{1}$$

para ello se desarrolló un nuevo método que permite el cálculo de la matriz de dispersión mediante un método iterativo, cuya certeza fue corroborada en diversos sistemas mediante el uso de cálculo numérico. Este método fue diseñado para ser compatible con técnicas de renormalización, que permiten abordar sistemas de longitud macroscópica. Como resultado de ello, fue publicado un artículo en la revista Annals of Physics y se sentaron las bases para la realización de una tesis de licenciatura que culminará en el año 2017.

2. Breve descripción de avances

En este proyecto se estudió la conductividad eléctrica en nanoalambres con defectos, poniendo especial énfasis a casos donde se tienen variaciones en la configuración transversal del material. Para ello, se inició con un estudio desde el punto de vista de la matriz de transferencia, el cual es un método muy eficaz para el cálculo de transmitancias en nanoalambres de sección trasversal fija. Sin embargo, fueron evidentes las limitaciones de dicho método causados principalmente por inestabilidades numéricas en los cálculos causados por productos matriciales, que producen matrices unimodulares, pero no unitarias. Adicionalmente a esto, no es clara la aplicación de este método en sistemas de sección transversal variable.

Con el fin de superar las inestabilidades numéricas, decidimos hacer uso de la matriz de dispersión, que por origen es una matriz unitaria. Para ello, desarrollamos con éxito un nuevo método numérico que permite su uso en casos modelados por Hamiltonianos de amarre fuerte. Dicho método consiste en el cálculo de la matriz de dispersión de un sistema grande, en términos de dos componentes complementarios. Adicionalmente fueron determinadas de forma analítica las matrices de dispersión de dos sistemas fundamentales que permiten el cálculo de cualquier otro sistema mediante la aplicación iterativa de éste método. En particular, este método es capaz de abordar nanoalambres con sección transversal variable, mientras que es compatible con técnicas de renormalización que permiten hacer cálculos sobre sistemas de longitud macroscópica.

Éste método fue validado por medio de cálculo numérico, al comparar los resultados con otros encontrados en la literatura y algunos deducidos de forma analítica. En particular, se

exploraron transmitancias en sistemas multiterminal, y nanoalambres con variaciones en su sección transversal.

Como resultado de este proyecto, se publicó el artículo titulado "Scattering matrix of arbitrary tight-binding Hamiltonians" en la revista Annals of Physics, el cual incluye un agradecimiento explicitó a DGTIC-UNAM. Adicionalmente, estos resultados servirán como base al alumno Luis Arturo Medina Amayo para la realización de su tesis de licenciatura, que concluirá durante el año 2017.

3. Cálculos realizados

Para la realización de este proyecto fue usada la supercomputadora Miztli, mediante código escrito en lenguaje Fortran 95, realizando los cálculos que se detallan en el artículo (1) de la sección *6. Lista de artículos Publicados*. En particular, los algoritmos básicos usados fueron los siguientes:

(1) Inversión de matrices por método de Gauss-Jordan. Típicamente se invirtieron matrices de dimensión 100 o menor.

(2) Determinación de eigenvalores y eigenvectores por algoritmo QR. Se ejecutaron ordinariamente casos con matrices de dimensión 100 o menor, aunque esporádicamente se abordaron matrices de dimensión mayor a 1000.

En los sistemas empleados, fueron frecuentemente usados 96 procesadores en paralelo, para lo cual empleamos de forma importante la cola residual. Además, la mayor parte de los procesos fueron ejecutados en cuádruple precisión.

4. Software utilizado

Los programas computacionales fueron compilados en Fortran 95 de la distribución de Intel.

5. Recursos utilizados

Fueron empleadas 4327.23 horas CPU.

6. Lista de artículos publicados

(1) C. Ramírez y L.A. Medina-Amayo, "Scattering matrix of arbitrary tight-binding Hamiltonians", Annals of Physics (2017) DOI: 10.1016/j.aop.2017.01.015

7. Lista de congresos nacionales e internacionales y participantes.

(1) C. Ramírez, "Condensación de pares de Cooper colectivos: un estudio analítico a partir de la solución lineal del Hamiltoniano de BCS" en el simposio "105 años de superconductividad" que se llevó a cabo en el Auditorio Alejandra Jaidar, en el Instituto de Física de la UNAM el 8 de abril de 2016.