

**ESTUDIO DE TRANSPORTE TÉRMICO EN NANOALAMBRES Y  
NANOPARTÍCULAS CON GEOMETRÍAS NO UNIFORMES BAJO EL  
FORMALISMO DE LANDAUER**

**Diego Reyes**

**200013344**

**Asesor: Alba Ávila**

**Departamento de Ingeniería Eléctrica y Electrónica**

**Universidad de los Andes**

**Bogotá, Colombia**

**2007**

# TABLA DE CONTENIDO

<b>1</b>	<b>INTRODUCCIÓN</b>	<b>7</b>
<b>2</b>	<b>DESCRIPCIÓN DEL PROBLEMA</b>	<b>8</b>
<b>3</b>	<b>CONDUCTIVIDAD TÉRMICA A ESCALAS MESOSCÓPICAS</b>	<b>10</b>
3.1	Escala Mesoscópica	10
3.2	Formalismo de Landauer	10
3.3	Conductividad Térmica en el Formalismo de Landauer	12
3.4	Cuantización de la Conductividad Térmica	13
3.5	Fonones	14
3.6	Ecuación Característica de Ondas Mecánicas en Cuerpo Rígidos	15
3.6.1	Ondas Longitudinales	15
<b>4</b>	<b>CÁLCULO DEL COEFICIENTE DE TRANSMISIÓN</b>	<b>17</b>
4.1	Ecuación Independiente del Tiempo	17
4.2	Variable de Separación	18
4.3	Esquema General de Solución	20
4.4	Método de Diferencias Finitas	22
4.4.1	Aproximación de las Derivadas de 1 <sup>er</sup> y 2 <sup>do</sup> orden	22
4.4.2	Condiciones de Frontera	23
4.4.3	Cálculo del Coeficiente de Transmisión	24
4.5	Método de Frobenius	26
<b>5</b>	<b>CÁLCULO DE LA RELACIÓN DE DISPERSIÓN</b>	<b>29</b>
5.1	Consideraciones	29
5.2	Método Frecuencial	31
5.3	Aproximación Periódica	32
<b>6</b>	<b>NANOALAMBRES</b>	<b>38</b>
6.1	Alambre Catenoidal	39
6.1.1	Coeficiente de Transmisión	39
6.1.2	Relación de Dispersión	45
6.2	Canal Cónico	51
6.2.1	Coeficiente de Transmisión	51
6.2.2	Relación de Dispersión	57
6.3	Canal Recto	61
<b>7</b>	<b>PARTÍCULA ESFÉRICA</b>	<b>66</b>
7.1	Coeficiente de Transmisión	66
7.2	Relación de Dispersión	72
<b>8</b>	<b>CONDUCTIVIDAD TÉRMICA</b>	<b>76</b>
8.1	Método de Cálculo	76
8.2	Nanoalambres	78
8.2.1	Canal Catenoidal	79
8.2.2	Canal Cónico	83
8.3	Partícula Esférica	84
<b>9</b>	<b>CONCLUSIONES</b>	<b>89</b>
	<b>BIBLIOGRAFÍA</b>	<b>91</b>
	<b>ANEXOS</b>	<b>92</b>

# LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1. Reservorios energéticos conectados por una estructura mesoscópica por la cual se realizará intercambio de energía. ....	8
Figura 2.2. Estructuras estudiadas por Rego [5]. ....	8
Figura 2.3. Estructura esférica truncada analizada por Ávila [7]. ....	8
Figura 4.1. Esquema general de transmisión y reflexión de fonones en un nanoalambre de área variable. .	20
Figura 5.1. Discretización para el análisis en frecuencia. ....	31
Figura 5.2. Potencial periódico para el modelo de Kronig-Penney. ....	33
Figura 5.3. Energía de un electrón en función del vector de onda [17]. ....	34
Figura 5.4. Estructura de bandas del modelo de Kronig-Penney y de un electrón libre: (a) Primera zona de Brillouin; (b) Comparación a banda más cercana. [17]. ....	35
Figura 5.5. Modelo periódico para estudiar la relación de dispersión de fonones. ....	36
Figura 6.1. Coeficiente de transmisión en función del vector de onda $k$ obtenido por Rego [5] para un canal unidimensional (A) de $1 \mu\text{m}$ de largo con contactos cónicos de ángulo de apertura $\theta = \pi/6$ y (B) catenoidal con longitud característica $\lambda = 0.86 \mu\text{m}$ . En ambos casos el área transversal es $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$ en el centro y $2000 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$ en los extremos. ....	38
Según lo obtenido por Rego [5], el comportamiento del coeficiente de transmisión para alambres con forma catenoidal y cónica tienen comportamientos similares. En la Figura 6.1 se presenta el coeficiente de transmisión para ambos casos. Para números de onda pequeños (o grandes longitudes de onda) el valor tiende a ser uno en ambos casos; sin embargo, a medida que $k$ aumenta, se presenta una región donde la reflexión de los fonones incidentes es máxima. Si el valor de $k$ sigue aumentando, entonces se presentan picos sucesivos en los que la probabilidad de transmisión es unitaria; estos picos se encuentran separados por valles que son cada vez menos profundos hasta que en altos números de ondas se llega a un coeficiente de transmisión unitario. La separación entre los picos de transmisión en ambos casos es distinta, además los valles que corresponden al canal con contactos cónicos (Figura 6.2A) son más profundos que los que corresponden al alambre catenoidal. ....	38
Figura 6.3. Dispositivo mesoscópico suspendido que se encuentra conectado térmicamente por medio de alambres catenoidales (Tomado de [10]). ....	39
Figura 6.4. Coeficiente de transmisión en función del vector de onda generalizado para un canal unidimensional catenoidal con longitud característica $\lambda = 0.86 \mu\text{m}$ , con área transversal de $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$ en el centro y $700 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$ en los extremos. ....	40
Figura 6.5. Curvas de transmisión para un canal catenoidal con área transversal de $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$ en el centro y $2000 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$ en los extremos en el cual la longitud característica $\lambda$ es (a) $0.001$ , (b) $0.01$ , (c) $0.1$ , (d) $1 \mu\text{m}$ . ....	41
Figura 6.6. Vector de onda donde ocurren los primeros cinco picos unitarios del coeficiente de transmisión en función de la longitud característica $\lambda$ del canal catenoidal de área transversal de $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$ en el centro y $2000 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$ en los extremos. ....	42
Figura 6.7. Curvas de transmisión para un canal catenoidal de longitud característica $\lambda = 0.86 \mu\text{m}$ con área transversal de $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$ en el centro y en los extremos de (a) $50 \text{ nm} \times 100 \text{ nm}$ , (b) $50 \text{ nm} \times 500 \text{ nm}$ , (c) $50 \text{ nm} \times 1000 \text{ nm}$ , (d) $50 \text{ nm} \times 5000 \text{ nm}$ . ....	43
Figura 6.8. Curva que relaciona el mínimo coeficiente de transmisión para variaciones en la relación existente entre el área transversal en el centro y extremo del alambre. La longitud característica $\lambda$ es $0.86 \mu\text{m}$ . ....	44
Figura 6.9. Ancho de la banda de rechazo en función de la relación de áreas para un canal catenoidal de longitud característica $\lambda = 0.86 \mu\text{m}$ . ....	45

Figura 6.10. Respuesta frecuencial para un canal catenoidal simétrico de largo $40 \mu\text{m}$ con longitud característica $\lambda = 0.86 \mu\text{m}$ .....	47
Figura 6.11. Respuesta frecuencial para canales catenoidales con longitud característica $\lambda = 0.5 \mu\text{m}$ y $\lambda = 2 \mu\text{m}$ . La longitud del canal en ambos casos es $40 \mu\text{m}$ .....	47
Figura 6.12. Respuesta frecuencial para un canal catenoidal de longitud característica $\lambda = 2 \mu\text{m}$ y largo de $4 \mu\text{m}$ .....	48
Figura 6.13. Relación de dispersión para un canal catenoidal simétrico con $\lambda = 0.86 \mu\text{m}$ , con relación de área menor y mayor de 40 repetido en un arreglo periódico.....	49
Figura 6.14. Comparación de la relación de dispersión teórica y la simulada trasladando cada una de las bandas obtenidas medio período para un canal catenoidal simétrico con $\lambda = 0.86 \mu\text{m}$ , con relación de área menor y mayor de 40 repetido en un arreglo periódico.....	50
Figura 6.15. Comparación de la relación de dispersión teórica y la simulada trasladando cada una de las bandas obtenidas medio período para un canal catenoidal simétrico con $\lambda = 0.86 \mu\text{m}$ , con relación de área menor y mayor de 10000 repetido en un arreglo periódico.....	51
Figura 6.16. Canal recto con contactos cónicos, el grosor se mantiene constante en todo el dominio.....	52
Figura 6.17. Coeficiente de transmisión en función del vector de onda generalizado $\beta$ para un canal unidimensional de $1 \mu\text{m}$ de largo con contactos cónicos con largo total de $4.4 \mu\text{m}$ con área transversal de $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$ en el centro y $2000 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$ en los extremos.....	53
Figura 6.18. Curva que relaciona el mínimo coeficiente de transmisión para variaciones en la relación existente entre el área transversal en el centro y extremo de un canal unidimensional de $1 \mu\text{m}$ de largo con contactos cónicos con largo total de $4.4 \mu\text{m}$ con área transversal de $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$ en el centro.....	54
Figura 6.19. Ancho de la banda de rechazo en función de la relación de áreas para un canal unidimensional de $1 \mu\text{m}$ de largo con contactos cónicos con largo total de $4.4 \mu\text{m}$ con área transversal de $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$ en el centro.....	55
Figura 6.20. Curvas de transmisión para un canal recto con contactos cónicos siendo el largo de cada uno de los contactos 1.7 veces más grande que el largo de la región central, adicionalmente, el área transversal es $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$ en el centro y $2000 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$ en los extremos. El largo de la región central es (a) $0.01 \mu\text{m}$ , (b) $0.1 \mu\text{m}$ , (c) $1 \mu\text{m}$ y (d) $10 \mu\text{m}$ .....	56
Figura 6.21. Ubicación de los primeros cuatro picos de transmisión unitaria en función de la longitud del canal central recto. La longitud de cada contacto cónico es 1.7 veces la longitud de la parte central recta. El transversal es $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$ en el centro, y $2000 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$ en los extremos.....	57
Figura 6.22. Respuesta frecuencial para un canal recto con contactos cónicos. El largo del canal recto es $1 \mu\text{m}$ , el ángulo de apertura de los contactos cónicos es $\pi/6$ . El área transversal en la región central es $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$ , mientras que en los extremos, es $50 \text{ nm} \times 2000 \text{ nm}$ .....	58
Figura 6.23. Respuesta frecuencial para un canal recto con contactos cónicos. El largo del canal recto es $1 \mu\text{m}$ , el ángulo de apertura de los contactos cónicos es $\pi/6$ . El área transversal en la región central es $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$ , mientras que en los extremos, es $50 \text{ nm} \times 50000 \text{ nm}$ .....	59
Figura 6.24. Comparación de la relación de dispersión teórica y la simulada trasladando cada una de las bandas obtenidas medio período para un canal recto de $1 \mu\text{m}$ con contactos cónicos de un ángulo de apertura $\pi/6$ . El área en los extremos es: (a) 40 y (b) 80 veces mayor que en el centro.....	60
Figura 6.25. Comparación de la relación de dispersión teórica y la simulada trasladando cada una de las bandas obtenidas medio período para un canal recto de $1 \mu\text{m}$ con contactos cónicos de un ángulo de apertura $\pi/6$ . El área en los extremos es 4000 veces mayor que en el centro.....	60
Figura 6.26. Esquema de un canal recto, existe una variación instantánea en el área transversal en el punto de contacto entre el canal y el reservorio.....	61
Figura 6.27. Coeficiente de transmisión en función del vector de onda $k$ para un canal unidimensional de $1 \mu\text{m}$ de largo con área transversal de $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$ en el centro y $2000 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$ en los extremos.....	61

Figura 6.28. Coeficiente de transmisión en función del vector de onda $k$ para un canal unidimensional de $1 \mu\text{m}$ de largo con área transversal de $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$ en el centro y $2000 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$ en los extremos. ....	62
Figura 6.29. Coeficientes de transmisión para un canal recto en el que la relación entre el área de los contactos y el área del alambre es (a) 0.01, (b) 0.1, (c) 10 y (d) 100. ....	63
Figura 6.30. Ancho de los picos de transmisión para una atenuación de la transmisión de -3dB. También se muestra el mínimo de transmisión. ....	64
Figura 6.31. Relación de dispersión para un alambre recto. ....	65
Figura 7.1. Canal térmico conformado por una nanopartícula esférica truncada ( $d < 2R$ ). ....	66
Figura 7.2. Coeficientes de transmisión para una partícula esférica de radio $R = 200 \text{ nm}$ con una distancia de truncamiento de (a) 12.6 nm, (b) 28.3 nm, (c) 56.4 nm y (d) 174.4 nm. (Tomado de [7]). ....	67
Figura 7.3. Coeficientes de transmisión obtenidos por diferencias finitas para una partícula esférica de radio $R = 200 \text{ nm}$ con una distancia de truncamiento de (a) 12.6 nm, (b) 28.3 nm, (c) 56.4 nm y (d) 174.4 nm. ....	68
Figura 7.4. Coeficientes de transmisión obtenidos por Frobenius para una partícula esférica de radio $R = 200 \text{ nm}$ con una distancia de truncamiento de (a) 12.6 nm, (b) 28.3 nm, (c) 56.4 nm y (d) 174.4 nm. ....	69
Figura 7.5. Coeficientes de transmisión obtenidos por diferencias finitas para una partícula esférica de radio $R = 200 \text{ nm}$ con una distancia de truncamiento de (a) 12.6 nm, (b) 28.3 nm, (c) 56.4 nm y (d) 174.4 nm. La escala horizontal es, en este caso, logarítmica. ....	70
Figura 7.6. Ubicación de los cuatro primeros picos de la curva de transmisión para una esfera de 200 nm de radio. El primer pico es la curva de abajo, y el último pico es la curva de arriba. ....	71
Figura 7.7. Posición de los primeros cinco picos de transmisión en función del radio de la partícula. El diámetro de los contactos es la mitad del radio de la partícula. ....	72
Figura 7.8. Relación de dispersión de una partícula esférica de radio 200 nm obtenida por medio de aproximación periódica. El diámetro del contacto es (a) 10 nm y (b) 200 nm. ....	73
Figura 7.9. Relación de dispersión de una partícula esférica de radio 200 nm obtenida por medio de aproximación periódica. El diámetro del contacto es 100 nm. La cantidad de puntos discretos en el dominio es 10000 (a) y 50000 (b). ....	74
Figura 7.10. Canal esférico al que se le agregaron secciones rectas para obtener una mejor aproximación de la relación de dispersión. ....	74
Figura 7.11. Relación de dispersión de una partícula esférica. ....	75
Figura 8.1. Relación de dispersión para varios modos de propagación en un alambre de sección transversal cuadrada de $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$ de GaAs. Las curvas con círculos, cuadrados, triángulos y diamantes corresponden respectivamente a los modos longitudinal, transversal, torsional y cortante. Tomado de [5]. ....	79
Figura 8.2. Contribución a la conductancia térmica por el modo longitudinal para varios tipos de canales: alambre catenoidal con $\lambda = 4.6 \mu\text{m}$ (punto–raya), alambre catenoidal con $\lambda = 0.86 \mu\text{m}$ (raya–raya) y alambre recto con contactos cónicos (círculos). Tomado de [5]. ....	79
Figura 8.3. Contribución a la conductancia térmica por el modo longitudinal para un canal catenoidal con $\lambda = 0.86 \mu\text{m}$ en función de la temperatura media del sistema. ....	80
Figura 8.4. Contribución a la conductancia térmica por el modo longitudinal para un canal catenoidal con $\lambda = 4.6 \mu\text{m}$ en función de la temperatura media del sistema. ....	81
Figura 8.5. Contribución a la conductancia térmica por el modo longitudinal para un canal catenoidal con distintos valores del parámetro $\lambda$ . ....	82
Figura 8.6. Contribución a la conductancia térmica por el modo longitudinal para un canal recto de $1 \mu\text{m}$ de largo con contactos cónicos de un ángulo de apertura $\pi/6$ . El área menor y el área mayor del canal guardan una relación de 40. ....	83

Figura 8.7. Contribución a la conductancia térmica por el modo longitudinal para un canal recto de distintas longitudes con contactos cónicos de un ángulo de apertura $\pi/6$ . El área menor y el área mayor del canal guardan una relación de 40.....	84
Figura 8.8. Contribución a la conductancia térmica por el modo longitudinal para una partícula esférica de GaAs que tiene un diámetro de 400 nm, para diámetros del área de contacto con los reservorios de 12.6, 28.3, 56.4 y 174.4 nm.....	85
Figura 8.9. (a) Conductividad térmica en función de la temperatura para esferas de distintos tamaños (El radio es dos veces mayor que el diámetro del área de contacto). (b) Temperatura donde se presenta el mínimo de conductividad en función del radio de la partícula. ....	86
Figura 8.10. Contribución del modo longitudinal a la conductividad térmica en una partícula de látex de radio 200 nm. Se están teniendo en cuenta distintos diámetros de la superficie de contacto con los reservorios. La escala horizontal es (a) logarítmica y (b) lineal.....	87
Figura 8.11. Conductancia térmica normalizada de una esfera de látex en función de la temperatura media del sistema [7].....	88

# 1 INTRODUCCIÓN

Los sistemas mesoscópicos en los cuales el fenómeno de transporte ocurren cuando las longitudes de onda de los portadores son comparables o incluso mayores que las dimensiones de las estructuras por las cuales ellos se trasladan. La cuantización de la conductividad térmica que se presenta a estas escalas cambia la forma en se venía estudiando los procesos de transferencia de calor. La importancia de del estudio aquí desarrollado radica en que permite avanzar el conocimiento para tener un mayor control sobre la forma que el calor se transferido a bajas escalas.

Las aplicaciones en sensores pueden ser amplias. Además, mejores técnicas de disipación térmica pueden contribuir a solucionar el problema que suscita las mayores escalas de integración logradas en la fabricación de circuitos integrado haciendo que la generación térmica alcance un nivel crítico de importancia.

En el presente trabajo se estudia la transferencia térmica a escalas mesoscópicas usando medios de transmisión dieléctricos restringiendo la amplitud del estudio a canales unidimensionales en modo de propagación longitudinales.

Se proponen métodos numéricos para el estudio teórico de la transferencia de calor sobre estructuras estudiadas por otros autores anteriormente [5], [7]. Con este método se establecen las condiciones geométricas sobre los canales para obtener un determinado comportamiento en cuanto al transporte de calor.

## 2 DESCRIPCIÓN DEL PROBLEMA

Considérese la situación de la Figura 2.1, en la cual se tienen dos reservorios térmicos conectados por un nanoalambre. Todo el sistema está compuesto de un mismo cristal dieléctrico e isotrópico, lo cual obliga a que el transporte energético por el alambre se realice por medio de la transmisión de fonones, evitando así la inclusión en el análisis del transporte por medio de electrones. Además, asegura que las propiedades inerciales y elásticas son las mismas para todo el sistema.

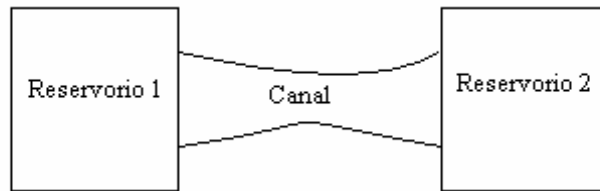


Figura 2.1. Reservorios energéticos conectados por una estructura mesoscópica por la cual se realizará intercambio de energía.

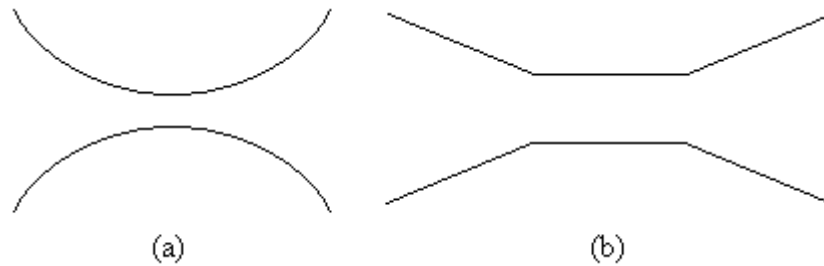


Figura 2.2. Estructuras estudiadas por Rego [5].

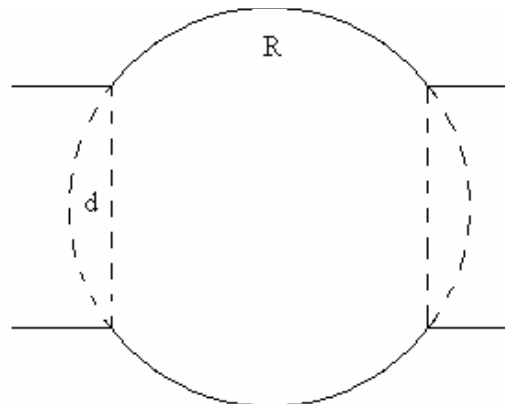


Figura 2.3. Estructura esférica truncada analizada por Ávila [7].

El sistema se encuentra a una temperatura del orden de unos cuantos Kelvin de tal manera que la longitud de onda de un fonón cruzando el canal es mucho más grande que el parámetro del cristal. Esto permite usar un modelo elástico continuo [5]. Dicho de otra



manera, el vector de onda dominante del fonón debe ser menor que cierto valor que depende del parámetro cristalino.

Es importante mencionar que el sistema se encuentra en equilibrio, lo cual significa que la transmisión de fonones de un reservorio al otro no cambia la temperatura de los mismos. Además se están despreciando otros mecanismos de transporte como tunelamiento y radiación entre los reservorios.

Se quiere estudiar la conductividad térmica entre los reservorios teniendo en cuenta geometrías no uniformes del canal. En particular se quiere verificar los resultados obtenidos por Rego [5] para canales con forma de catenaria y cono (Figura 2.2). Adicionalmente, se quiere realizar un estimativo preliminar de la conductividad térmica a través de partículas esféricas (Figura 2.3) para las cuales, Ávila [7] obtuvo los coeficientes de transmisión usando el método de Frobenius.

Asumiendo que el sistema es casi 1D (sección transversal pequeña), los modos transmitidos están bien descritos por los modos longitudinales [5]. Por lo tanto, en el presente trabajo se obtendrá la contribución del modo longitudinal a la conductividad térmica.

# 3 CONDUCTIVIDAD TÉRMICA A ESCALAS MESOSCÓPICAS

## 3.1 Escala Mesoscópica

El concepto de dualidad partícula-onda que introduce la mecánica cuántica implica que los portadores de energía pueden ser estudiados usando, o bien estadísticas de partícula; o bien de onda [3]. Ahora, las propiedades ondulatorias de la materia toman gran importancia cuando se analizan los procesos de transporte de energía en nanoestructuras.

En este trabajo, el interés radica en el transporte térmico que puede ser realizado a través de los portadores de energía. El transporte térmico puede ser analizado a cualquier escala métrica. A escala macroscópica, es bien sabido que la conducción de calor depende del gradiente de temperatura que exista en el medio conductor. A muy bajas escalas donde la mecánica cuántica es dominante, el transporte de calor está dado por las estadísticas de cada una de las partículas portadoras. Adicionalmente, a escala macroscópica el medio se modela como un dominio continuo, por otro lado a escala cuántica, el medio se modela como un medio discreto donde se tiene en cuenta el efecto de los portadores de energía en cada uno de los átomos que componen el sistema.

Existe un rango dimensional en el cual se pueden usar las estadísticas cuánticas para cada una de las partículas que se pueden propagar por un sistema por medio de un modelado en un dominio continuo. Este rango de dimensiones se conoce como **escala mesoscópica**.

A escala mesoscópica, las dimensiones de la estructura son menores que el camino medio libre de los portadores de energía (fonones, electrones, fotones, etc.) que transitan a través de ellas. Esto implica que el sistema puede ser modelado como un medio continuo.

La primera restricción que impone un régimen balístico también implica que el sistema debe estar a **bajas temperaturas**. Esta afirmación es explicada por la relación inversamente proporcional que existe entre el camino medio libre de las partículas y la temperatura a la cual se encuentra el sistema. Así pues, para que el camino medio libre de los portadores sea mayor que la longitud característica, la temperatura del sistema debe ser menor de un valor límite [16].

## 3.2 Formalismo de Landauer

A escalas mesoscópicas, en las cuales se tiene un régimen balístico, el transporte energético puede ser descrito por medio de la aproximación de Landauer [5],[7],[11]. En esta aproximación el flujo de energía (eléctrica, térmica) a través de una estructura puede ser expresada en términos de la probabilidad de que el portador pueda ser transmitido a

través de ella [11]. Inicialmente, este formalismo fue propuesto para el transporte de energía por electrones, el concepto básico del formalismo de Landauer para electrones es que la conductancia eléctrica está dada por [3]

$$G = g_0 \text{Tr}[t^* t] \quad (3.1)$$

donde  $g_0 = e^2/h$  es la unidad fundamental (cuanto) de conductancia y  $t$  es la matriz de transmisión que comprende cada uno de los modos de propagación que la partícula puede tener. Para el caso de un alambre unidimensional en el cual todos los modos de propagación tienen la misma probabilidad de transmisión, se tiene que la conductancia es [3],[11]

$$G = 2g_0 MT \quad (3.2)$$

donde  $M$  es la cantidad de modos de propagación con energías menores al nivel de Fermi de los electrones y  $T$  la probabilidad de transmisión de los electrones en cada uno de los modos. La Ecuación (3.2) implica que la conductividad eléctrica está cuantizada presentando pasos bien definidos a medida que la energía de los electrones supera la energía de Fermi de cada uno de los modos de propagación [3],[11].

Aunque este formalismo fue propuesto inicialmente para fermiones, también se ha demostrado que puede usado para bosones [2][3][5] —por ejemplo, fonones—. Incluso se ha confirmado experimentalmente [10] algunas de las predicciones hechas sobre la conductividad térmica por transporte de fonones en estructuras mesoscópicas mediante el formalismo de Landauer [5].

Así pues, considerando un sistema compuesto por dos reservorios energéticos a distintas temperaturas  $T_1$  y  $T_2$  conectados por una estructura mesoscópica (Figura 2.1), el flujo energético del reservorio 1 al reservorio 2 está dado por [2]

$$q_{1 \rightarrow 2} = \sum_{\alpha} \left[ \frac{1}{V_1} \sum_k v_z E \tau_{12} f(E, T_1) \right] \quad (3.3)$$

donde  $E$  es la energía del portador,  $v_z$  es la velocidad del portador,  $\tau_{12}$  es la probabilidad de transmisión del reservorio 1 al reservorio 2,  $\alpha$  es cada uno de los modos de propagación del portador,  $k$  es el vector de onda del portador y  $f$  es la estadística de ocupación de estados del portador. Según (3.3), cada uno de los modos de propagación contribuye de manera independiente a la conductividad térmica, de ahí el efecto de cuantización.

### 3.3 Conductividad Térmica en el Formalismo de Landauer

En sistemas mesoscópicos descritos por la situación de la Figura 2.1, la Ec. (3.3) es válida tanto para electrones como para fonones. Para obtener el flujo térmico total entre los dos reservorios se debe restar el flujo que hay del reservorio 2 al 1. Ahora, suponiendo, que la diferencia de temperatura entre los reservorios es pequeña, entonces el flujo neto puede ser expresado como [2]

$$q = (T_1 - T_2) \sum_{\alpha} \int_{\Omega \geq 2\pi} \left[ \int v_1 \cos \theta E \frac{\partial f(E, T)}{\partial T} \tau_{12}(E, \phi, \theta) D_1(E) dE / 4\pi \right] d\Omega \quad (3.4)$$

$$q = K\Delta T$$

donde  $K$  es la conductividad térmica,  $\Omega$  es un ángulo sólido y  $T$  es la temperatura promedio. Nótese que esta ecuación es válida para cualquier tipo de portador.

Ahora suponiendo un sistema 1D, la Ec. (3.4) puede ser re-escrita en términos del vector de onda de la siguiente manera [5],

$$q = \sum_{\alpha} \int_0^{\infty} \hbar \omega_{\alpha}(k) v_{\alpha}(k) [n_1(\omega_{\alpha}(k)) - n_2(\omega_{\alpha}(k))] \Gamma_{\alpha}(k) \frac{dk}{2\pi} \quad (3.5)$$

donde  $\hbar$  es la constante de Dirac,  $\omega_{\alpha}(k)$  es la relación de dispersión de los fonones para el modo  $\alpha$ ,  $v_{\alpha}(k)$  es la velocidad de grupo para el modo  $\alpha$ ,  $n_i(\omega)$  es la distribución térmica de portadores en cada reservorio, y  $\Gamma_{\alpha}(k)$  es el coeficiente de transmisión de fonones a través del canal.

La distribución de portadores  $n$  usada en la Ec. (3.5) depende del tipo de partícula. Asumiendo equilibrio térmico; para el caso de Bosones, se debe usar la distribución de Planck —que es un caso particular de la distribución de Bose–Einstein—, la cual está dada por

$$n(\omega) = \frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1} \quad (3.6)$$

donde  $k_B$  es la constante de Boltzmann y  $\omega$  es la frecuencia angular del fonón. Re-escribiendo la Ec. (3.5) en términos de la frecuencia angular se obtiene que

$$q = \frac{1}{2\pi} \sum_{\alpha} \int_{\omega_{\alpha}(0)}^{\infty} \hbar \omega [n_1(\omega) - n_2(\omega)] \Gamma_{\alpha}(\omega) d\omega \quad (3.7)$$

donde  $\omega_\alpha(0)$  es la frecuencia de corte para el modo de propagación  $\alpha$ . Nótese que se está asumiendo que el canal permite que cada uno de los modos se pueda propagar a frecuencias arbitrariamente grandes. Finalmente, se tiene que la conductancia térmica está dada por [10]:

$$\kappa = \frac{q}{\Delta T} = \frac{1}{2\pi} \sum_{\alpha} \int_{\omega_\alpha(0)}^{\infty} \hbar\omega \left[ \frac{n_1(\omega) - n_2(\omega)}{\Delta T} \right] \Gamma_{\alpha}(\omega) d\omega \quad (3.8)$$

donde  $\Delta T = T_1 - T_2$  es la diferencia de temperatura entre los dos reservorios térmicos. Es importante notar que la conductividad térmica **no depende de la forma que tenga la relación de dispersión sino de su frecuencia de corte.**

Con el ánimo de simplificar la Ec. (3.8). Cuando la diferencia de temperatura entre los dos reservorios es bastante pequeña, la diferencia en la distribución térmica de fonones entre los dos reservorios es

$$n_1(\omega) - n_2(\omega) = \frac{\partial n}{\partial T} \Delta T = \frac{\hbar\omega}{k_B T^2} \frac{\exp(\hbar\omega/k_B T)}{(\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1)^2} \Delta T \quad (3.9)$$

donde  $T = (T_1 + T_2)/2$  es la temperatura promedio del sistema. Reemplazando este resultado en la Ec. (3.8) se obtiene lo siguiente:

$$\kappa = \frac{k_B}{2\pi} \sum_{\alpha} \int_{\omega_\alpha(0)}^{\infty} \left( \frac{\hbar\omega}{k_B T} \right)^2 \frac{\exp(\hbar\omega/k_B T)}{(\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1)^2} \Gamma_{\alpha}(\omega) d\omega \quad (3.10)$$

La Ecuación (3.10) sólo es válida cuando la diferencia de temperatura entre los reservorios es bastante pequeña.

### 3.4 Cuantización de la Conductividad Térmica

Asumiendo el caso ideal (adiabático) en que la probabilidad de transmisión para cada uno de los modos es igual a la unidad, entonces la conductividad térmica puede ser expresada así:

$$\kappa = \frac{k_B^2 T}{h} \sum_{\alpha} \int_{x_{\alpha}(0)}^{\infty} \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2} dx, \quad x = \frac{\hbar\omega}{k_B T} \quad (3.11)$$

Ahora, si en la Ec. (3.11) se asume que cada uno de los modos de propagación tiene frecuencia de corte igual a cero. Entonces se tiene que la conductividad para cada modo de propagación es

$$\kappa = \frac{k_B^2 T}{h} \int_0^\infty \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2} dx \quad (3.12)$$

Al evaluar la integral en la anterior expresión se tiene que es igual a  $\pi^2/3$ , por lo tanto, finalmente se tiene que la conductividad térmica por modo es

$$\kappa = \frac{\pi^2 k_B^2 T}{3h} \quad (3.13)$$

Esto se conoce como el cuanto fundamental de conductancia térmica. Este es el valor máximo que puede tener la conductancia para cada modo de transmisión. Este tipo de cuantización también es observada para conductancias eléctricas, aún cuando la estadísticas de los electrones y fonones son distintas.

### 3.5 Fonones

Un fonón es un modo cuantizado de vibración al interior de una estructura cristalina [13]. En otras palabras, un fonón es una onda mecánica que se propaga a través de la materia. Dado que este tipo de oscilaciones están cuantizadas, también presentan comportamiento corpuscular. A nivel atómico, los fonones son emitidos y absorbidos por las vibraciones de los átomos en los puntos de la red de un sólido, de la misma manera como los fotones son emitidos y absorbidos por las vibraciones de los átomos en la pared de una cavidad.

Para aproximarse a la idea de un fonón, hay que pensar en los modos de vibración de una estructura. Cuando todos los elementos de un sistema oscilan a la misma frecuencia, se tiene un único modo de vibración, el cual tiene asociado un valor específico de energía; esto es precisamente lo que da su cuantización. Al igual que los electrones, la energía asociada a los fonones se cuantiza cuando se consideran las restricciones que impone el medio por el cual se propagan. La energía discreta que puede ser transferida a través de un fonón está dado por la frecuencia acústica de oscilación que tenga, la cual es

$$\begin{aligned} E &= h\nu \\ E &= \hbar\omega \end{aligned} \quad (3.14)$$

donde  $\nu$  es la frecuencia acústica de oscilación,  $h$  la constante de Planck,  $\omega$  la frecuencia angular de oscilación y  $\hbar$  la constante de Dirac.

La importancia del estudio de fonones radica en el papel que juega en la transmisión de calor. Para el caso de conductores, casi todo el calor es transportado por electrones, pero en el caso de semiconductores y aislantes, el transporte se hace en su mayoría por fonones [2]. Esto se debe a que la densidad de electrones es mucho menor en los dos

últimos tipos de material. Dado que los fonones tiene spin unitario, es un bosón y le aplica la distribución de Bose-Einstein (Ec. (3.6)).

### 3.6 Ecuación Característica de Ondas Mecánicas en Cuerpo Rígidos

Dentro de las condiciones especificadas en la Sección 3.1, en este trabajo se analizará la propagación de fonones en un medio continuo. Esto quiere decir que se estudiará la propagación de ondas mecánicas a través de canales dieléctricos entre dos reservorios térmicos a distintas temperaturas.

Asumiendo que las oscilaciones que se propagan a lo largo del canal térmico están dentro del rango elástico lineal, las propiedades de movimiento y comportamiento de la estructura están dadas por [14]

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \tau_{i,j} + \rho f_i \quad (3.15)$$

$$\tau_{i,j} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (3.16)$$

donde  $\rho$  es la densidad del medio,  $u_i$  es el desplazamiento en la dirección  $i$ ,  $\tau_{i,j}$  es el esfuerzo,  $f_i$  es la fuerza de cuerpo,  $C_{ijk}$  es la matriz de elasticidad y  $\varepsilon_{kl}$  es el strain.

#### 3.6.1 Ondas Longitudinales

Las Ecuaciones (3.15) y (3.16) describen el movimiento de cada punto de la estructura en 3 dimensiones. Esto quiere decir que tiene en cuenta todos los modos de propagación que se pueden dar en el canal. En la Sección 2, se restringió el objetivo de este estudio a ondas longitudinales. De acuerdo con la teoría de elasticidad [5], la propagación de ondas longitudinales en un medio continuo con sección transversal constante está dada por

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{v_l^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \quad (3.17)$$

donde  $u$  es la magnitud de la oscilación longitudinal en cualquier punto del alambre, y  $v_l$  es la velocidad de propagación longitudinal de la onda. Nótese que ésta es una ecuación de onda.

Cuando el área transversal del alambre presenta variaciones respecto a la coordenada longitudinal ( $x$ ), la propagación de ondas longitudinales está dada por [6]

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{A'(x)}{A(x)} \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{v_l^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \quad (3.18)$$

donde  $A(x)$  es el área transversal del alambre y la velocidad longitudinal de propagación es  $v_l = \sqrt{E/\rho}$ , donde  $E$  es el módulo de Young y  $\rho$  es la densidad del material dieléctrico del nanoalambre [6].



## 4 CÁLCULO DEL COEFICIENTE DE TRANSMISIÓN

En trabajos anteriores, el problema descrito en la Sección 2 fue solucionado analíticamente [5], [8] y por medio del método de Frobenius [7]. Las soluciones de tipo analítico se basan en el supuesto que exista una solución analítica para la ecuación diferencial (3.18) dada una función arbitraria del área  $A(x)$ , esto no siempre es posible. Por otro lado, para el método de Frobenius se reportó problemas de convergencia para longitudes de onda muy bajas [7].

De acuerdo a lo anterior, en este trabajo se propone usar el método de diferencias finitas para solucionar la ecuación diferencial dada por la Ec. (3.18). Con este método se busca inicialmente comprobar los resultados obtenidos previamente [5],[8],[7] y explorar estructuras adicionales que no hayan sido contempladas. Adicionalmente, se espera superar los problemas surgidos en el uso de los métodos ya nombrados.

### 4.1 Ecuación Independiente del Tiempo

La ecuación diferencial parcial (3.18) involucra el comportamiento de las oscilaciones en tiempo y espacio. En este trabajo se realizará un análisis en equilibrio térmico y en estado estable, entonces sólo es necesario realizar un análisis independiente del tiempo. Así pues, asumiendo que la amplitud de las oscilaciones  $u(x,t)$  es el producto de una función en el espacio  $u(x)$  con una función en el tiempo  $\phi(t)$ , se puede usar el método de separación de variables para obtener una ecuación diferencial ordinaria en el espacio.

Tomando  $u(x,t) = u(x)\phi(t)$ , la Ec. (3.18) se transforma en

$$\phi \frac{d^2 u}{dx^2} + \frac{A'(x)}{A(x)} \phi \frac{du}{dx} = \frac{1}{v_l^2} u \frac{d^2 \phi}{dt^2}. \quad (4.1)$$

Ahora, dividiendo (4.1) entre  $u(x,t)$  e introduciendo la constante de separación  $\beta$  se obtiene

$$\frac{1}{u} \frac{d^2 u}{dx^2} + \frac{A'(x)}{A(x)} \frac{1}{u} \frac{du}{dx} = \frac{1}{v_l^2} \frac{1}{\phi} \frac{d^2 \phi}{dt^2} = -\beta^2. \quad (4.2)$$

En la Ec. (4.2), la constante de separación introducida tiene unidades de [rad/s] es decir, puede ser considerada como el número de onda; sin embargo esto no es necesariamente cierto. Por lo tanto, se le llamará *vector de onda generalizado*. En la Sección 4.2 se analizará un poco mejor la característica de esta constante.

Como los dos primeros miembros de la igualdad en la Ec. (4.2) son iguales para cualquier  $x$  y  $t$ , entonces deben ser constantes e iguales a  $-\beta^2$ . De la Ec. (4.2) se derivan dos ecuaciones diferenciales ordinarias e independientes, una en el espacio y otra en el tiempo:

$$\frac{d^2 \phi}{dt^2} + \beta^2 v_l^2 \phi = 0 \quad (4.3)$$

$$\frac{d^2 u}{dx^2} + \frac{A'(x)}{A(x)} \frac{du}{dx} + \beta^2 u = 0. \quad (4.4)$$

La ecuación (4.4) será usada para obtener el coeficiente de transmisión en estado estable de fonones bajo el modo longitudinal para distintas longitudes de onda.

## 4.2 Variable de Separación

Antes de discutir sobre la variable de separación, es preciso justificar la validez del método de separación de variables usado en la Sección 4.1. De manera general, se tiene que si es posible mostrar que la ecuación diferencial puede ser separada en cada una de las variables, entonces el método es válido [9].

Ahora, considérese la siguiente ecuación de onda generalizada en una sola dimensión [12]:

$$a(x) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b(x) \frac{\partial u}{\partial x} + c(x)u = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \beta \frac{\partial u}{\partial t} \quad (4.5)$$

donde  $a(x)$ ,  $b(x)$ ,  $c(x)$  son funciones continuas a lo largo de un intervalo cerrado  $I:[x_1, x_2]$ ,  $\alpha$  y  $\beta$  son constantes.

Suponiendo que  $u(x, t) = X(x)T(t)$ , el método de separación de variables conduce a las siguientes ecuaciones diferenciales ordinarias:

$$a(x)X'' + b(x)X' + c(x)X + \lambda X = 0 \quad (4.6)$$

$$\alpha T'' + \beta T' + \lambda T = 0. \quad (4.7)$$

donde  $\lambda$  es la constante de separación.

Si  $a(x)$  es positiva sobre el intervalo  $I$ , entonces, es posible encontrar una función positiva  $\rho(x)$  que al multiplicarla por la Ec. (4.6) haga que el operador

$$\rho a \frac{d^2}{dx^2} + \rho b \frac{d}{dx} + \rho c = 0 \quad (4.8)$$

sea auto-adjunto<sup>1</sup>, entonces, es posible expresar la solución de la ecuación diferencial como una combinación lineal de las funciones propias de las Ec. (4.6) y (4.7). La convergencia de esta combinación lineal está asegurada, sin embargo, puede verse afectada por las condiciones de frontera [12].

Si la Ec. (4.4) es multiplicada por  $A(x)$  (Nótese que el área transversal es siempre positiva) se tiene:

$$A(x) \frac{d^2 u}{dx^2} + A'(x) \frac{du}{dx} + A(x) \beta^2 u = 0. \quad (4.9)$$

El nuevo operador es auto-adjunto y puede ser re-escrito así:

$$\frac{d}{dx} \left( \frac{du}{dx} A(x) \right) + A(x) \beta^2 u = 0. \quad (4.10)$$

Dado que la Ec. (4.4) puede ser convertida en un operador auto-adjunto, entonces, la solución de la ecuación inicial puede ser expresada en términos de las funciones propias. Lo cual implica que el método de separación de variables es válido.

Dado que se aseguró la validez del método de separación de variables, entonces esto quiere decir que la constante de separación usada viene a representar los valores propios de la ecuación diferencial. Re-escribiendo la Ec. (4.6):

$$a(x)X'' + b(x)X' + c(x)X = -\lambda X \quad (4.11)$$

se tiene que la constante de separación representa justamente un valor propio dependiendo de las condiciones de frontera impuestas.

La constante de separación debe ser escogida de manera conveniente, por ejemplo, todas las siguientes opciones son válidas, pero sólo una puede dar sentido físico al problema que está analizando:

---

<sup>1</sup> Para que el operador  $L = p_0 \frac{d^2}{dx^2} + p_1 \frac{d}{dx} + p_2$  sea auto-adjunto, se debe cumplir que  $p_0'(x) = p_1(x)$ .

- $\beta = k$
- $\beta = k + D$
- $\beta^2 = k^2 + D$
- $\beta^2 = k^2 + D^2$

En las anteriores opciones,  $D$  es un número arbitrario que puede ser negativo o positivo. Es claro que el valor de  $D$ , no afecta la validez del método de separación de variables, pues está presente la constante  $k$  cuyo valor depende de las condiciones de frontera impuestas. Adicionalmente, la suma de dos constantes es otra constante.

Supóngase que para ciertas condiciones de frontera, la constante de separación tiene un valor de 5, es decir,  $\beta = 5$ . Por otro lado, supóngase que  $D$  se hace igual a 3 de manera arbitraria. Además se asume que  $\beta^2 = k^2 + D^2$ . Entonces, el valor de  $k$  que mantiene la relación de manera adecuada es 4, de tal manera que  $4^2 + 3^2 = 5^2$ . Este ejemplo ilustra que la constante de separación puede ser expresada como la suma de otras dos constantes.

En la Sección 4.1, se dijo que la constante de separación introducida no corresponde exactamente al vector de onda. Como se acaba de ver, este número de onda puede tener un desfase arbitrario, e igual ser válida para el método. Esta situación debe ser tomada en cuenta en el desarrollo de este trabajo.

### 4.3 Esquema General de Solución

Teniendo en cuenta la Ec. (4.4), se tiene el esquema general de la Figura 4.1, en el cual, una onda de amplitud  $A$  proviene de un canal de área constante e incide en un canal cuya área transversal está dada por  $A(x)$ . En este punto se produce una onda reflejada de amplitud  $B$ . Al otro lado del canal, una onda de amplitud  $C$  es transmitida al reservorio 2. En este caso se está asumiendo que los reservorios a ambos lados del canal son infinitamente largos de tal manera que se desprecian las ondas reflejadas en ellos (En otras palabras elimina la necesidad de incluir una onda incidente por el lado izquierdo del canal de la Figura 4.1). Adicionalmente, se está asumiendo que el área transversal es continua en todo el dominio.

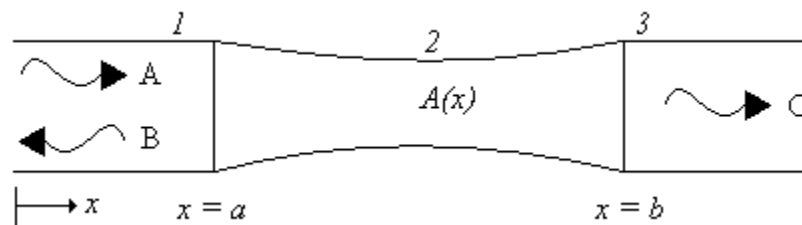


Figura 4.1. Esquema general de transmisión y reflexión de fonones en un nanoalambre de área variable.

En las regiones 1 y 3 (Figura 4.1) el área transversal es constante, por lo tanto la ecuación diferencial que rige es la dada por la Ec. (3.17). Las soluciones para esta ecuación son bien conocidas y están dadas por:

$$u_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (4.12)$$

$$u_3(x) = Ce^{ikx} \quad (4.13)$$

donde el primer término en la Ec. (4.12) corresponde a la onda que incide en el canal; mientras que el segundo término corresponde a la onda que se refleja hacia el reservorio 1. En la Ec. (4.13) sólo existe un término de propagación hacia la derecha, por lo que se está asumiendo que el reservorio 2 es infinitamente largo y no se presentan reflexiones en su frontera derecha.

Dado que el material es el mismo para toda la estructura, la velocidad de propagación de las ondas en los reservorios 1 y 2 son iguales, por lo tanto, los coeficientes de reflexión y transmisión del canal térmico están dados por:

$$\Gamma = \left| \frac{C}{A} \right|^2 \quad (4.14)$$

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2. \quad (4.15)$$

Estos coeficientes deben cumplir el principio de conservación de la energía, esto es que  $\Gamma + R = 1$ .

En la región 2, las ondas que se propagan están regidas por la Ec. (3.18), la cual ya tiene en cuenta los efectos inducidos por la variación del área transversal. Para este caso, no es siempre posible obtener soluciones analíticas. Esto depende de la función que describa la variación del área transversal  $A(x)$ . Esta situación impone la necesidad de usar métodos numéricos que permitan obtener el coeficiente de transmisión a través del canal. En las siguientes páginas se analizarán dos métodos que pueden ser usados para tal caso: Método de Diferencias Finitas y el Método de Frobenius.

#### 4.3.1.1 Ecuaciones de Continuidad

Las condiciones de continuidad asociadas a la ecuación diferencial dada por (3.18) exigen que la velocidad de las ondas  $\dot{u}(x,t)$  y el esfuerzo axial  $\sigma(x,t) = A(x)E\hat{c}u/\hat{c}x$  a lo largo del canal sean continuos [6]. Ahora, considerando una situación de estado estable, estas ecuaciones de continuidad se transforman en:

$$\lim_{x \rightarrow x_0} u(x) = u(x_0) \quad (4.16)$$

$$\lim_{x \rightarrow x_0} EA(x) \frac{du}{dx} = EA(x_0) \frac{du}{dx} \Big|_{x=x_0} \quad (4.17)$$

La condición de continuidad dada por (4.17) impone una consideración adicional sobre el coeficiente de transmisión. Por conservación de la energía, cuando el área de entrada al canal es distinta al área de salida, las oscilaciones desplazan más o menos cantidad de materia, por lo tanto es necesario incluir un factor de corrección sobre el coeficiente de transmisión dado por la expresión (4.18) el cual simplemente consiste en la relación entre el área de entrada  $A_1$  y el área de salida  $A_2$ :

$$T = \frac{A_2}{A_1} \left| \frac{C}{A} \right|^2 \quad (4.18)$$

Es importante aclarar que variaciones bruscas en el área transversal del canal pueden producir efectos en 2 y 3 dimensiones [6], los cuales no son el objetivo del presente trabajo.

## 4.4 Método de Diferencias Finitas

### 4.4.1 Aproximación de las Derivadas de 1<sup>er</sup> y 2<sup>do</sup> orden.

Al igual que el método de elementos finitos, el de diferencias finitas es ampliamente usado en la solución de ecuaciones diferenciales parciales. Su principal ventaja radica en que es fácil de implementar para casi cualquier problema con restricciones en las fronteras. Básicamente, este método consiste en discretizar el espacio de solución en una serie finita de puntos (o nodos) para los cuales se construyen ecuaciones algebraicas que aproximan la ecuación diferencial continua que se busca resolver. Así pues se cambia un problema continuo por otro discreto en el cual las ecuaciones obtenidas pueden ser resueltas ya sea por métodos lineales o no. Naturalmente la exactitud de la solución obtenida depende de la cantidad de nodos definida en el dominio de solución.

Este método se basa en la aproximación de las derivadas de la función de interés en cada nodo  $i$  a partir del valor de la función en cada uno de sus vecinos. Así pues, teniendo en cuenta que la derivada de una función  $u(x)$  en el punto  $x_i$  puede ser aproximada por una recta secante que corte la curva en una vecindad bastante cercana, se tiene que la primera derivada puede ser aproximada de alguna de las siguientes formas [1]:

$$\frac{du}{dx} \Big|_{x_i} \approx \frac{u(x_{i+1}) - u(x_{i-1}))}{x_{i+1} - x_{i-1}} \quad (4.19)$$

$$\left. \frac{du}{dx} \right|_{x_i} \approx \frac{u(x_{i+1}) - u(x_{i-1}))}{2h} \quad (4.20)$$

donde  $h$  es la separación entre puntos consecutivos —si todos los puntos están equiespaciados—. La ecuación (4.19) representa la pendiente de la recta secante que corta la función  $u(x)$  en los puntos  $x_{i+1}$  y  $x_{i-1}$  la cual permite obtener una aproximación aceptable de la primera derivada en el punto  $x_i$ .

Ahora suponiendo que la separación entre puntos consecutivos  $h$  es siempre constante, para obtener la aproximación de la segunda derivada en  $x_i$  simplemente se recurre de nuevo a la ecuación (4.19) así:

$$\begin{aligned} \left. \frac{d^2u}{dx^2} \right|_{x_i} &\approx \frac{u'(x_{i+1/2}) - u'(x_{i-1/2})}{x_{i+1/2} - x_{i-1/2}} \\ \left. \frac{d^2u}{dx^2} \right|_{x_i} &\approx \frac{\frac{u(x_{i+1}) - u(x_i)}{x_{i+1} - x_i} - \frac{u(x_i) - u(x_{i-1}))}{x_i - x_{i-1}}}{x_{i+1/2} - x_{i-1/2}} \\ \left. \frac{d^2u}{dx^2} \right|_{x_i} &\approx \frac{\frac{u(x_{i+1}) - u(x_i)}{h} - \frac{u(x_i) - u(x_{i-1}))}{h}}{h} \\ \left. \frac{d^2u}{dx^2} \right|_{x_i} &\approx \frac{u(x_{i+1}) - 2u(x_i) + u(x_{i-1}))}{h^2} \end{aligned} \quad (4.21)$$

Así las cosas, las ecuaciones (4.20) y (4.21) permiten resolver ecuaciones diferenciales ordinarias de segundo orden bajo un dominio con condiciones de frontera arbitrarias.

## 4.4.2 Condiciones de Frontera

Las condiciones de frontera definen las características del comportamiento de una ecuación diferencial en un dominio dado. Existen dos tipos de condiciones de frontera que se usan principalmente para la solución de este tipo de problemas. Estas son, la condición de frontera de Primer Tipo (o condiciones de frontera de Dirichlet) y las de Segundo Tipo (o condiciones de frontera de Neumann) [1].

### 4.4.2.1 Primer Tipo

Las condiciones de frontera del primer tipo especifican el valor de la función  $u(x)$  en la frontera [1]. Esto es [2]:

$$u(x)|_{\partial} = f(r) \quad (4.22)$$

#### 4.4.2.2 Segundo Tipo

Las condiciones de frontera del segundo tipo especifican el comportamiento de la primera derivada de la función en la dirección normal de una frontera [1]. Esto es [2]:

$$\left. \frac{\partial u(x)}{\partial n} \right|_{\partial} = \hat{n} \nabla u|_{\partial} = f(r) \quad (4.23)$$

#### 4.4.2.3 Tipo Compuesto

En algunos casos —como lo es el de interés—, las condiciones de frontera pueden ser una combinación las de Newmann y Dirichlet. Por ejemplo, supóngase que se tiene una función arbitraria que relaciona el valor de una función en la frontera del dominio con el valor de su derivada así:

$$u'(x_0) = f(u(x_0)) \quad (4.24)$$

### 4.4.3 Cálculo del Coeficiente de Transmisión

#### 4.4.3.1 Ecuación Algebraica

Teniendo en cuenta la Ec. (4.4), las Ec. de continuidad (4.16) y (4.17) se construye un método de diferencias finitas para solucionar la situación descrita en la Sección 4.3. Primero se obtiene la ecuación algebraica común para un nodo interior, reemplazando las Ec. (4.20) y (4.21) en la Ec. (4.4):

$$\begin{aligned} \frac{u(x_{i+1}) - 2u(x_i) + u(x_{i-1}))}{h^2} + \frac{A'(x_i)}{A(x_i)} \frac{u(x_{i+1}) - u(x_{i-1}))}{2h} + \beta^2 u(x_i) &= 0 \\ \left[ 1 + \frac{h}{2} \frac{A'(x_i)}{A(x_i)} \right] u(x_{i+1}) + [h^2 \beta^2 - 2] u(x_i) + \left[ 1 - \frac{h}{2} \frac{A'(x_i)}{A(x_i)} \right] u(x_{i-1}) &= 0 \\ \alpha(x_i) u(x_{i+1}) + \eta u(x_i) + \gamma(x_i) u(x_{i-1}) &= 0 \end{aligned} \quad (4.25)$$

donde  $\alpha$ ,  $\eta$  y  $\gamma$  están dados por:

$$\alpha(x_i) = \left[ 1 + \frac{h}{2} \frac{A'(x_i)}{A(x_i)} \right] \quad (4.26)$$

$$\eta = [h^2 \beta^2 - 2] \quad (4.27)$$



$$\gamma(x_i) = \left[ 1 - \frac{h}{2} \frac{A'(x_i)}{A(x_i)} \right] \quad (4.28)$$

La ecuación (4.25) explica el comportamiento de la función  $u(x)$  en el nodo  $x_i$  en función de los nodos vecinos.

#### 4.4.3.2 Condiciones de Frontera

Si se evalúan las funciones (4.12) y (4.13) y sus derivadas en  $x = a$  y  $x = b$  se obtienen las condiciones de frontera en ambos extremos del canal que se muestran a continuación:

$$u_1(a) = Ae^{ika} + Be^{-ika} \quad (4.29)$$

$$u_1'(a) = ikAe^{ika} - ikBe^{-ika} \quad (4.30)$$

$$u_3(b) = Ce^{ikb} \quad (4.31)$$

$$u_3'(b) = ikCe^{ikb}. \quad (4.32)$$

Si se dividen las dos últimas ecuaciones entre sí, se obtiene una condición de frontera que relaciona la derivada de la función  $u$  con ella misma en la frontera de salida eliminando la necesidad de incluir el parámetro  $C$  dentro del cálculo de diferencias finitas:

$$u_3(b) = \frac{u_3'(b)}{ik} \quad (4.33)$$

Ahora reemplazado la aproximación de las derivadas en diferencias [Ec. (4.20) y (4.21)] finitas en las ecuaciones de condiciones de frontera, se obtiene:

$$\begin{aligned} u(x_1) &= Ae^{ika} + Be^{-ika} \\ \frac{u(x_2) - u(x_0)}{2h} &= ikAe^{ika} - ikBe^{-ika} \\ u(x_N) &= \frac{1}{ik} \frac{u(x_{N+1}) - u(x_{N-1}))}{2h} \end{aligned}$$

Despejando  $u(x_1)$ ,  $u(x_0)$  y  $u(x_{N+1})$  respectivamente, se tiene:

$$u(x_1) = Ae^{ika} + Be^{-ika} \quad (4.34)$$

$$u(x_0) = u(x_2) - 2hikAe^{ika} + 2hikBe^{-ika} \quad (4.35)$$

$$u(x_{N+1}) = 2hiku(x_N) + u(x_{N-1}) \quad (4.36)$$

Las expresiones (4.34)–(4.36) pueden ser incorporadas fácilmente dentro de las ecuaciones algebraicas dadas por (4.25) para obtener un sistema lineal de  $N$  ecuaciones con  $N$  incógnitas entre las cuales de encuentra  $(B / A)$ . El sistema de ecuaciones final queda de la siguiente forma:

$$e^{-ika}(\beta + 2\gamma(x_1)hik)(B / A) + (\alpha(x_1) + \gamma(x_1))u_2 = (2\gamma(x_1)hik - \beta)e^{ika}, n = 1 \quad (4.37)$$

$$e^{-ika}\gamma(x_2)(B / A) + \beta u_2 + \alpha(x_2)u_3 = -\gamma(x_2)e^{ika}, \quad n = 2 \quad (4.38)$$

$$\alpha(x_n)u_{n+1} + \beta u_n + \gamma(x_n)u_{n-1} = 0, \quad n = 3 \dots N-1 \quad (4.39)$$

$$(\alpha(x_N) + \gamma(x_N))u_{N-1} + (\beta + 2\alpha(x_N)hik)u_N = 0, \quad i = N \quad (4.40)$$

Este es un sistema lineal de tipo  $Au = b$  el cual puede ser fácilmente implementado en MATLAB. El código correspondiente se encuentra en el Anexo A.1 para el caso en que el área transversal está dada por  $A(x)$ . Este código además de obtener la amplitud de la oscilación en cada nodo obtiene directamente el coeficiente de reflexión  $R$ .

Para obtener el coeficiente de transmisión, se debe hacer uso de la expresión (4.31) asumiendo además que  $A$  es 1:

$$T = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \left| \frac{u_3(b)}{e^{ikb}} \right|^2 = \left| \frac{u(x_N)}{e^{ikb}} \right|^2 = |u(x_N)|^2 \quad (4.41)$$

Así pues se dedujo un método simple que permite obtener los coeficientes de transmisión y reflexión para alambres con área transversal arbitraria.

## 4.5 Método de Frobenius

El método de Frobenius para la solución de ecuaciones diferenciales consiste en asumir que la solución puede ser escrita como una serie de potencias así [9]:

$$u_2(x) = (x-a)^r \sum_{n=1}^{\infty} a_n (x-a)^n \quad (4.42)$$

Así pues, se reemplaza la primera y segunda derivada de la solución propuesta en la ecuación diferencial (4.4) resolviendo para cada uno de los coeficientes  $a_n$  obteniendo una relación recursiva que relaciona cada coeficiente con los anteriores. Luego la función analítica es evaluada en las condiciones de frontera para obtener el valor de los coeficientes transmisión y reflexión.

Dado que la ecuación diferencial que se quiere resolver es de segundo orden, la solución en series de potencia debe ser del siguiente estilo:

$$u_2(x) = C_1 p_1(x) + C_2 p_2(x) \quad (4.43)$$

donde  $p_1$  y  $p_2$  son polinomios con un número infinito de términos, o al menos lo suficientemente grades para tener una buena aproximación; con  $C_1$  y  $C_2$  constantes cuyo valor dependen de las condiciones de frontera.

Para determinar el coeficiente de transmisión se debe considerar las condiciones de continuidad impuestas sobre la función y su derivada en cada una de las dos fronteras así:

$$u_1(a) = u_2(a) \quad (4.44)$$

$$u_1'(a) = u_2'(a)$$

$$u_2(b) = u_3(b) \quad (4.45)$$

$$u_2'(b) = u_3'(b)$$

Reemplazando las Ec. (4.12), (4.13) y (4.43) en las anteriores condiciones de frontera, se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones:

$$Ae^{ika} + Be^{-ika} = C_1 p_1(a) + C_2 p_2(a) \quad (4.46)$$

$$ikAe^{ika} - ikBe^{-ika} = C_1 p_1'(a) + C_2 p_2'(a)$$

$$C_1 p_1(b) + C_2 p_2(b) = Ce^{ikb} \quad (4.47)$$

$$C_1 p_1'(b) + C_2 p_2'(b) = ikCe^{ikb}$$

esto puede ser escrito de forma matricial así:

$$\begin{bmatrix} e^{ika} & e^{-ika} \\ ik e^{ika} & -ik e^{-ika} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_1(a) & p_2(a) \\ p_1'(a) & p_2'(a) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix} \quad (4.48)$$

$$\begin{bmatrix} p_1(b) & p_2(b) \\ p_1'(b) & p_2'(b) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ ik \end{bmatrix} Ce^{ikb} \quad (4.49)$$

Para obtener el coeficiente de transmisión se debe despejar  $[A, B]^T$  así:

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{ika} & e^{-ika} \\ ik e^{ika} & -ik e^{-ika} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} p_1(a) & p_2(a) \\ p_1'(a) & p_2'(a) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_1(b) & p_2(b) \\ p_1'(b) & p_2'(b) \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 1 \\ ik \end{bmatrix} Ce^{ikb} \quad (4.50)$$

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ ik \end{bmatrix} C e^{ikb} \quad (4.51)$$

donde M es la matriz resultado del producto de cada una de las matrices de la Ec. (4.50). Dividiendo todo entre A y despejando C/A de la primera fila se tiene que el coeficiente de transmisión es:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} 1 \\ B/A \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ ik \end{bmatrix} \frac{C}{A} e^{ikb} \\ \frac{C}{A} &= \frac{e^{-ikb}}{m_{11} + ikm_{12}} \quad (4.52) \\ \Gamma &= \left| \frac{C}{A} \right|^2 = \frac{1}{|m_{11} + ikm_{12}|^2} \end{aligned}$$

El coeficiente de reflexión es simplemente la resta entre la unidad y el coeficiente de transmisión. Este método es implementado en MATLAB, el código se encuentra en el Anexo A.4.

## 5 CÁLCULO DE LA RELACIÓN DE DISPERSIÓN

Según la Ec. (3.18), la conductividad térmica entre dos reservorios térmicos no depende de la forma que tenga la relación de dispersión, pero sí depende de la frecuencia de corte de cada uno de los modos de propagación. Esta frecuencia de corte implica que los fonones deben tener un mínimo de energía para que se puedan propagar a través del medio.

En este punto es preciso recordar que se está asumiendo que la relación de dispersión crece indefinidamente, de tal manera que se acepta que un fonón se pueda propagar a muy altas frecuencias de oscilación. Esto implica que el límite superior en la integral de la Ec. (3.18) es no acotado. Esto no es realmente cierto, pues si la energía del fonón es muy grande, crece la probabilidad que éste interactúe con la estructura cristalina del material que compone el sistema.

A pesar que no es del todo necesario conocer la relación de dispersión para determinar la conductividad del nanoalambre, sí resulta de interés para determinar la forma en que los modos de vibración se propagan por un canal con sección transversal arbitraria.

Los métodos analíticos pueden ser útiles para determinar la relación de dispersión, pero esto implica que se debe conocer por anticipado la solución analítica de la Ec. (4.4). Este análisis analítico fue realizado por Rego [5] para canales con forma de catenaria y de cono para los cuales existe solución analítica de la ecuación diferencial que describe el sistema. En el caso de la estructura estudiada por Ávila [7], la ecuación diferencial debe ser resuelta por métodos numéricos, lo cual implica que la relación de dispersión debe ser obtenida del mismo modo.

Antes de describir los métodos usados para obtener la relación de dispersión, primero se harán unas consideraciones que harán más simple el proceso.

### 5.1 Consideraciones

De manera general, la relación de dispersión es la relación existente entre la energía y la cantidad de movimiento de un sistema. Para el caso de los fonones, la energía es proporcional a su frecuencia de oscilación tal como lo explica la Ec. (3.14). Por otro lado, la cantidad de movimiento de una onda, está relacionada con el vector de onda por medio de la relación de de Broglie [15]. Así pues, la relación de dispersión también puede ser tomada como las frecuencias aceptadas para cada vector de onda que pueda poseer un fonón propagándose por el sistema. Esto es, una función  $\omega(k)$ .

La frecuencia de oscilación de un fonón propagándose por el canal térmico está determinada por la ecuación diferencial independiente en el tiempo. Nótese que la Ec. (4.3) corresponde a la ecuación diferencial que describe un movimiento armónico simple.

La frecuencia de oscilación de un sistema de este tipo, está dada por la constante que multiplica el término sin derivar en la ecuación diferencial. Así pues para el sistema descrito por

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \omega^2 u = 0 \quad (5.1)$$

la frecuencia de oscilación es  $\omega$ . Por lo tanto, comparando esta situación con la Ec. (4.3), se tiene que la frecuencia de oscilación de un fonón propagándose por un canal dieléctrico es

$$\omega^2 = v_l^2 \beta^2 \quad (5.2)$$

donde  $v_l^2$  es la velocidad de propagación longitudinal en el material del cual está hecho el canal y  $\beta$  es el vector de onda generalizado introducido en la Sección 4.1.

La Ecuación (5.2) es justamente la relación de dispersión para los fonones longitudinales que se propagan entre los reservorios a través del canal dieléctrico; sin embargo, hay que tener en cuenta que  $\beta$  no es necesariamente el número de onda del fonón. Es un vector de onda generalizado que mantiene un mismo valor tanto en los reservorios como al interior del canal. Esto se debe a que según (5.2), el vector de onda generalizado es proporcional a la frecuencia de oscilación que a su vez es constante en toda la estructura, dadas las condiciones de estado estable que se asumieron. En la Sección 4.2 se mostró que la Ec. (3.18) siempre acepta separación de variables dado que la función que describe el área transversal  $A(x)$  es siempre positiva en el dominio. Adicionalmente, la constante de separación puede ser expresada como la suma de otras dos constantes. En particular, la constante  $\beta$  puede ser expresada de la siguiente manera:

$$\beta^2 = k^2 + C_0^2 \quad (5.3)$$

donde  $k$  es el vector de onda del fonón y  $C_0$  es una constante. El significado físico de  $C_0$  puede ser explicado fácilmente si se reemplaza la Ec. (5.3) en la Ec. (5.2) para obtener la relación de dispersión completa:

$$\omega^2 = v_l^2 k^2 + v_l^2 C_0^2 \quad (5.4)$$

De esta última expresión se tiene que cuando  $k = 0$  entonces  $\omega = v_l C_0$ . Lo cual quiere decir que la constante  $C_0$  es proporcional a la frecuencia de corte de la relación de dispersión. Por ejemplo, Rego [5] mostró que para un canal con sección transversal dada por  $A(x) = A \cosh^2(x/\lambda)$ , la relación de dispersión es  $\omega^2 = v_l^2 k^2 + v_l^2 / \lambda^2$ , lo cual quiere decir que  $C_0 = 1/\lambda$ .

La anterior situación implica que para determinar la relación de dispersión, simplemente es necesario determinar la frecuencia de corte del sistema. Por lo tanto se desarrollarán dos métodos numéricos para determinar dicha frecuencia de corte.

## 5.2 Método Frecuencial

Una aproximación numérica inicial consiste en calcular la respuesta en frecuencia del canal que no tiene en cuenta la longitud de onda de los fonones que se propagan a través de él. Así que sólo se estaría determinando las bandas de frecuencia que la estructura permite existir.

Este método numérico recurre al uso de la transformada de Fourier en el tiempo pero aprovechando las ecuaciones de diferencias finitas obtenidas en la Sección 4.4.3.1, de tal manera que pueda construir un sistema discreto lineal sobre el cual se va a estudiar la respuesta en frecuencia. La discretización consiste de nuevo en reducir el dominio unidimensional continuo del nanoalambre en una serie de nodos tal como se observa en la Figura 5.1.

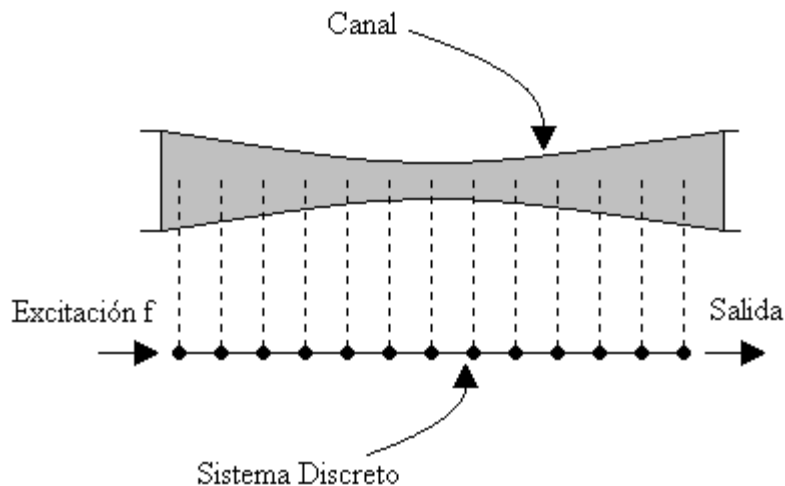


Figura 5.1. Discretización para el análisis en frecuencia.

En el sistema de la Figura 5.1 se excita el primer nodo con una señal de amplitud constante y de frecuencia  $\omega$ . El objetivo es establecer la magnitud de la oscilación en el último nodo del sistema.

Las ecuaciones que establecen la interacción de cada uno de los nodos con sus vecinos se obtienen de reemplazar las aproximaciones de diferencias finitas en la ecuación diferencial parcial (3.18):

$$\frac{u(x_{i+1}, t) - 2u(x_i, t) + u(x_{i-1}, t))}{h^2} + \frac{A'(x_i)}{A(x_i)} \frac{u(x_{i+1}, t) - u(x_{i-1}, t))}{2h} = \frac{1}{v_i^2} \frac{\partial^2 u(x_i, t)}{\partial t^2}$$

$$\begin{aligned}
& - \left[ 1 + \frac{h}{2} \frac{A'(x_i)}{A(x_i)} \right] u(x_{i+1}, t) + 2u(x_i, t) - \left[ 1 - \frac{h}{2} \frac{A'(x_i)}{A(x_i)} \right] u(x_{i-1}, t) = - \frac{h^2}{v_i^2} \frac{\partial^2 u(x_i, t)}{\partial t^2} \\
& - \alpha(x_i) u(x_{i+1}, t) + 2u(x_i, t) - \gamma(x_i) u(x_{i-1}, t) = - \frac{h^2}{v_i^2} \frac{\partial^2 u(x_i, t)}{\partial t^2}. \tag{5.5}
\end{aligned}$$

Tomando la transformada de Fourier en el tiempo,

$$\begin{aligned}
& - \alpha(x_i) u(x_{i+1}, \omega) + 2u(x_i, \omega) - \gamma(x_i) u(x_{i-1}, \omega) = \frac{h^2 \omega^2}{v_i^2} u(x_i, \omega) \\
& - \alpha(x_i) u(x_{i+1}, \omega) + \left[ 2 - \frac{h^2 \omega^2}{v_i^2} \right] u(x_i, \omega) - \gamma(x_i) u(x_{i-1}, \omega) = 0. \tag{5.6}
\end{aligned}$$

La ecuación (5.6) puede ser usada para construir un sistema de  $N - 1$  ecuaciones (Se pierde un grado de libertad pues en el primer nodo se está forzando una amplitud de oscilación) que permite obtener la amplitud de las oscilaciones en el último nodo en función de la frecuencia. La primera y la última ecuación del sistema son (suponiendo que la amplitud de oscilación a la entrada es unitaria y que  $u(x_{N+1}) = 0$ ):

$$\left[ 2 - \frac{h^2 \omega^2}{v_i^2} \right] u(x_2, \omega) - \alpha(x_2) u(x_3, \omega) = \gamma(x_2) \tag{5.7}$$

$$- \gamma(x_N) u(x_{N-1}, \omega) + \left[ 2 - \frac{h^2 \omega^2}{v_i^2} \right] u(x_N, \omega) = 0. \tag{5.8}$$

El sistema definido por las Ec. (5.6)–(5.8), es de la forma  $\mathbf{A}(\omega)\mathbf{u} = \mathbf{b}$ , donde  $\mathbf{A}(\omega)$  es una matriz de  $(N - 1) \times (N - 1)$ ,  $\mathbf{u}$  es un vector de la amplitud de las oscilaciones en cada uno de los puntos en los que fue discretizado el dominio, y  $\mathbf{b}$  un vector que contiene un sólo valor en su primera componente. Este problema lineal es solucionado en MATLAB (El código se presenta en el Anexo A.2). El código implementado obtiene la amplitud de oscilación del último nodo del dominio en función de la frecuencia angular de oscilación, teniendo en cuenta la función que describe el área transversal.

### 5.3 Aproximación Periódica

En el estudio de cristales semiconductores, cuando se quiere obtener una aproximación a nivel continuo de la estructura de bandas, se suele usar el método de Kronig-Penney [2],[16]. En este método se modela el potencial debido a cada electrón de la estructura en una dirección cristalográfica específica como un potencial constante, con valles que se repiten de manera periódica e indefinida. En la Figura 5.2 se presenta el potencial periódico del modelo, el ancho de la celda básica dependen de la distancia de separación



entre átomos. Otros parámetros de importancia son: la altura del potencial y el ancho de cada valle.

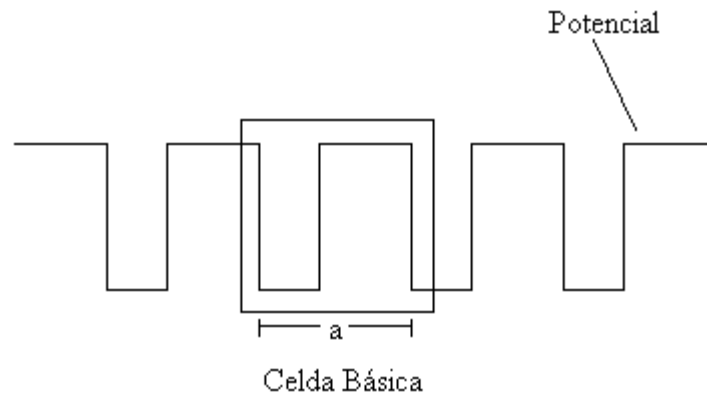


Figura 5.2. Potencial periódico para el modelo de Kronig-Penney.

El modelo de Kronig-Penney tiene su principal fundamento en el teorema de Bloch [2],[16], el cual especifica que para un potencial periódico la función  $\Psi(x)$  que soluciona el hamiltoniano es también periódica y cumple que

$$\Psi(x) = u(x)e^{jkx} \quad (5.9)$$

donde  $u(x)$  es una función periódica. Esto quiere decir que la solución puede ser expresada como una onda plana en la que existe un término oscilatorio modulado.

El uso del modelo de Kronig-Penney permite obtener una estructura de bandas como la que se muestra en la Figura 5.3. Esta estructura de bandas relaciona las energías permitidas para un electrón de acuerdo a su vector de onda (o también, momento). Nótese que el vector de onda es reducido, es decir, esta multiplicado por la separación entre átomos. Esta estructura de bandas tiene una periodicidad igual a  $2\pi/a$ , donde  $a$  es el ancho de una celda unitaria. Esta zona de periodicidad se conoce como la primera zona de Brillouin.

La estructura de bandas de la Figura 5.3 presenta gaps de energía, es decir, valores de energía que un electrón no puede tener al propagarse por la estructura. Nótese que para un sólo valor de  $k$  existen varias posibles energía que el sistema puede tener. Estos valores de energía corresponden a los valores propios del sistema, las cuales están dadas por las condiciones de frontera del sistema. Cada valor de energía tiene una función de onda asociada que describe las estadísticas de la partícula a medida que se propaga por la estructura.

Ahora, ¿Qué utilidad puede tener el uso de este modelo para el cálculo de relaciones de dispersión en nanoalambres si estos dispositivos no presentan una estructura periódica? Bien, en el caso de los canales dieléctricos, se quiere obtener una relación de

dispersión que no dependa de las fronteras, es decir, se quiere obtener el comportamiento de un fonón libre. Ahora, para ver cómo el modelo de Kronig-Penney puede dar información acerca del comportamiento de una partícula en estado libre es mejor ver la diferencia que existe entre la relación de dispersión para un electrón en un potencial periódico y otro en estado libre.

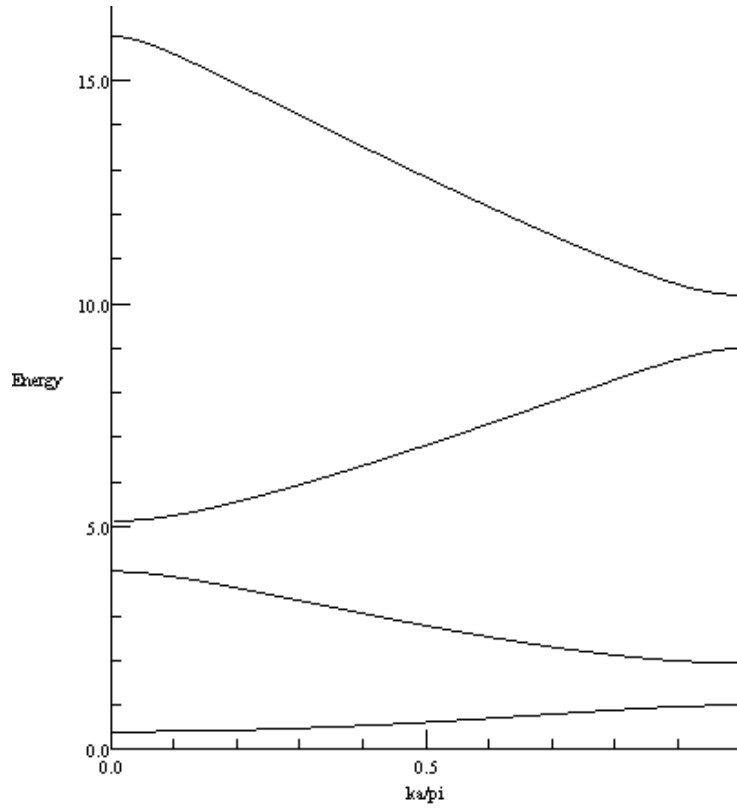


Figura 5.3. Energía de un electrón en función del vector de onda [17].

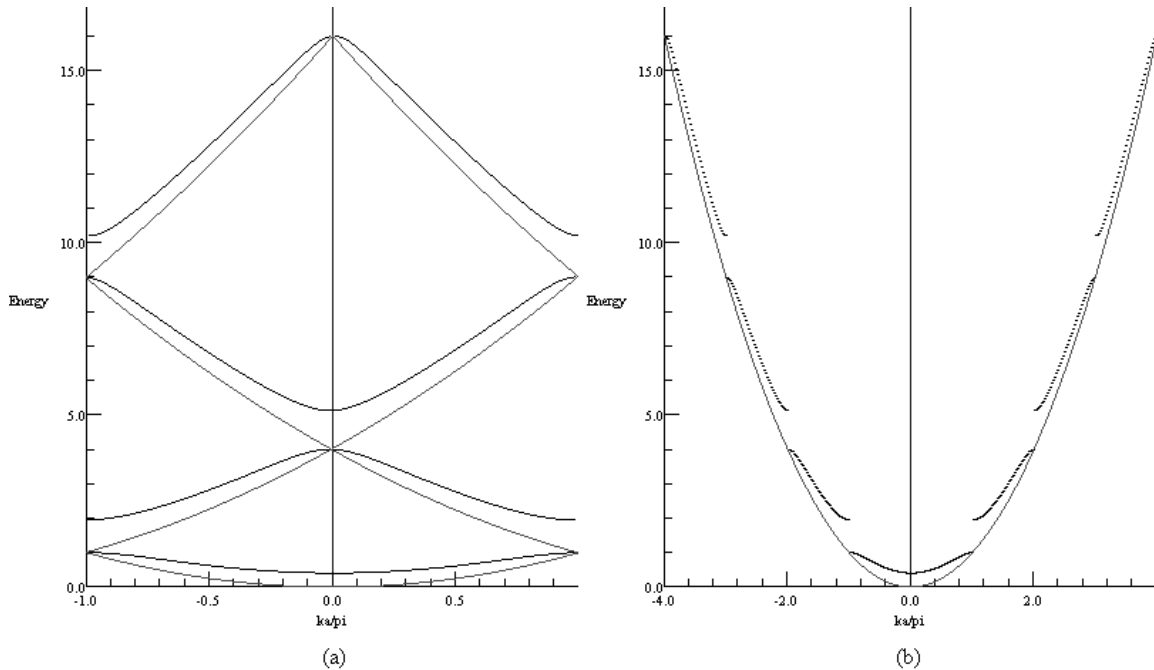


Figura 5.4. Estructura de bandas del modelo de Kronig-Penney y de un electrón libre: (a) Primera zona de Brillouin; (b) Comparación a banda más cercana. [17].

La Figura 5.4 muestra la relación de dispersión para un electrón en estado libre y otro en un potencial periódico. En la parte (a) se grafica en la primera zona de Brillouin. Nótese que en este caso, la banda de energía del electrón libre (rojo) coincide con la de un electrón en un potencial periódico en los puntos extremos de la zona de Brillouin escogida. Por otro lado, cuando se compara cada una de las bandas de energía posicionadas en distintas zonas de Brillouin con la relación de dispersión de un electrón libre, se encuentra que cada una de estas bandas coincide con la del electrón libre en el punto extremo que se encuentra más alejado del origen. Es así que el modelo de Kronig-Penney puede dar una idea del comportamiento de una partícula libre en un medio.

Para el caso que es de interés en este trabajo; se va a usar un caso similar al modelo de Kronig-Penney. La idea es ver cómo es la relación de dispersión de fonones longitudinales en canales con área transversal arbitraria que conectan dos reservorios térmicos. Ahora bien, el primer paso en la formulación es deshacerse de los reservorios y asumir que el canal térmico está conectado a otro exactamente igual en cada uno de sus extremos como se muestra en la Figura 5.5. A su vez, cada uno de estos nuevos canales está conectado otro canal similar y así sucesivamente. Al final, se tiene un sistema periódico para fonones como el de Kronig-Penney.

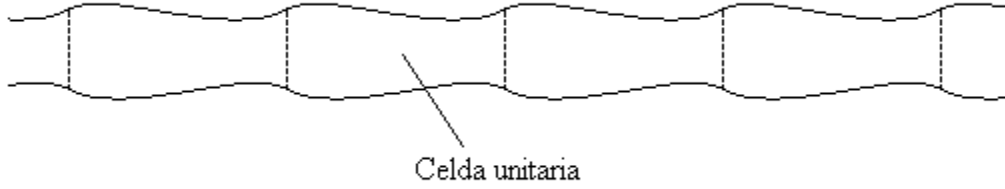


Figura 5.5. Modelo periódico para estudiar la relación de dispersión de fonones.

Para poder construir este sistema, se debe hacer una importante restricción: ambas áreas de contacto del canal deben ser iguales. Esto con el ánimo de mantener las condiciones de continuidad necesarias para resolver el problema. En este nuevo sistema, también se hará uso del teorema de Bloch [Ec. (5.9)], el cual permite expresar la función como una onda plana.

El cálculo se hará de manera numérica; se partirá de la formulación de diferencias finitas que se realizó en la Sección 5.2, esto implica que también se hará uso de la transformada de Fourier. Ahora, combinando el teorema de Bloch con el esquema de diferencias finitas se tiene que este teorema puede ser reescrito así:

$$u(x_i) = A_i \exp(jkx_i) \quad (5.10)$$

donde  $A_i$  es la amplitud de la oscilación en cada uno de los puntos discretos en que fue particionado el medio continuo para resolver por diferencias finitas;  $x_i$  es cada uno de los puntos discretos del dominio y está dado por:

$$x_i = a + hi \quad (5.11)$$

donde  $a$  es el límite inicial del dominio,  $h$  la separación entre puntos discretos, e  $i$  el índice de cada punto.

Combinando las Ec. (5.6), (5.9) y (5.10) se obtiene:

$$\begin{aligned} -\alpha(x_i)A_{i+1} \exp(jkx_{i+1}) + \left[ 2 - \frac{h^2 \omega^2}{v_l^2} \right] A_i \exp(jkx_i) - \gamma(x_i)A_{i-1} \exp(jkx_{i-1}) &= 0. \\ -\alpha(x_i)A_{i+1} \exp(jkh) + 2A_i - \gamma(x_i)A_{i-1} \exp(-jkh) - \frac{h^2 \omega^2}{v_l^2} A_i &= 0. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Esta ecuación es válida para cada punto dentro del dominio de estudio. Ahora es necesario incluir las condiciones de frontera, para las cuales se aprovecha la periodicidad que se construyó para el sistema. Así pues, se tiene que  $A_{N+1} = A_1$  y  $A_0 = A_N$ . Combinando esto con la Ec. (5.12) se obtienen las siguientes dos ecuaciones:

$$2A_1 - \alpha(x_1)A_2 \exp(jkh) - \gamma(x_1)A_N \exp(-jkh) - \frac{h^2 \omega^2}{v_l^2} A_1 = 0. \quad (5.13)$$

$$-\alpha(x_N)A_1 \exp(jkh) - \gamma(x_N)A_{N-1} \exp(-jkh) + 2A_N - \frac{h^2 \omega^2}{v_l^2} A_N = 0. \quad (5.14)$$

El sistema compuesto por las Ec. (5.12), (5.13) y (5.14) corresponde a un problema de valor propio dado así:

$$[M(k) - \lambda]\vec{a} = 0 \quad (5.15)$$

donde  $M$ ,  $\vec{a}$  y  $\lambda$  están dados por:

$$M(k) = \begin{bmatrix} 2 & -\alpha(x_1)e^{jkh} & 0 & \cdots & -\gamma(x_1)e^{-jkh} \\ 0 & \ddots & & & 0 \\ \vdots & -\gamma(x_i)e^{-jkh} & 2 & -\alpha(x_i)e^{jkh} & \vdots \\ 0 & & & \ddots & 0 \\ -\alpha(x_N)e^{jkh} & 0 & \cdots & -\gamma(x_1)e^{-jkh} & 2 \end{bmatrix}$$

$$\vec{a} = [A_1, A_2, \dots, A_N]^T$$

$$\lambda = \frac{h^2 \omega^2}{v_l^2}$$

El sistema de la Ec. (5.15) fue resuelto usando MATLAB, el código usado para tal fin se presenta en el Anexo A.3. El número de puntos en que se divide el dominio, hace que la exactitud de la estructura de bandas obtenida sea mejor.

Como resultado, se espera que, al igual que para un electrón en un potencial periódico, los extremos de las bandas de la relación de dispersión en el sistema periódico coincidan con la relación de dispersión de un fonón libre en la estructura. Hay que recordar que el objetivo es conocer la relación de dispersión de un fonón para distintos patrones de áreas transversales.

## 6 NANOALAMBRES

En esta sección se obtendrán los coeficientes de transmisión y relaciones de transmisión para alambres con las formas propuestas y analizadas por Rego [5]. Así pues, la intención de esta sección es verificar los resultados obtenidos previamente de manera analítica con los métodos numéricos descritos en las Secciones 4 y 5. Esto permite validar el uso de los métodos de diferencias finitas propuestos aquí.

Inicialmente se analizará un alambre de forma catenoidal, luego uno de forma cónica y finalmente se analizará un alambre totalmente recto que no fue analizado por Rego pero que tiene propiedades interesantes.

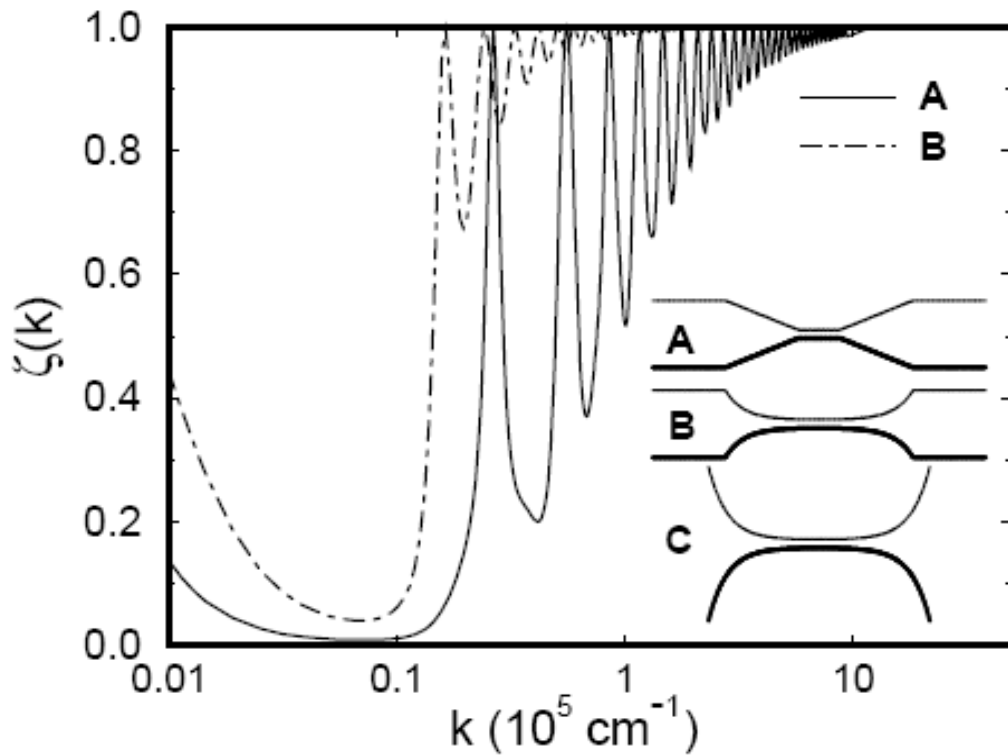


Figura 6.1. Coeficiente de transmisión en función del vector de onda  $k$  obtenido por Rego [5] para un canal unidimensional (A) de  $1 \mu\text{m}$  de largo con contactos cónicos de ángulo de apertura  $\theta = \pi/6$  y (B) catenoidal con longitud característica  $\lambda = 0.86 \mu\text{m}$ . En ambos casos el área transversal es  $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$  en el centro y  $2000 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$  en los extremos.

Según lo obtenido por Rego [5], el comportamiento del coeficiente de transmisión para alambres con forma catenoidal y cónica tienen comportamientos similares. En la Figura 6.1 se presenta el coeficiente de transmisión para ambos casos. Para números de onda pequeños (o grandes longitudes de onda) el valor tiende a ser uno en ambos casos; sin embargo, a medida que  $k$  aumenta, se presenta una región donde la reflexión de los fonones incidentes es máxima. Si el valor de  $k$  sigue aumentando, entonces se presentan picos sucesivos en los que la probabilidad de transmisión es unitaria; estos picos se encuentra separados por valles que son cada vez menos profundos hasta que en altos

números de ondas se llega un coeficiente de transmisión unitario. La separación entre los picos de transmisión en ambos casos es distinta, además los valles que corresponden al canal con contactos cónicos (Figura 6.2A) son más profundos que los que corresponden al alambre catenoidal.

Las curvas de transmitancia de la Figura 6.1 permiten afirmar que la energía de los fonones puede jugar un papel importante en la conductancia térmica final. Adicionalmente se puede decir que esta conductancia no sólo está afectada por las propiedades térmicas del alambre sino también por su geometría. A continuación se presentarán los resultados obtenidos mediante los métodos descritos anteriormente:

## 6.1 Alambre Catenoidal

### 6.1.1 Coeficiente de Transmisión

Esta estructura fue estudiada analíticamente por Rego [5]; luego, Roukes [10] logró realizar la fabricación del mismo perfil con el ánimo de realizar una verificación experimental de los resultados de Rego. Los efectos de cuantización de la conductividad bajo una situación de adiabaticidad fueron logrados. En la Figura 6.3 se observa un dispositivo térmico que se encuentra conectado por medio de alambres catenoidales [10]. Básicamente se puede apreciar que constan de una membrana sostenida por cuatro catenoides, dos de los cuales sirven para inyectar energía y los otros dos para medir el flujo térmico de la membrana al soporte exterior.

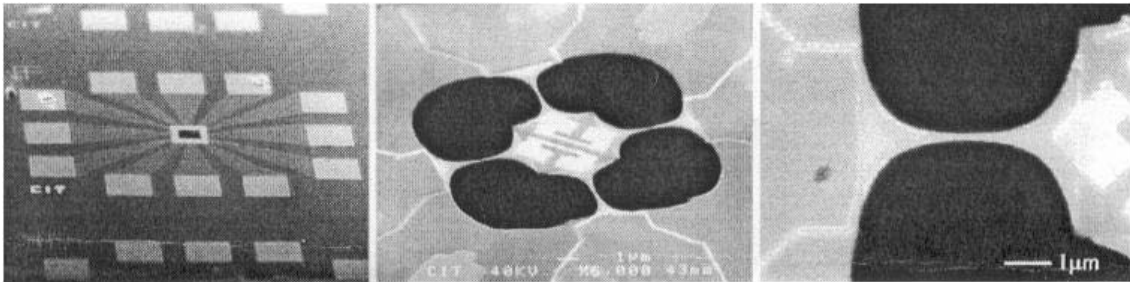


Figura 6.3. Dispositivo mesoscópico suspendido que se encuentra conectado térmicamente por medio de alambre catenoidales (Tomado de [10]).

El grosor del alambre de la Figura 6.3 viene dado por

$$A(x) = A_0 \cosh^2\left(\frac{x}{\lambda}\right) \quad (6.1)$$

donde  $\lambda$  es la longitud característica del alambre, y  $A_0$  es el área en el centro del alambre. El parámetro  $\lambda$  define el grado de concavidad que posee el alambre; es decir, entre más pequeño sea, más pronunciada será la concavidad del canal. Normalmente, el espesor de este tipo de alambres es constante [5].

De acuerdo a la Ec. (4.4), las oscilaciones independientes del tiempo están dadas por:

$$\frac{d^2u}{dx^2} + \frac{2 \tanh(x/\lambda)}{\lambda} \frac{du}{dx} + \beta^2 u = 0 \quad (6.2)$$

donde  $\beta$  es el vector de onda generalizado, y  $\lambda$  es la longitud característica del alambre.

Usando el método de diferencias finitas descrito en la sección 4.4 se obtuvo la curva de la Figura 6.4 que corresponde al coeficiente de transmisión de fonones para un canal catenoidal cuya longitud característica es  $\lambda = 0.86 \mu\text{m}$ . La geometría de este canal reproduce la descrita por Rego [5] (Figura 6.1), en la cual el área central es de  $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$  y el área de los contactos es  $700 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$ , lo cual quiere decir que el área en los contactos es 14 veces mayor que el área de la parte central de la estructura.

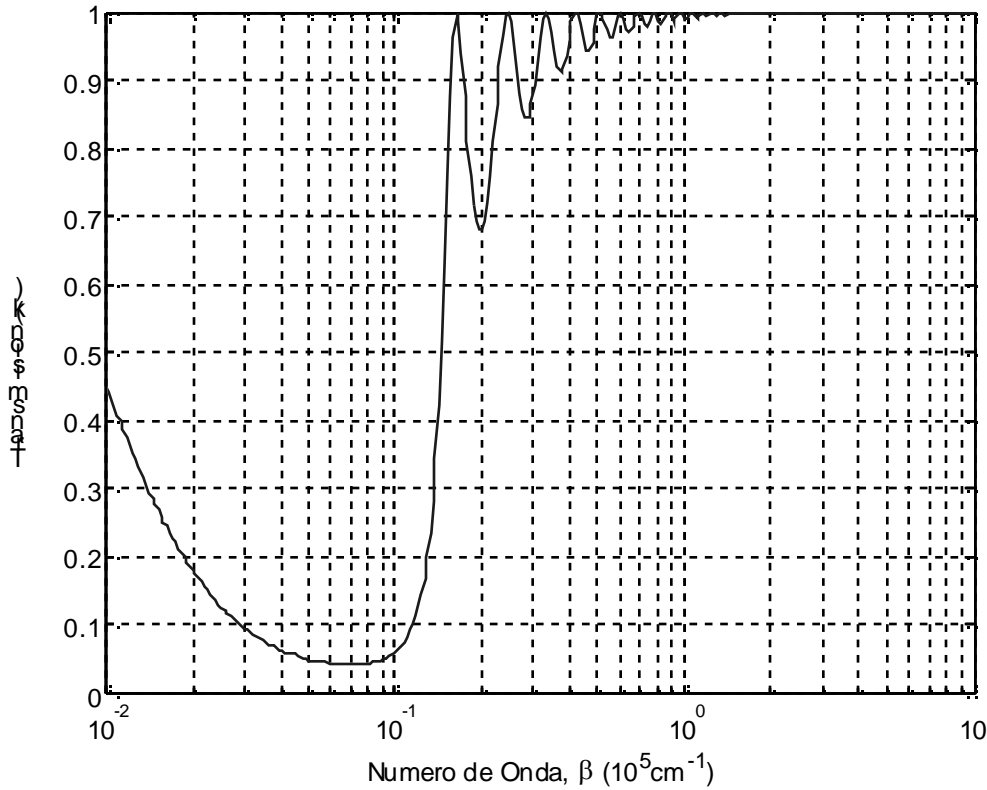


Figura 6.4. Coeficiente de transmisión en función del vector de onda generalizado para un canal unidimensional catenoidal con longitud característica  $\lambda = 0.86 \mu\text{m}$ , con área transversal de  $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$  en el centro y  $700 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$  en los extremos.

Al comparar la curva de la Figura 6.4 con la obtenida por Rego (ver Figura 6.1B) se encuentra que ambas curvas son idénticas; primero se presenta una región de rechazo principal donde la transmitancia es mínima, seguida de varios picos y valles que finalmente se desvanecen para llegar a una probabilidad de transmisión unitaria. En



ambos casos, la región de mayor reflexión ocurre para valores de número de onda entre  $0.01$  y  $0.1 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ . Esto permite confirmar la validez del método numérico usado.

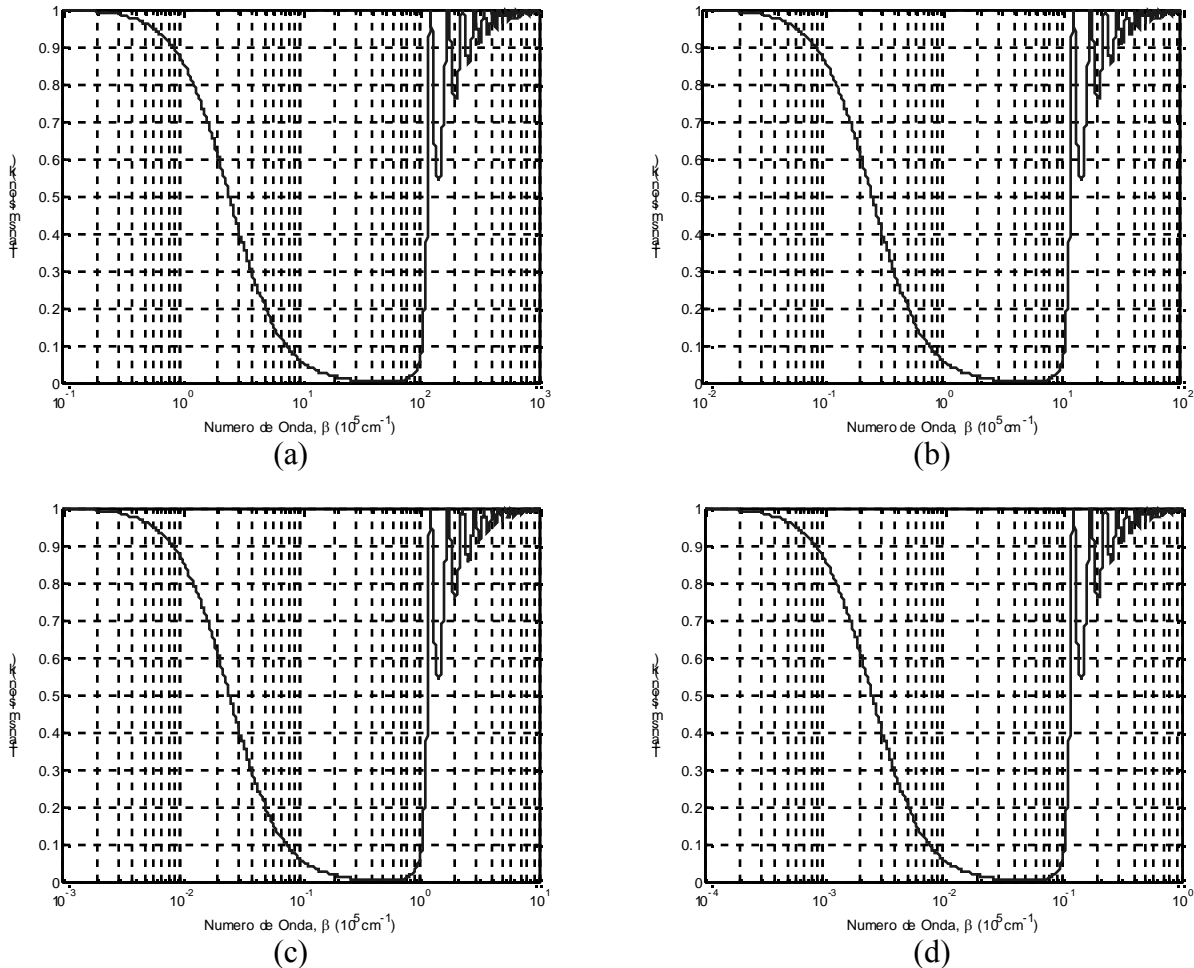


Figura 6.5. Curvas de transmisión para un canal catenoidal con área transversal de  $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$  en el centro y  $2000 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$  en los extremos en el cual la longitud característica  $\lambda$  es (a)  $0.001$ , (b)  $0.01$ , (c)  $0.1$ , (d)  $1 \mu\text{m}$ .

Ahora, manteniendo constante en un valor de cuarenta la relación entre el área central y el área en los contactos del alambre; y variando el parámetro  $\lambda$  se cambia la concavidad y el largo del canal así: Si  $\lambda$  es muy pequeño, entonces la curvatura del canal es muy grande lo cual implica que la variación del área transversal a medida que se avanza por el eje longitudinal del alambre es bastante alta, así que el largo del mismo debe ser pequeño para mantener la relación de áreas *central/extrema* igual a cuarenta; cuando  $\lambda$  crece, entonces la curvatura se hace menos pronunciada haciendo el canal más recto y además más largo para mantener la relación de áreas constante. En la Figura 6.5, se muestran las curvas de transmisión para varios valores de  $\lambda$ . Aunque en principio parece que todas las gráficas presentadas son la misma, hay que ver los límites del eje horizontal son distintos. Es decir, al variar el valor de  $\lambda$  se puede desplazar a voluntad la curva transmitancia hacia

la derecha o la izquierda. Hay que notar sin embargo que esta traslación se hace válida siempre y cuando el eje horizontal sea logarítmico.

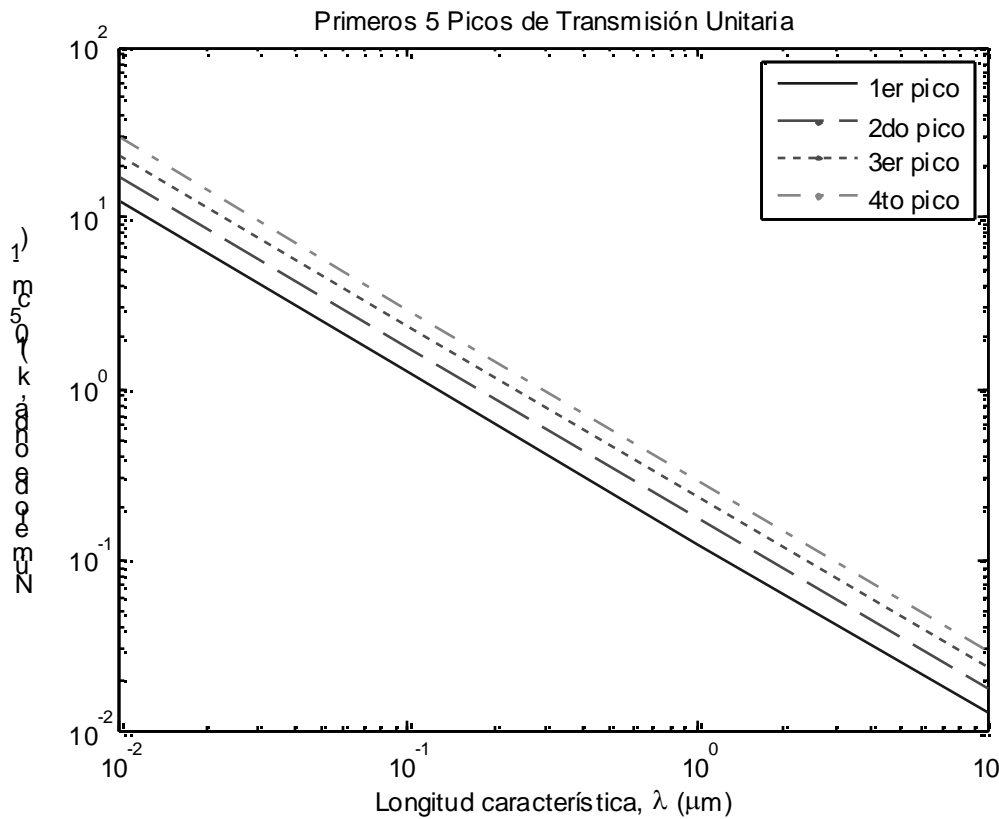


Figura 6.6. Vector de onda donde ocurren los primeros cinco picos unitarios del coeficiente de transmisión en función de la longitud característica  $\lambda$  del canal catenoidal de área transversal de  $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$  en el centro y  $2000 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$  en los extremos.

Este corrimiento sugiere una relación inversamente proporcional entre la longitud característica del canal, y las regiones de transmisión y reflexión. Con el ánimo de determinar la relación existente, en la Figura 6.6 se presenta los vectores de onda en los cuales se presentan los primeros cinco picos de transmisión para un canal catenoidal. Hay que aclarar que en el cálculo de estos resultados, la relación entre el área central del canal y el área en los contactos con los reservorios se mantuvo en 40. Según lo que se puede notar de la Figura 6.6, a medida que  $\lambda$  aumenta, la ubicación de los picos se acerca a cero. La relación es aparentemente lineal; sin embargo, los ejes están en escala logarítmica, lo cual sugiere que la relación es inversamente proporcional a alguna potencia de  $\lambda$ . Es de gran interés notar que todos los picos de transmisión unitaria tienen la misma pendiente, lo cual sugiere que cambios en  $\lambda$ , provoca corrimientos de toda la función de transmisión, tal como se dijo en el párrafo anterior. Al hacer la regresión, se encuentra que cada una de las curvas exhibe el siguiente comportamiento:

$$k_{pico,i} = A_i \lambda^{-1} \quad (6.3)$$

donde  $A_i$  es una constante de proporcionalidad para cada uno de los picos. Esto muestra que efectivamente la relación es inversamente proporcional.

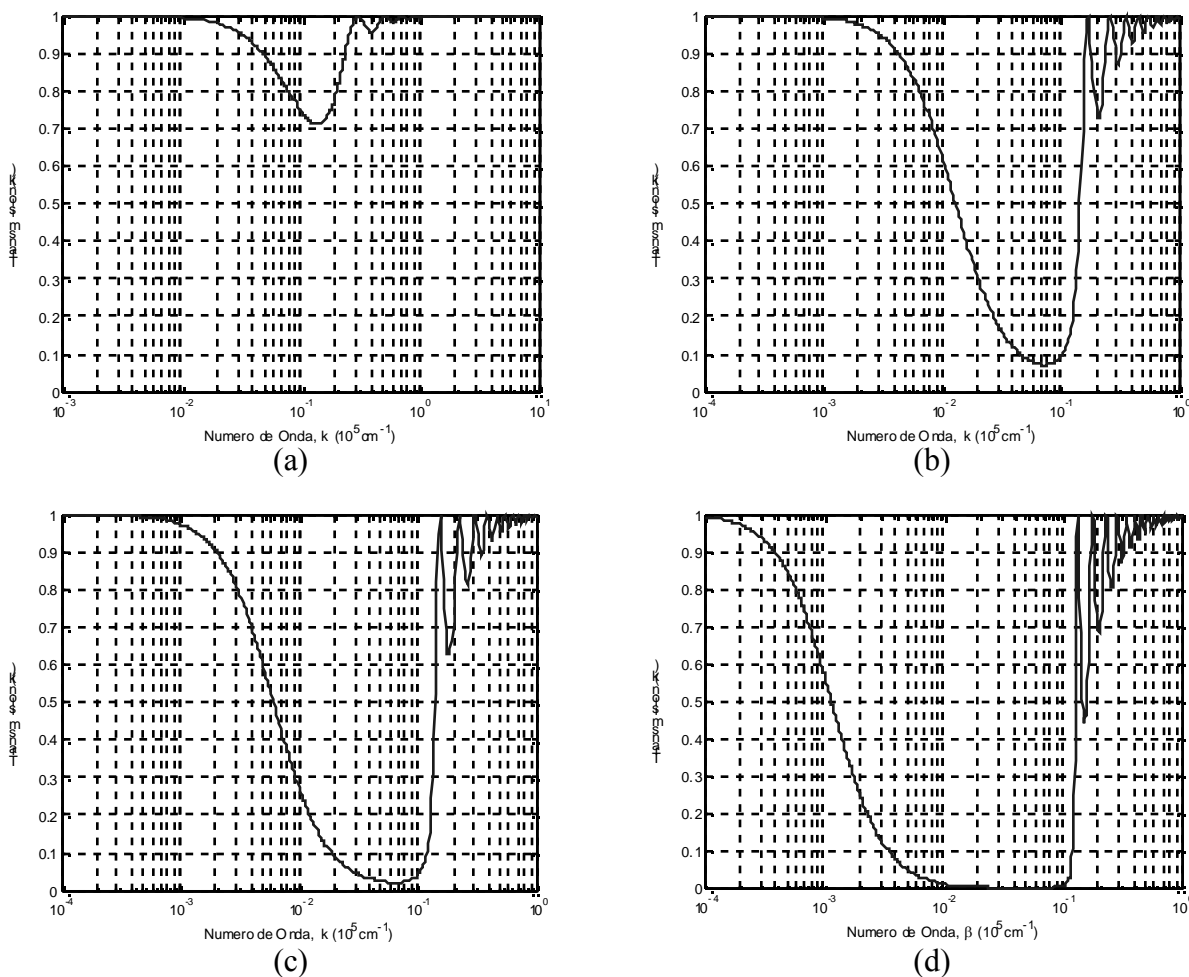


Figura 6.7. Curvas de transmisión para un canal catenoidal de longitud característica  $\lambda = 0.86 \mu\text{m}$  con área transversal de  $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$  en el centro y en los extremos de (a)  $50 \text{ nm} \times 100 \text{ nm}$ , (b)  $50 \text{ nm} \times 500 \text{ nm}$ , (c)  $50 \text{ nm} \times 1000 \text{ nm}$ , (d)  $50 \text{ nm} \times 5000 \text{ nm}$ .

La relación *Área Máxima/Área Mínima* es también un parámetro que influye de manera significativa en la probabilidad de transmisión. En la Figura 6.7 se muestran las curvas de transmisión al variar las relaciones de áreas manteniendo la longitud característica del canal  $\lambda$  en  $0.86 \mu\text{m}$ . El área central se mantuvo constante, así que lo que realmente se varió fue el área transversal en los contactos. Si el área en los contacto es el doble de la central (Figura 6.7a), el mínimo de transmisión en la región de reflexión máxima no es muy pronunciado, pues la poca variación de área no produce una dispersión apreciable en las vibraciones que se propaguen por el canal. A medida que se aumenta la magnitud del área transversal del contacto, entonces la región de reflexión

máxima se hace más profunda amplia y definida. Esto es claramente observable en cada una de las curvas de la Figura 6.7, cuando el área de los contacto es 100 veces mayor (d), la región de reflexión es muy amplia, además el punto final de dicha región queda claramente definido.

El mínimo de transmisión observado en la Figura 6.7 se hace más pronunciado a media que aumenta la relación entre las áreas, ahora, al confrontar esta relación con el valor del mínimo de la primera región de reflexión máxima se encuentra la relación dada por la curva de la Figura 6.8. Cuando la relación es cercana a uno, se tiene que el alambre se acerca bastante en forma a un alambre recto, el cual no presenta dispersión, es por esta razón que el mínimo de transmisión se acerca a uno, lo que es igual a decir que no hay reflexiones. A medida que la relación aumenta, el comportamiento de la gráfica presenta una región curva para luego tomar un comportamiento lineal, que en escala logarítmica se traduce en un comportamiento inversamente proporcional, por lo tanto si desea que el coeficiente de reflexión sea lo más cercano a uno, el área de contacto debe ser mucho mayor que el área mínima del canal.

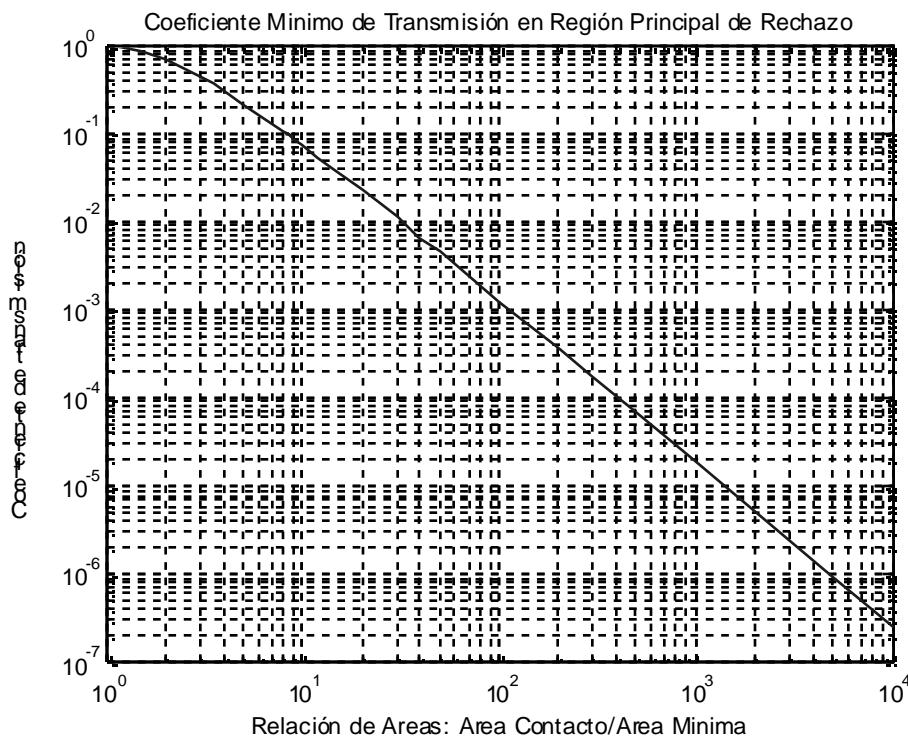


Figura 6.8. Curva que relaciona el mínimo coeficiente de transmisión para variaciones en la relación existente entre el área transversal en el centro y extremo del alambre. La longitud característica  $\lambda$  es 0.86  $\mu\text{m}$ .

Por otro lado también se analizó el ancho de la región de reflexión máxima de la curva del coeficiente de transmisión en función de la relación de áreas. En el ancho de dicha región se define arbitrariamente como la distancia entre los dos puntos en que la curva e transmitancia es menor que 0.1. Así pues cuando la relación de áreas es muy pequeña, el

mínimo de transmisión no es menor que 0.1 lo que lleva a mostrar que el ancho de esta región es cero cuando la relación de áreas es ligeramente mayor que ocho.

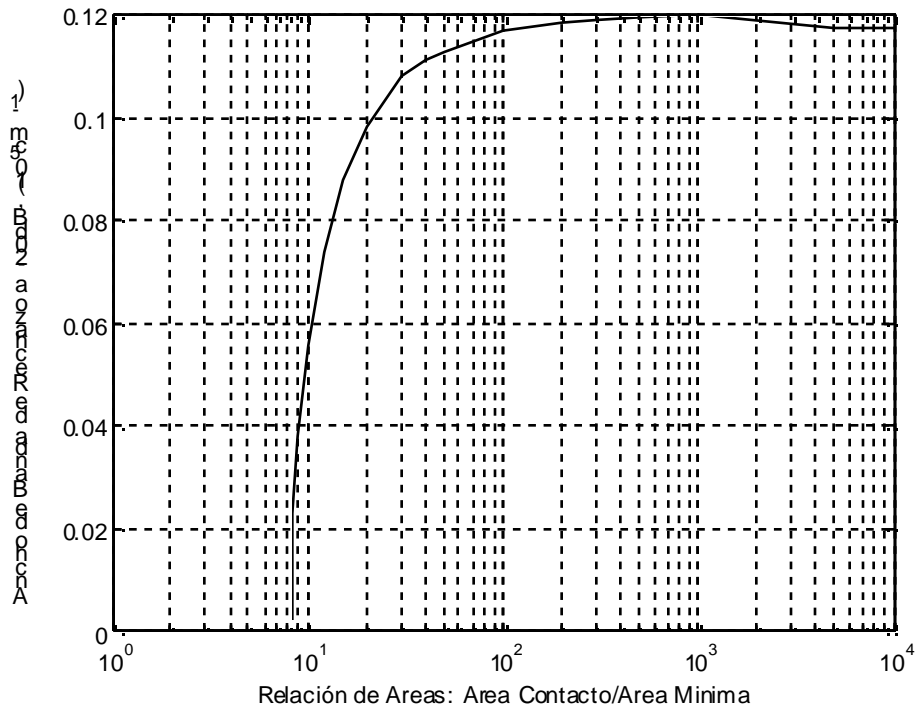


Figura 6.9. Ancho de la banda de rechazo en función de la relación de áreas para un canal catenoidal de longitud característica  $\lambda = 0.86 \mu\text{m}$ .

Cuando la relación de áreas se hace cada vez más grande, el ancho de la región de reflexión se hace mayor rápidamente hasta llegar un valor máximo de  $0.12 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ ; luego de eso, el ancho decae un poco para mantenerse en un valor constante. Esto quiere decir que la región de rechazo crece hacia la izquierda (hacia cero) y no hacia la derecha cuando la relación de áreas aumenta, pues el espacio hacia la izquierda se encuentra limitado por el cero.

Para hacer el ancho de la región de reflexión aún más amplio, es necesario hacer que la longitud característica del canal sea más pequeña, lo que corre el límite derecho de dicha banda hacia la derecha y luego hacer la relación de áreas grandes lo que correría el límite izquierdo hacia la izquierda hasta un valor límite de cero.

### 6.1.2 Relación de Dispersión

De acuerdo a lo deducido teóricamente por Rego [5], la relación de dispersión para un canal catenoidal [Ec. (6.1)] está dada por:

$$\omega^2(k) = v_l^2 \beta^2 = v_l^2 \left( k^2 + \frac{1}{\lambda^2} \right) \quad (6.4)$$

donde  $\beta^2$  es el vector de onda generalizado,  $v_l^2$  es la velocidad longitudinal de propagación,  $k$  es el vector de onda y  $\lambda$  es la longitud característica del canal con forma de catenaria. Nótese que la Ec. (6.4) tiene la misma forma que se había predicho para las relaciones de dispersión en la Sección 5.1 [Ec. (5.4)]. Sólo que en este caso, el inverso de la longitud característica es la constante que se suma al vector de onda  $k$  para generar la constante de separación  $\beta$  (la cual también se definió como vector de onda generalizado).

Dado que ya se conoce de manera previa la relación de dispersión para un canal catenoidal, se desea usar esto para verificar la validez de los métodos numéricos implementados. Como se explicó en la Sección 5.1, estos métodos al menos determinan la frecuencia de corte, la cual ya es suficiente para determinar toda la relación de dispersión.

Usando el método frecuencial descrito en la Sección 5.2, se obtuvo el resultado resumido en la Figura 6.10. Nótese que el eje horizontal corresponde a la razón entre la frecuencia de oscilación y la velocidad de propagación, de tal manera que las unidades son de  $\mu\text{m}^{-1}$ , es decir, unidades de vector de onda. Para explicarlo mejor, el eje horizontal corresponde al vector de onda generalizado  $\beta$ . Esto se puede ver mejor si de la Ec. (6.4) se despeja  $\beta$  así:

$$\beta = \frac{\omega}{v_l} \quad (6.5)$$

Según el resultado obtenido en la Figura 6.10, el vector de onda generalizado a partir del cual el sistema acepta la propagación de ondas es aproximadamente  $1.16 \mu\text{m}^{-1}$ . Por otro lado, teóricamente, se espera que este corte se iguala a  $1/\lambda^2 = 1.1628 \mu\text{m}^{-1}$ . Esto quiere decir que hay plena concordancia entre lo simulado y lo esperado teóricamente, lo cual quiere decir que el método frecuencial propuesto resulta ser válido para el cálculo del corte de la relación de dispersión.

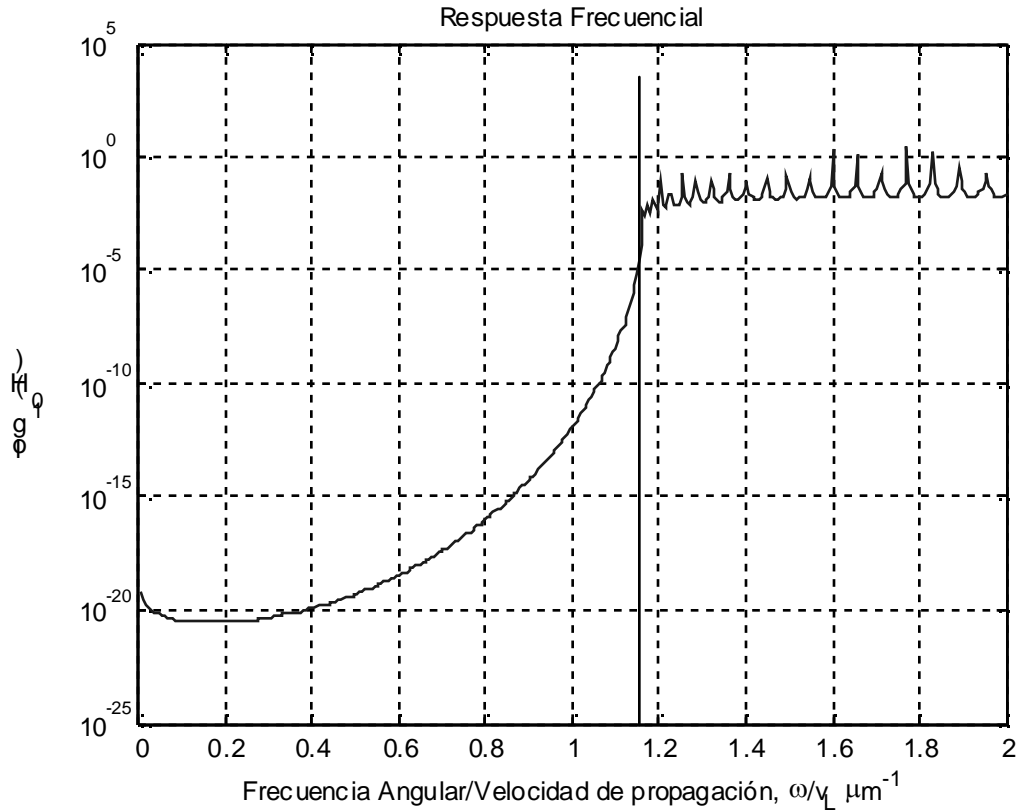


Figura 6.10. Respuesta frecuencial para un canal catenoidal simétrico de largo  $40 \mu m$  con longitud característica  $\lambda = 0.86 \mu m$ .

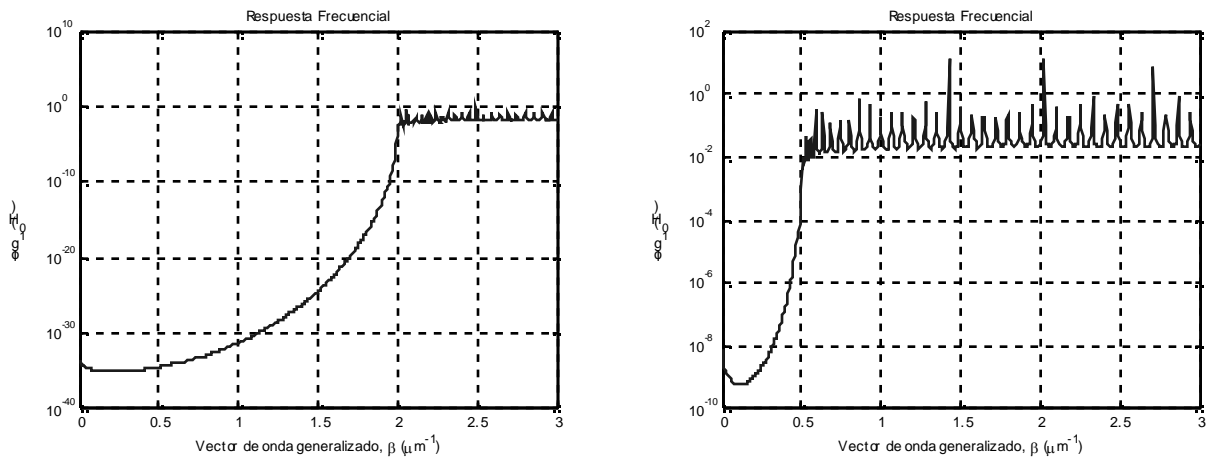


Figura 6.11. Respuesta frecuencial para canales catenoidales con longitud característica  $\lambda = 0.5 \mu m$  y  $\lambda = 2 \mu m$ . La longitud del canal en ambos casos es  $40 \mu m$ .

Con el ánimo de comprobar este resultado, en la Figura 6.11 se muestran las respuestas frecuenciales para canales catenoidales con distintas longitudes características  $\lambda$ . Nótese que para estas curvas de respuesta, el eje horizontal corresponde al vector de onda generalizado  $\beta$ . En la primera curva,  $\lambda = 2 \mu m$ ; en la segunda,  $\lambda = 0.5 \mu m$ . De

acuerdo a esto, se puede ver que los cortes respectivos son  $0.5$  y  $2 \mu\text{m}^{-1}$  respectivamente. Hay que aclarar que para ambas curvas, el largo del canal es  $40 \mu\text{m}$ .

Para que el método frecuencial implementado tenga resultados aceptables, es necesario que la longitud del canal sea mucho mayor comparado con la longitud característica de la catenaria. En la Figura 6.12 se ilustra mejor esta restricción. El largo del canal es  $4 \mu\text{m}$ , mientras que la longitud característica es  $2 \mu\text{m}$ . Esto quiere decir que la relación entre el área central y el área en los extremos del canal es aproximadamente  $1.54$ , lo cual quiere decir que el área transversal varía poco a lo largo del dominio evaluado. Esto último implica que el canal es prácticamente recto, lo cual implica que el corte esperado debe ser cero. Este comportamiento se aprecia claramente en la Figura 6.12 en la cual no se evidencia una frecuencia de corte definida.

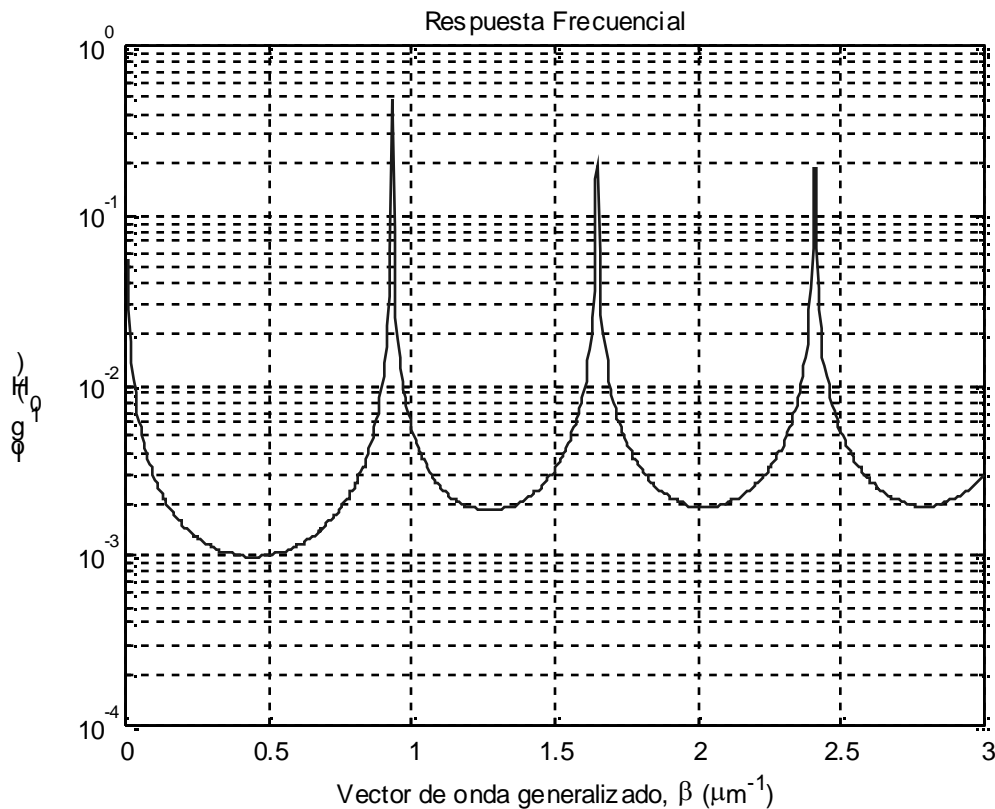


Figura 6.12. Respuesta frecuencial para un canal catenoidal de longitud característica  $\lambda = 2 \mu\text{m}$  y largo de  $4 \mu\text{m}$ .

El anterior resultado no quita del todo validez a lo obtenido anteriormente, sin embargo supone una limitación cuando se quiera analizar canales cuya función de área tenga concavidad negativa (es decir, ancha en la mitad y angosta en los extremos) pues el largo del canal debe ser menor que una valor dado, como es el caso de canales con forma de partícula esférica. Es por esto que se decidió implementar un método adicional para el cálculo de la frecuencia de corte de la relación de dispersión.



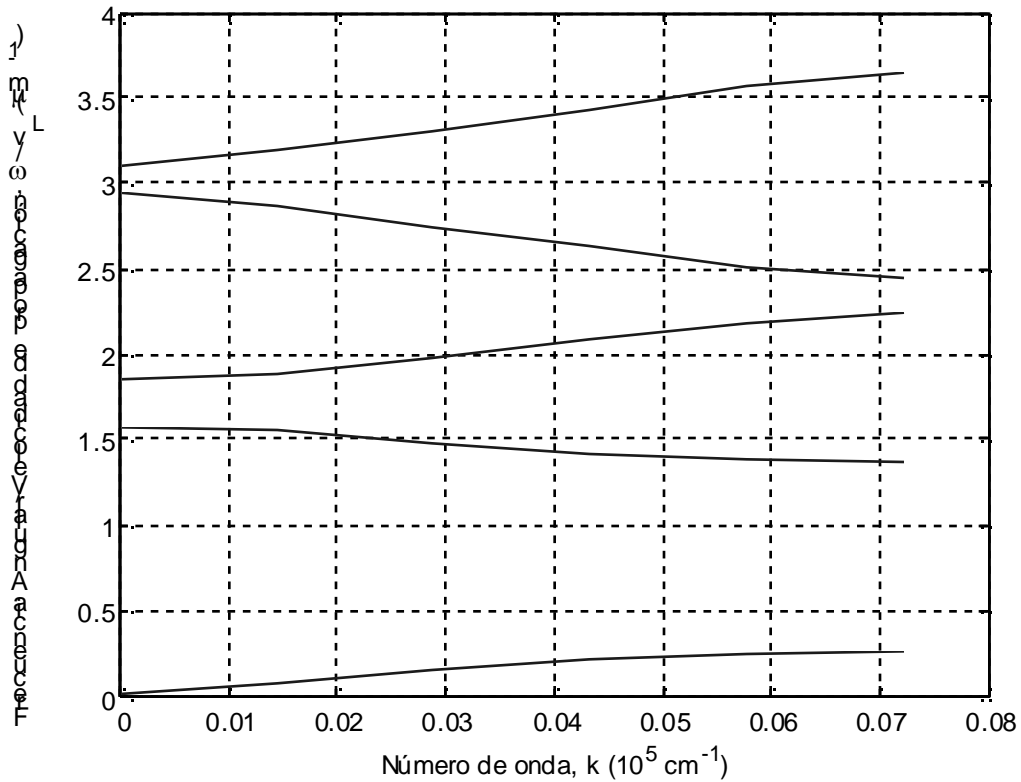


Figura 6.13. Relación de dispersión para un canal catenoidal simétrico con  $\lambda = 0.86 \mu\text{m}$ , con relación de área menor y mayor de 40 repetido en un arreglo periódico.

Usando el método de aproximación periódica, descrito en la Sección 5.3 se obtiene una estructura de bandas de los fonones longitudinales para un sistema compuesto por un arreglo periódico de canales. Para el caso de un canal catenoidal con el parámetro  $\lambda = 0.86 \mu\text{m}$  los resultados se muestran en la Figura 6.13. El eje vertical corresponde a la frecuencia de oscilación dividida entre la velocidad longitudinal de propagación, lo cual es el vector de onda generalizado  $\beta$ . Dado que es un sistema periódico, se forma una estructura de bandas que se repite de manera periódica a lo largo de  $k$ . El dominio en el cual se grafican las curvas, corresponde a la mitad de un período. El período de cada una de estas bandas es

$$K_{\text{periodo}} = \frac{2\pi}{L} \quad (6.6)$$

donde  $L$  es la longitud total del canal, el cual también corresponde a la distancia de periodicidad del sistema construido con muchos canales iguales conectados en forma sucesiva.

El resultado de la Figura 6.13 no es del todo contundente, sin embargo, si se grafica en un mismo eje cada una de las bandas obtenidas con un desfase sucesivo de  $K_{\text{periodo}}/2$ , e invirtiendo horizontalmente las bandas pares; y adicionalmente se grafica la relación de

dispersión esperada, se obtiene el resultados de la Figura 6.14. En este caso, el punto donde comienza la banda se encuentra bastante próximo a la relación de dispersión esperada. Nótese que la primera banda no tiene nada que ver con lo esperado, este resultado es explicado por el hecho que se está considerando un alambre de longitud finita, lo cual en cierto modo trata de tener una relación de dispersión que arranca en cero (es decir, un sistema que no tiene dispersión.)

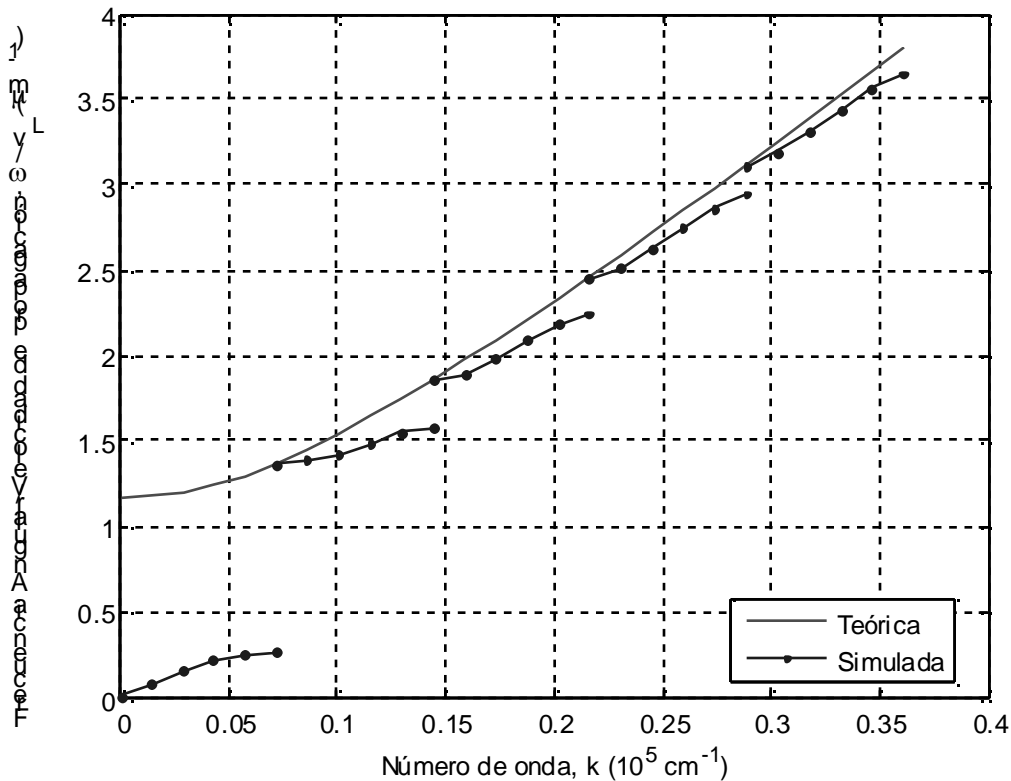


Figura 6.14. Comparación de la relación de dispersión teórica y la simulada trasladando cada una de las bandas obtenidas medio período para un canal catenoidal simétrico con  $\lambda = 0.86 \mu\text{m}$ , con relación de área menor y mayor de 40 repetido en un arreglo periódico.

Para el caso de la Figura 6.14, el largo del canal es  $4.35 \mu\text{m}$ . Dado que la longitud de cada una de las bandas está dada por la Ec. (6.4), si se desea obtener un mejor resultado del corte de la relación de dispersión, se debe hacer mucho más largo el canal. Por ejemplo, manteniendo  $\lambda = 0.86 \mu\text{m}$ , si el largo del canal aumenta a  $9.11 \mu\text{m}$  se obtiene el resultado que se presenta en la Figura 6.15. El resultado muestra que para el mismo dominio de vectores de onda, existe una mejor aproximación de la relación de dispersión, así como también de la frecuencia de corte.

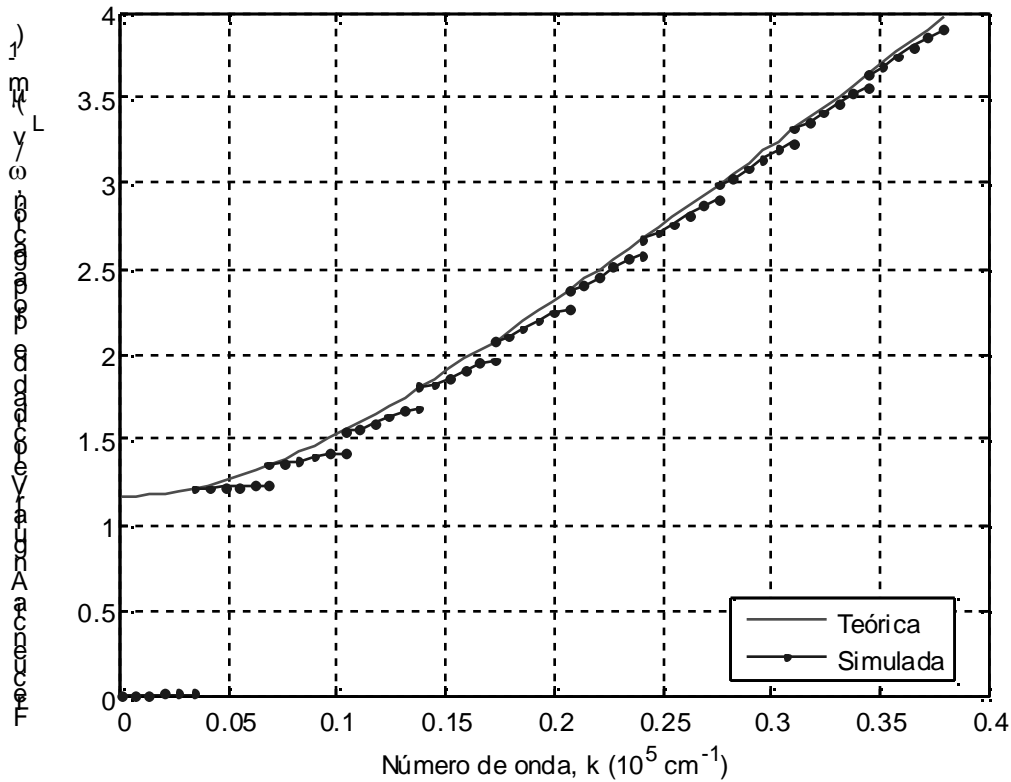


Figura 6.15. Comparación de la relación de dispersión teórica y la simulada trasladando cada una de las bandas obtenidas medio período para un canal catenoidal simétrico con  $\lambda = 0.86 \mu\text{m}$ , con relación de área menor y mayor de 10000 repetido en un arreglo periódico.

Finalmente, se puede decir que se comprobó numéricamente la predicción analítica que se hizo de la relación de dispersión para un alambre catenoidal, lo cual permite seguir usando los métodos descritos para otro tipo de estructuras.

## 6.2 Canal Cónico

### 6.2.1 Coeficiente de Transmisión

El canal cónico también fue estudiado por Rego [5]. En la Figura 6.16 muestra el esquema general de es tipo de canal. En la región 2, el área transversal es constante, mientras que en las regiones 1 y 3, el área transversal varía de acuerdo a

$$A(x) = 2w \tan(\theta)(x + a). \quad (6.7)$$

donde  $\theta$  es el ángulo de apertura de la sección cónica,  $w$  es el grosor del canal, y  $a$  es una constante de ajuste que asegura la continuidad de la función que describe el área transversal. Los parámetros que serán de interés a lo largo de la presente sección son el

ángulo de apertura de los contactos y el largo de la sección recta central. Es importante aclarar que se asumirá que el canal es perfectamente simétrico.

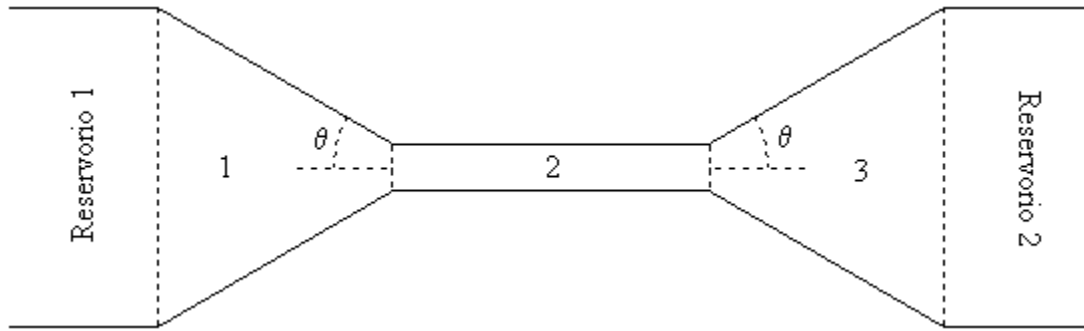


Figura 6.16. Canal recto con contactos cónicos, el grosor se mantiene constante en todo el dominio.

Como en la sección 2 del canal, la variación del área a lo largo del eje longitudinal es nula, entonces la ecuación que rige los fonones longitudinales es simplemente una ecuación de onda, la cual se presentó en la Ec. (3.17). Por otro lado, para las secciones 1 y 2 del canal, las ecuaciones diferenciales son respectivamente:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{1}{x-a} \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{v_l^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}. \quad (6.8)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{1}{x+a} \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{v_l^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}. \quad (6.9)$$

La solución analítica para las Ec. (6.8) y (6.9) está en términos de polinomios de Bessel de primer grado de la primera y segunda clase. Rego [5] aprovechó esto para obtener la probabilidad de transmisión en función del número de onda (Figura 6.1).

En la Figura 6.17 se presenta la curva del coeficiente de transmisión para un canal cónico con una región central de 1  $\mu\text{m}$  de largo. Los contactos cónicos tienen un ángulo de apertura de 30°, adicionalmente, el área transversal al extremo de los contactos es 40 veces mayor que en la región central recta. El alambre recto central tiene una sección transversal de 50 nm  $\times$  50 nm; mientras que en el extremo de los contactos, el área transversal es de 2000 nm  $\times$  50 nm. Nótese que el espesor del canal se mantiene constante a lo largo del eje longitudinal.

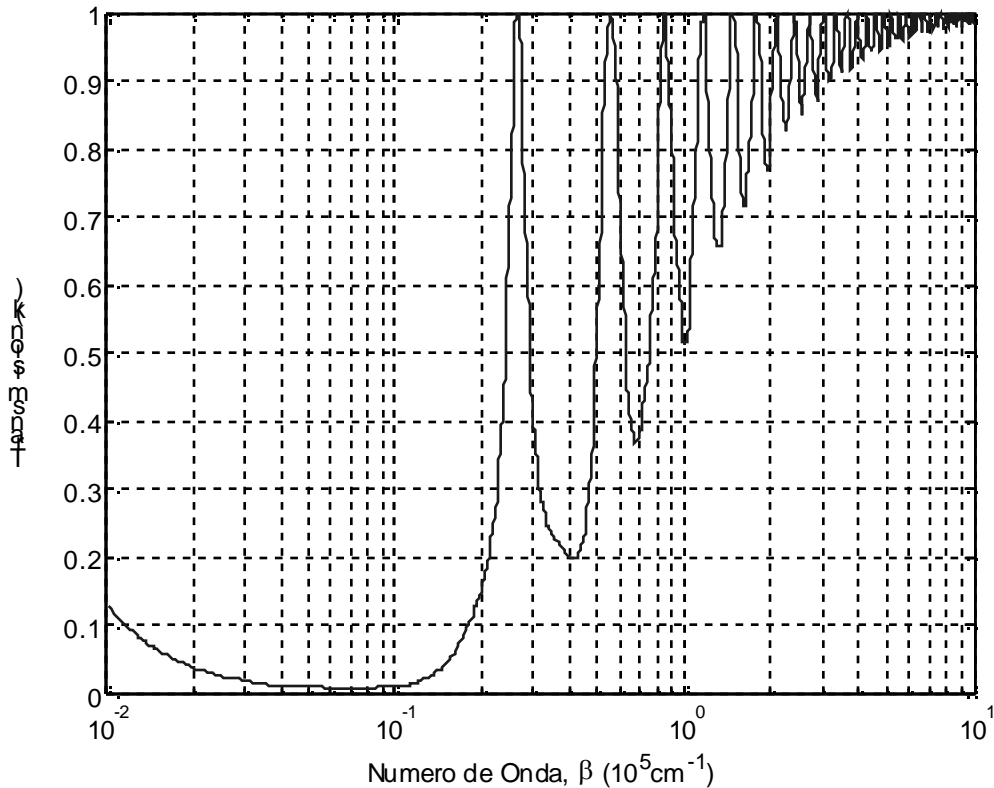


Figura 6.17. Coeficiente de transmisión en función del vector de onda generalizado  $\beta$  para un canal unidimensional de  $1 \mu\text{m}$  de largo con contactos cónicos con largo total de  $4.4 \mu\text{m}$  con área transversal de  $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$  en el centro y  $2000 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$  en los extremos.

El ángulo de apertura y la variación de área transversal implica que la longitud para cada contacto es  $1.7 \mu\text{m}$ , lo que resulta en una longitud total para el canal de  $4.4 \mu\text{m}$ ; además, la constante de ajuste  $a$  es  $-0.4567 \mu\text{m}$ . Lo anterior, permite describir el área transversal del canal de la siguiente manera:

$$A(x) = \begin{cases} 0.1 \tan\left(\frac{\pi}{6}\right)(x - 0.4567)\mu\text{m}^2; & 2.19\mu\text{m} > |x| > 0.5\mu\text{m} \\ 2.5 \times 10^{-3} \mu\text{m}^2; & |x| < 0.5\mu\text{m} \end{cases}, \quad x \text{ en } \mu\text{m}$$

La curva presentada en la Figura 6.17 fue obtenida usando el método de diferencias finitas descrito en la Sección 4.4. Los resultados obtenidos son exactamente iguales a los obtenidos analíticamente por Rego [5] (Figura 6.1). Esto permite hacer aún más válido el uso del método de diferencias finitas para este tipo de cálculos.

El uso del método de Frobenius conduce directamente a los polinomios de Bessel, que hacen parte de la solución analítica de las Ec. (6.8) y (6.9).

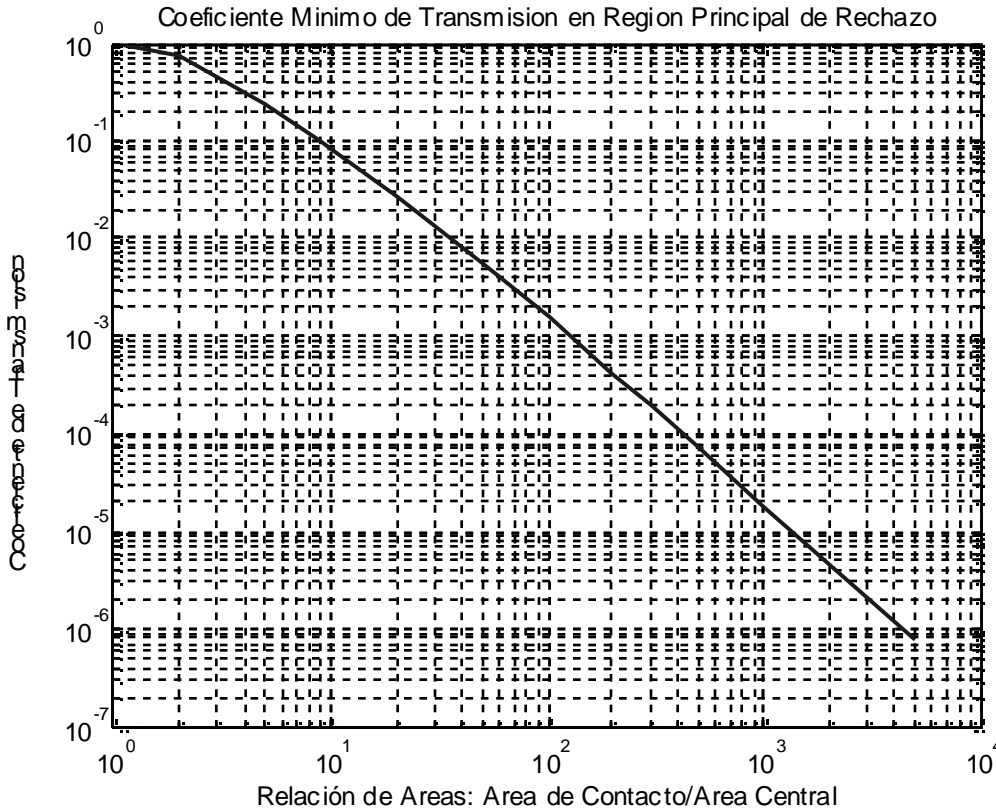


Figura 6.18. Curva que relaciona el mínimo coeficiente de transmisión para variaciones en la relación existente entre el área transversal en el centro y extremo de un canal unidimensional de  $1 \mu\text{m}$  de largo con contactos cónicos con largo total de  $4.4 \mu\text{m}$  con área transversal de  $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$  en el centro.

Al igual para el canal catenoidal, se varió la relación entre el área central y el área en los contactos para obtener el valor mínimo del coeficiente de transmisión (Figura 6.18). El largo del canal se mantuvo constante, de tal manera que se varió el ángulo de apertura de la sección cónica. Al igual que para la catenaria, cuando el área mínima y la máxima tienden a ser iguales, el pico mínimo de transmisión se acerca a uno, indicando que el canal es prácticamente recto; por otro lado cuando el área central es mucho más pequeña que el área en los extremos del canal, los picos de transmisión se hacen mucho más pronunciados y los máximos de transmisión más profundos.

Por otro lado, el ancho de la región de reflexión máxima presenta el mismo comportamiento que en la catenaria, pero en este caso, el valor máximo de dicha banda de reflexión es menor que  $0.1\pi \times 10^{-5} \text{ cm}^{-1}$  (Figura 6.19).

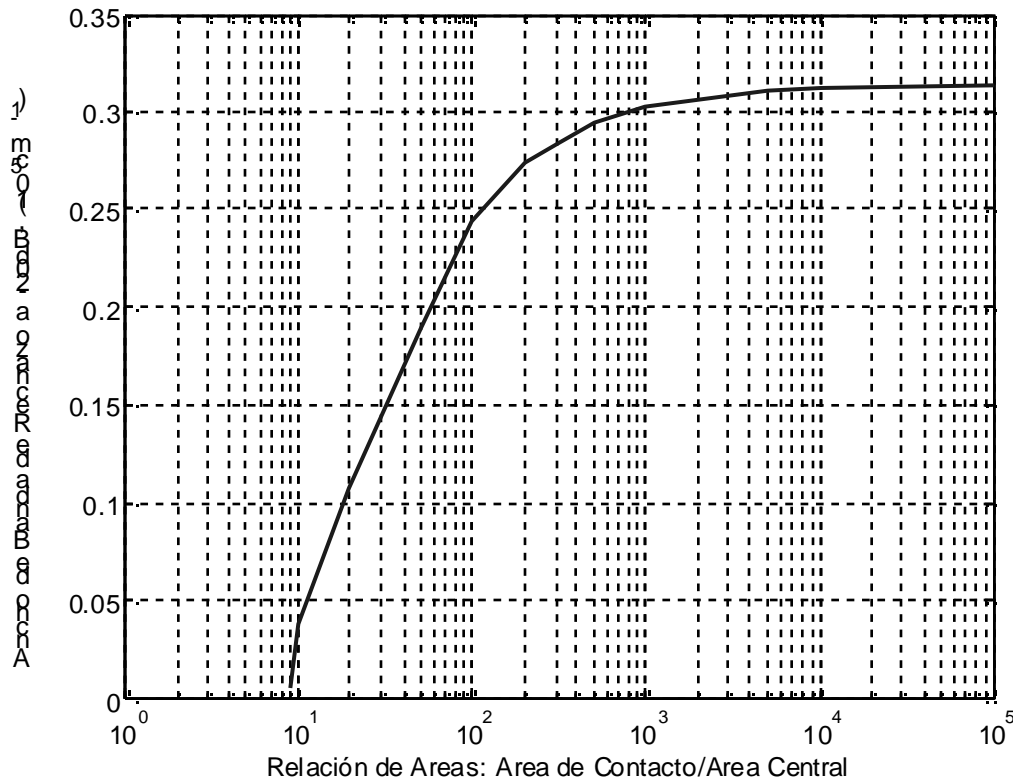


Figura 6.19. Ancho de la banda de rechazo en función de la relación de áreas para un canal unidimensional de 1  $\mu\text{m}$  de largo con contactos cónicos con largo total de 4.4  $\mu\text{m}$  con área transversal de 50 nm  $\times$  50 nm en el centro.

Se varió el largo de la región central recta del canal asegurando siempre que la longitud de cada contacto cónico fuera 1.7 veces mayor que la longitud de la región central; además, que la relación entre el área central y el área en los contactos fuera 40. Los resultados son presentados en la Figura 6.20. Cuando la longitud del canal central es (a) 0.01  $\mu\text{m}$  la región de reflexión máxima se encuentra entre 1 y  $10 \times 10^{-5} \text{ cm}^{-1}$ , si la longitud del canal se multiplica por 10, entonces la región de reflexión máxima se corre una década hacia la izquierda (b). La forma de la curva de transmitancia no varía, únicamente se producen desplazamientos en el eje logarítmico, tal como ocurría para el alambre catenoidal cuando se variaba el valor del parámetro  $\lambda$ .

El hecho que la forma de la curva de transmisión se mantenga para distintos largos del canal central (claro está, en escala logarítmica) implica que la distancia entre picos sucesivos de transmisión unitaria es inversamente proporcional a alguna potencia del largo del canal central. Esto resulta de gran importancia, pues este simple parámetro permite controlar el ancho de los valles entre los picos unitarios de transmisión.

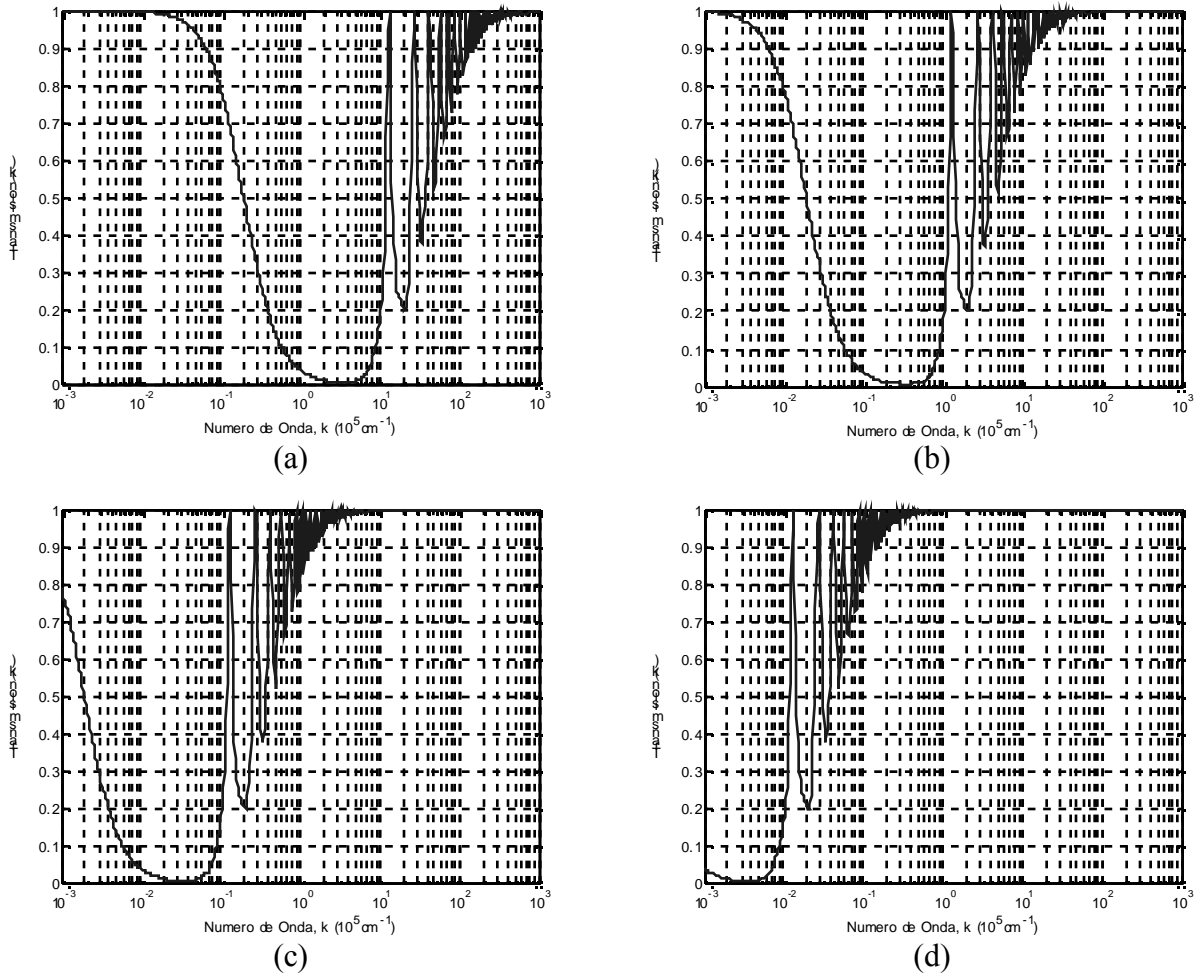


Figura 6.20. Curvas de transmisión para un canal recto con contactos cónicos siendo el largo de cada uno de los contactos 1.7 veces más grande que el largo de la región central, adicionalmente, el área transversal es  $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$  en el centro y  $2000 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$  en los extremos. El largo de la región central es (a)  $0.01 \mu\text{m}$ , (b)  $0.1 \mu\text{m}$ , (c)  $1 \mu\text{m}$  y (d)  $10 \mu\text{m}$ .

Tomando los resultados de la Figura 6.20, toma la ubicación de los cuatro primeros picos de transmisión unitaria y se grafica respecto a la longitud del canal central. Este resultado se muestra en la Figura 6.21. El número de onda en que ocurre cada uno de los picos disminuye de manera inversamente proporcional al aumento en la longitud del canal central. Es por esta razón que cada una de las curvas presentadas en la Figura 6.21 es paralela a todas las demás. Esto implica que la separación entre picos consecutivos es también inversamente proporcional a la longitud del canal.

Al igual que con el canal catenoidal, en este caso se puede controlar el ancho de la región reflexión máxima y el punto donde esta se presenta, sólo variando el largo de la región central y la relación de áreas.



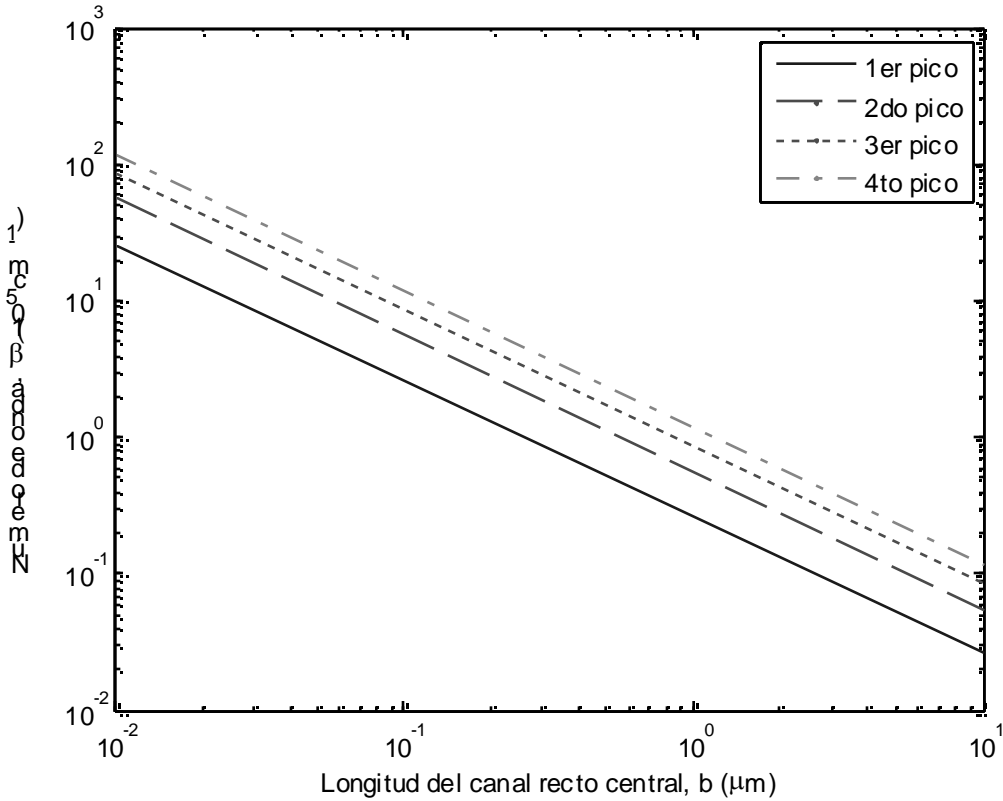


Figura 6.21. Ubicación de los primeros cuatro picos de transmisión unitaria en función de la longitud del canal central recto. La longitud de cada contacto cónico es 1.7 veces la longitud de la parte central recta. El transversal es  $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$  en el centro, y  $2000 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$  en los extremos.

## 6.2.2 Relación de Dispersión

Según lo obtenido por Rego [5], el canal de contactos cónicos no produce dispersión en las ondas longitudinales que se desplazan a través de él. Esto quiere decir que el corte de la relación de dispersión es cero; asimismo, implicando que existe una relación lineal entre el vector de onda longitudinal y la frecuencia de oscilación. En resumen, la relación de dispersión esperada es:

$$\omega^2(k) = v_l^2 \beta^2 = v_l^2 k^2. \quad (6.10)$$

Nótese que el vector de onda generalizado es, en este caso, igual al vector de onda regular  $k$  de los fonones que se propagan por el canal.

Con el ánimo de verificar este resultado se usarán los dos métodos numéricos especificados en la Sección 5. Considérese un canal recto de  $1 \mu\text{m}$  de largo conectado a dos reservorios térmicos por contactos cónicos con un ángulo de apertura  $\theta = \pi/6$ . El área transversal en los extremos de los contactos es 40 veces mayor que en el centro del canal. Usando el método frecuencial sobre este canal, se obtiene el resultado presentado en la

Figura 6.22. Lo obtenido no es del todo concluyente, no se puede observar un vector de onda generalizado desde el cual el sistema empiece a mostrar una respuesta sostenida. De hecho si se observa bien la curva de respuesta, se aprecian varios valles que pueden sugerir gaps de energía, sin embargo, dadas las hipótesis matemáticas sobre las que se está trabajando, esto es imposible.

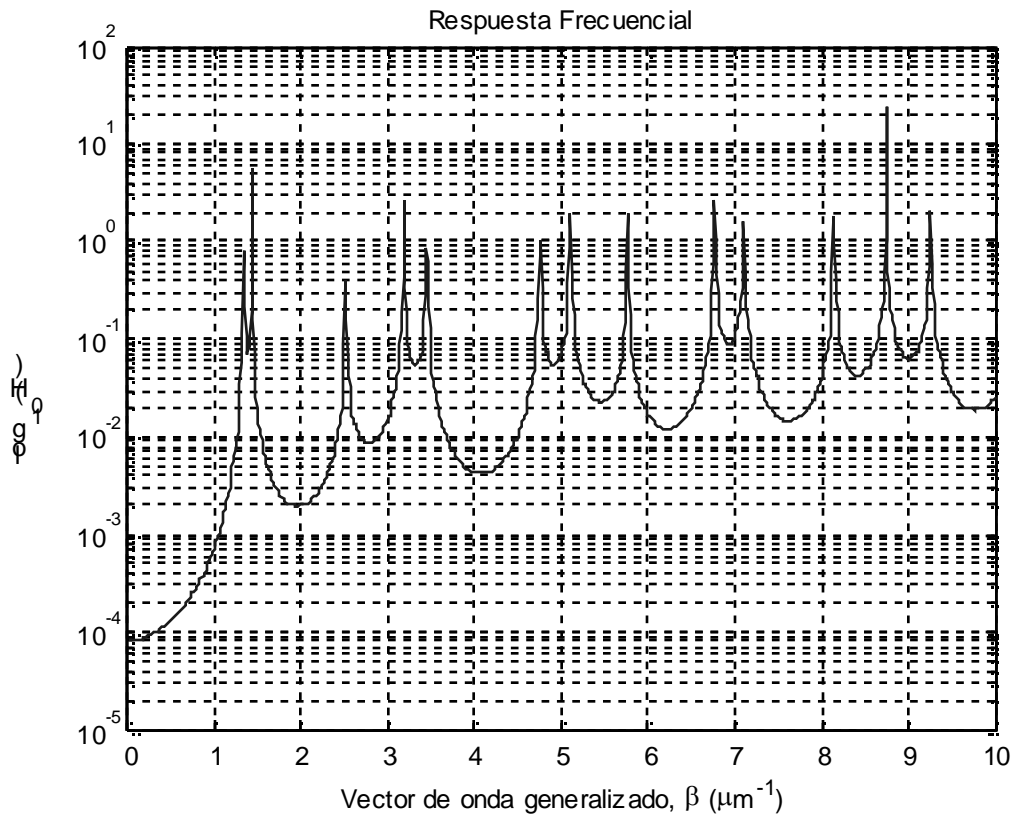


Figura 6.22. Respuesta frecuencial para un canal recto con contactos cónicos. El largo del canal recto es 1  $\mu\text{m}$ , el ángulo de apertura de los contactos cónicos es  $\pi/6$ . El área transversal en la región central es 50 nm  $\times$  50 nm, mientras que en los extremos, es 50 nm  $\times$  2000 nm.

Cuando se usó este método para determinar la frecuencia de corte de la relación de dispersión para la catenaria, se descubrió que si la longitud del canal se hacía más grande, entonces los resultados obtenidos eran más precisos. En la Figura 6.23 se muestra la respuesta frecuencial del mismo canal con contactos cónicos, sólo que este caso, los contactos son 25 veces más largos. El ángulo de apertura se mantiene igual. El largo total del alambre es entonces 87  $\mu\text{m}$ . Este cambio implicó hacer más fina la partición del dominio, de tal manera que se asegure resultados confiables por parte del método numérico usado. La respuesta frecuencial obtenida muestra que el canal empieza a mostrar resonancias desde frecuencias pequeñas, lo cual indica que la frecuencia de corte puede ser cero. Adicionalmente, en este caso ya no se presentan los valles pronunciados que se presentaban en la Figura 6.22. En síntesis, puede afirmarse que la frecuencia de corte es cero, comprobando lo obtenido teóricamente. Sin embargo se usará la aproximación periódica para comprobar estos resultados.

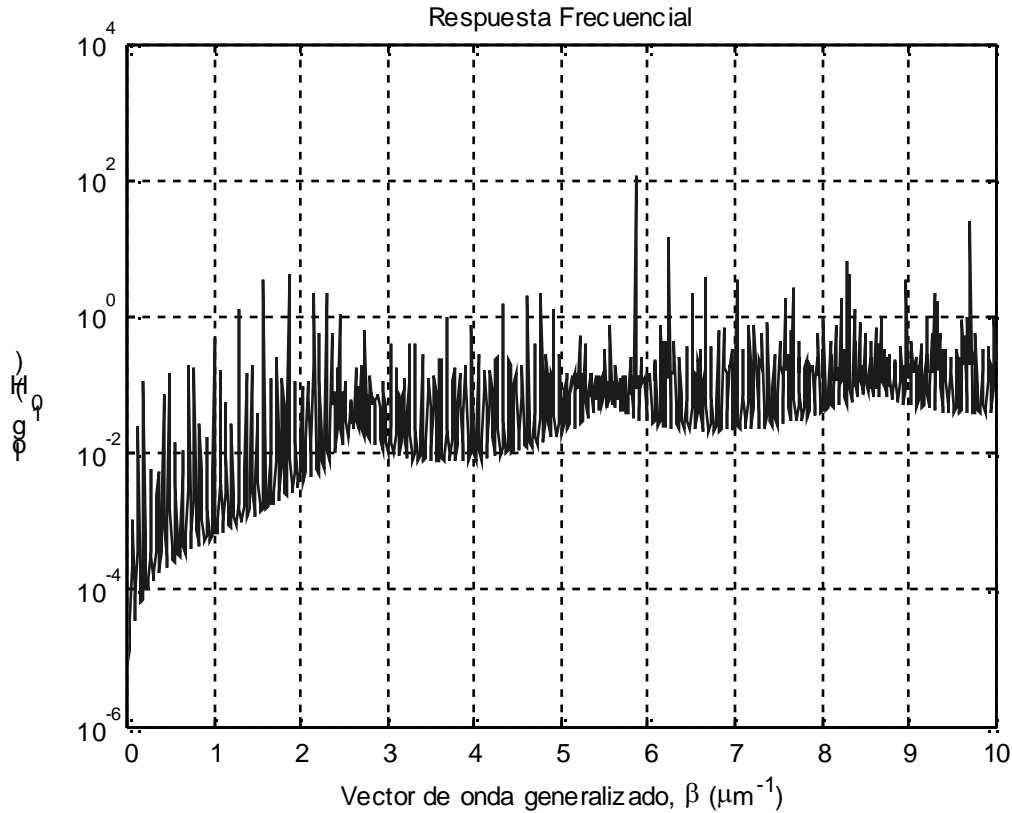


Figura 6.23. Respuesta frecuencial para un canal recto con contactos cónicos. El largo del canal recto es  $1 \mu\text{m}$ , el ángulo de apertura de los contactos cónicos es  $\pi/6$ . El área transversal en la región central es  $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$ , mientras que en los extremos, es  $50 \text{ nm} \times 50000 \text{ nm}$ .

Tomando el canal original, descrito anteriormente, se construyó un sistema periódico. La relación de dispersión obtenida se muestra en la Figura 6.24a. En ella se compara la relación de dispersión teórica esperada con la obtenida mediante simulación. En este caso cada una de las bandas desplazadas no coinciden en su extremo, como en el caso de la catenaria, con lo esperado analíticamente; sino que la relación de dispersión esperada corta en un punto intermedio cada una de las bandas.

El comportamiento de las tres primeras bandas puede sugerir que sí existe un corte. Sin embargo, de acuerdo a la Ec. (6.6), el ancho de cada una de estas bandas es inversamente proporcional al largo del canal, así que para obtener una mejor resolución se aumentó el largo del canal casi 2 veces. El resultado se muestra en la Figura 6.24b. Como se puede apreciar en este caso, la segunda banda discreta se encuentra mucho más cerca del origen que la segunda banda de la Figura 6.24a. Nótese además que está casi 2 veces más cerca, lo cual indica que si el largo del canal se aumenta indefinidamente, la relación de dispersión obtenida se acercará a la obtenida analíticamente. Este comportamiento, es evidencia de una relación de dispersión lineal.

En la Figura 6.25, se muestra la relación de dispersión cuando el canal es 100 veces más largo que el original, nótese que es prácticamente lineal desde el principio. Además,

hay que notar que el eje de valores horizontal es mucho más pequeño que en los casos anteriores, lo cual indica una muy buena precisión en el cálculo.

En conclusión se puede afirmar lo siguiente: Para un canal con contactos cónicos, la relación de dispersión es lineal. Además, en cuanto a los métodos numéricos empleados, el de aproximación periódica resulta mucho más confiable y adecuado para obtener la relación dispersión, pues no sólo permite obtener la frecuencia de corte, sino también permite obtener una aproximación discontinua de toda la curva.

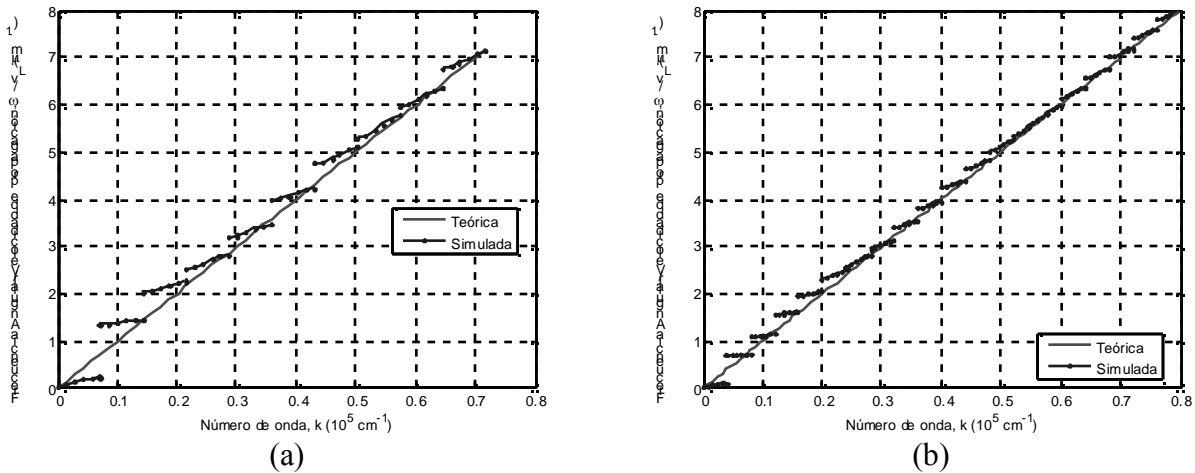


Figura 6.24. Comparación de la relación de dispersión teórica y la simulada trasladando cada una de las bandas obtenidas medio período para un canal recto de  $1 \mu\text{m}$  con contactos cónicos de un ángulo de apertura  $\pi/6$ . El área en los extremos es: (a) 40 y (b) 80 veces mayor que en el centro.

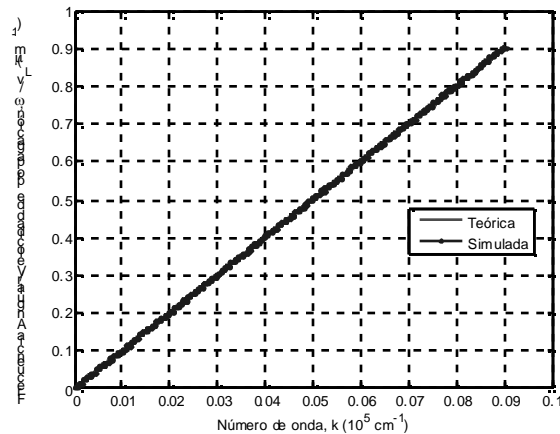


Figura 6.25. Comparación de la relación de dispersión teórica y la simulada trasladando cada una de las bandas obtenidas medio período para un canal recto de  $1 \mu\text{m}$  con contactos cónicos de un ángulo de apertura  $\pi/6$ . El área en los extremos es 4000 veces mayor que en el centro.

### 6.3 Canal Recto

El canal recto puede ser analizado como un caso especial del canal con contactos cónicos cuando el ángulo de apertura  $\theta$  de los contactos tiende a  $\pi/2$ , esto provoca un cambio abrupto en el área transversal del alambre. Esto implica que el comportamiento de los fonones longitudinales está regido por la Ec. (3.17). Este canal recto tiene un área transversal distinta a la de los reservorios, tal como se muestra en la Figura 6.26.

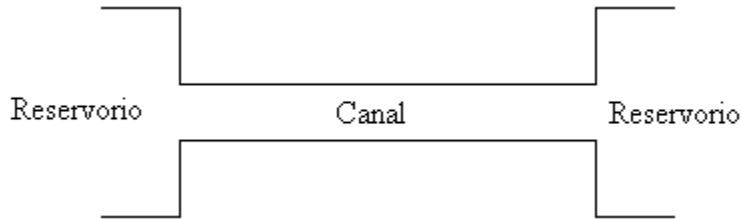


Figura 6.26. Esquema de un canal recto, existe una variación instantánea en el área transversal en el punto de contacto entre el canal y el reservorio.

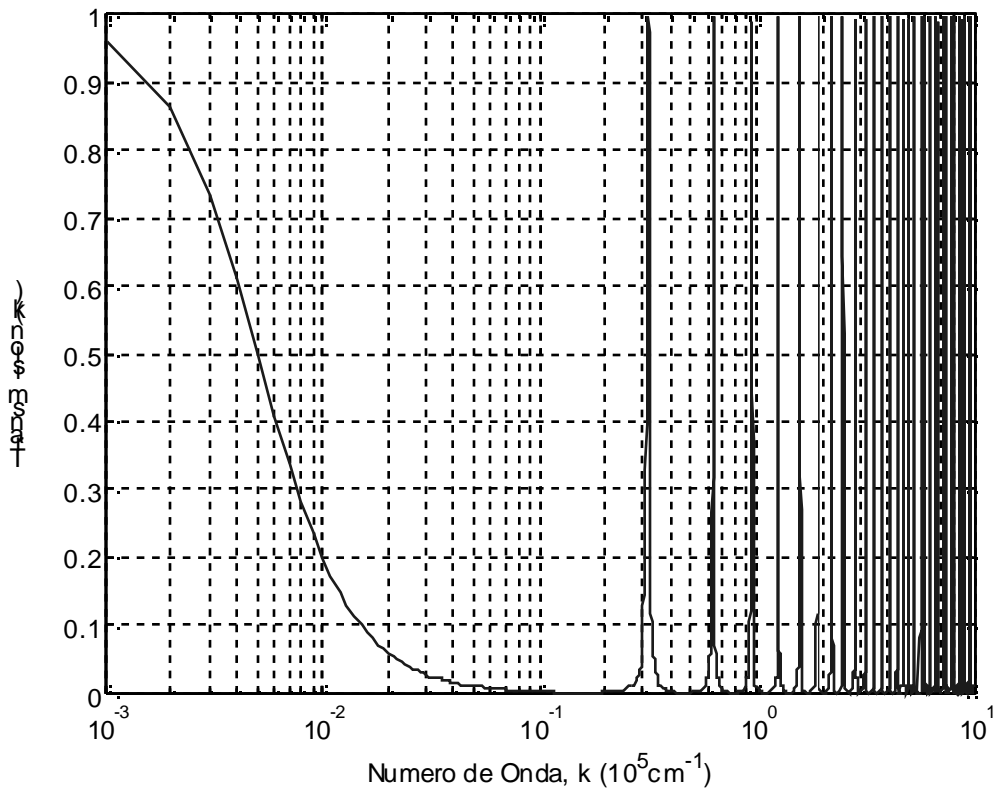


Figura 6.27. Coeficiente de transmisión en función del vector de onda  $k$  para un canal unidimensional de 1  $\mu\text{m}$  de largo con área transversal de  $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$  en el centro y  $2000 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$  en los extremos.

El comportamiento del coeficiente de transmisión en función del número de onda  $k$  (en este caso, el vector de onda  $k$  es el mismo vector de onda generalizado  $\beta$  pues no hay

variación en el área transversal) para un canal de  $1 \mu\text{m}$  se muestra en la Figura 6.27, la relación entre el área del canal central y el área del contacto es de 40.

El coeficiente de transmisión mostrado en la Figura 6.27, presenta una región de reflexión máxima inicial seguida de varios picos bien definidos en los que la transmisión se hace uno separados por valles en los que la transmisión se hace prácticamente cero. La separación entre los picos parece no ser constante, sin embargo, al repetir la gráfica con un eje lineal y no logarítmico (Figura 6.28) se ve que la separación entre picos de transmisión sucesivos es constante, el valor de dicha separación  $0.314 \times 10^{-5} \text{ cm}^{-1}$ .

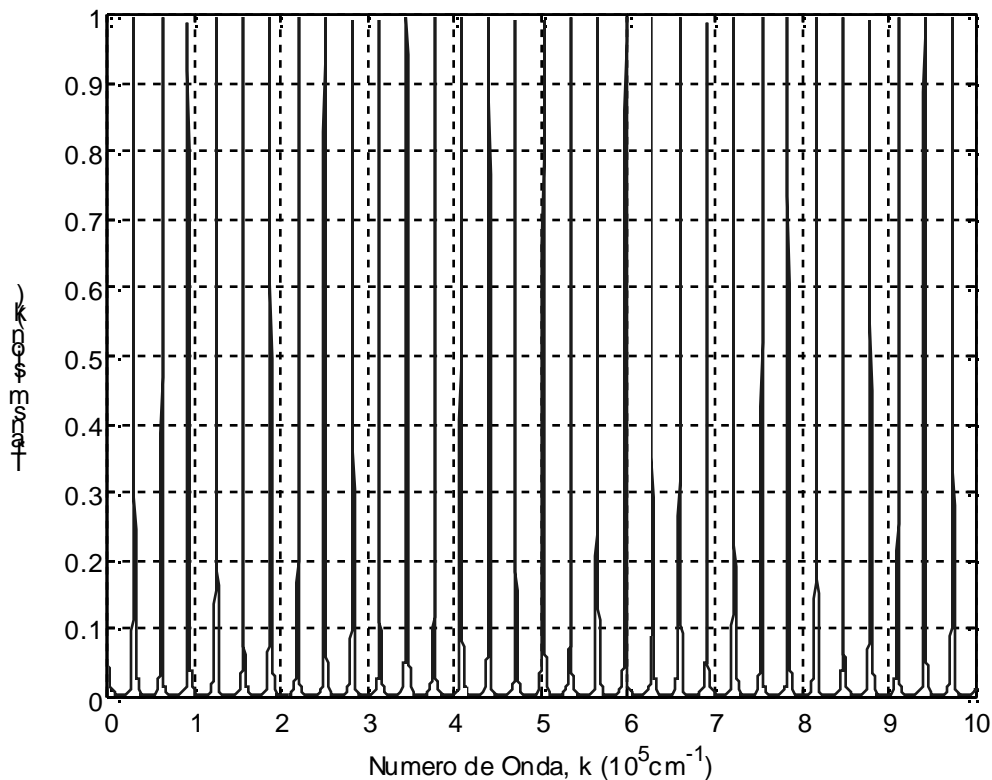


Figura 6.28. Coeficiente de transmisión en función del vector de onda  $k$  para un canal unidimensional de  $1 \mu\text{m}$  de largo con área transversal de  $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$  en el centro y  $2000 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$  en los extremos.

Para el canal catenoidal y el recto con contactos cónicos, el ancho de la región de reflexión máxima estaba gobernado por el largo de la región más angosta del canal. Así, que se esperaba que en este caso, la separación entre picos consecutivos de transmisión esté también gobernada por el largo del nanoalambre.

Resolviendo analíticamente el problema de dispersión como el definido en la Sección 4.3 se encuentra que la transmisión se hace unitaria cuando

$$k = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6.11)$$

donde  $a$  es la longitud del alambre. Lo cual quiere decir que la separación entre picos consecutivos de transmisión es  $\pi/a$ . En este análisis la forma de la onda que se propaga al interior del canal es también de la forma:

$$u_2(x) = De^{ikx} + Ee^{-ikx} \quad (6.12)$$

En la ecuación (6.11) si se escoge el valor de  $a$  como  $1 \mu\text{m}$ , entonces los picos de transmisión se presentarían en  $k = n\pi \mu\text{m}^{-1}$ , lo cual implica una separación entre picos de  $\Delta k = \pi \mu\text{m}^{-1}$ , que expresado en  $[\text{cm}^{-1}]$  es igual a  $0.1\pi \times 10^{-5} \text{cm}^{-1} \approx 0.314 \times 10^{-5} \text{cm}^{-1}$  que es justamente el valor obtenido a partir de las simulaciones.

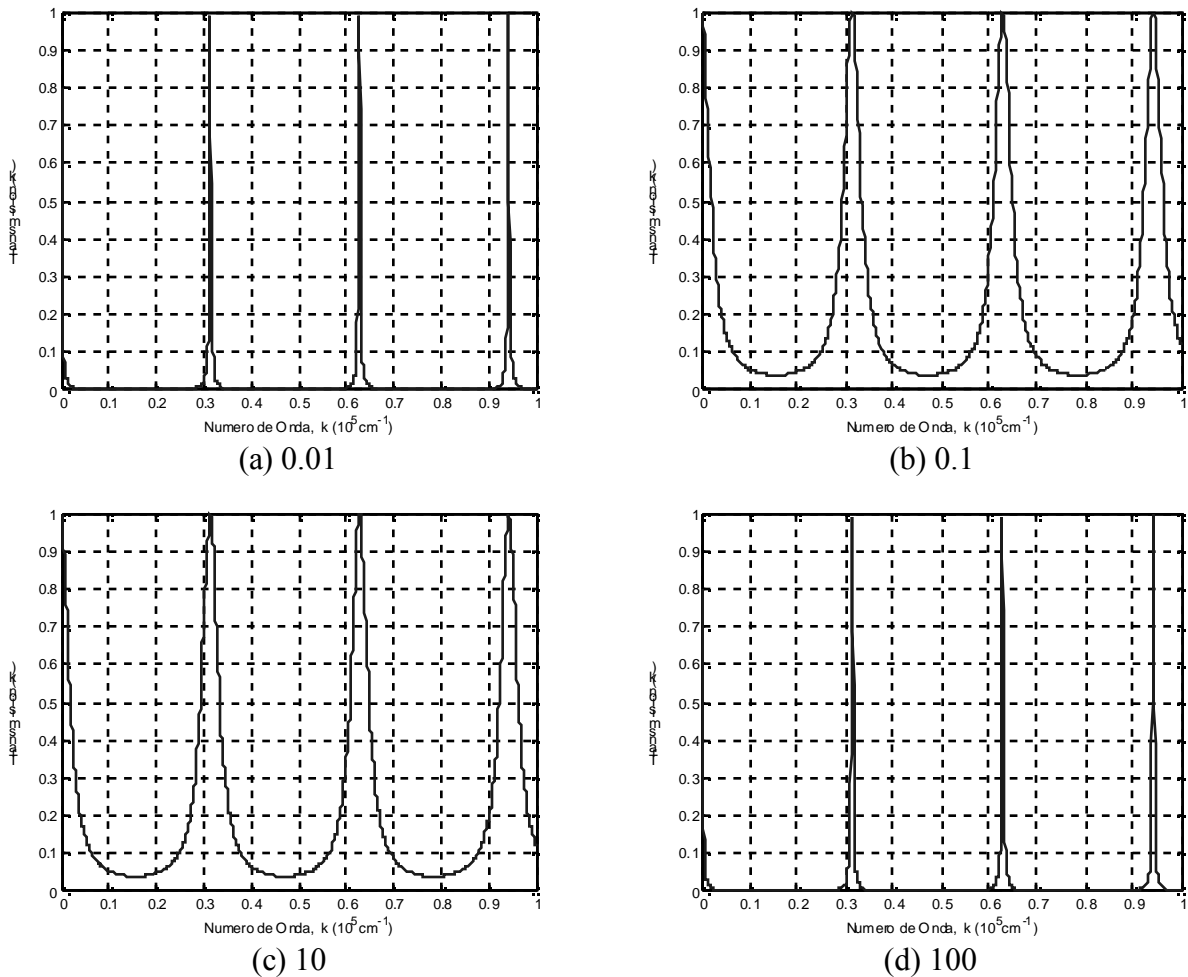


Figura 6.29. Coeficientes de transmisión para un canal recto en el que la relación entre el área de los contactos y el área del alambre es (a) 0.01, (b) 0.1, (c) 10 y (d) 100.

Ahora, la relación entre el área del alambre y el área del contacto puede afectar el coeficiente de transmisión. En la Figura 6.29 se muestra el efecto de variar la relación de áreas. En (a) y (b), el área de los contactos es menor que el área transversal del alambre y en (c) y (d) el área de los contactos es mayor que el área del alambre. Las gráficas (a) y (d) son iguales. En la primera el área del contacto es 100 veces menor y en la segunda, 100 veces mayor. Lo mismo ocurre entre las curvas (b) y (c) en las que el área del contacto es 10 veces mayor y 10 veces menor que el área del alambre.

Según las curvas de la Figura 6.29, el efecto de variar la relación de áreas es hacer más o menos definidos los picos de transmisión máxima, cuando la relación de áreas es cercana a uno, lo picos de transmisión pierden su definición en tanto que el alambre tiende a ser un alambre recto totalmente uniforme en el cual no se presenta reflexión alguna y la transmisión es siempre unitaria. Adicionalmente se ve que entre más separada esté la relación de áreas de la unidad, los mínimos de reflexión se hacen más pronunciados y cercanos a cero, esto se puede apreciar más claramente en la Figura 6.30, en la cual el mínimo de transmisión tiene un valor máximo igual a uno cuando el alambre es completamente recto, es decir, no hay reflexiones. Por otro lado la reflexión es máxima cuando la relación de áreas es o bien muy cercana a cero o tiende a infinito.

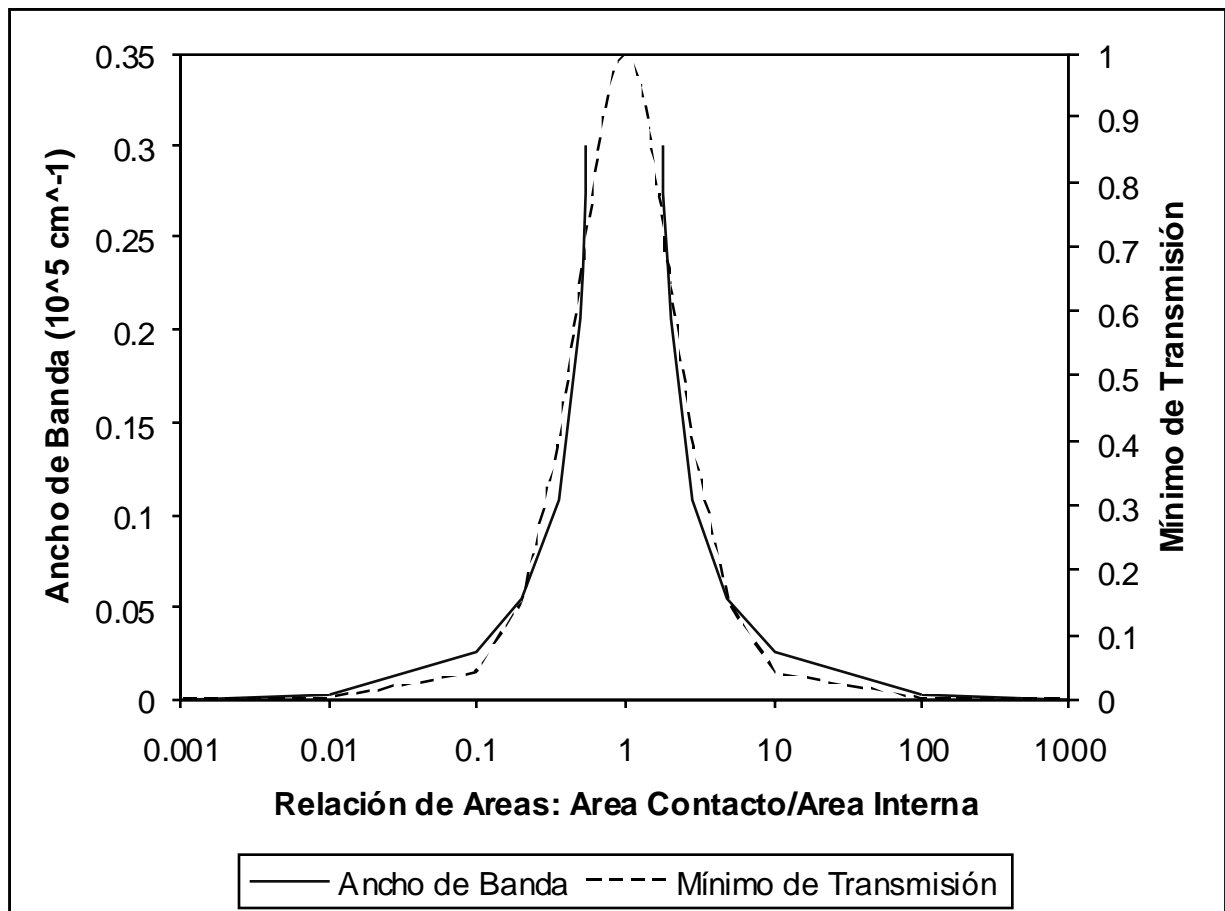


Figura 6.30. Ancho de los picos de transmisión para una atenuación de la transmisión de -3dB. También se muestra el mínimo de transmisión.



El ancho de los picos de transmisión (definidos arbitrariamente como los rangos en los que el coeficiente de transmisión es mayor que -3dB) es más pequeño y definido cuando la relación de áreas es muy grande o muy pequeña, es decir, el factor de calidad se hace muchísimo más alto en estas condiciones (ver Figura 6.30).

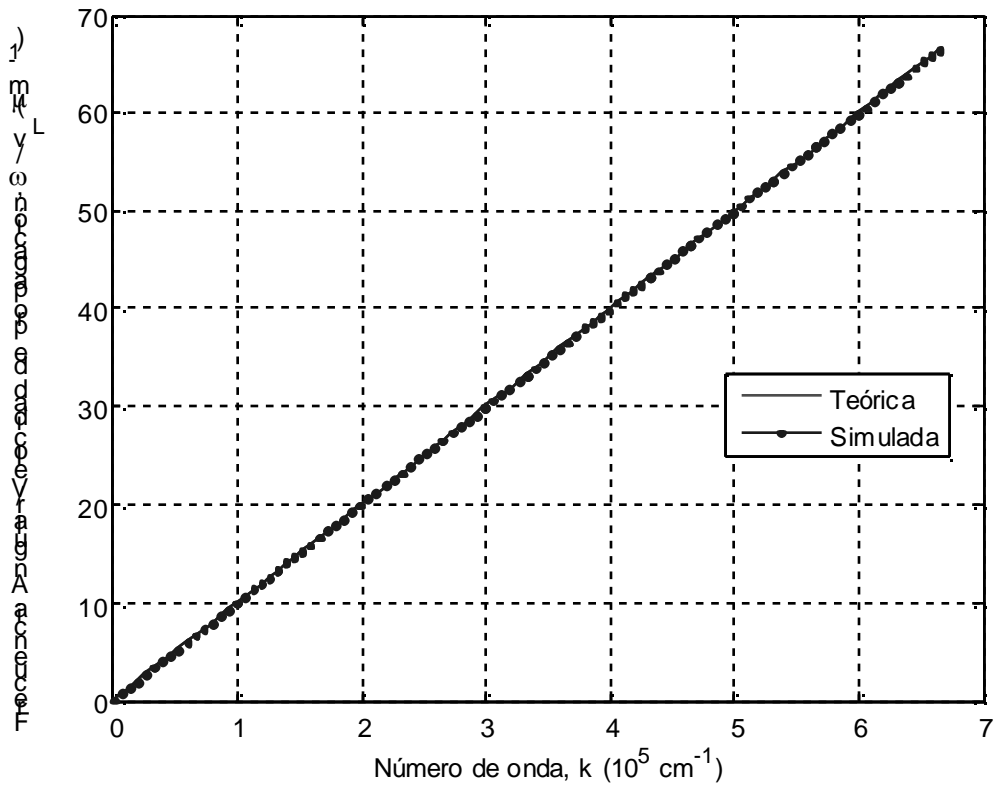


Figura 6.31. Relación de dispersión para un alambre recto.

Resulta claro que la relación en este caso debe ser lineal, sin embargo se decide usar el método de aproximación periódica para comprobar esto; el resultado que se muestra en la Figura 6.31 para un canal de  $1 \mu\text{m}$  de largo permite validar el uso del método numérico mencionado.

## 7 PARTICULA ESFÉRICA

### 7.1 Coeficiente de Transmisión

Ávila [7] analizó los coeficientes de transmisión para canales conformados por partículas esféricas truncadas en los extremos, tal como se muestra en la Figura 7.1, donde  $R$  es el radio de la partícula y  $d$  es el diámetro del contacto en cada extremo del canal.

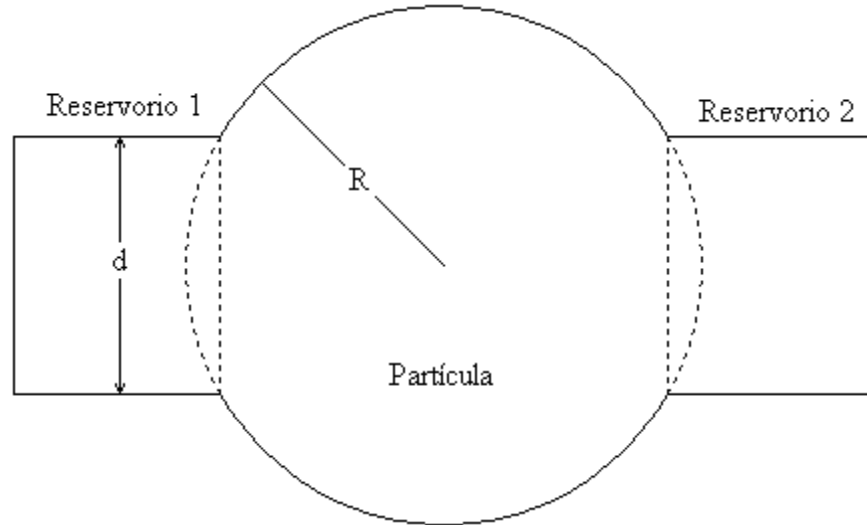


Figura 7.1. Canal térmico conformado por una nanopartícula esférica truncada ( $d < 2R$ ).

En este caso la ecuación diferencial que gobierna la propagación de las vibraciones longitudinales a través la partícula es:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{2x}{R^2 - x^2} \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{v_l^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \quad (7.1)$$

donde  $R$  es el radio de la partícula,  $x$  el eje de propagación y  $v_l$  la velocidad longitudinal de propagación. Los coeficientes de transmisión obtenidos por Ávila [7] para este tipo de partículas se muestran en la Figura 7.2. El método empleado para solucionar la Ec. (7.1) fue Frobenius. Las curvas de transmisión presentan variaciones significativas cuando el valor del diámetro de contacto  $d$  varía (el radio  $R$  es el mismo para todos los casos [200 nm]). Lo interesante de las curvas aquí presentadas es que presentan muchos picos de transmisión para números de onda mayores a  $1 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ . Estos picos de transmisión ocurren en números de onda similares en todos los casos. La ocurrencia de estos picos puede ser explicada por sucesivas reflexiones al interior de la nanopartícula, las cuales dependen del largo total de la misma. Es importante notar también que el primer pico de transmisión siempre se presenta aproximadamente  $1 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ , lo cual quiere decir que la variación del diámetro del contacto no tiene mucho efecto sobre la longitud característica

de la estructura que es la que define el punto de inicio de los picos y la separación entre ellos.

Usando diferencias finitas se obtuvieron los resultados de la Figura 7.3 para una esfera de radio 200 nm y con las mismas longitudes de truncamiento usadas por Ávila. En este caso, el comportamiento es similar al reportado por Ávila (Figura 7.2). La ubicación de los primeros cinco o seis picos ocurre para las curvas (a), (b) y (c) de la Figura 7.2 y Figura 7.3 en los mismos puntos. Esta semejanza en las respuestas obtenidas sólo se mantiene para vectores de onda menores que  $5 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ ; a partir de este número de onda se llega al límite del radio de convergencia del método de Frobenius, en el cual, como según lo afirma Ávila [7], se pierde precisión.

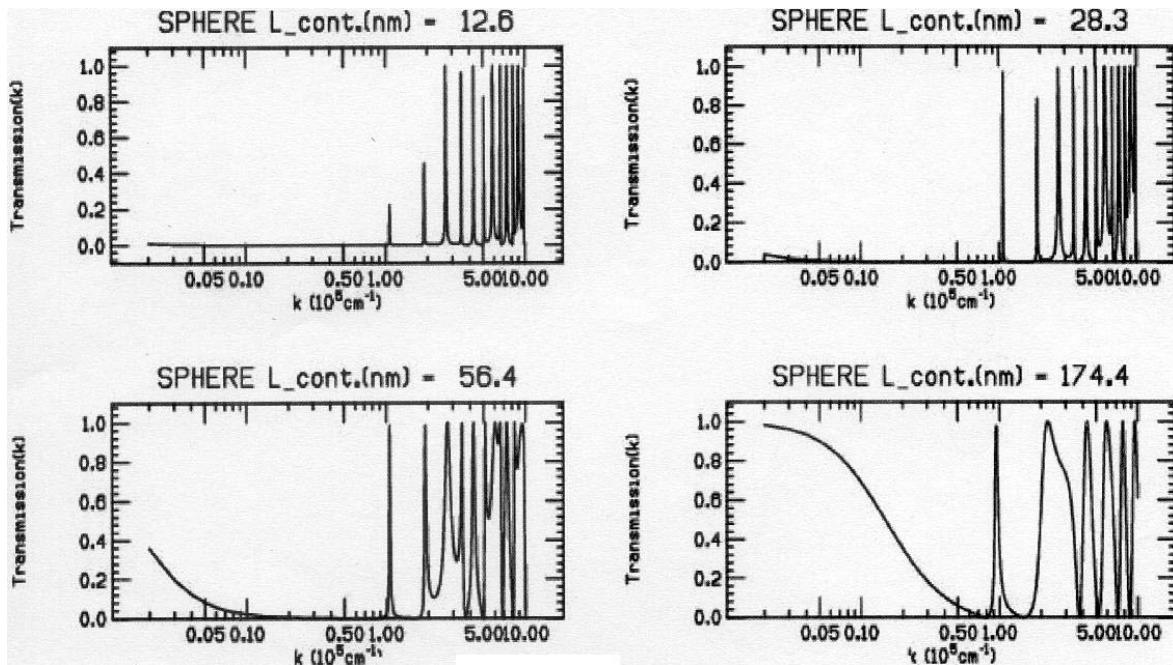


Figura 7.2. Coeficientes de transmisión para una partícula esférica de radio  $R = 200 \text{ nm}$  con una distancia de truncamiento de (a) 12.6 nm, (b) 28.3 nm, (c) 56.4 nm y (d) 174.4 nm. (Tomado de [7]).

En el caso particular de una partícula con un radio de 200 nm y un diámetro de contacto de 174.4 nm, el resultado obtenido por Ávila (Figura 7.2) muestra que luego del primer pico de transmisión, se presentan otros 5 picos que se encuentran separados entre sí por valles que prácticamente llegan a cero. Por otro lado, los resultados obtenidos por diferencias finitas (Figura 7.3d) muestran que luego del primer pico de transmisión, los valles entre picos se hacen cada vez menos pronunciados hasta que la curva de transmitancia se hace totalmente unitaria. Esta incongruencia en los resultados implica que alguno de los métodos usados no es apropiado; pero ¿cuál?

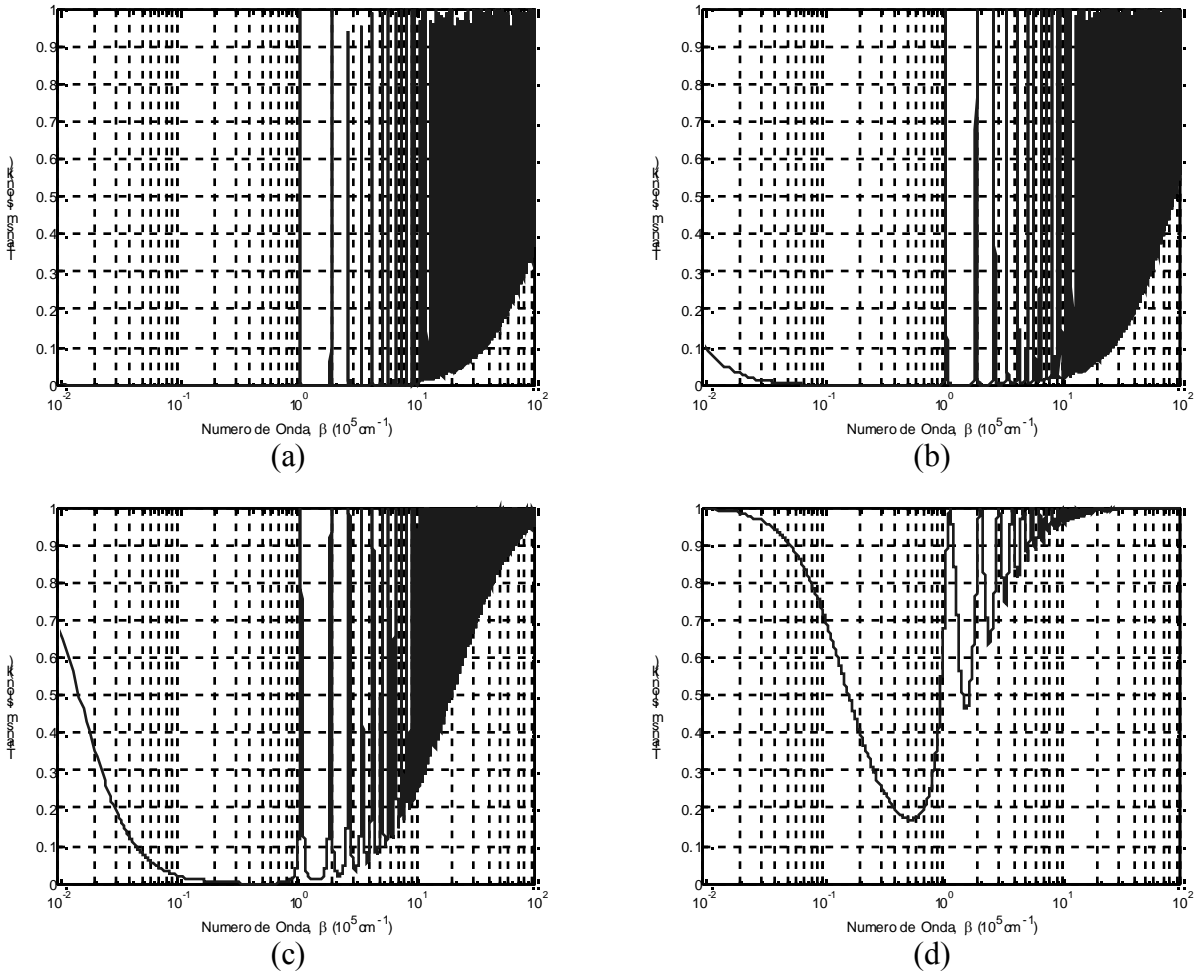


Figura 7.3. Coeficientes de transmisión obtenidos por diferencias finitas para una partícula esférica de radio  $R = 200$  nm con una distancia de truncamiento de (a) 12.6 nm, (b) 28.3 nm, (c) 56.4 nm y (d) 174.4 nm.

En las Secciones 6.1 y 6.2 se contrastaron los resultados obtenidos por diferencias finitas con los analíticos, y se encontró una completa concordancia. Adicionalmente, los resultados obtenidos (Figura 6.4 y Figura 6.17) mostraron que a medida que la magnitud del vector de onda aumenta, los valles de transmisión entre picos se hacen menos pronunciados resultando en una transmisión totalmente unitaria para grandes vectores de onda. En resumen, esto permite afirmar que el método de diferencias finitas es el correcto y el que da la mejor aproximación en el estudio de la transmitancia en partículas esféricas.

Con el ánimo de verificar los cálculos realizados por Ávila [7] se usó nuevamente el método de Frobenius descrito en la Sección 4.5; el código de MATLAB usado para esto se encuentra en el Anexo A.4. Los resultados obtenidos son presentados en la Figura 7.4. En todos los casos, se observa que sólo el primer pico de transmisión observado anteriormente es el que se presenta, luego, no se presentan más picos hasta que las curvas presentan un comportamiento caótico.

Lo anterior es un fuerte indicio de los problemas de convergencia que tiene el método de Frobenius, el cual en este caso es mucho más notable que en los resultados obtenidos por Ávila. A pesar que en ambos casos se pierde la convergencia, la diferencia que se presentan en las respuestas obtenidas en este trabajo por Frobenius (usando MATLAB) y por Ávila (usando FORTRAN) pueden ser explicadas por los lenguajes de programación usados. Es posible que FORTRAN tenga un manejo numérico distinto al de MATLAB.

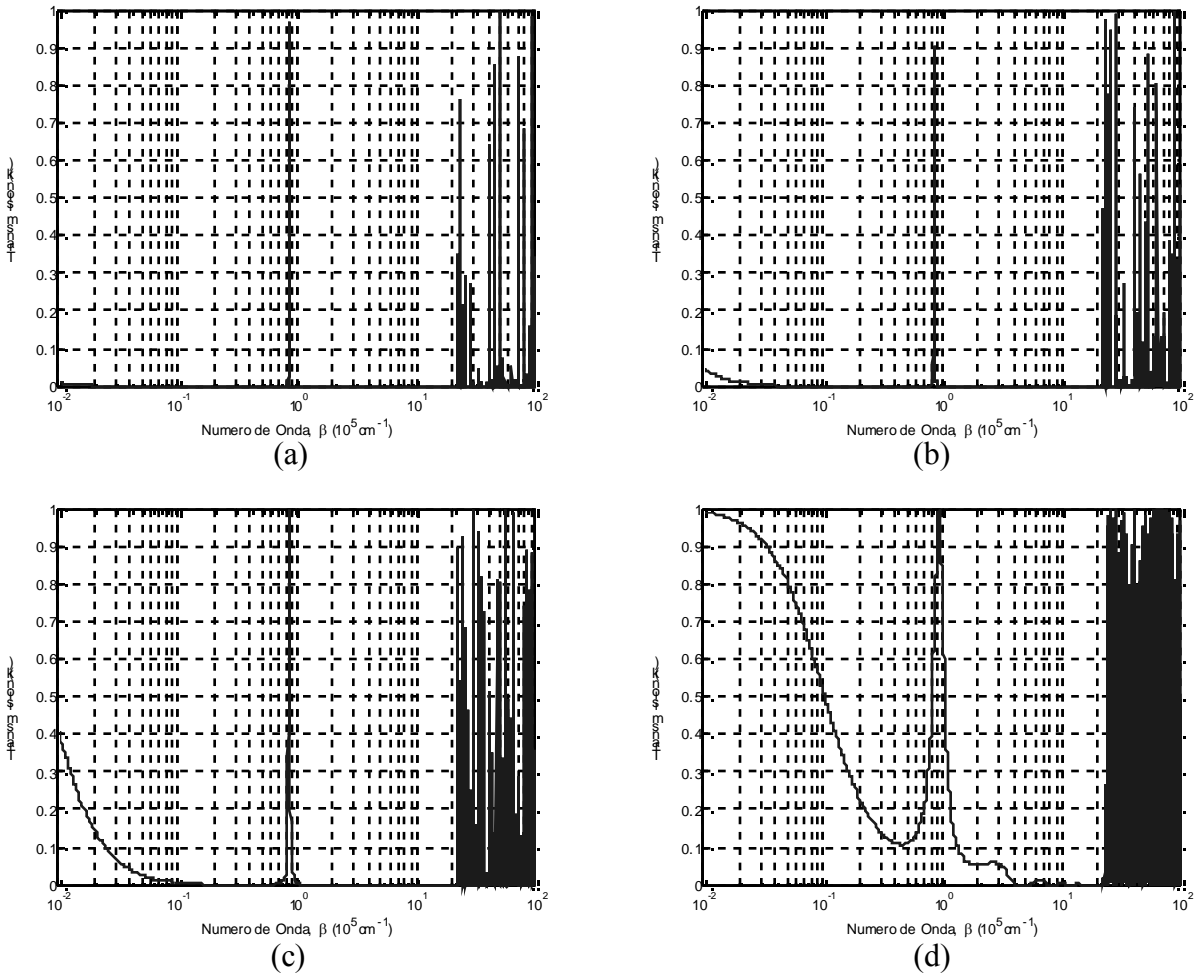


Figura 7.4. Coeficientes de transmisión obtenidos por Frobenius para una partícula esférica de radio  $R = 200$  nm con una distancia de truncamiento de (a) 12.6 nm, (b) 28.3 nm, (c) 56.4 nm y (d) 174.4 nm.

Vale la pena hacer notar que a medida que el diámetro de contacto aumenta, la velocidad con que los valles de transmisión se hacen menos pronunciados también aumenta. En otras palabras, cuando el diámetro del contacto aumenta (el radio de la esfera permanece constante), la envolvente inferior de probabilidad de transmisión presenta una pendiente más pronunciada que provoca que los valles en la transmisión sean cada vez más cercanos a uno. En la Figura 7.3 se puede observar claramente este fenómeno.

La Figura 7.5 corresponde a los mismos resultados expuestos en la Figura 7.3, solo que el eje horizontal está en escala lineal y no logarítmica. Según lo que se observa, parece ser que la separación entre los picos de transmisión es constante, sobre todo cuando el diámetro del contacto es muy pequeño. Los ejes horizontales sólo van de 0 a  $10^6 \text{ cm}^{-1}$ .

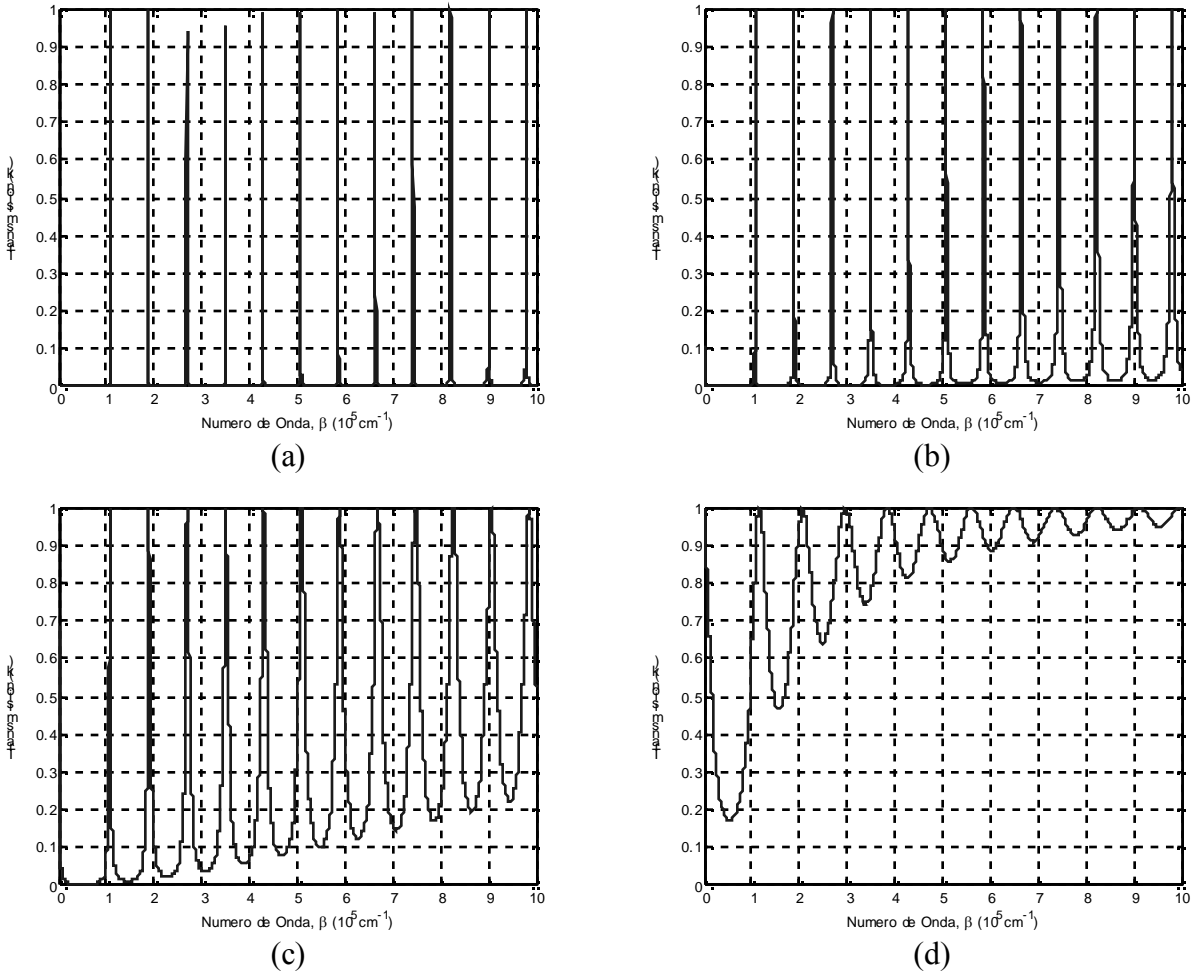


Figura 7.5. Coeficientes de transmisión obtenidos por diferencias finitas para una partícula esférica de radio  $R = 200 \text{ nm}$  con una distancia de truncamiento de (a)  $12.6 \text{ nm}$ , (b)  $28.3 \text{ nm}$ , (c)  $56.4 \text{ nm}$  y (d)  $174.4 \text{ nm}$ . La escala horizontal es, en este caso, logarítmica.

En las gráficas de la Figura 7.5, también se puede apreciar mejor un efecto que ya se había mencionado anteriormente, el valor mínimo de los valles entre picos, aumenta más rápidamente cuando el diámetro del contacto es mayor. Cuando el diámetro del contacto es muy grande, entonces el truncamiento de la esfera se debe hacer muy cerca de su punto central, lo cual implica que se pasa de una forma esférica a otra aproximadamente cilíndrica. Es como tener una delgada rebanada de una esfera, que es lo mismo que tener un cilindro con una altura bastante corta. Dado que en un cilindro, la variación del área es nula, la curva de transmitancia es siempre igual a uno. Así pues, cuando el diámetro de contacto aumenta, los picos se van ‘aplanando’ sobre uno, cuando esto sucede, la

separación entre los picos aumenta, pues, como se vio en la Sección 6.3, la separación entre picos tiene una relación inversamente proporcional al largo del canal de propagación.

Este efecto de separación de picos se puede observar de una manera más clara en la Figura 7.6; cuando el diámetro tiende a cero, la separación entre los picos es algo menor que  $10^5 \text{ cm}^{-1}$ ; por otro lado, a medida que el diámetro de contacto se acerca al doble del diámetro de la esfera, la separación de los picos crece aceleradamente para finalmente tender a infinito. Es importante aclarar que se está asumiendo que los reservorios tienen la misma sección transversal que hay en el punto de contacto.

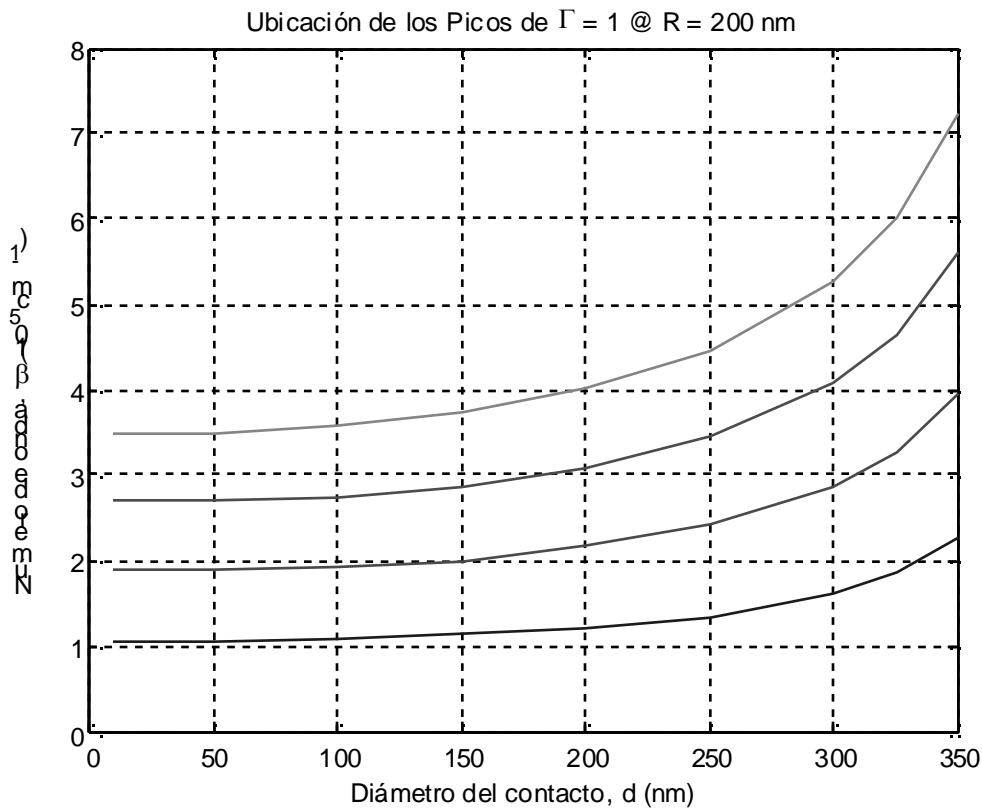


Figura 7.6. Ubicación de los cuatro primeros picos de la curva de transmisión para una esfera de 200 nm de radio. El primer pico es la curva de abajo, y el último pico es la curva de arriba.

Se afirmó que la separación entre los picos de transmisión es inversamente proporcional a la longitud característica del canal. Al variar el diámetro del contacto, la longitud característica del canal no varía de manera notable hasta que éste se acerca a un valor cercano al diámetro de la partícula. Ahora, si por el contrario, se varía el radio de la partícula de tal manera que el diámetro del contacto sea justamente su mitad, se obtiene el resultado presentado por la Figura 7.7. Como se puede ver, la posición de los picos es inversamente proporcional al radio de la partícula; es más, cuando el radio se incrementa diez veces, entonces, la curva de transmitancia se desplaza una década hacia la izquierda.

Este resultado resulta totalmente congruente, con lo que se mostró para canales catenoidales, cónicos y rectos.

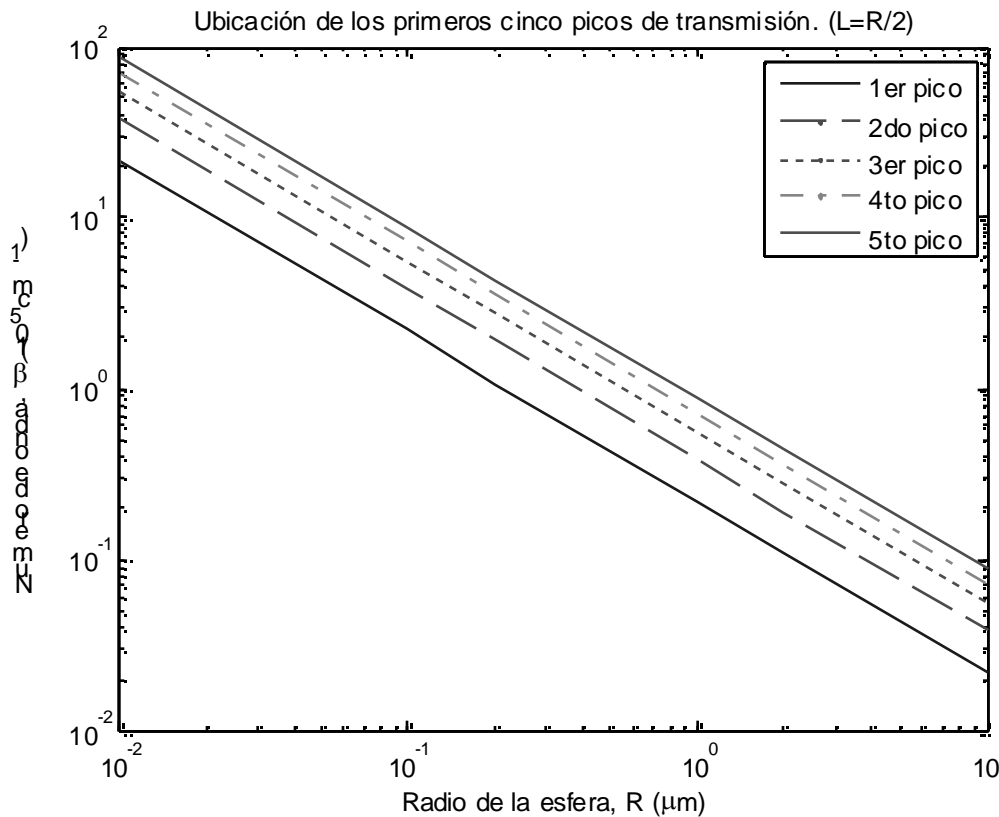


Figura 7.7. Posición de los primeros cinco picos de transmisión en función del radio de la partícula. El diámetro de los contactos es la mitad del radio de la partícula.

En conclusión, se puede afirmar que para una partícula esférica, el radio determina los puntos en los cuales se va a tener probabilidades de transmisión ideales. Adicionalmente, el diámetro de los contactos permite modular la profundidad de los valles o mínimos de transmisión; agranda o reduce los rangos en los cuales la transmitancia, en promedio, va a tener un valor más alto o bajo; esto último es de gran impacto en la conductancia térmica, permite controlar el valor de la conductancia fácilmente mediante parámetros geométricos.

## 7.2 Relación de Dispersión

En las secciones anteriores se vio que el método de aproximación teórica es el que brinda mejores resultados al momento de estimar la relación de dispersión del canal. Dado que la Ec. (7.1) no tiene solución analítica, es necesario usar este método numérico para derivar la relación de dispersión.



En la Figura 7.8 se muestran las relaciones de dispersión aproximadas que se obtuvieron para una partícula esférica de radio 200 nm. En la Figura 7.8a, el diámetro del contacto es de 10 nm, lo cual implica que la esfera tiene una distancia de truncado bastante pequeña, es decir, la esfera está prácticamente completa. Obsérvese que todas las bandas son prácticamente horizontales y en conjunto siguen una trayectoria recta que parte desde el origen. En la Figura 7.8b, el diámetro de contacto es 200 nm, lo cual implica que a la esfera se parece a un cilindro; en este caso, las bandas están más inclinadas y se semejan más a una línea recta. Este efecto se debe principalmente a que la variación de área, en un dominio más pequeño alrededor del eje central de la esfera, es más pequeño que si se toma el dominio completo, si la variación de área es mínima, entonces los efectos dispersivos también lo son, lo cual resulta en una relación de dispersión lineal.

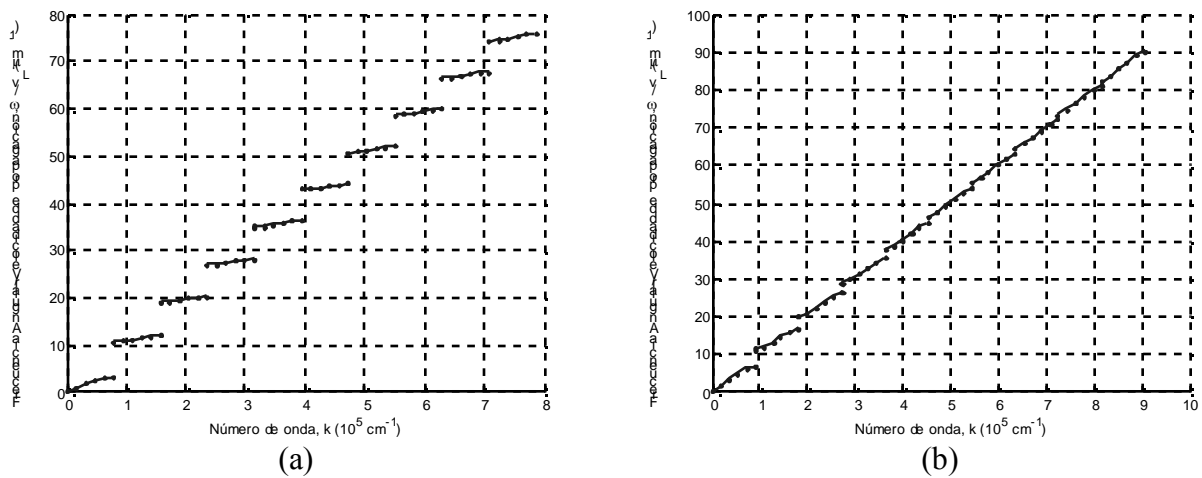


Figura 7.8. Relación de dispersión de una partícula esférica de radio 200 nm obtenida por medio de aproximación periódica. El diámetro del contacto es (a) 10 nm y (b) 200 nm.

En la Sección 6.1.2, se vio que el ancho de cada una de las bandas es inversamente proporcional al largo del canal, lo cual implica que si se desea una mejor aproximación de la relación de dispersión, entonces se debe hacer más largo el canal; sin embargo, en este caso, la función que define la esfera está definida para un dominio que va de  $-R$  a  $R$ , por lo tanto, la mayor resolución que se puede tener para la relación de dispersión es, de acuerdo a la Ec. (7.1), menor a  $\pi/(2R)$ .

Dado que no se puede aumentar el largo del canal, entonces se decidió mirar si aumentando la cantidad de puntos en que se particiona el dominio para el análisis numérico se mejora forma en cada una de las bandas aproxima la relación de dispersión. Así pues en la Figura 7.9 se muestra la estructura de bandas obtenida para una esfera de 200 nm con partición de 10000 (a) y 50000 (b) puntos; como se puede observar, no existe diferencia alguna entre ambas curvas, lo cual indica que la aproximación numérica está bien, el problema que se debe solucionar para tener una mejor precisión es aumentar el largo del canal. Para hacer esto se puede hacer lo que se indica a continuación:

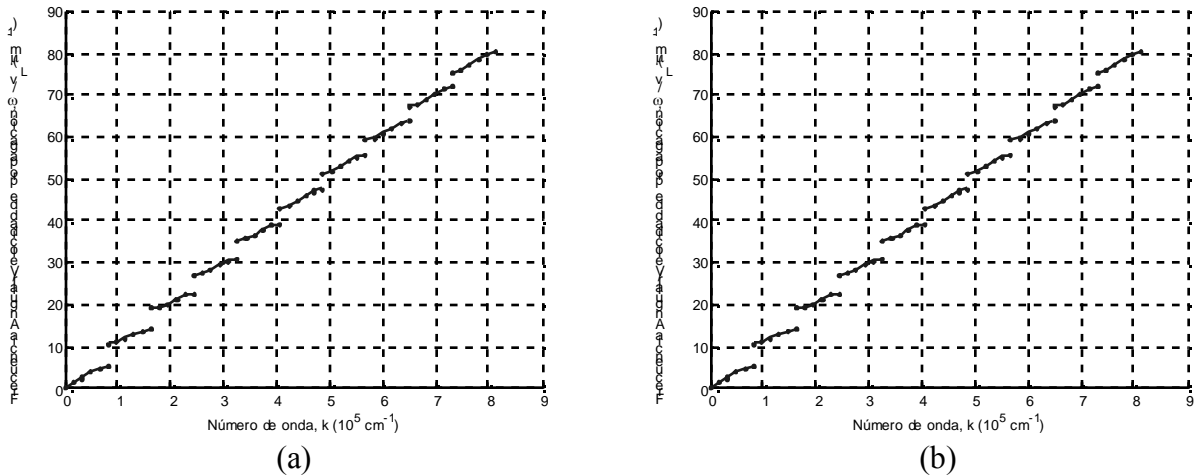


Figura 7.9. Relación de dispersión de una partícula esférica de radio 200 nm obtenida por medio de aproximación periódica. El diámetro del contacto es 100 nm. La cantidad de puntos discretos en el dominio es 10000 (a) y 50000 (b).

Dado que un canal recto no presenta fenómenos de dispersión, agregar una porción recta a otro canal con una forma arbitraria no debe afectar la relación de dispersión del canal original. Así pues, bajo este supuesto, se va a tomar un canal esférico y se va a completar con secciones rectas a ambos lado de tal manera que se pueda tener un canal más largo con la misma relación de dispersión que dé una mayor resolución en el cálculo de la misma por el método de aproximación periódica. El esquema del que se está hablando se entiende mejor en la Figura 7.10.

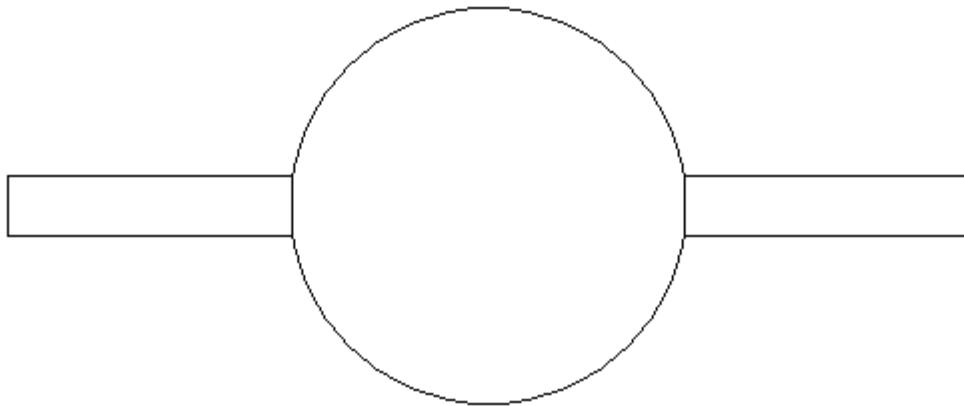


Figura 7.10. Canal esférico al que se le agregaron secciones rectas para obtener una mejor aproximación de la relación de dispersión.

Así pues, a una partícula esférica de radio 200 nm, con un diámetro de contacto de 50 nm se le agregó un canal recto a cada lado, cada uno de una longitud seis veces mayor que el diámetro de la esfera. Este nuevo sistema se usó para obtener la relación de dispersión que se muestra en la Figura 7.11. El número de bandas que se grafican aquí es 50, lo cual, sumado al pequeño ancho de cada una de las bandas, permite obtener una relación de dispersión casi tontamente lineal o que por lo menos parte del origen.

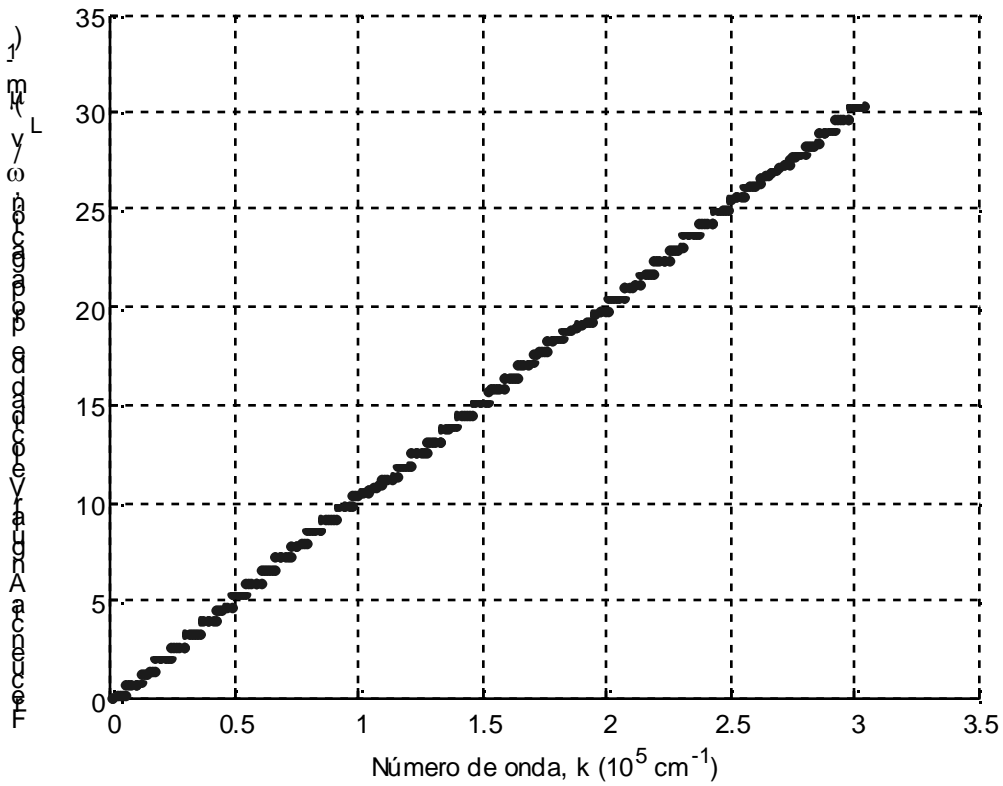


Figura 7.11. Relación de dispersión de una partícula esférica.

La relación de dispersión obtenida en la Figura 7.11 cubre un intervalo de 0 a  $3 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ . En las graficas anteriores, sólo habían tres bandas en este mismo intervalo, mientras que este caso hay más de diez, las cuales se dirigen hacia el origen indicando claramente que la relación de dispersión de una partícula esférica tiene corte en el origen. Así pues la relación de dispersión es:

$$\omega = v_l k. \tag{7.2}$$

## 8 CONDUCTIVIDAD TÉRMICA

En las secciones anteriores se realizó el cálculo de los coeficientes de transmisión y de las relaciones de dispersión para varias geometrías de canales unidimensionales. Según lo que se vio en la Sección 3.3, la conductividad térmica depende principalmente de la frecuencia de corte de la relación de dispersión y de la probabilidad de transmisión de fonones de un reservorio térmico al otro.

En la presente sección se calculará la conductividad térmica para cada uno de los canales térmicos propuestos en función de la temperatura promedio de los reservorios térmicos entre los cuales se encuentran cada uno de los canales dieléctricos analizados.

Es importante recordar al lector que en el cálculo de la conductividad térmica se están teniendo en cuenta las siguientes consideraciones:

- La diferencia de temperatura entre los dos reservorios térmicos es bastante pequeña. Esta suposición fue necesaria para obtener la Ec. (3.10) la cual será usada en el cálculo de la conductividad térmica.
- Lo anterior implica que sólo se calculará la contribución hecha por fonones longitudinales a la conductividad térmica.
- El rango de temperaturas que se analizará es bastante cercano al cero absoluto, que es cuando se el camino medio libre de los fonones es mayor que la longitud total del canal térmico.

El método de cálculo se resume a continuación:

### 8.1 Método de Cálculo

Según la Ec.(3.10), el cálculo de la conductividad térmica implica realizar la integral sobre todo del rango de frecuencias posible, arrancando desde la frecuencia de corte, del producto de la probabilidad de transmisión y la distribución de Planck para ocupación de estados en función de la temperatura.

Antes que todo, en la Ec. (3.10), la probabilidad de transmisión se encuentra en función de la frecuencia angular de oscilación, mientras que en las Secciones 6 y 7, ésta se encuentra en función del vector de onda generalizado. Las Ecuaciones (5.3) y (5.4) especifican la relación que existe entre el vector de onda generalizado y la frecuencia angular de oscilación; y la que hay entre el vector de onda ordinario y el generalizado. En síntesis, el vector de onda generalizado es directamente proporcional a la frecuencia angular de oscilación, la constante de proporcionalidad entre estas magnitudes es la velocidad de propagación de los fonones longitudinales en el material; por otro lado, la

relación que existe entre el vector de onda y el vector de onda generalizado es cuadrática o lineal dependiendo de la frecuencia de corte de la relación de dispersión.

Cuando una onda se propaga de un medio a otro, la frecuencia de oscilación es la misma sin importar el cambio de medio. En otras palabras, cuando un fonón pasa de un reservorio al canal, la frecuencia con la que oscilaba antes y después de entrar es la misma. Entonces, ¿Qué cambia? La respuesta es, la longitud de onda (o su recíproco, el vector de onda). Matemáticamente, el hecho que la frecuencia de oscilación se mantenga de un medio a otro se debe a que la solución particular de la Ec. (3.18) a una fuerza excitatriz oscilatoria en el tiempo, tiene exactamente la misma frecuencia de oscilación dado que la ecuación diferencial que describe el fenómeno es lineal.

En este punto se le puede dar un significado físico más preciso al vector de onda generalizado. Dado que el vector de onda generalizado es proporcional (la constante de proporcionalidad es siempre la misma ya que se asume que siempre se tiene el mismo material) a la frecuencia de oscilación, y como la frecuencia de oscilación no cambia de un medio a otro, entonces el vector de onda generalizado es un vector de onda que tiene el mismo valor sin importar que el fonón se encuentre en el reservorio o en el canal térmico.

De acuerdo a lo que se ha dicho anteriormente, la probabilidad de dispersión en términos de la frecuencia de oscilación es

$$\Gamma(\beta) = \Gamma\left(\frac{\omega}{v_l}\right) \quad (8.1)$$

donde  $\Gamma$  es la curva de transmitancia que se obtuvo en las secciones 6 y 7. Esto quiere decir que para usar las curvas obtenidas anteriormente en función de la frecuencia, primero se debe dividir ésta entre la velocidad de propagación de los fonones longitudinales. Así, la Ec. (3.10) puede ser escrita de la siguiente manera:

$$\kappa = \frac{k_B}{2\pi} \int_{\omega_0}^{\infty} \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)^2 \frac{\exp(\hbar\omega/k_B T)}{(\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1)^2} \Gamma\left(\frac{\omega}{v_l}\right) d\omega \quad (8.2)$$

donde  $\omega_0 = v_l\beta_0$ , siendo  $\beta_0$  el vector de onda generalizado de corte;  $T$  es la temperatura promedio del sistema.

El cálculo de la integral de la Ec. (8.2) se hará numéricamente, implica primero el cálculo de la probabilidad de transmisión hasta un número suficientemente grande, luego el cálculo del vector generalizado de corte  $\beta_0$ . Todo se hace usando MATLAB, el código usado para los cálculos se encuentra en el Anexo A.5.

El código de MATLAB implementado básicamente sigue el siguiente procedimiento: Primero obtiene el coeficiente de transmisión para el canal en un rango de frecuencias que arranca desde la frecuencia de corte y termina en una frecuencia suficientemente grande que no afecte los resultados obtenidos. (El límite superior de la integral es infinito). Luego se calcula numéricamente la integral de la Ec. (8.2). Este proceso se repite para varios valores de temperatura media del sistema.

## 8.2 Nanoalambres

Las conductividades térmicas obtenidas por Rego [5] son para alambres de arseniuro de galio (GaAs). En la Figura 8.1 se presenta la relación de dispersión de los distintos modos de propagación para este material. Más específicamente, corresponde a los modos acústicos de baja energía que se propagan en un canal de sección transversal constante. Como se puede apreciar, la relación de dispersión para el modo longitudinal es recta, indicando que no hay dispersión.

A partir de la Figura 8.1, se puede deducir la velocidad de propagación longitudinal que Rego asumió en sus cálculos de conductancia. Nótese que la escala vertical está en Kelvins y la horizontal en  $10^5 \text{ cm}^{-1}$ , teniendo en cuenta que cuando  $k = 10^6 \text{ cm}^{-1}$  la energía es 4 K, entonces la velocidad de propagación es

$$v_l = \frac{\omega}{k} = \frac{E/\hbar}{k} = \frac{E}{\hbar k} = \frac{k_B T}{\hbar k} = \frac{k_B}{\hbar} \frac{T}{k} \quad (8.3)$$

donde  $T$  es la temperatura promedio del sistema,  $k$  el número de onda,  $k_B$  es la constante de Boltzmann y  $\hbar$  la constante de Dirac. Reemplazando los valores del fondo de escala, se tiene que la velocidad de propagación longitudinal es  $v_l = 5236 \text{ m/s}$ . Si se compara este valor con el disponible en la literatura [18], se encuentra que no existe mucha diferencia, así pues se usará este valor para cálculos posteriores.

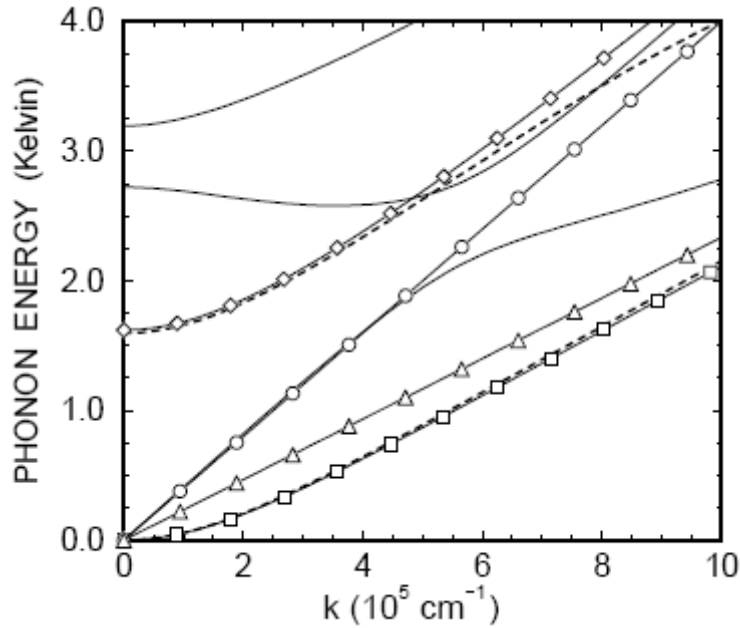


Figura 8.1. Relación de dispersión para varios modos de propagación en un alambre de sección transversal cuadrada de  $50 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$  de GaAs. Las curvas con círculos, cuadrados, triángulos y diamantes corresponden respectivamente a los modos longitudinal, transversal, torsional y cortante. Tomado de [5].

### 8.2.1 Canal Catenoidal

Para el canal catenoidal y cónico, Rego [5] calculó las conductancias térmicas en función de la temperatura. Estos resultados se resumen en la Figura 8.2, nótese que las conductividades son menores o iguales que el valor ideal del cuanto de conductancia deducido en la Sección 3.4. Esta gráfica será usada como referencia para validar los cálculos realizados numéricamente.

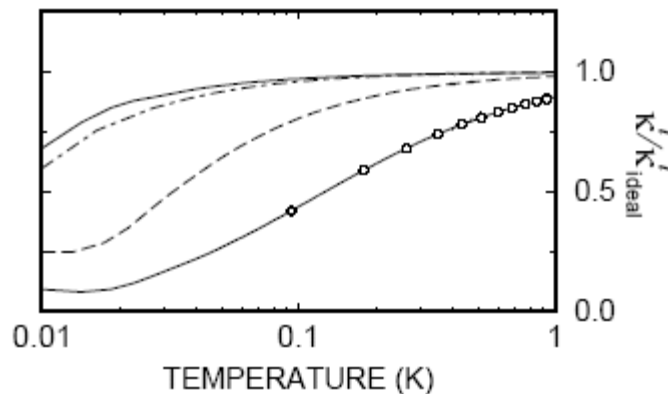


Figura 8.2. Contribución a la conductancia térmica por el modo longitudinal para varios tipos de canales: alambre catenoidal con  $\lambda = 4.6 \text{ }\mu\text{m}$  (punto–raya), alambre catenoidal con  $\lambda = 0.86 \text{ }\mu\text{m}$  (raya–raya) y alambre recto con contactos cónicos (círculos). Tomado de [5].

Considérese el caso de un alambre catenoidal con una longitud característica  $\lambda = 0.86 \mu\text{m}$ . La frecuencia de corte de la relación de dispersión es entonces  $\omega_0 = v_l/\lambda = 6.088 \times 10^9 \text{ rad/s}$  (se usó la velocidad del arseniuro de galio). De acuerdo al postulado de de Broglie, la energía mínima que debe tener un fonón para poder atravesar el canal debe ser  $E = \hbar\omega = 4 \text{ eV}$ . Ahora, dado que sólo se está teniendo en cuenta un modo de vibración, la vibración que representa el fonón se encuentra a una temperatura de  $T = E/k_B = 0.0465 \text{ K}$ . Este resultado implica que si la temperatura máxima del sistema no es mayor que este valor, la conductividad térmica es bastante cercana a cero.

En la Figura 8.2, la conductividad de un alambre catenoidal de longitud característica  $\lambda = 0.86 \mu\text{m}$  corresponde a la curva de rayas consecutivas. El eje horizontal de la gráfica corresponde a la temperatura media de los dos reservorios térmicos entre los cuales está conectado el alambre dieléctrico. El eje vertical corresponde al aporte del modo longitudinal a la conductividad térmica en términos del cuanto ideal de conductividad deducido en la Sección 3.4.

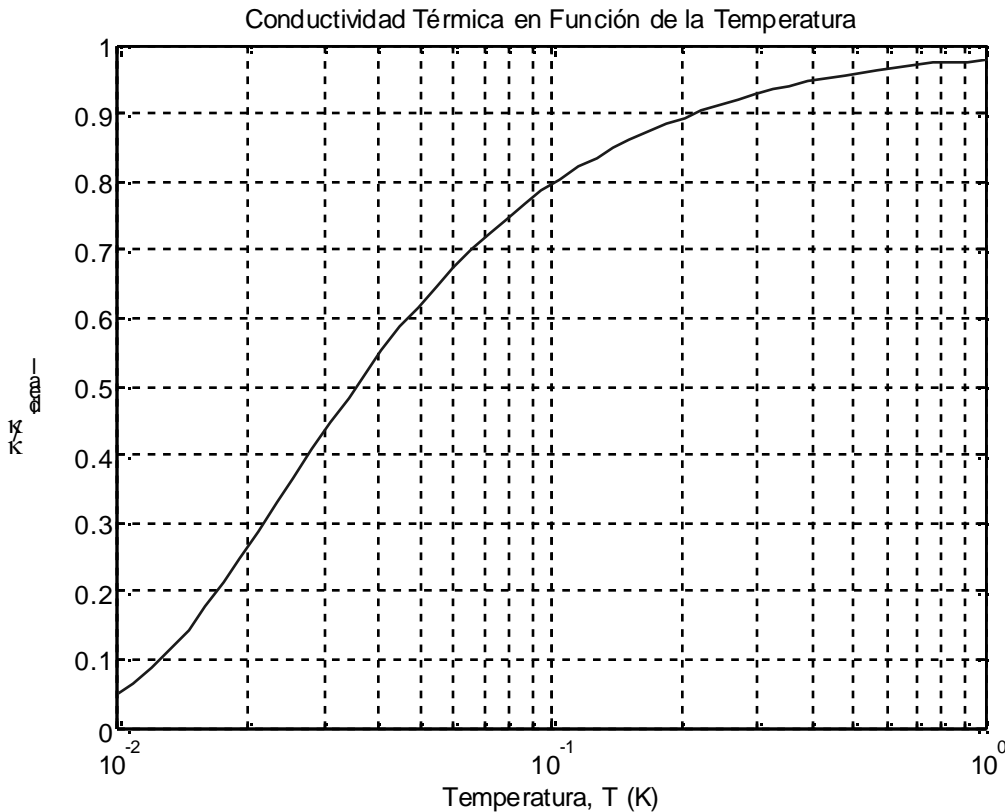


Figura 8.3. Contribución a la conductancia térmica por el modo longitudinal para un canal catenoidal con  $\lambda = 0.86 \mu\text{m}$  en función de la temperatura media del sistema.

Usando el método descrito en la sección anterior, se obtuvo la curva de conductancia en función de la temperatura que se muestra en la Figura 8.3. Los parámetros físicos usados corresponden a los del arseniuro de galio. Comparando este resultado con el obtenido por Rego (Ver Figura 8.2), se puede ver que existe una gran similitud entre los



resultados obtenidos. Cuando la temperatura del sistema es próxima a 1 K, la conductividad térmica en ambos casos tiende a ser la ideal. En síntesis, entre 0.1 y 1 K, el comportamiento es prácticamente el mismo en ambos casos. Sin embargo, según los resultados obtenidos por Rego, cuando la temperatura del sistema disminuye hacia 0.01 K, la conductividad presenta un incremento; mientras que en los resultados obtenidos en el presente trabajo, la conductividad permite suponer una trayectoria que se dirige asintóticamente a cero.

Ahora bien, ¿qué quiere decir que la conductividad siga disminuyendo cuando la temperatura del sistema se acerca al cero absoluto? Si la temperatura del sistema está por debajo del umbral mínimo que dicta la relación de dispersión, entonces la conductividad térmica tenderá más rápidamente a cero. Así pues, si la conductividad cae más allá de lo que debe caer la conductividad ideal, entonces se tiene un sistema con una frecuencia de corte mayor que cero en su relación de dispersión. Lo cual supone una temperatura mínima de operación para que exista una transferencia térmica entre un reservorio y otro.

La anterior observación indica que los resultados obtenidos están en plena concordancia con las hipótesis físicas del sistema, así no reproduzcan fielmente los resultados obtenidos por Rego.

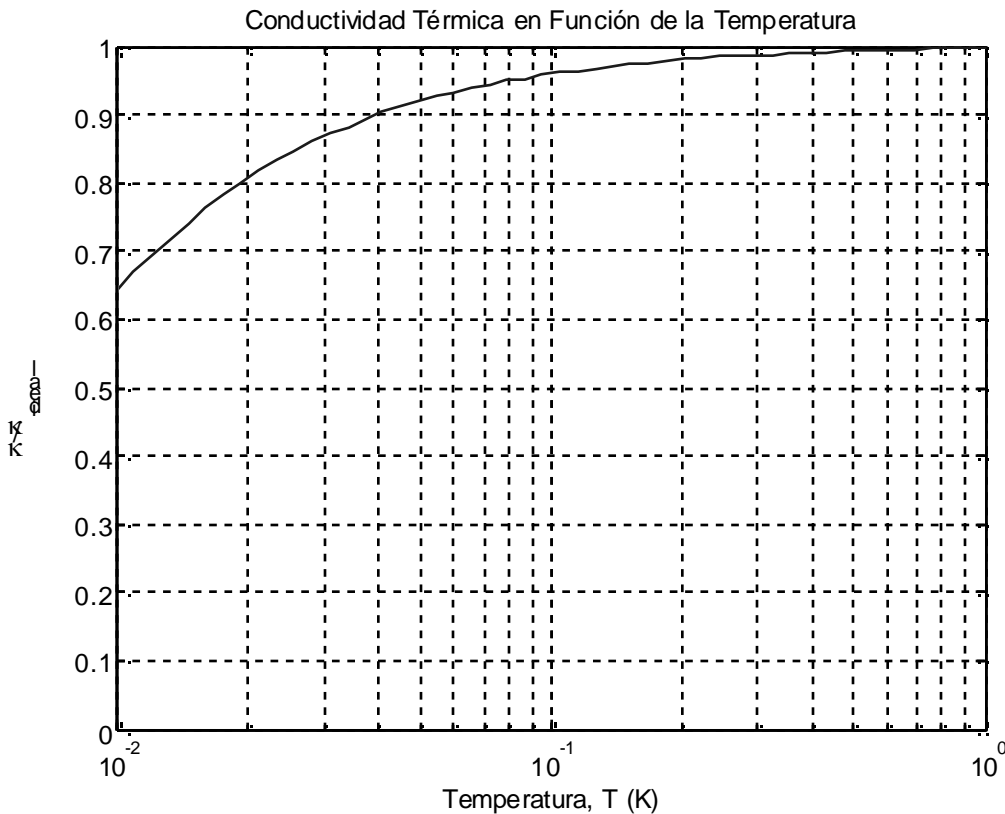


Figura 8.4. Contribución a la conductancia térmica por el modo longitudinal para un canal catenoidal con  $\lambda = 4.6 \mu\text{m}$  en función de la temperatura media del sistema.

Adicionalmente, se decidió simular la conductividad térmica de otro canal catenoidal, pero esta vez con  $\lambda = 4.6 \mu\text{m}$ . El resultado de los cálculos se presenta en la Figura 8.4. En este caso, si se compara la curva obtenida con la deducida por Rego, se encuentra que son prácticamente iguales en todo el rango de temperatura simulado. En síntesis, se tiene plena verificación de los métodos numéricos usados para el cálculo de conductividades térmicas. A bajas temperaturas, la conductividad térmica tiende a ser mucho más pequeña que la ideal, pero cuando la temperatura aumenta, la mayor parte de los fonones en los reservorios tiene la energía suficiente para cruzar a través del canal.

En este tipo de canales, al parecer, el principal efecto que domina el comportamiento de la conductividad térmica es la frecuencia de corte de la relación de dispersión. El coeficiente de transmisión, aunque produce un efecto algo significativo en la conductividad, claramente no es el efecto dominante.

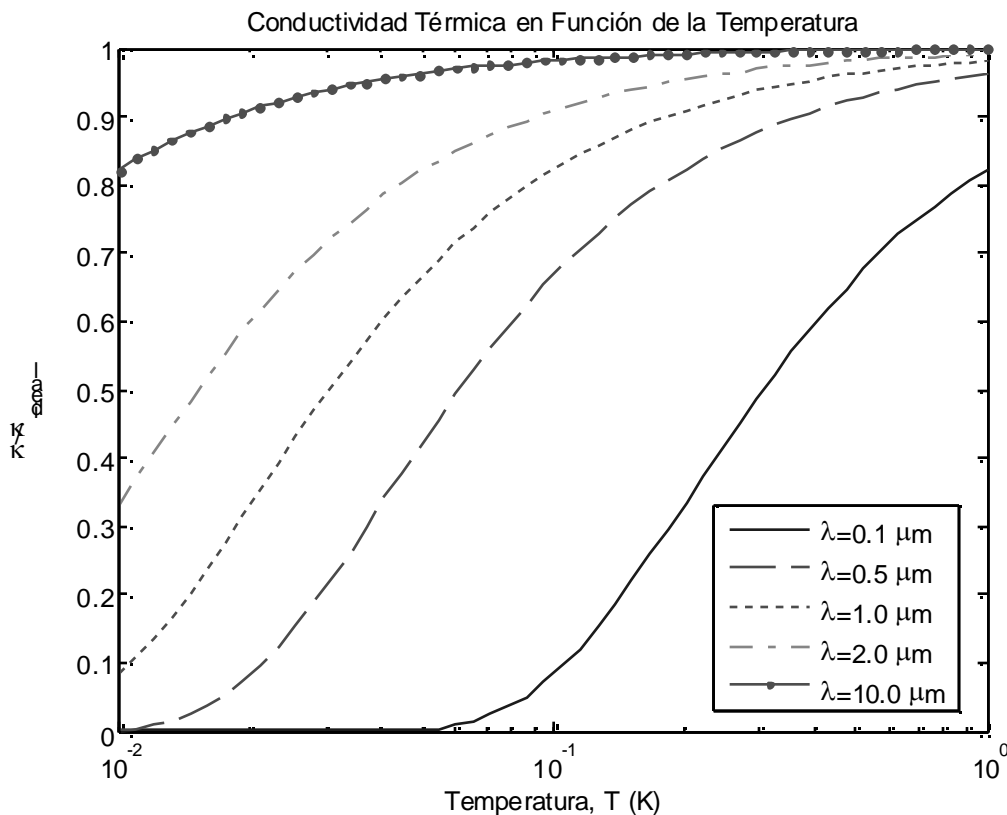


Figura 8.5. Contribución a la conductancia térmica por el modo longitudinal para un canal catenoidal con distintos valores del parámetro  $\lambda$ .

Para verificar el efecto que tiene la frecuencia de corte en la conductividad, se varió el valor de  $\lambda$  y se obtuvo las distintas conductividades térmicas que se presentan en la Figura 8.5. Cuando  $\lambda$  es muy pequeño, la energía mínima que debe tener un fonón para cruzar el canal debe ser mayor. Esto se puede evidenciar claramente al observar que las curvas de conductancia que corresponden a  $\lambda$ 's pequeños requieren de una temperatura mayor para acercarse al valor ideal de conductividad térmica. Cuando el parámetro  $\lambda$  es

muy grande, el canal es prácticamente recto, lo cual supone que la relación de dispersión tiene corte cercano a cero implicando a su vez que la conductividad permanece bastante cercana a la ideal.

### 8.2.2 Canal Cónico

Además del canal catenoidal, en la presente sección se presentan los resultados de conductividad térmica obtenidos para un canal recto con contactos cónicos. En la Sección 6.2 se mostró una completa concordancia entre los resultados obtenidos por Rego y los presentados en este trabajo en cuanto a la probabilidad de transmisión de fonones longitudinales; además, se mostró que la relación de dispersión tiene frecuencia de corte igual a cero, lo que significa que dicha relación es completamente lineal.

En la Figura 8.6 se presenta la conductividad térmica calculada numéricamente. Comparando esta curva con la presentada en la Figura 8.2, se encuentra que ambas son prácticamente iguales. En este caso, se puede observar que para bajas temperaturas, la curva presenta una concavidad positiva, lo cual es evidencia que la frecuencia de corte es cero; esto, combinado con el hecho que a bajas temperaturas la transmitancia es unitaria resulta en una conductancia ideal (Esto no se aprecia en el dominio graficado).

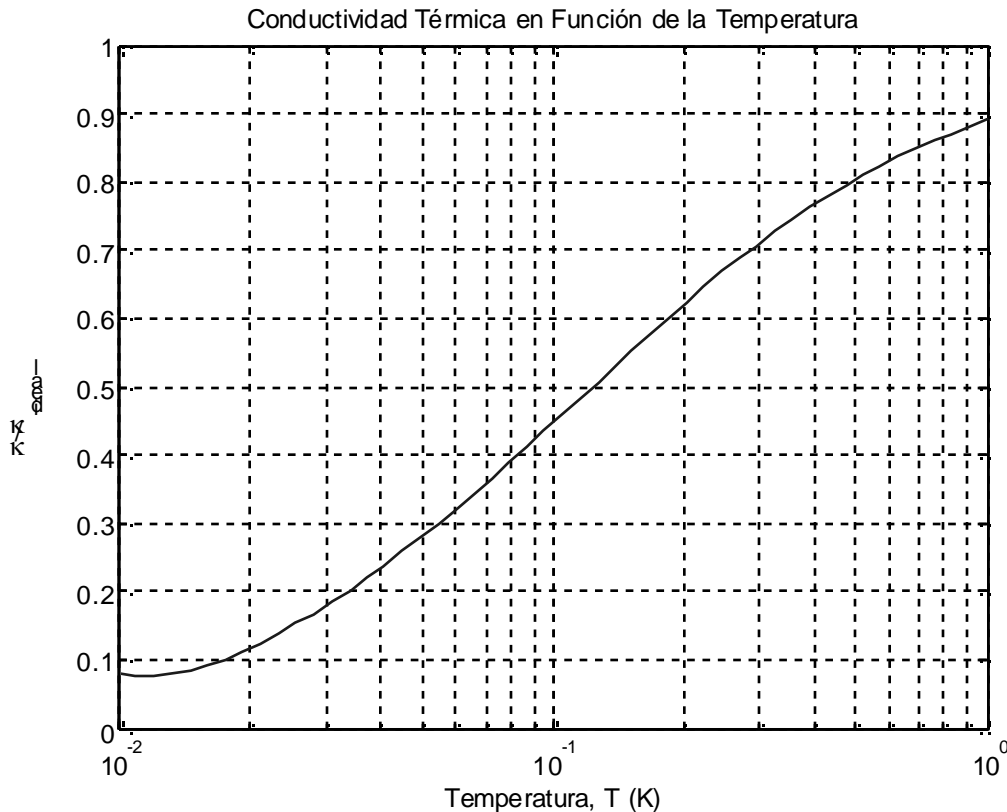


Figura 8.6. Contribución a la conductancia térmica por el modo longitudinal para un canal recto de 1  $\mu\text{m}$  de largo con contactos cónicos de un ángulo de apertura  $\pi/6$ . El área menor y el área mayor del canal guardan una relación de 40.

El tamaño del canal tiene un efecto significativo en la conductividad. Se varió el tamaño del canal manteniendo el ángulo de apertura y la relación entre el largo del canal y de los contactos constantes (respectivamente  $\pi/6$  y 1.7). Los resultados que se presentan en la Figura 8.6 muestran que cuando la longitud del canal aumenta, la curva de conductividad presenta un corrimiento hacia la izquierda. Nótese que el valor mínimo de conductividad se presenta a una temperatura inversamente proporcional al largo del canal. Así pues se puede tener cierto tipo de control de la conductividad por medio de un parámetro geométrico tan simple como la longitud del canal.

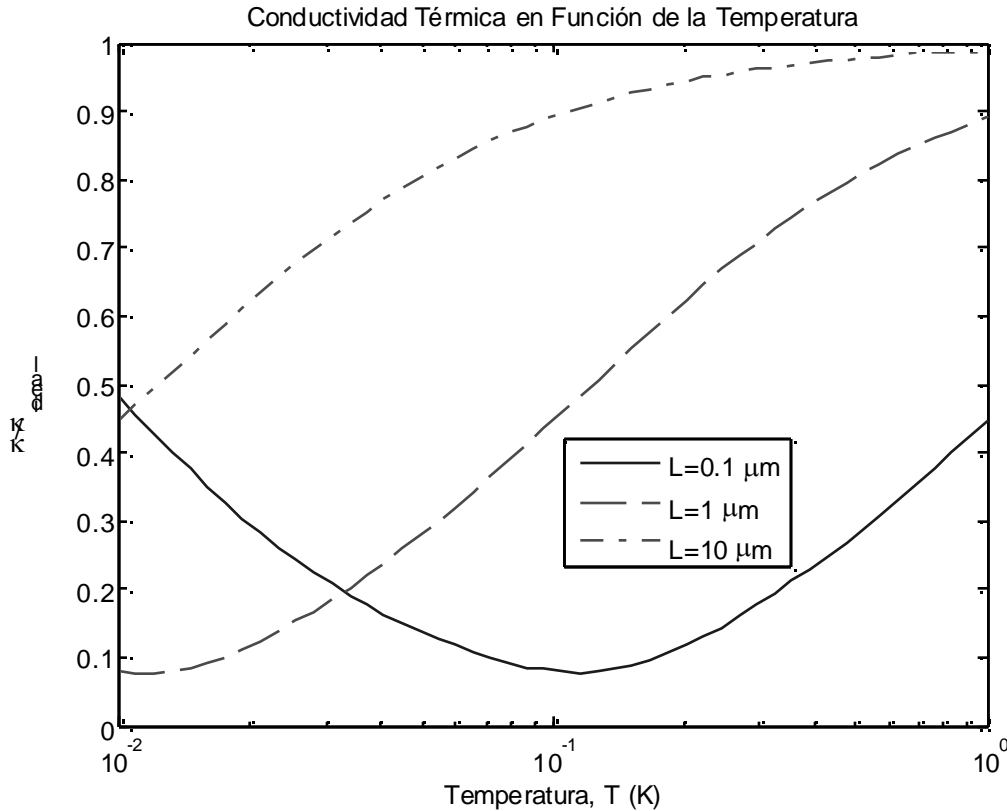


Figura 8.7. Contribución a la conductancia térmica por el modo longitudinal para un canal recto de distintas longitudes con contactos cónicos de un ángulo de apertura  $\pi/6$ . El área menor y el área mayor del canal guardan una relación de 40.

### 8.3 Partícula Esférica

Finalmente, el modelo numérico construido en el presente trabajo será usado para tratar de predecir el comportamiento térmico partículas que se encuentran entre dos reservorios térmicos. En las secciones anteriores, se vio que el punto donde una partícula esférica se trunque para formar el contacto con el reservorio influye en gran medida en el comportamiento de la misma como canal térmico.

Ávila [7] realizó algunas mediciones de conductividad térmica a través de partículas esféricas a bajas temperaturas. Inicialmente se asumió que el material del cual estaban

compuestas las partículas era GaAs. Las geometrías simuladas son las mismas usadas anteriormente. Una esfera de 200 nm de radio que se encuentra truncada en dos extremos opuestos para formar un contacto con dos reservorios térmicos, el diámetro de dichos contactos es 12.6, 28.3, 56.4 y 174.4 nm. Los coeficientes de transmisión obtenidos en la Sección 7.1 son independientes del material del cual están hechos los reservorios y la partícula; sin embargo, en el cálculo de la conductividad térmica sí hay que tener en cuenta el material que se está usando, en especial, su módulo de elasticidad y su densidad.

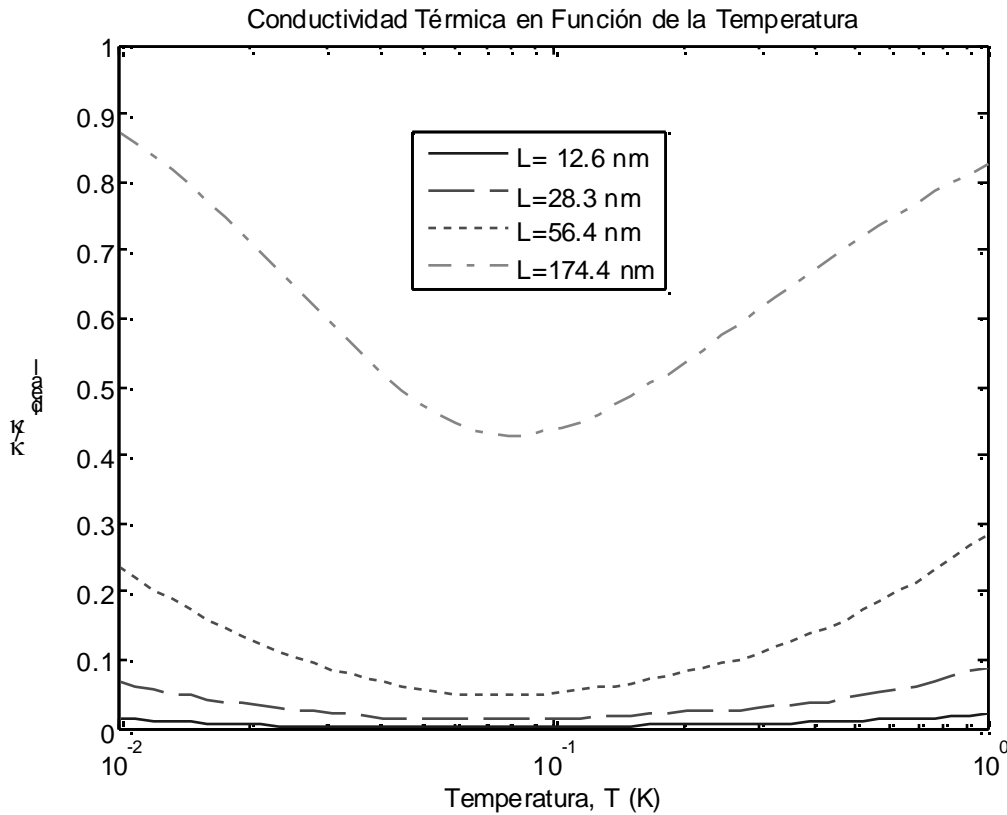


Figura 8.8. Contribución a la conductancia térmica por el modo longitudinal para una partícula esférica de GaAs que tiene un diámetro de 400 nm, para diámetros del área de contacto con los reservorios de 12.6, 28.3, 56.4 y 174.4 nm.

La Figura 8.8 presenta la conductividad térmica de una partícula esférica de GaAs a diferentes diámetros del área de contacto. Según lo que se puede observar, cuando la superficie de contacto es muy baja, la conductividad térmica es bastante cercana a cero para el dominio graficado. Cuando el área de contacto aumenta, la conductividad térmica también lo hace. Para explicar este comportamiento es conveniente recordar los resultados de la Figura 7.3, cuando el área de contacto es muy pequeña, la probabilidad de transmisión presenta un gran número de picos, y las regiones de reflexión entre cada uno de estos picos son bastante grandes y mantienen una amplitud considerable aún para grandes números de onda (o altas energías). Es decir, la envolvente inferior de la curva de transmitancia tarda mucho en subir a uno, por lo tanto, sólo los fonones que tengan exactamente el número de onda correspondiente a un pico unitario de transmisión tendrán

una buena posibilidad de propagarse de un reservorio a otro, esto restringe el espectro a unos intervalos bastante cortos que van a contribuir con la conductividad térmica.

Por otro lado, cuando el área de contacto aumenta la envolvente inferior del coeficiente de transmisión llega más rápido para grandes vectores de onda. Esto implica que a bajas temperaturas, los fonones tienen más probabilidades de cruzar el canal, pues los intervalos de paso se hacen más amplios.

Adicionalmente, en todos los casos, la conductividad presenta un valor mínimo cuando la temperatura del sistema es cercana a 0.1 K. Esto se debe a que en todos los casos, la transmitancia presenta el mínimo valor en el mismo intervalo de vectores de onda.

A diferencia del canal catenoidal, la conductividad térmica de una partícula esférica depende principalmente de la probabilidad de transmisión y no de la relación de dispersión, por lo menos para el caso de fonones longitudinales. La curva de transmitancia puede ser escalada para los vectores de onda mediante el tamaño de la partícula como se vio en la Sección 7.1.

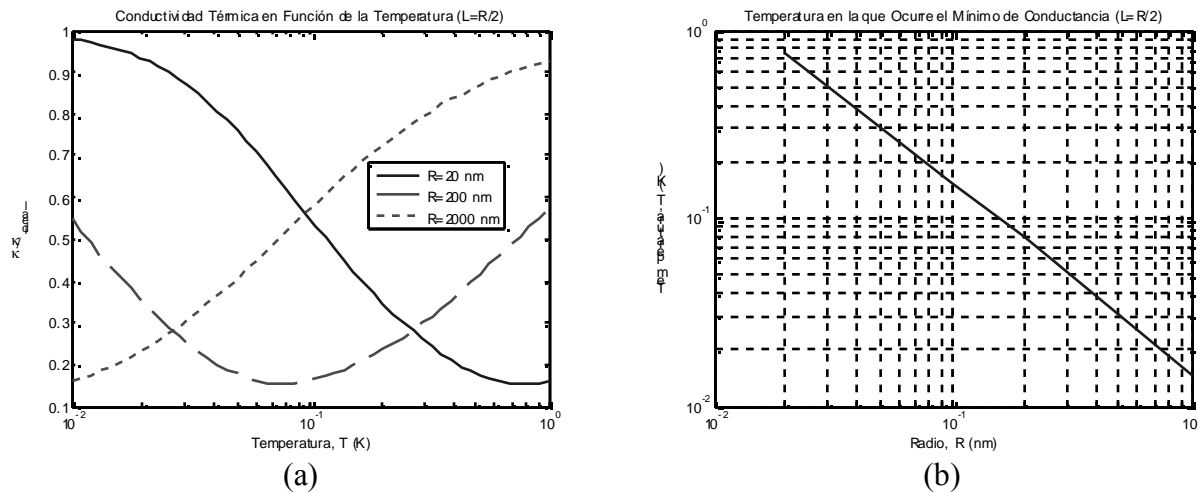


Figura 8.9. (a) Conductividad térmica en función de la temperatura para esferas de distintos tamaños (El radio es dos veces mayor que el diámetro del área de contacto). (b) Temperatura donde se presenta el mínimo de conductancia en función del radio de la partícula.

Así, pues, al variar el tamaño de la partícula, se puede cambiar la temperatura donde la conductividad térmica presenta su mínimo. En la Figura 8.9a se puede apreciar cómo al variar el radio de la partícula, se producen desplazamientos de la curva de conductividad; estos desplazamientos son lineales en la escala logarítmica, sólo que en el sentido contrario al aumento del tamaño. Esto sugiere que la relación es inversamente proporcional. Esto último es verificado en la Figura 8.9b en la cual se presenta la temperatura en la cual se presenta el mínimo de conductancia en función del radio de la partícula.

Según lo anterior, si por ejemplo se deseara construir un dispositivo que no permita el paso de energía de un reservorio a otro en un cierto rango de temperaturas, simplemente se debe modular el tamaño de la partícula que une ambos reservorios. Este resultado es bastante alentador, sin embargo, Ávila [7] realizó mediciones sobre esferas de látex, el cual es un material con distintas propiedades que el arseniuro de galio.

El módulo elástico del látex es bastante bajo, es decir, puede ser deformado fácilmente. Esto implica que la velocidad longitudinal de propagación deber ser más baja que la del GaAs. Según la literatura, la velocidad de propagación de ondas longitudinales en látex es 70 m/s [19].

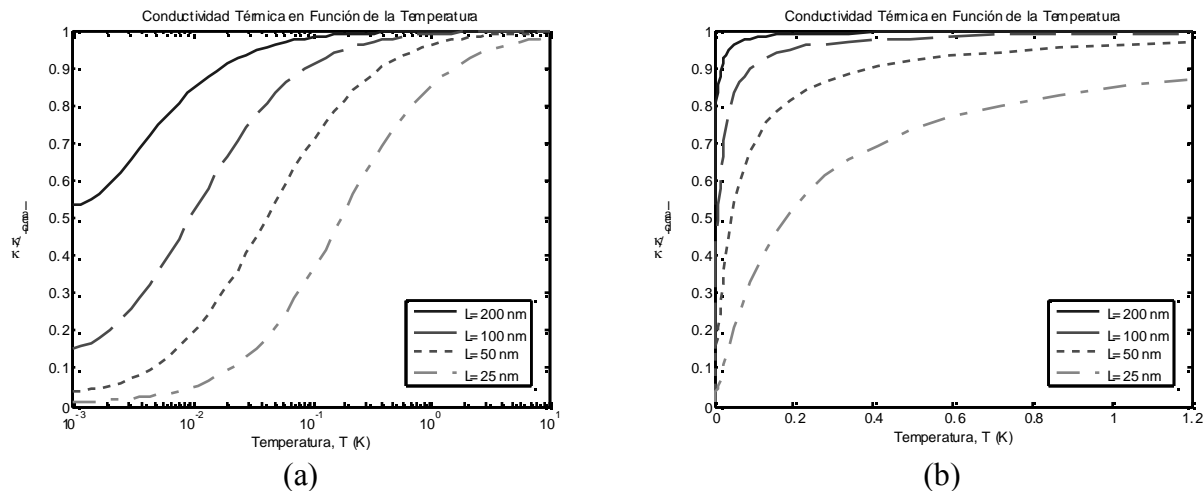


Figura 8.10. Contribución del modo longitudinal a la conductividad térmica en una partícula de látex de radio 200 nm. Se están teniendo en cuenta distintos diámetros de la superficie de contacto con los reservorios. La escala horizontal es (a) logarítmica y (b) lineal.

En la Figura 8.10 se presentan las curvas de conductividad de una partícula esférica de látex de 200 nm de radio que tiene distintos diámetros de la superficie de contacto con los reservorios térmicos. Los dos conjuntos de curvas que se presentan son exactamente iguales, sólo que en el primer caso, la escala horizontal es logarítmica; mientras que en el segundo caso la escala es lineal. Al igual que lo observado para una partícula de GaAs, cuando el área de contacto es grande, la conductividad tiende al valor ideal. Por otro lado, cuando la superficie de contacto es pequeña, el sistema debe tener más temperatura para que la conductividad se acerque al valor ideal.

En la Figura 8.10b se puede ver que cuando la temperatura es 1 K, para todas las curvas se ve que la pendiente de la curva de conductividad es bastante baja, es decir, la variación de la conductividad es bastante baja a esta temperatura. Adicionalmente, para áreas de contacto más pequeñas se observa una variación apreciable de conductividad alrededor de temperaturas de 1 K.

Ávila realizó mediciones experimentales de la conductividad térmica en partículas esféricas de látex; los resultados se muestran en la Figura 8.11. La conductividad térmica

no presenta mayores variaciones para el rango de temperaturas en que fue medida (0.8 a 1.2 K). La normalización realizada muestra que al menos 25 modos de propagación están contribuyendo con la conductividad térmica. Según la Figura 8.10, si la superficie de contacto es bastante pequeña, entonces la variación de conductividad es alta, sin embargo en este caso la variación es bastante pequeña, lo cual sugiere que las partículas tienen un área de contacto grande con los reservorios. Sin embargo, los resultados de Ávila incluyen muchos modos de transmisión, mientras que lo obtenido en el presente trabajo sólo incluye el longitudinal.

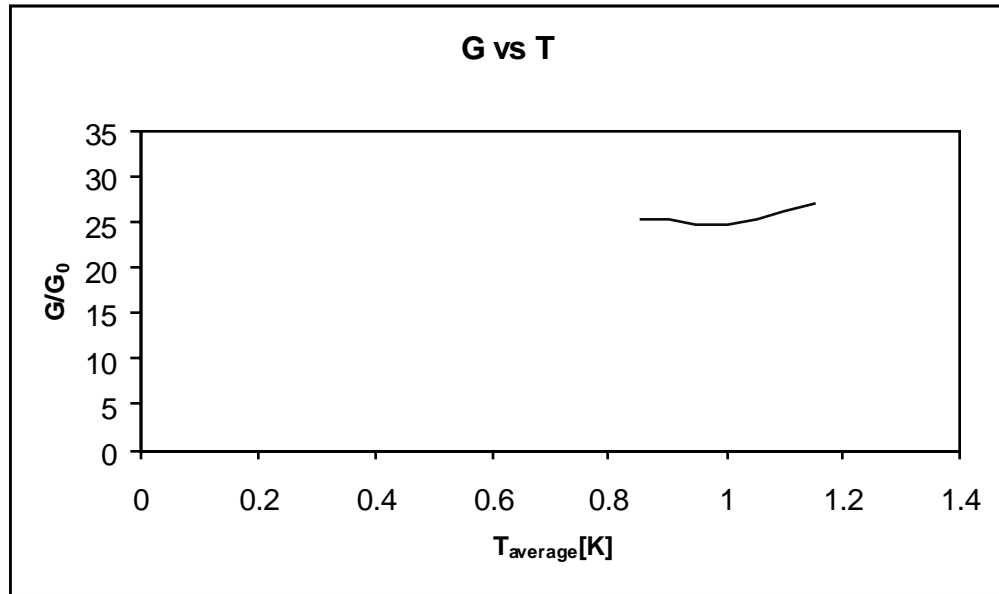


Figura 8.11. Conductancia térmica normalizada de una esfera de látex en función de la temperatura media del sistema [7].



## 9 CONCLUSIONES

Aunque los cálculos de conductividad térmica presentan un sesgo considerable cuando sólo se considera un modo de polarización de los fonones, es de esperar que el comportamiento de los demás modos también sea afectado por los parámetros geométricos que influyen en el aporte que tiene el modo longitudinal a la conductividad térmica.

Dependiendo de la frecuencia de corte, el parámetro de mayor influencia en la conductividad térmica puede ser, o bien la relación de dispersión, o el coeficiente de transmisión. Cuando la frecuencia de corte es muy alta, se requiere mayor energía en el sistema para que exista un flujo de energía entre los reservorios, esto implica que la conductividad se hace muy pequeña respecto del valor ideal para temperaturas muy bajas. Por otro lado, cuando la frecuencia de corte es nula o muy cercana a cero, el coeficiente de transmisión es el que rige el comportamiento de la conductividad. En este caso, cuando la temperatura es muy baja o muy alta, la conductividad es cercana al valor ideal  $\kappa_0$ ; existe un rango de temperaturas en que el sistema presenta una conductividad menor que el valor ideal.

Este rango de baja conductividad depende del ancho del primer valle de transmisión y de la profundidad del mismo. Si esta región de baja transmisión ocupa un gran intervalo de vectores de onda, entonces la región de baja conductividad se extiende por un mayor rango de temperatura. Por otro lado, si la profundidad del valle de transmisión es más alta, entonces, para el rango en cuestión, la conductividad térmica se aproxima a un valor nulo, lo cual convierte al alambre en un aislante térmico para cierto intervalo de temperaturas.

La separación de los picos de transmisión es controlada por la longitud característica del canal, mientras que para controlar la profundidad de los valles de transmisión se debe variar la relación existente entre área máxima y mínima en el canal. En síntesis, mediante estos dos parámetros geométricos se puede establecer una temperatura en que el canal se comporta como un mejor aislante. Esto permitiría la disipación selectiva de energía.

A rasgos generales, el comportamiento entre las estructuras analizadas es el mismo, todas permiten controlar la conductividad mediante parámetros geométricos similares. La principal diferencia radica en la relación de dispersión.

Es importante realizar una selección apropiada de los métodos numéricos que solucionen este tipo de problemas físicos. Siempre se debe buscar una buena convergencia a los resultados reales, manteniendo bajo el tiempo de cálculo. Es necesario conocer las limitaciones que poseen los distintos métodos de tal manera que no se tomen resultados erróneos como verdaderos.

Las mediciones experimentales de conductividad térmica en régimen balístico incluyen la contribución de varios modos de propagación [7],[10]. En estos arreglos experimentales, la selección de los modos se ha realizado por medio de la temperatura. Solo los modos con frecuencia de corte cercana a cero van contribuir cuando la temperatura es muy cercana al cero absoluto. Ahora bien, puede ser de interés investigar experimentalmente la contribución de cada modo independientemente. La solución puede estar, en el uso de ‘polarizadores’ de fonones que permitan la fabricación emisoras coherentes de fonones.

Hace ya algún tiempo se exploró el uso de cristales de fluoruro de litio (LiF) como ‘polarizadores’ de fonones [20]. En este tipo de cristales, sólo los modos sin masa ( $\omega_0 \approx 0$ ) pueden propagarse. Es posible que el uso de este tipo de materiales se útil en este sentido.

Como trabajo futuro se espera extender este estudio a 2 y 3 dimensiones, de manera que se puede estudiar la propagación una mayor cantidad de modos a través de canales mesoscópicos de sección transversal variable.

Adicionalmente, se espera comprobar experimentalmente lo expuesto en este trabajo, pero esto es algo que requiere un periodo de espera más largo.

# BIBLIOGRAFÍA

- [1] M. A. Celia, W. G. Gray, Numerical Methods for Differential Equations: Fundamental Concepts for Scientific and Engineering Applications, Prentice Hall, 1992.
- [2] G. Cheng, Nanoscale Energy Transport and Conversion, Oxford University Press, 2005.
- [3] D. E. Anagelescu, M. C. Cross, M. L. Roukes, Heat transport in mesoscopic systems, Superlatt. Microstruct. 23, 673, 1998.
- [4] Wolfram Research Inc. Boundary Conditions. Disponible en: <http://mathworld.wolfram.com/BoundaryConditions.html>.
- [5] L. Rego, G. Kirczenow, Quantized Thermal Conductance of Dielectric Quantum Wires, Phys. Rev. Lett. 81, 232, 1998.
- [6] K. F. Graff, Wave Motion in Elastic Solids (Ohio State University Press, Columbus, 1975).
- [7] A. Avila, Thermal Properties of Low Dimensional Devices, University of Cambridge, Doctoral Thesis. 2003.
- [8] A. N. Cleland, D. R. Schmidt, C. S. Yung, Thermal conductance of nanostructured phononic, Phys. Rev. B 64, 172301, 2001.
- [9] W. E. Boyce, R. C. DiPrima, Elementary Differential Equations and Boundary Value Problems, Wiley & Sons, Third Ed., 2005.
- [10] K. Schwab, E. A. Henriksen, J. M. Worlock, M. L. Roukes, Measurement of the quantum of thermal conductance, Nature 404, 974, April 2000.
- [11] S. Datta, Electronic Transport in Mesoscopic Systems, Cambridge Studies in Semiconductor Physics and Microelectronic Engineering, Cambridge University Press, 1997.
- [12] B. Epstein, Partial Differential Equations: An Introduction, McGraw Hill, 1962, pp. 241–243.
- [13] Wikipedia, Phonon, Disponible en: <http://en.wikipedia.org/wiki/Phonon>
- [14] P. F. Hsieh, T. T. Wu, J. H. Sun, Three-dimensional phononic band gap calculations using the FDTD method and a PC cluster system, IEEE Trans. On Ultrasonics, Ferroelectrics and Frequency Control, Vol. 53, no. 1, Jan. 2006.
- [15] R. Eisberg, R. Resnick, Física Cuántica: Átomos, moléculas, sólidos, núcleos y partículas, Editorial Limusa, S.A., México, 2004.
- [16] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, Solid State Physics, Holt, Rinehart and Winston, 1976.
- [17] The Kronig-Penney Model, Disponible en: <http://www.benfold.com/sse/kp.html>.
- [18] GaAs, Mechanical Properties, Disponible en: <http://www.ioffe.rssi.ru/SVA/NSM/Semicond/GaAs/mechanic.html>.
- [19] P. Pertersan, R. Deegan, M. Marder, H. Swinney, Cracks in Rubber under Tension Exceed the ShearWave Speed, Phys. Rev. Lett. 93, 015504, 2004.
- [20] G. A. Northrop, E. J. Cotts, A. C. Anderson, and J. P. Wolfe, Phonon Imaging of Highly Dislocated LiF, Phys. Rev. Lett., 49, 54, 1982.

## ANEXOS

### A.1. Código de Matlab que obtiene el coeficiente de transmisión por medio de diferencias finitas para un alambre con perfil de catenaria.

```
function [T,R,x,S]=caten1(K)
K=K*10; % K en 1/micrómetros
lambda=0.86;
H=1000;
Rel=40;
xl=acosh(sqrt(Rel))*lambda;
h=2*xl/(H-1);
x=[-xl:h:xl];
N=length(x);
F=2*tanh(x/lambda)/lambda;
alpha=(1+h*F/2);
beta=(h^2*K^2-2);
gamma=(1-h*F/2);
A=zeros(N,N);
for i=3:N-1,
    A(i,i+1)=alpha(i);
    A(i,i)=beta;
    A(i,i-1)=gamma(i);
end
A(1,1)=(beta+gamma(1)*2*j*K*h)*exp(j*K*xl);
A(1,2)=alpha(1)+gamma(1);
A(2,1)=gamma(2)*exp(j*K*xl);
A(2,2)=beta;
A(2,3)=alpha(2);
A(N,N)=alpha(N)*2*j*K*h+beta;
A(N,N-1)=alpha(N)+gamma(N);
b=zeros(N,1);
b(1)=-(beta-gamma(1)*2*j*K*h)*exp(-j*K*xl);
b(2)=-gamma(2)*exp(-j*K*xl);
iA=inv(A);
u=iA*b;
B=u(1);
u1=exp(-j*K*xl)+B*exp(j*K*xl);
C=u(end)/exp(j*K*xl);
ONE=B*B'+C*C';
R=B*B';
T=C*C';
s=[u1;u(2:end)];
S=conj(s');
```

### A.2. Código de Matlab que permite obtener la respuesta en frecuencia de un nanoalambre con área arbitraria.

```
clear;
v=1;
H=400;
d=0.02;
R=0.5;
xl=R-d;
x1=-xl;
```

```

x2=x1;
h=(x2-x1)/(H-1);
x=[x1:h:x2];
N=length(x);
F=(-2*x)./(R^2-x.^2);
w=[0:0.01:10];
T=clock;
for n=1:length(w),
    u(:,n)=Frecuencial(w(n),F,h,v);
    tt=etime(clock,T);
    a=n/length(w);
    s=((1-a)/a)*tt;
    clc;
    disp(['Simulado:']);
    disp(['    %' '    Min' '    Sec']);
    disp([a*100 floor(tt/60) floor(mod(tt,60))]);
    disp(['Faltante:']);
    disp(['    %' '    Min' '    Sec']);
    disp([(1-a)*100 floor(s/60) floor(mod(s,60))]);
end
semilogy(w,abs(u(end,:).*w.^2));
hold;
semilogy([1/R 1/R],[1e-8 1e2],'r');
hold;

function u=Frecuencial(w,F,h,v)
alpha=(1+h*F/2);
gamma=(1-h*F/2);
N=length(F);
A=zeros(N-1,N-1);
B=zeros(N-1,1);
for nn=1:N-1,
    i=nn+1;
    if nn==1
        A(nn,nn+1)=-alpha(i);
        A(nn,nn)=2-h^2*w^2/(v^2);
        B(nn,1)=gamma(i);
    elseif nn==N-1
        A(nn,nn)=2-h^2*w^2/(v^2);
        A(nn,nn-1)=-gamma(i);
        B(nn,1)=0;
    else
        A(nn,nn)=2-h^2*w^2/(v^2);
        A(nn,nn-1)=-gamma(i);
        A(nn,nn+1)=-alpha(i);
        B(nn,1)=0;
    end
end
u=inv(A)*B;

```

### A.3. Código en Matlab para obtener la relación de dispersion en un modelo periódico.

```

clear;
Fsel=6;
H=1000;
M=50;
corrK=2;
Nk=5;
switch Fsel
    case 1

```

```

lambda=0.86;
Rel=10000;
x2=acosh(sqrt(Rel))*lambda;
x1=-x2;
h=(x2-x1)/(H-1);
x=[x1:h:x2];
N=length(x);
F=2*tanh(x/lambda)/lambda;
C=1/lambda;
case 2
lambda=10;
x2=100;
x1=-x2;
h=(x2-x1)/(H-1);
x=[x1:h:x2];
N=length(x);
F=tanh(x/lambda)/lambda;
C=1/(2*lambda);
case 3
R=0.2;
L=0.1;
D=roots([1 -2*R (L/2)^2]);
d=min(D);
x2=R-d;
x1=-x2;
h=(x2-x1)/(H-1);
x=[x1:h:x2];
N=length(x);
F=-2*x./(R^2-x.^2);
C=1/R;
case 4
x2=1;
x1=-x2;
h=(x2-x1)/(H-1);
x=[x1:h:x2];
N=length(x);
F=0*x;
C=0;
case 5
Rel=80;
b=0.5;
theta=pi/2.01;
c=(0.05/(2*tan(pi/6)))-b;
x2=((Rel*0.05)/2)/tan(theta)-c;
x1=-x2;
h=(x2-x1)/(H-1);
x=[x1:h:x2];
N=length(x);
for i=1:N,
    F(i)=Fconil(x(i),c,b);
end
C=0;
case 6
R=0.2;
L=0.05;
D=roots([1 -2*R (L/2)^2]);
d=min(D);
x2=R-d;
x1=-x2;
h=(x2-x1)/(H-1);
x=[x1:h:x2];
N=length(x);
F=-2*x./(R^2-x.^2);

```

```

        F=[zeros(1,6*N) F zeros(1,6*N)];
        x=[x1-h*[6*N:-1:1] x1:h:x2 x2+h*[1:6*N]];
        N=length(x);
        x1=min(x);
        x2=max(x);
        C=0;
end

DK=(pi/(x2-x1))/10;
K=[0*DK:DK/Nk:1*DK];
rho=zeros(M,length(K));
L=zeros(M,length(K));
for i=1:length(K),
    [rho(:,i),L(:,i)]=eigperiod(K(i)+corrK*DK,x,F,h,M);
    i
end

figure(1);
plot(K,real(rho),'r','MarkerSize',5); grid;
figure(2);
plot(K,real(rho),'b'); grid; xlabel('Número de onda, k (10^{5} cm^{-1})');
ylabel('Frecuencia Angular/Velocidad de propagación, \omega/ v_{L} (\mum^{-1})');
figure(3);
KKK=[0*DK:DK/Nk:M*DK];
plot(KKK,sqrt((10*KKK).^2+C^2),'r'); grid; xlabel('Número de onda, k (10^{5} cm^{-1})');
ylabel('Frecuencia Angular/Velocidad de propagación, \omega/ v_{L} (\mum^{-1})');

figure(1);
hold on;
for n=1:M,
    KK=K+(n-1)*DK;
    rd=sqrt((10*KK).^2+C^2);
    if mod(n-1,2)==0
        plot(K,rd);
    else
        plot(K,rd(end:-1:1));
    end
end
hold off;

figure(3);
hold on;
for n=1:M,
    if mod(n-1,2)==0
        plot((n-1)*DK+K,real(rho(n,:)),'.-');
    else
        plot((n-1)*DK+K,real(rho(n,end:-1:1)),'.-');
    end
end
legend('Teórica','Simulada','Location','Best')
hold off;

figure(4);
hold on;
for n=1:M,
    if mod(n-1,2)==0
        plot((n-1)*DK+K,real(rho(n,:)),'.-');
    else
        plot((n-1)*DK+K,real(rho(n,end:-1:1)),'.-');
    end
end

```

```

end
end
grid; xlabel('Número de onda, k (10^{5} cm^{-1})');
ylabel('Frecuencia Angular/Velocidad de propagación, \omega/ v_{L} (\mum^{-1})');
hold off;

```

```

function [rho,L]=eigperiod(K,x,F,h,sm)
K=K*10; % K en 1/micrómetros
N=length(x);
alpha=(1+h*F/2);
beta=-2*ones(size(x));
gamma=(1-h*F/2);
A=sparse(N,N);
for i=2:N-1,
    A(i,i+1)=-alpha(i)*exp(j*K*h);
    A(i,i)=-beta(i);
    A(i,i-1)=-gamma(i)*exp(-j*K*h);
end
% Casos especiales
A(1,1)=-beta(1);
A(1,2)=-alpha(1)*exp(j*K*h);
A(1,N)=-gamma(1)*exp(-j*K*h);
A(N,N)=-beta(N);
A(N,N-1)=-gamma(N)*exp(-j*K*h);
A(N,1)=-alpha(N)*exp(j*K*h);
[V,b]=eigs(A,sm,'sm');
L=diag(b);
rho2=L/h^2;
rho=sort(sqrt(rho2));

```

```

function y=Fconil(x,c,b)
if x<-b
    y=1/(x-c);
elseif x>b
    y=1/(x+c);
else
    y=0;
end

```

#### A.4. Código de Matlab que obtiene el coeficiente de transmisión por medio del método de Frobenius para una partícula esférica.

```

function [T,r]=esferaf1(K)
NN=1000;
R=200;
d=12.6;
x1=-R+d;
x2=R-d;
K=K/100;
a(1)=1;
a(2)=1;
a(3)=(-K^2/2)*a(1);
a(4)=(2-R^2*K^2)/(6*R^2)*a(2);
for n=5:NN,

```



```

a(n)=(K^2)/(R^2*(n-1)*n))*a(n-4)-(((3-n)*(n-2)-2*(n-2)+R^2*K^2)/(R^2*(n-1)*n))*a(n-2);
end
%plot(a);
p=[1:NN];
P1=mod(p,2);
P2=mod(p+1,2);
p1=a.*P1;
p2=a.*P2;
p1=p1(end:-1:1);
p2=p2(end:-1:1);
pp1=polyder(p1);
pp2=polyder(p2);
%plot(p2)
A(1,:)=[exp(-i*K*x1) 0 -polyval(p1,x1) -polyval(p2,x1)];
A(2,:)=[-i*K*exp(-i*K*x1) 0 -polyval(pp1,x1) -polyval(pp2,x1)];
A(3,:)=[0 exp(i*K*x2) -polyval(p1,x2) -polyval(p2,x2)];
A(4,:)=[0 i*K*exp(i*K*x2) -polyval(pp1,x2) -polyval(pp2,x2)];
b=zeros(4,1);
b(1,1)=-exp(i*K*x1);
b(2,1)=-i*K*exp(i*K*x1);
iA=inv(A);
x=iA*b;
B=x(1);
C=x(2);
r=B'*B;
T=C'*C;

```

## A.5. Código de Matlab para calcular la conductividad térmica

```

% Esta rutina calcula la conductividad térmica de canales dieléctricos
% entre dos reservorios a temperaturas diferentes teniendo en cuenta
% acople no adiabático.
%
% Parámetros de entrada:
% T1, T2: Temperatura de Reservorios.
% dt: Incremento de temperatura.
% Fsel: Selector de canal.
% 1: Catenaria
% 2: Esfera
% 3: Cono
% Par1: Parámetro Geométrico 1
% 1: Parámetro de apertura [um]
% 2: Radio [um]
% 3: Angulo de apertura [rad]
% Par2: Parámetro Geométrico 2
% 1: Relación área mayor/área menor
% 2: Longitud transversal del contacto [um]
% 3: Relación área mayor/área menor
% Par3: Parámetro Geométrico 3
% 1: No usado
% 2: No usado
% 3: Longitud de la sección recta central [um]
% H: Cantidad de particiones del dominio.
% w0: Frecuencia de corte de la relación dispersión.
% vl: Velocidad de propagación.
% ps: Potencia de 10, donde T se hace uno.
% Nw: Número de puntos en frecuencia
% archivo: Nombre del archivo donde se guardan los resultados
clear;
T1=0.01;
T2=1;

```

```

dt=0.001;
Fsel=2;
Par1=0.2;
Par2=Par1/8;
Par3=1;
H=10000;
vl=5236;      %m/s
vl=70;
ps=3.4;      % Potencia donde el coef. de trans. se hace 1.
Nw=2000;
archivo='esfera_R0p2_Loctavo_latex';
%%%
%%%
%%% Selección de Función
switch Fsel
  case 1
    lambda=Par1;
    Rel=Par2;
    xl=acosh(sqrt(Rel))*lambda;
    h=2*xl/(H-1);
    x=[-xl:h:xl];
    F=2*tanh(x/lambda)/lambda;
    w0=vl/(lambda*1e-6);
  case 2
    R=Par1;
    L=Par2;
    D=roots([1 -2*R (L/2)^2]);
    d=min(D);
    xl=R-d;
    x1=-xl;
    x2=xl;
    h=(x2-x1)/(H-1);
    x=[x1:h:x2];
    F=(-2*x)/(R^2-x.^2);
    w0=1;
  case 3
    Rel=Par2;
    b=Par3/2;
    theta=Par1;
    c=(0.05/(2*tan(pi/6)))-b;
    x2=((Rel*0.05)/2)/tan(theta)-c;
    %   x2=1.6887*2*b+b;
    %   c=(x2-Rel*b)/(Rel-1);
    x1=-x2;
    h=(x2-x1)/(H-1);
    x=[x1:h:x2];
    N=length(x);
    for i=1:N,
      F(i)=Fconil(x(i),c,b);
    end
    w0=1;
end
%%%
%%%
%%% Obtención de curva de transmisión
%%%
ks=10^ps;      % Vector de onda (10^5 cm^-1) media antes de aproximar a 1
ws=vl*(ks*1e7); % Las unidades acá son SI [metros y segundos].
dw=(log10(ws)-log10(w0))/(Nw-1);
if w0>ws
  pause;      %% Por si las moscas
  disp('ojo');
end

```

```

w1=10.^[log10(w0):dw:log10(ws)];
[k1,t]=Transmision((w1/v1)/1e7,x,F,h,H);
figure(10); plot(w1,t); grid;
save(archivo,'k1','w1','t','ws','w0','dw','v1');
%%% acá se puede partir el archivo
Kb=1.3806503e-23;
hbar=1.0546e-34;
T1=0.01;
T2=1;
Nt=50;
dt=(log10(T2)-log10(T1))/(Nt-1);
T=10.^[log10(T1):dt:log10(T2)];
wf=10000*Kb/hbar;
w2=10.^[log10(w1(end))+0.001:0.001:log10(wf)];
cond=zeros(1,length(T));
kappal=zeros(1,length(T));
kappaid=T*(Kb*pi)^2/(3*hbar*2*pi);
for i=1:length(T),
    for j=1:length(w1),
        if hbar*w1(j)/(Kb*T(i))>696
            W1(j)=696*Kb*T(i)/hbar;
        else
            W1(j)=w1(j);
        end
    end
    for j=1:length(w2),
        if hbar*w2(j)/(Kb*T(i))>696
            W2(j)=696*Kb*T(i)/hbar;
        else
            W2(j)=w2(j);
        end
    end
    int1=((hbar*W1/(Kb*T(i))).^2).*exp(hbar*W1/(Kb*T(i)))./((exp(hbar*W1/(Kb*T(i)))
    )-1).^2);
    int2=((hbar*W2/(Kb*T(i))).^2).*exp(hbar*W2/(Kb*T(i)))./((exp(hbar*W2/(Kb*T(i)))
    )-1).^2);
    I=trapz([w1 w2],[int1 int2]);
    figure(30); semilogx(w1,int1,'.',w2,int2,'. '); pause;
    kappa(i)=Kb*I/(2*pi);
    cond(i)=kappa(i)/kappaid(i);
end
figure(11); clf; semilogx(T,cond); grid; ylim([0 1]);
xlabel('Temperatura, T (K)');
ylabel('\kappa/\kappa_{ideal}');
title('Conductividad Térmica en Función de la Temperatura');

```

```

function [k,t,r]=Transmision(k,x,F,h,H)
T=clock;
for n=1:length(k),
    [t(n),r(n)]=Solucion(k(n),x,F,h,H);
    tt=etime(clock,T);
    a=n/length(k);
    s=((1-a)/a)*tt;
    clf;
    disp(['Obteniendo probabilidad de transmisión']);
    disp(['Simulado:']);
    disp(['    %' '    Min' '    Sec']);
    disp([a*100 floor(tt/60) floor(mod(tt,60))]);
    disp(['Faltante:']);
    disp(['    %' '    Min' '    Sec']);

```

```

    disp([(1-a)*100 floor(s/60) floor(mod(s,60))]);
end

```

```

function [T,R,x,s]=Solucion(K,x,F,h,H)
K=K*10;
N=length(x);
alpha=(1+h*F/2);
beta=(h^2*K^2-2);
gamma=(1-h*F/2);
A=sparse(N,N);
for i=3:N-1,
    A(i,i+1)=alpha(i);
    A(i,i)=beta;
    A(i,i-1)=gamma(i);
end
A(1,1)=(beta+gamma(1)*2*j*K*h)*exp(-j*K*x(1));
A(1,2)=alpha(1)+gamma(1);
A(2,1)=gamma(2)*exp(-j*K*x(1));
A(2,2)=beta;
A(2,3)=alpha(2);
A(N,N)=alpha(N)*2*j*K*h+beta;
A(N,N-1)=alpha(N)+gamma(N);
b=sparse(N,1);
b(1)=-(beta-gamma(1)*2*j*K*h)*exp(j*K*x(1));
b(2)=-gamma(2)*exp(j*K*x(1));
u=A\b;
B=u(1);
u1=exp(j*K*x(1))+B*exp(-j*K*x(1));
C=u(end)/exp(j*K*x(end));
R=B*B';
T=C*C';
s=conj([u1;u(2:end)])';

```