

EDROALDO LUMMERTZ DA ROCHA

**TRANSPORTE DE FÔNONS EM
GEOMETRIAS FRACTAIS**

FLORIANÓPOLIS

2010

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO
EM ENGENHARIA ELÉTRICA**

**TRANSPORTE DE FÔNONS EM GEOMETRIAS
FRACTAIS**

Dissertação submetida à
Universidade Federal de Santa Catarina
como parte dos requisitos para a
obtenção do grau de Mestre em Engenharia Elétrica

EDROALDO LUMMERTZ DA ROCHA

Florianópolis, Setembro de 2010

Catálogo na fonte pela Biblioteca Universitária
da
Universidade Federal de Santa Catarina

R672t Rocha, Edroaldo Lummertz da
Transporte de fônons em geometrias fractais [dissertação] /
Edroaldo Lummertz da Rocha ; orientador, Carlo Requião da
Cunha. - Florianópolis, SC, 2010.
96 p.: il., grafs.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Santa
Catarina, Centro Tecnológico. Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Elétrica.

Inclui referências

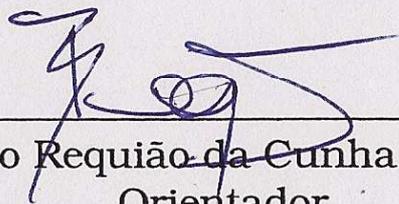
1. Engenharia elétrica. 2. Fônons. 3. Fractais. 4.
Termoeletricidade. I. Cunha, Carlo Requião da. II.
Universidade Federal de Santa Catarina. Programa de Pós-
Graduação em Engenharia Elétrica. III. Título.

CDU 621.3

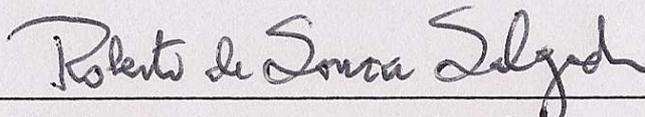
TRANSPORTE DE FÔNONS EM GEOMETRIAS FRACTAIS

EDROALDO LUMMERTZ DA ROCHA

Esta Dissertação foi julgada adequada para obtenção do Título de Mestre em Engenharia Elétrica, Área de concentração Materiais e Dispositivos Eletrônicos, e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós Graduação em Engenharia Elétrica da Universidade Federal de Santa Catarina.

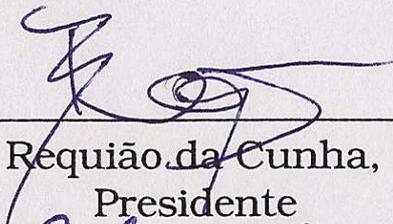


Carlo Requião da Cunha, Ph.D.
Orientador

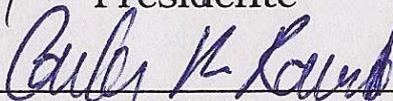


Roberto de Souza Salgado, Dr.
Coordenador do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica

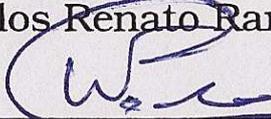
Banca Examinadora:



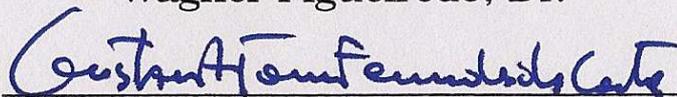
Carlo Requião da Cunha, Ph.D.
Presidente



Carlos Renato Rambo, Dr.



Wagner Figueiredo, Dr.



Gustavo Adolfo T. F. da Costa, Dr.

Dedico à minha família.

AGRADECIMENTOS

- Ao meu orientador, Ph.D. Carlo Requião da Cunha, pela amizade e criatividade.
- Aos meus pais pelo apoio, compreensão e por terem me dado a vida.
- Ao meu irmão, por ser uma fonte de alegria na minha vida.
- A minha namorada pelo apoio, compreensão e amor.
- A CAPES pelo suporte financeiro para desenvolver este trabalho.

Resumo da Dissertação apresentada à UFSC como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia Elétrica.

TRANSPORTE DE FÔNONS EM GEOMETRIAS FRACTAIS

Edroaldo Lummertz da Rocha

Setembro / 2010

Orientador: Carlo Requião da Cunha, Ph.D..

Área de Concentração: Materiais e Dispositivos Eletrônicos.

Palavras-chave: fractons, fônons, termoeletricidade, fractais.

Número de Páginas: 76

O transporte térmico em geometrias fractais é investigado utilizando o formalismo de funções de Green atomísticas. Os fractais considerados são o triângulo de *Sierpinski*, o *Barnsley Fern* e a *Self-contacting Tree*. A densidade de estados total e local, transmissão de fônons e estimativas da condutância térmica são calculadas utilizando o formalismo descrito. Além disso, funções de correlação são utilizadas para analisar os resultados. A influência da desordem nas propriedades de transporte é investigada e observa-se uma transição de estados fractônicos para fonônicos na presença de desordem. Argumenta-se que os fônons gerados podem ser estendidos ou localizados devido às oscilações presentes na condutância térmica em função do nível de desordem. Portanto, observa-se um comportamento distinto daquele esperado pela teoria da localização de Anderson onde as funções de onda associadas as vibrações da rede deveriam apresentar efeitos de localização dependentes da desordem. É observado que para determinados intervalos de desordem os fônons gerados são estendidos. Neste caso, o modelo de Anderson pode não ser o mais indicado para descrever a transição. No entanto, para níveis de desordem onde a dimensão de correlação encontra-se em um regime de dimensão fractal estatística, os resultados obtidos são condizentes com aqueles esperados pelo modelo de Anderson.

Abstract of Dissertation presented to UFSC as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master in Electrical Engineering.

PHONONS TRANSPORT IN FRACTAL GEOMETRIES

Edroaldo Lummertz da Rocha

Setembro / 2010

Advisor: Carlo Requião da Cunha, Ph.D..

Area of Concentration: Materials and Electronic Devices.

Keywords: fractons, phonons, thermoelectricity, fractals.

Number of pages: 76

The thermal transport in fractal geometries is investigated using the atomistic Green functions formalism. The fractals considered are the Sierpinski triangle, the Barnsley Fern and the Self-contacting Tree. The total and local density of states, phonons transmission and thermal conductance estimates are computed using the described formalism. Besides, correlation functions are used to analyze the obtained results. The influence of disorder on transport properties is investigated and it is observed that there is a transition from fracton to phonon states when disorder is introduced. It is argued that the phonons generated could be extended or localized due to oscillations in the thermal conductance as a function of the disorder level. Therefore, a distinctive behaviour is observed from that expected from Anderson localization theory where the wave functions associated to vibrations from the lattice should exhibit disorder dependent localization effects. It is observed that at determined intervals of disorder the phonons generated are extended. In this case, the Anderson model can be further explored to describe the transition. However, for disorder levels where the dimension correlation is in a statistical fractal dimension regime, the obtained results are compatible with those expected from the Anderson model.

SUMÁRIO

Introdução.....	1
Formalismo Teórico.....	11
2.1 Redes de Bravais e Espaço Recíproco	12
2.2 Fônons	16
2.3 Matriz Dinâmica	19
2.4 Funções de Green	21
2.5 Fluxo de energia entre dois graus de liberdade . .	27
2.6 Normalização	29
2.7 Expressão para o fluxo de energia total	29
2.8 Localização de Anderson	33
2.9 Percolação	35
2.10 Correlações	37
Método.....	39
3.1 Matriz Dinâmica	40
3.2 Autoenergias	41
3.3 Algoritmos	44
3.4 Metodologia	48
Resultados e Discussão.....	49
4.1 Sierpinski	50
4.2 Barnsley Fern e Self-Contacting Tree	57
Resultados para o Barsley Fern.....	59
Resultados para a Self-contacting Tree.....	63
Conclusão e Trabalhos Futuros.....	67

7.1 Trabalhos Futuros 70

LISTA DE FIGURAS

1	Fractais modelados: (a) Triângulo de <i>Sierpinski</i> , (b) <i>Barnsley Fern</i> , (c) <i>Self-contacting Tree</i> (1), (2), (3).	8
2	Estrutura FCC.	13
3	Primeira zona de Brillouin indicando os pontos de alta simetria (4).	16
4	Fio monoatômico utilizado para obter a relação de dispersão para fônons acústicos (5).	17
5	Relação de dispersão para fônons acústicos.	18
6	Rede diatômica de GaAs utilizada na obtenção dos ramos de fônons acústicos e ópticos (5).	18
7	Relação de dispersão para fônons acústicos e ópticos.	20
8	Fluxograma para o cálculo da condutância térmica.	34
9	Fractais modelados: (a) Triângulo de <i>Sierpinski</i> , (b) <i>Barnsley Fern</i> , (c) <i>Self-contacting Tree</i>	39
10	Fractal de <i>Sierpinski</i> para níveis de auto-similaridade 1, 2, 3, 4 e 5, respectivamente.	45
11	Fractal de <i>Fern</i> para níveis de auto-similaridade 1, 2, 3, 4 e 5, respectivamente.	46
12	Fractal <i>Tree</i> para níveis de auto-similaridade 1, 2, 3, 4 e 5, respectivamente.	47
13	Densidade de estados local média para os níveis de desordem 0, 20, 40 e 60%.	50
14	Mapa da densidade de estados média em função do nível de desordem.	51
15	Dimensão de correlação da densidade de estados média em função do nível de desordem.	52

16	Tamanho médio do cluster em função do nível de desordem.	53
17	Mapa da transmissão média em função do nível de desordem.	54
18	Dimensão de correlação da transmissão média em função do nível de desordem.	55
19	Soma da transmissão média em função do nível de desordem.	56
20	Mapa da densidade de estados média em função do nível de desordem.	59
21	Dimensão de Correlação da densidade de estados média em função no nível de desordem.	60
22	Mapa da transmissão média em função do nível de desordem.	60
23	Tamanho médio do cluster em função no nível de desordem.	61
24	Dimensão de Correlação da transmissão média em função no nível de desordem.	61
25	Soma da transmissão média em função no nível de desordem.	62
26	Mapa da densidade de estados média em função do nível de desordem.	63
27	Dimensão de Correlação da densidade de estados média em função no nível de desordem.	64
28	Mapa da transmissão média em função do nível de desordem.	64
29	Tamanho médio do cluster em função no nível de desordem.	65

30	Dimensão de Correlação da transmissão média em função no nível de desordem.	65
31	Soma da transmissão média em função no nível de desordem.	66

1 INTRODUÇÃO

Observar a natureza consiste essencialmente em contemplar seu caráter fractal. Árvores, nuvens e montanhas são exemplos macroscópicos representativos desta constatação quando geometricamente investigados. A geometria fractal possibilita abordar de forma matematicamente consistente aspectos estruturais da natureza que poderiam parecer puramente aleatórios (6), (7), constituindo um complemento para a geometria euclidiana e simetria cristalina(8).

Fractais podem ser entendidos como entidades, físicas ou matemáticas, que apresentam propriedades estruturais como invariância sob transformações de escala, dimensão fracionária e auto-similaridade. Em uma geometria auto-similar, as propriedades geométricas da estrutura são indistinguíveis em função da escala de comprimento. Em geral, a dimensão fracionária D é menor ou igual a dimensão euclidiana d , devido ao caráter “aberto” das estruturas fractais (7), isto é, elas tendem a exibir arranjos de partículas não homogêneos e irregulares porém, preservando suas características auto-similares.

Em física da matéria condensada, fractais emergem em uma ampla variedade de sistemas como aerogéis, dendrímeros, polímeros, meios porosos e colóides. Estudos recentes indicam a existência de fractais quânticos em GaAs dopados com Mn. A observação destes padrões fractais em funções de onda eletrônicas ocorre devido ao fenômeno de localização de ondas em meios desordenados. A estrutura cristalina do GaAs é desordenada pela inserção de Mn em sítios de Ga (9). Ondas propagando-se em ambiente aleatório podem tornar-se lo-

calizadas devido a um padrão de interferências construtivas e destrutivas ocorrendo a partir de múltiplos eventos de espalhamento aleatórios (10). No caso eletrônico, a transição de ondas extendidas para localizadas é chamada transição metal-isolante (11) e foi inicialmente proposta por P. W. Anderson (12).

De um modo geral, efeitos de localização de funções de onda devido a inserção de desordem ocorrem em uma ampla variedade de sistemas físicos, não limitando-se necessariamente ao caso eletrônico, podendo ocorrer com ondas sísmicas (9) e ondas fonônicas (13, 14), por exemplo. Em geometrias fractais, a quantização de suas propriedades vibracionais, que apresentam caráter localizado, é denominada *fracton* (15). A presença de *fractons* em um material pode causar difusão anômala (16) com um deslocamento médio quadrático obedecendo a uma lei de potência relacionada a sua dimensão fractal (15, 8). Portanto, a propagação de fônons é reduzida, resultando na redução da condutividade térmica. Um comportamento similar pode ser observado em materiais desordenados.

O transporte de fônons é teoricamente investigado utilizando diferentes metodologias, dentre elas: a equação de transporte de Boltzmann, dinâmica molecular e o formalismo de funções de Green atomísticas (17). As técnicas de dinâmica molecular não são interessantes para este estudo uma vez que fornecem resultados dentro de uma abordagem clássica. O método baseado na equação de transporte de Boltzmann, que descreve a evolução da distribuição de fônons e, portanto, trata os mesmos como partículas não considerando seu caráter ondulatório, fornece somente uma descrição média do fluxo de

fônons no sistema. Este método não considera localização de estados de Anderson e não é evidente sua capacidade de fornecer uma aproximação considerável para a função de transmissão (18).

No entanto, o tratamento de Boltzmann é computacionalmente menos intenso e a inclusão de processos de espalhamento não harmônicos é mais fácil do que utilizando funções de Green. A equação de transporte de Boltzmann foi utilizada com sucesso para cálculos de transporte fonônico em nanofios em altas temperaturas, para sistemas onde o comprimento resistivo do fio é longo o suficiente para o transporte ser difusivo (17). Além disso, o comportamento de retificação térmica observado em cadeias harmônicas assimétricas pode ser atribuído a localização de fônons(13).

O método de funções de Green atomísticas é capaz de capturar a natureza ondulatória de vibrações fonônicas (18). Portanto, aparenta ser uma técnica adequada para o tratamento de localização de estados em geometrias cujas homogeneidades são quebradas devido a inserção de desordem. Este formalismo foi utilizado em diversos trabalhos para calcular as propriedades de transporte, como função de transmissão e condutância térmica (19), (20), tanto na presença quando na ausência de desordem, sendo um formalismo bem estabelecido para cálculos de transporte eletrônico em nanoescala (5), (21), (22).

O efeito da desordem no transporte térmico em nanotubos de carbono semicondutores foi analisado em (23). O trabalho mostra que diferentes regimes de transporte para fônons de diferentes energias coexistem e seu peso relativo na con-

dutância térmica depende da temperatura. Além disso, conclui que a localização de fônons energéticos pode causar superaquecimento de dispositivos longos, uma vez que o aquecimento do nanotubo de carbono é dependente do comprimento do dispositivo e da distribuição de frequências de fônons gerada.

Investigações relacionadas ao transporte térmico são fundamentais para o desenvolvimento de pesquisas em termoelectricidade. O desempenho termoelétrico é avaliado através da figura de mérito $ZT = S^2 \sigma T / \kappa$, onde S é o coeficiente de Seebeck, σ é a condutividade elétrica, T é a temperatura absoluta e κ é a condutividade térmica. É conhecido que S e σ dependem somente das propriedades eletrônicas do material, enquanto que κ é dependente tanto das contribuições eletrônicas quanto fonônicas (24).

Um valor de ZT superior a 3 é necessário para se obter competitividade com os refrigeradores e geradores atuais. No entanto, em cinco décadas, a ZT de semicondutores *bulk* aumentou marginalmente, de 0.6 para 1.0. O desafio atual consiste na otimização dos parâmetros interdependentes S , σ , e κ (25). Atualmente, tem-se investigado mecanismos de transporte eletrônico em superredes de Si/Ge/Si, nanofilmes, nanofios e outras nanoestruturas (26).

O confinamento quântico nestas nanoestruturas aumenta a densidade de estados de portadores locais próximos ao nível de Fermi (27), aumentando o coeficiente de Seebeck S , enquanto a condutividade térmica pode ser reduzida devido ao confinamento de fônons e o espalhamento de fônons nas interfaces do material em superredes. Os efeitos combinados

do aumento do coeficiente de Seebeck e a redução da condutividade térmica implicam em valores de ZT teoricamente maiores.

No entanto, experimentalmente, especialmente em superredes de Si/Ge, este aperfeiçoamento de ZT não foi observado (24). Logo, abordagens em direção ao entendimento dos mecanismos de transporte em nanoestruturas podem estar relacionadas ao confinamento eletrônico e mecanismos de espalhamento diversos, como espalhamento elétron-fônon e elétron-impureza, assim como investigações sobre a redução da condutividade térmica influenciando minimamente a condutividade elétrica.

Uma baixa condutância de fônons é requerida para conversão de energia termoelétrica eficiente (28). Em materiais semicondutores, o transporte de calor é governado principalmente por fônons e a condução térmica é fortemente influenciada pelas dimensões do dispositivo. Foi observado que a condução de fônons pode ser reduzida sem afetar significativamente o transporte eletrônico em nanofios de silício, levando ao aperfeiçoamento de ZT . Esta redução na condutância térmica ocorre principalmente devido ao espalhamento de fônons na região desordenada, enquanto a transferência eletrônica é mantida pelos estados *bulk* (23).

Em um outro trabalho (29), a estratégia utilizada para maximização de ZT também baseia-se na redução da condutividade térmica. Este trabalho utiliza nanotiras de grafano *armchair* e investiga o impacto da desordem na condutância térmica. Desordem é inserida através de vacâncias de hidrogênio na estrutura molecular do grafano, cuja con-

dutância térmica é reduzida. Um ZT de 2.1 é obtido, que é 5 vezes maior do que o predito para estruturas perfeitas. Os cálculos neste trabalho foram realizados utilizando teoria do funcional da densidade, para calcular a matriz dinâmica, e o formalismo de funções de Green fora do equilíbrio, para obtenção da condutância térmica de rede.

Estes trabalhos ilustram a importância do entendimento sobre o transporte de fônons em nanoestruturas. As implicações possíveis são variáveis. Em eletrônica, valores altos tanto da condutância eletrônica quanto fonônica são desejados enquanto que em termoeletricidade, o aumento de ZT pode ser obtido ou por um aumento tanto no coeficiente de Seebeck quanto na condutância eletrônica ou por uma redução na condutância térmica. Avanços na área de termoeletricidade são importantes em nanomedicina. O entendimento da condutância térmica pode levar ao desenvolvimento de nanodispositivos com controle direcional do fluxo de calor e terapia ablativa pelo aquecimento seletivo de sistemas de *drug delivery* ou nanopartículas (30).

Materiais termoelétricos ideais teriam como propriedades básicas, condutividade elétrica perfeita e condutividade térmica zero. No entanto, condições ideais não existem. Porém, materiais como aerogéis apresentam características de isolantes térmicos e elétricos. Não obstante, pesquisas indicam a possibilidade de aerogéis com comportamento condutivo. Sabe-se também que estes materiais apresentam geometria, ao menos estatística, fractal, tornando-se candidatos possíveis para o desenvolvimento de pesquisas em termoeletricidade (31), (32).

Moléculas dendríticas, conhecidas como dendrímeros,

tem atraído atenção considerável em áreas como nanomedicina e *light-harvesting*, para conversão de energia solar. Sua geometria altamente ramificada, com possibilidade de atribuir atividades específicas aos seus grupos funcionais torna-os candidatos para desenvolvimento de pesquisas em câncer, por exemplo. Em geração de energia, possibilitam a captação de luz solar através destas extremidades, que transferem os fótons absorvidos para o núcleo dendrítico. É conhecido que estas moléculas apresentam geometria fractal (33).

Neste sentido, o estudo de mecanismos de transporte, eletrônico e fonônico, em geometrias fractais pode ser importante para o entendimento destes sistemas. Deste modo, é possível projetar nanomateriais com propriedades específicas, abrangendo um intervalo considerável de aplicações. Neste trabalho, nós não nos concentramos em propriedades específicas de sistemas físicos particulares. Nosso objetivo é investigar o impacto da geometria fractal em propriedades de transporte, como a função de transmissão de fônons, a densidade de estados total e local bem como a condutância térmica. Além disso, a influência de desordem estrutural nestas propriedades é avaliada.

Neste trabalho, para estudar teoricamente o transporte fonônico, supõem-se inicialmente que a geometria fractal de materiais como aerogéis e dendrímeros, por exemplo, podem ser consideradas como fractais ideais. Três modelos de fractais são utilizados nesta pesquisa. Dois deles aparecem com frequência na natureza e podem ser observados cotidianamente. A Figura 1 (b) e (c) ilustram esses fractais: O *Barnsley Fern* e *Self-contacting Tree*.

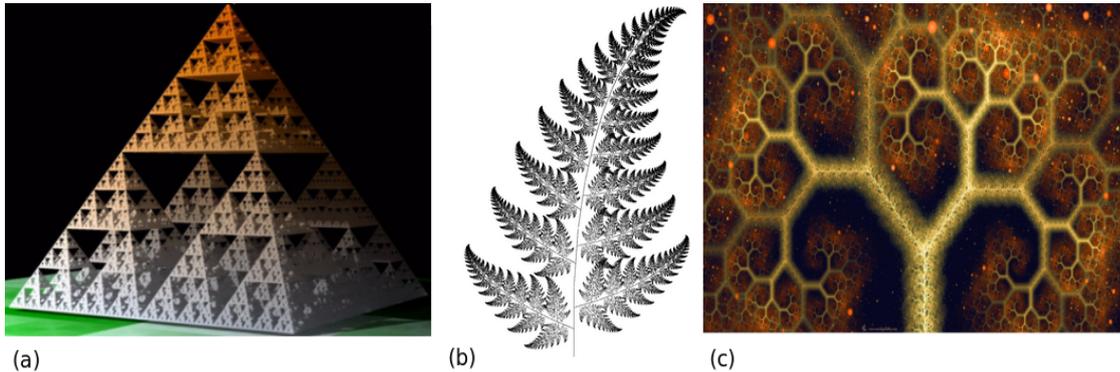


Figura 1: Fractais modelados: (a) Triângulo de *Sierpinski*, (b) *Barnsley Fern*, (c) *Self-contacting Tree* (1), (2), (3).

O outro é puramente matemático e foi descoberto pelo matemático polonês Waclaw Sierpinski, sendo conhecido como triângulo de Sierpinski Figura 1 (a). Curiosamente, o *gasket* hexagonal de Sierpinski foi sintetizado utilizando *self-assembly* molecular (34). O impacto da inserção de desordem nestas três geometrias fractais na função de transmissão de fônons e densidade de estados total e local é avaliado. Os resultados indicam algumas peculiaridades, que podem ser atribuídos as suas características geométricas. Para explicar este comportamento, diversas propriedades de correlação são calculadas e estudadas como uma função do nível de desordem estrutural inserido.

Nos capítulos dois e três, o formalismo teórico e o método utilizado são descritos, respectivamente. A arquitetura dos nanodispositivos fractais investigados é analisada e o método de funções de Green atomísticas é apresentado. As funções de correlação calculadas para fundamentar as hipóteses relacionadas a localização de estados e a transição de um regime fractônico para fonônico nas propriedades de transporte são

também explicadas. O capítulo quatro apresenta os resultados e discussões. Finalizando, o capítulo cinco descreve as conclusões, contribuições e direcionamentos futuros para a pesquisa desenvolvida.

2 FORMALISMO TEÓRICO

O transporte de fônons em nanoescala, no qual as dimensões do dispositivo tornam-se comparáveis ao comprimento de onda típico de um fônons e a natureza ondulatória do mesmo é proeminente, tem sido amplamente investigado. Não obstante, a miniaturização da eletrônica moderna e dispositivos moleculares se aproxima da escala nanométrica. Portanto, o transporte de fônons é frequentemente restrito a contornos heterogêneos e interfaces embutidas nos dispositivos (20).

Neste regime de transporte balístico ou semi-balístico, o método de funções de Green atomísticas pode ser utilizado para calcular a função de transmissão de fônons bem como outras propriedades de transporte de interesse. Baseados no sucesso do método de funções de Green para simulações de transporte eletrônico em nanoescala (21), nós o utilizamos para investigação do transporte fonônico em geometrias fractais.

Este capítulo apresenta uma derivação matemática do formalismo de funções de Green atomísticas, baseada em (20), e sua utilização no transporte de fônons. A derivação do formalismo é semelhante a desenvolvida para o transporte eletrônico. Essencialmente, a diferença, do ponto de vista formal, entre o caso fonônico e eletrônico, consiste na utilização de uma matriz dinâmica para o sistema de interesse, no primeiro, e no operador Hamiltoniano eletrônico, para o segundo, sendo as equações idênticas.

2.1 Redes de Bravais e Espaço Recíproco

Um conjunto de pontos geométricos determinados pelos vetores r_i em um referencial R , constituem uma rede espacial se existem três vetores \mathbf{a} , \mathbf{b} e \mathbf{c} tais que, quaisquer que sejam os pontos r_j e r_k , tem-se $r_j - r_k = n_1 \mathbf{a} + n_2 \mathbf{b} + n_3 \mathbf{c}$, onde n_1, n_2 e n_3 são inteiros (35).

Esta definição implica em simetria translacional, isto é, a rede espacial é indistinguível para um observador situado nos pontos r_j e r_k , para os quais $r_j - r_k = n_1 \mathbf{a} + n_2 \mathbf{b} + n_3 \mathbf{c}$. Os vetores \mathbf{a} , \mathbf{b} e \mathbf{c} são chamados vetores básicos da rede espacial e definem a peridiocidade da mesma. Neste sentido, é possível definir um sólido perfeito como um conjunto de átomos ao qual se pode associar uma rede espacial. Desta forma, a cada ponto da rede espacial corresponde um ou mais átomos, de forma que a invariância translacional seja respeitada (36).

A partir da periodicidade de um sólido perfeito é possível inferir que deve existir um grupo mínimo de átomos a partir do qual o sólido inteiro pode ser reproduzido pela repetição desse grupo. Logo, o sólido pode ser visto como um conjunto de blocos idênticos justapostos. Ao espaço definido pelo grupo mínimo de átomos que reproduzem a estrutura cristalina de um sólido chama-se célula primitiva (36).

No entanto, algumas vezes é preferível a utilização de um grupo de átomos maior que aquele correspondente à célula primitiva. A todo o grupo de átomos que devido a sua utilização repetitiva permita a geração do sólido corresponde um espaço físico denominado célula unitária. Portanto, a célula primitiva é a menor célula unitária para o respectivo sólido (37).

Uma rede de Bravais é uma rede de pontos que satisfaz as seguintes condições.

- Compreende o espaço inteiro.
- A aplicação dos vetores de rede deve levar a exatamente um outro ponto de rede.

Rotação, reflexão e translação são as operações de simetria frequentemente realizadas e são utilizadas para classificação do sólido ou rede de Bravais associada. Existem 14 configurações espaciais que satisfazem estes requisitos que são agrupadas em 7 sistemas cristalográficos: cúbico, tetragonal, ortorrômbico, hexagonal, monoclinico, triclinico e trigonal. A estrutura FCC, pertencente ao sistema cúbico é um exemplo de rede de Bravais conforme ilustra a figura 2.

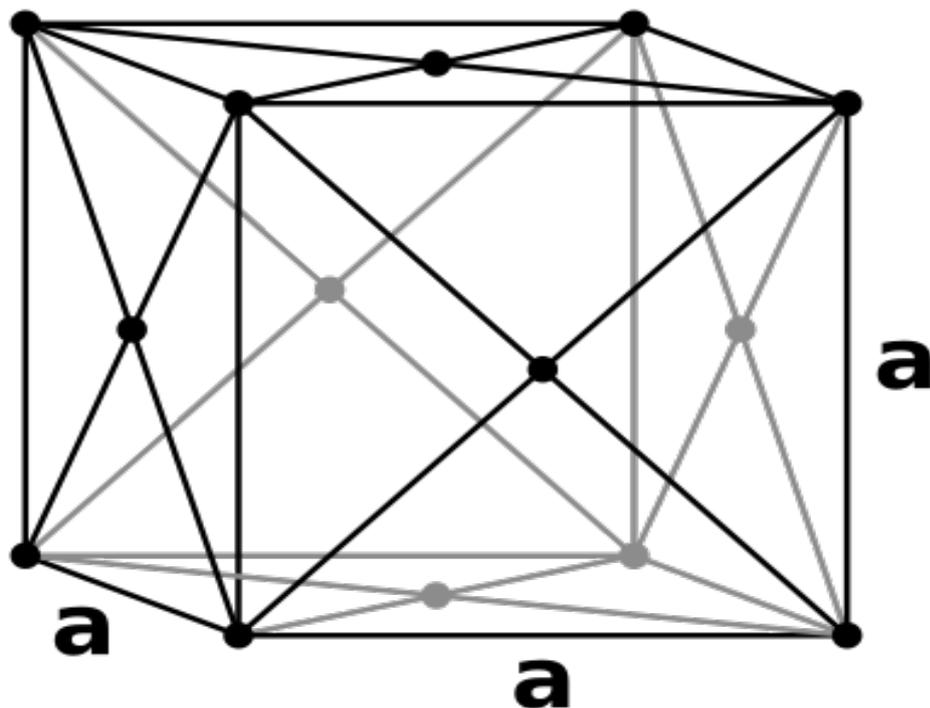


Figura 2: Estrutura FCC.

O sistema FCC possui pontos de rede nas faces do cubo. Os vetores de translação primitivos são

$$\begin{aligned} \mathbf{a}' &= \frac{a}{2}(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}}) \\ \mathbf{b}' &= \frac{a}{2}(\hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}}) \\ \mathbf{c}' &= \frac{a}{2}(\hat{\mathbf{z}} + \hat{\mathbf{x}}) \end{aligned} \quad (2.1)$$

onde a é o parâmetro de rede. Considerando este exemplo, o conceito de rede recíproca de uma determinada rede de Bravais pode ser definido. Quando os elétrons em um sólido são descritos através da mecânica quântica, devido à sua natureza ondulatória, quando encontrarem um potencial eles poderão sofrer difração.

Este fenômeno ocorre com a periodicidade do cristal. Uma forma interessante de abordar esta difração é encontrando um conjunto de ondas planas que possuem vetor de onda com a periodicidade da rede. Uma vez que tal periodicidade é discreta, devido às condições de contorno periódicas impostas, este conjunto de vetores de onda constituirá um espaço discreto, conhecido como espaço recíproco. Com isso, os vetores que constituem o espaço recíproco são construídos a partir dos vetores do espaço real (35) com as seguintes equações

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= 2\pi \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}} \\ \mathbf{B} &= 2\pi \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}} \\ \mathbf{C} &= 2\pi \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}} \end{aligned} \quad (2.2)$$

Aplicando as definições 2.2 aos vetores primitivos da estrutura FCC 2.1, obtém-se

$$\begin{aligned}\mathbf{A} &= \frac{2\pi}{a}(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{z}}) \\ \mathbf{B} &= \frac{2\pi}{a}(-\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}}) \\ \mathbf{C} &= \frac{2\pi}{a}(\hat{\mathbf{x}} - \hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}})\end{aligned}$$

(2.3)

Este resultado indica que a rede recíproca de uma FCC é a rede real de um BCC. Desta forma, a primeira zona de Brillouin, que é a região no espaço recíproco que pode ser construída sem cruzar qualquer plano de Bragg, para a estrutura diamante é a célula de Wigner-Seitz para um BCC, conforme a figura 3. A célula de Wigner-Seitz é a mínima célula correspondente a um ponto de rede. Os vetores de onda dos pontos de máxima simetria são: $\Gamma = [0 \ 0 \ 0]$, $X = [1 \ 0 \ 0]$, $L = [1/2 \ 1/2 \ 1/2]$, $K = [3/4 \ 3/4 \ 0]$, $W = [1 \ 1/2 \ 0]$ e $U = [1 \ 1/4 \ 1/4]$. Percorrer os pontos de máxima simetria consiste em atravessar a estrutura da rede inteira.

A figura 3 também apresenta caminhos de alta simetria. Através deles, toda a estrutura do cristal pode ser percorrida. Por exemplo, a partir do ponto L é possível percorrer um caminho Λ até atingir o ponto Γ , no centro da zona. Em seguida, um caminho Δ pode ser utilizado para chegar ao ponto X . Deste ponto é possível passar por U então W e chegar em K . Finalizando, é possível percorrer um caminho Σ e chegar novamente

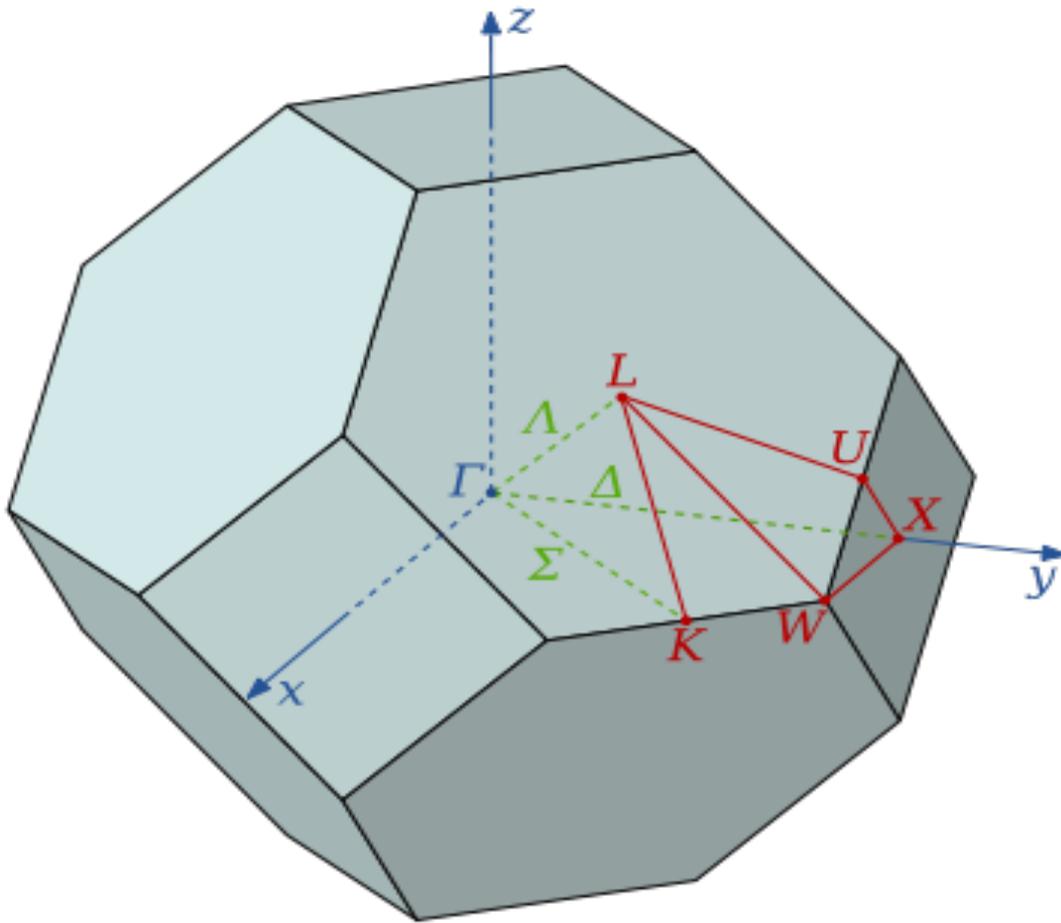


Figura 3: Primeira zona de Brillouin indicando os pontos de alta simetria (4).

ao ponto Γ . Conhecendo a estrutura básica subjacente à teoria dos sólidos é possível introduzir as vibrações que ocorrem na rede cristalina.

2.2 Fônons

A rede na qual os átomos do sólido residem encontram-se em constante estado vibracional. A energia destas vibrações de rede é quantizada sendo o quanta de energia denominado fônon (35), (5). Para exemplificar esta situação um sólido unidimen-

sional é considerado e modelado segundo um sistema massa-mola conforme indicado na figura 4.

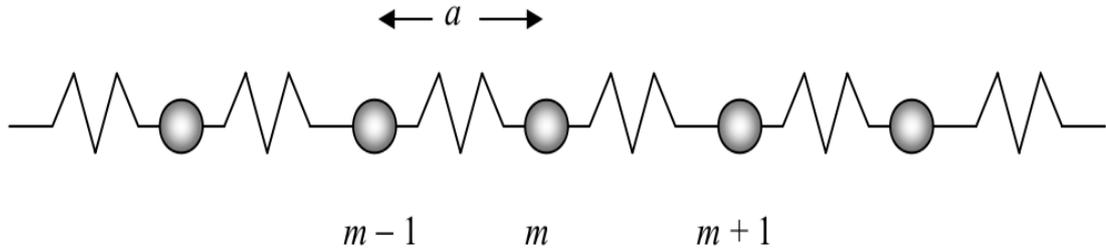


Figura 4: Fio monoatômico utilizado para obter a relação de dispersão para fônons acústicos (5).

Assumindo que u_m é o deslocamento do m -ésimo átomo a partir de sua posição de equilíbrio na rede e utilizando as equações de Newton obtém-se,

$$M \frac{d^2 u_m}{dt^2} = C[u_{m+1} - 2u_m + u_{m-1}] \quad (2.4)$$

onde M é a massa do átomo e C é a constante de mola. Assumindo vibrações da forma $u_m = \tilde{u}_m e^{-i(kna - wt)}$ e substituindo na equação 2.4 obtém-se a relação de dispersão

$$\omega^2 = 2\omega_0^2(1 - \cos(ka)) \quad (2.5)$$

onde ω_0 são os modos normais de vibração. Um gráfico desta relação de dispersão é mostrado na figura 5. Os fônons gerados por este sistema são denominados fônons acústicos e fazem parte do espectro de baixa frequência.

A inserção de uma base neste modelo de sólido unidimensional gera um novo ramo de fônons denominado ramo óptico. Para ilustrar isso, podemos considerar uma rede com duas massas distintas $M_{1,2}$ e constantes de mola $C_{1,2}$ por célula

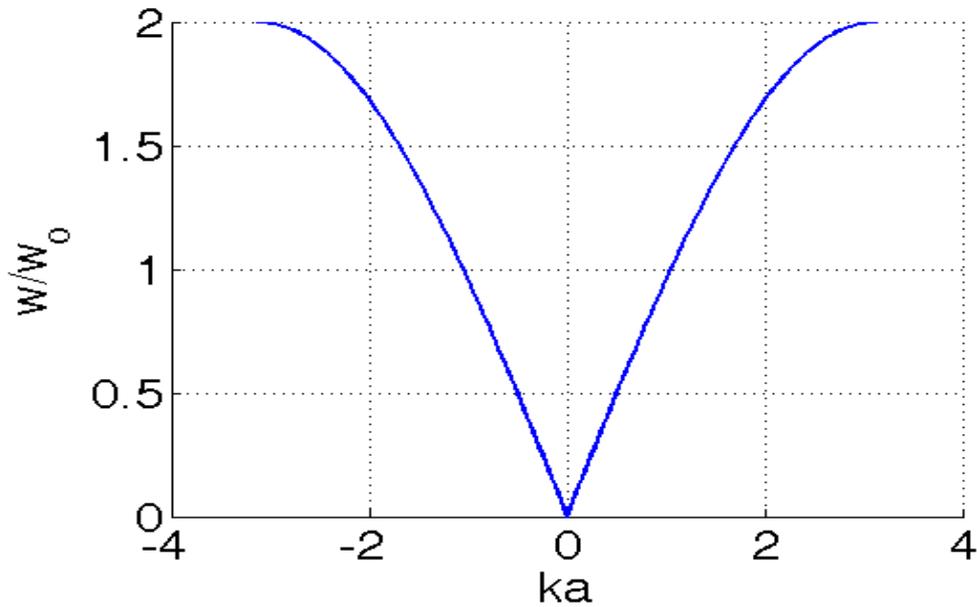


Figura 5: Relação de dispersão para fônons acústicos.

unitária, como mostrado na figura 6.

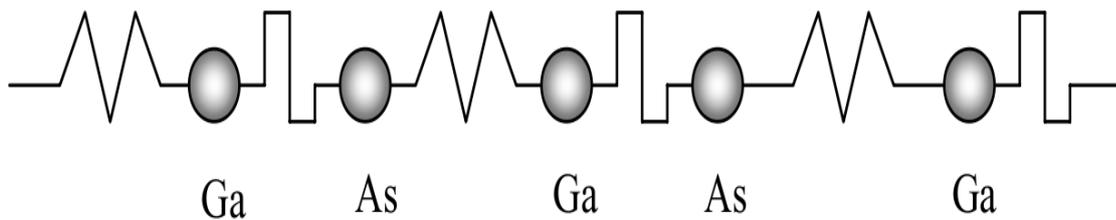


Figura 6: Rede diatômica de GaAs utilizada na obtenção dos ramos de fônons acústicos e ópticos (5).

Utilizando as equações de Newton para este sistema obtém-se a seguinte equação matricial

$$\omega^2 \tilde{u} = [\Omega] \tilde{u} \quad (2.6)$$

onde $\omega_1 \equiv \sqrt{C_1/M_1}$, $\omega_2 \equiv \sqrt{C_2/M_2}$, \tilde{u} são os autodeslocamentos e Ω é uma matriz definida por

$$\Omega = \begin{bmatrix} \omega_1^2 + \omega_2^2 & -\omega_1^2 & 0 & 0 & \dots \\ -\omega_1^2 & \omega_1^2 + \omega_2^2 & -\omega_2^2 & 0 & \dots \\ 0 & -\omega_2^2 & \omega_1^2 + \omega_2^2 & -\omega_1^2 & \dots \\ 0 & 0 & -\omega_1^2 & \omega_1^2 + \omega_2^2 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \quad (2.7)$$

Seguindo o raciocínio apresentado em (5), os ramos fonônicos acústicos e ópticos podem ser obtidos através dos autovalores da matriz

$$\begin{bmatrix} \omega_1^2 + \omega_2^2 - \omega^2 & \omega_1^2 + \omega_2^2 e^{-ika} \\ \omega_1^2 + \omega_2^2 e^{+ika} & \omega_1^2 + \omega_2^2 - \omega^2 \end{bmatrix} = 0 \quad (2.8)$$

O gráfico destes autovalores, ilustrando a relação de dispersão de fônons considerando os ramos acústico e óptico é mostrado na figura 7 onde a curva superior é o ramo óptico e a curva inferior o acústico.

É importante observar que os fônons ópticos podem ser transversais ou longitudinais enquanto que no ramo acústico, os fônons são somente longitudinais.

No entanto, para modelar o transporte de fônons em nanoestruturas comumente utiliza-se um formalismo mais sofisticado, baseado no conceito de matriz dinâmica e funções de Green atomísticas, como descrito a seguir.

2.3 Matriz Dinâmica

A estrutura atômica de interesse pode ser generalizada como um dispositivo entre dois contatos, ou reservatórios

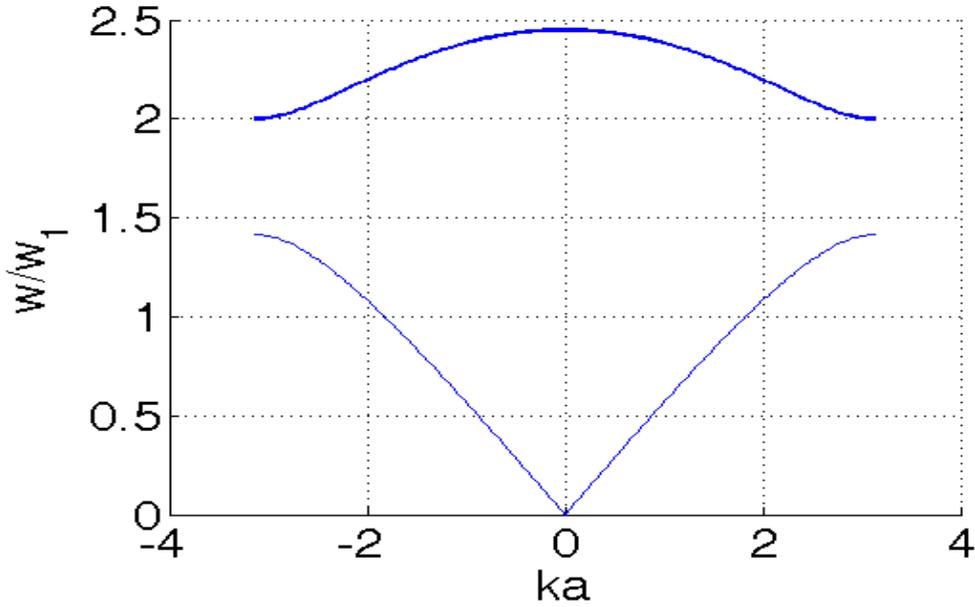


Figura 7: Relação de dispersão para fônons acústicos e ópticos.

térmicos, em diferentes temperaturas. As distribuições de fônons nos contatos podem alterar significativamente as características de transporte no dispositivo. O método de funções de Green utiliza matrizes de autoenergias para representar os efeitos dos contatos no dispositivo, simplificando o problema. O dispositivo e os contatos são representados por matrizes dinâmicas (17), que representam interações entre diferentes graus de liberdade. A definição matemática da matriz dinâmica é

$$H = \{H_{pq}\} = \frac{1}{\sqrt{M_p M_q}} = \begin{cases} -\frac{\partial^2 U}{\partial u_p \partial u_q} & \text{se } p \neq q \\ -\sum_{m \neq q} \frac{\partial^2 U}{\partial u_q \partial u_m} & \text{se } p = q \end{cases} \quad (2.9)$$

onde u_p e u_q referem-se a quaisquer dois graus de liberdade vibracionais atômicos. U representa o potencial in-

teratômico total e M_p e M_q são as massas atômicas associadas com os deslocamentos u_p e u_q . A partir da matriz dinâmica, obtém-se a seguinte equação de autovalores

$$Hu = \omega^2 u, \quad (2.10)$$

onde u é um vetor coluna consistindo dos graus de liberdade vibracionais. Esta equação de autovalores pode ser resolvida utilizando funções de Green.

2.4 Funções de Green

A equação 2.10 é uma equação de autovalores e autovetores. Uma forma de resolver este tipo de problema é através do uso de funções de Green. Uma resposta R está relacionada a uma excitação $\delta(x - x')$ através de um operador diferencial D_{op} (22)

$$D_{op}R = \delta(x - x') \quad (2.11)$$

Nós podemos definir a função de Green e expressar a resposta associada a uma excitação na forma

$$R = D_{op}^{-1} \delta(x - x') = G\delta(x - x') \quad (2.12)$$

onde $G \equiv D_{op}^{-1}$.

Portanto, para avaliar como um sistema responde a uma excitação é necessário fazer uma convolução desta resposta com a excitação. A resposta ao impulso é o que chamamos função de Green. Dito isto, a matriz dinâmica é utilizada para obter a equação dinâmica do sistema

$$(\omega^2 I - H)u = 0, \quad (2.13)$$

onde u representa os graus de liberdade vibracionais. Neste trabalho, as matrizes τ_1 e τ_2 representam interações entre dois grupos distintos de átomos. Os vetores coluna ψ e Φ representam os graus de liberdade vibracionais no dispositivo e nos contatos, respectivamente. As equações dinâmicas para os contatos isolados são

$$(\omega^2 I - H_1)\Phi_1^R = 0, \quad (2.14)$$

$$(\omega^2 I - H_2)\Phi_2^R = 0, \quad (2.15)$$

onde H_1 e H_2 são as matrizes harmônicas dos contatos. O superescrito R refere-se ao estado desconectado. Utilizando χ como a mudança no vetor original do contato (Φ^R) após a conexão entre o contato e o dispositivo, o vetor real no contato é $\Phi = \Phi^R + \chi$. Portanto, a equação dinâmica para os contatos conectados ao dispositivo é (5)

$$\begin{bmatrix} \omega^2 I - H_1 + i\eta & -\tau_1^\dagger & 0 \\ -\tau_1 & \omega^2 I - H_d & -\tau_2 \\ 0 & -\tau_2^\dagger & \omega^2 I - H_2 + i\eta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_1^R + \chi_1 \\ \psi \\ \Phi_2^R + \chi_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_1^R \\ 0 \\ S_2^R \end{bmatrix} \quad (2.16)$$

onde S^R pode ser escrito como

$$[\omega^2 I - H_n + i\eta]\Phi_n^R = S_n^R, \quad (2.17)$$

sendo $n = 1, 2$ e H_d a matriz harmônica do dispositivo. O termo

$i\eta$ na equação 2.17 representa a extração de fônons do contato enquanto que o termo S^R representa a reinserção de fônons a partir de fontes externas. Estes mecanismos de remoção e reinserção de fônons são fundamentais para manter o contato em um potencial eletroquímico constante (5). Utilizando a primeira linha da equação matricial 2.16, podemos escrever

$$\begin{aligned} (\omega^2 I - H_1 + i\eta)(\Phi_1^R + \chi_1) - \tau_1^\dagger \psi &= S_1^R, \\ (\omega^2 I - H_1 + i\eta)\chi_1 + (\omega^2 I - H_1 + i\eta)\Phi_1^R - \tau_1^\dagger \psi &= S_1^R, \end{aligned} \quad (2.18)$$

Considerando a equação 2.17 para o termo S_n^R , o segundo termo da equação 2.19 pode ser eliminado e obtém-se

$$\chi_1 = g_1 \tau_1^\dagger \psi, \quad (2.19)$$

Uma expressão similar pode ser obtida para χ_2 , considerando a terceira linha da equação 2.16, obtendo

$$\chi_2 = g_2 \tau_2^\dagger \psi, \quad (2.20)$$

Ao considerar a segunda linha da matriz em 2.16 e utilizando as equações 2.19 e 2.20 é possível obter a função de Green para o sistema completo, da seguinte forma

$$(\omega^2 I - H_d)\psi - \tau_1^\dagger(\Phi_1^R + \chi_1) - \tau_2(\Phi_2^R + \chi_2) = 0, \quad (2.21)$$

Após alguma álgebra, obtém-se

$$\left[(\omega^2 I - H_d - \underbrace{\tau_1 g_1 \tau_1^\dagger}_{\Sigma_1} - \underbrace{\tau_2 g_2 \tau_2^\dagger}_{\Sigma_2}) \right] \psi - \tau_1 \Phi_1^R - \tau_2 \Phi_2^R = 0. \quad (2.22)$$

Resultando em

$$\psi = GS. \quad (2.23)$$

onde

$$G = [\omega^2 I - H_d - \Sigma_1 - \Sigma_2]^{-1}. \quad (2.24)$$

sendo Σ_1 e Σ_2 são matrizes de autoenergia e S é dado por

$$S = \tau_1 \Phi_1^R + \tau_2 \Phi_2^R. \quad (2.25)$$

As matrizes utilizadas nas equações 2.19, 2.20 e 2.23 são definidas como

$$g_1 = [\omega^2 I - H_1 + i\eta]^{-1}, \quad (2.26)$$

$$g_2 = [\omega^2 I - H_2 + i\eta]^{-1}. \quad (2.27)$$

são as funções de Green para os contatos 1 e 2, isolados, respectivamente. Antes de prosseguir, é interessante fornecer algumas igualdades que serão úteis posteriormente. Uma vez que Φ_1^R e Φ_2^R são vetores que representam dois contatos desconectados cujo produto interno é nulo, obtemos.

$$S_1 S_2^\dagger = \tau_1 \Phi_1^R \Phi_2^{R\dagger} \tau_2^\dagger = 0, \quad (2.28)$$

$$S_2 S_1^\dagger = \tau_2 \Phi_2^R \Phi_1^{R\dagger} \tau_1^\dagger = 0, \quad (2.29)$$

A função espectral, utilizada posteriormente, é definida por

$$A = i[G - G^\dagger] = i[g_1 - g_1^\dagger] + i[g_2 - g_2^\dagger] = \underbrace{G\Gamma_1 G^\dagger}_{A_1} + \underbrace{G\Gamma_2 G^\dagger}_{A_2}. \quad (2.30)$$

O alargamento na densidade de estados devido aos contatos é definido pela matriz $\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2$

$$\Gamma = \tau_1 A_1 \tau_1^\dagger + \tau_2 A_2 \tau_2^\dagger. \quad (2.31)$$

Neste ponto é importante definir o significado associado às funções de Green, as matrizes de autoenergias e sua interpretação física. As funções de Green definidas nas equações 2.26 e 2.27 são denominadas funções de Green retardadas. No entanto, também é possível obter a chamada função de Green avançada. Estas funções de Green são provenientes das condições de contorno aplicadas ao resolver a respectiva equação diferencial (38), (22), (5).

A função de Green $G(x, x')$ pode ser vista como a função de onda em x resultante de uma excitação em x' . Fisicamente, se espera que esta excitação dê origem a duas ondas viajando no sentido de afastar-se do ponto de excitação (22). Esta solução é a função de Green retardada. A solução correspondente à função de Green avançada consiste de uma onda aproximando-se do ponto de excitação e desaparecendo no mesmo. Apenas por ilustração, podemos considerar as funções de Green retardada e avançada definidas abaixo

$$G(\omega^2) = \overbrace{[(\omega^2 + i\eta)I - H]^{-1}}^{\text{Retardada}} \quad (2.32)$$

e

$$G(\omega^2) = \overbrace{[(\omega^2 - i\eta)I - H]^{-1}}^{\text{Avançada}} \quad (2.33)$$

Formalmente, as duas funções de Green diferem somente através do sinal do termo $i\eta$. No entanto, no domínio do tempo os respectivos comportamentos são distintos. A função de Green retardada possui uma interpretação física como resposta a um impulso de excitação em $t = 0$ (5) enquanto que a função de Green avançada é somente uma solução matematicamente válida da equação, sem um significado físico. Logo, neste trabalho, as funções de Green consideradas são retardadas.

As autoenergias, definidas na equação 2.24, são utilizadas para representar o efeito dos contatos no dispositivo (20). Fisicamente, a parte real da autoenergia causa um deslocamento nos níveis de energia do dispositivo enquanto que a parte imaginária confere aos autoestados um tempo de vida finito e também está relacionada ao alargamento da densidade de estados (5).

A densidade de estados pode ser definida como o número de estados em cada nível de energia que estão disponíveis para serem ocupados (37). Utilizando o formalismo de funções de Green é possível obter uma expressão para a densidade de estados. Podemos considerar a seguinte função de Green

$$G \equiv \lim_{\eta \rightarrow 0^+} [\varepsilon - H + i\eta]^{-1} \quad (2.34)$$

Assim, os elementos diagonais do operador podem ser es-

critos como

$$\langle k|G|k\rangle \equiv \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_k + i\eta}, \quad (2.35)$$

que, após alguma álgebra obtém-se

$$\langle k|G|k\rangle \equiv \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left[\int \frac{\varepsilon - \varepsilon_k}{(\varepsilon - \varepsilon_k)^2 + \eta^2} d\varepsilon - i \int \frac{\eta}{(\varepsilon - \varepsilon_k)^2 + \eta^2} d\varepsilon \right] \quad (2.36)$$

O segundo termo fornece $-i\pi\delta(E - E_k)$ no limite onde η tende a zero. Este termo é igual a definição da densidade de estados que então, pode ser expressa por

$$DOS(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \sum_k \text{Im}[\langle k|G|k\rangle] \quad (2.37)$$

A próxima etapa é calcular o fluxo de energia entre dois graus de liberdade. Neste ponto, uma equação de conservação de energia é obtida a partir da qual as expressões para a função de transmissão serão derivadas.

2.5 Fluxo de energia entre dois graus de liberdade

As equações necessárias para o cálculo da função de transmissão de fônons e condutância térmica são obtidas utilizando uma expressão para a energia do sistema. Esta expressão, conforme apresenta a literatura, é baseada na soma dos termos de energia cinética e potencial e pressupõe o conhecimento da matriz dinâmica. Seguindo o formalismo apresentado em (20), a energia associada com quaisquer graus de liberdade pode ser expressa por

$$E_p = \frac{1}{4} \sum_q (u_p^* k_{pq} u_q + u_q^* k_{qp} u_p) + \frac{M_p}{2} \dot{u}_p^* \dot{u}_p \quad (2.38)$$

onde

$$k_{pq} = H_{pq} \sqrt{M_p M_q}. \quad (2.39)$$

O termo H_{pq} é o elemento da matriz dinâmica associado aos graus de liberdade p e q . Considerando o conhecimento da matriz dinâmica, podemos calcular a derivada temporal da energia E_p como

$$\frac{dE_p}{dt} = \frac{1}{4} \sum_q (\dot{u}_p^* k_{pq} u_q + u_p^* k_{pq} \dot{u}_q + \dot{u}_q^* k_{qp} u_p + u_q^* k_{qp} \dot{u}_p) + \frac{M_p}{2} (\ddot{u}_p^* \dot{u}_p + \dot{u}_p^* \ddot{u}_p). \quad (2.40)$$

Usando as equações de Newton ($M_p \ddot{u}_p = -\sum_q k_{pq} u_q$ e $M_p \ddot{u}_p^* = -\sum_q k_{qp} u_q^*$), a equação 2.40 pode ser expressa como

$$\frac{dE_p}{dt} = \frac{1}{4} \sum_q (u_p^* k_{pq} \dot{u}_q + \dot{u}_q^* k_{qp} u_p - u_q^* k_{qp} \dot{u}_p - \dot{u}_p^* k_{pq} u_q) \quad (2.41)$$

As expressões $u_p = \phi_p e^{-i\omega t} / \sqrt{M_p}$ e $u_q = \phi_q e^{-i\omega t} / \sqrt{M_q}$, onde ϕ_p e ϕ_q não apresentam dependência temporal, simplificam a equação 2.41 para

$$\frac{dE_p}{dt} = \frac{\omega}{2i} \sum_q [\phi_p^* H_{pq} \phi_q - \phi_q^* H_{qp} \phi_p] \equiv \sum_q J_{pq} \quad (2.42)$$

A equação 2.42 assume a forma típica de uma equação de conservação de energia. Portanto, é natural definir o fluxo de energia entre dois graus de liberdade u_p e u_q como

$$J_{pq} = \frac{\omega}{2i} [\phi_p^* H_{pq} \phi_q - \phi_q^* H_{qp} \phi_p]. \quad (2.43)$$

2.6 Normalização

Utilizando a equação 2.38 e $u_p = \phi_p e^{-i\omega t} / \sqrt{M_p}$, a condição de normalização para fônons pode ser expressa como

$$\begin{aligned}
 \hbar\omega &= \sum_p E_p \\
 &= \sum_p \left[\frac{1}{4} \sum_q (u_p^* k_{pq} u_q + u_q^* k_{qp} u_p) + \frac{M_p}{2} \dot{u}_p^* \cdot \dot{u}_p \right] \\
 &= \sum_p \omega^2 |\phi_p|^2
 \end{aligned} \tag{2.44}$$

Portanto,

$$\sum_p |\phi_p|^2 = \frac{\hbar}{\omega} \tag{2.45}$$

Esta condição de normalização será posteriormente utilizada para o cálculo do fluxo de entrada e saída no dispositivo, assunto da próxima seção.

2.7 Expressão para o fluxo de energia total

O fluxo de energia total é o somatório dos fluxos entre graus de liberdade individuais, conforme a equação 2.43. J_1 é o fluxo de calor entre o Contato 1 e o Dispositivo e pode ser expresso como

$$\begin{aligned}
 J_1 &= \frac{\omega \text{Tr}[\psi^\dagger \tau_1 \Phi_1 - \Phi_1^\dagger \tau_1^\dagger \psi]}{2i} \\
 &= \underbrace{\frac{\omega \text{Tr}[\psi^\dagger \tau_1 \Phi_1^R - \Phi_1^{R\dagger} \tau_1^\dagger \psi]}{2i}}_{\text{fluxoEntrada}} - \underbrace{\frac{\omega \text{Tr}[\psi^\dagger \tau_1 \Phi_1^L - \Phi_1^{L\dagger} \tau_1^\dagger \psi]}{2i}}_{\text{fluxoSaida}} \tag{2.46}
 \end{aligned}$$

O primeiro e segundo termos na equação 2.46 são os

fluxos de entrada e saída, respectivamente. Utilizando as equações 2.19, 2.20, 2.23, 2.25, 2.28 e 2.29 o fluxo de entrada pode ser escrito como

$$\begin{aligned}
\text{fluxoEntrada} &= \\
&= \frac{\omega}{2i} \text{Tr} \left[S^\dagger G^\dagger S_1 - S_1^\dagger G S \right] \\
&= \frac{\omega}{2i} \text{Tr} \left[(\tau_1 \Phi_1^R + \tau_2 \Phi_2^R)^\dagger G^\dagger (\tau_1 \Phi_1^R) - (\Phi_1^{R\dagger} \tau_1^\dagger) G (\tau_1 \Phi_1^R + \tau_2 \Phi_2^R) \right] \\
&= \frac{\omega}{2i} \text{Tr} \left[\Phi_1^R \tau_1 \Phi_1^{R\dagger} \tau_1^\dagger G^\dagger - \Phi_1^R \tau_1 \Phi_1^{R\dagger} \tau_1^\dagger G \right] \\
&= \frac{\omega \text{Tr} [S_1 S_1^\dagger - S_1 S_1^\dagger G]}{2i} \\
&= - \frac{\omega \text{Tr} [S_1 S_1^\dagger (G - G^\dagger)]}{2i} \\
&= \frac{\omega \text{Tr} [S_1 S_1^\dagger A]}{2}. \tag{2.47}
\end{aligned}$$

A propriedade amostral da função delta de Dirac diz que

$$\sum_{\alpha} N_1(\varepsilon_{\alpha}) = \int N_1(\omega^2) \sum_{\alpha} \delta(\omega^2 - \varepsilon_{\alpha}) d\omega^2. \tag{2.48}$$

Utilizando a condição de normalização expressa na equação 2.45, a densidade de fônons pode ser expressa em termos da função espectral A_1 . Somando nos autoestados ocupados, tem-se

$$\begin{aligned}
\frac{\omega}{\hbar} \Phi_1^R \Phi_1^{R\dagger} &= \sum_{\alpha} N_1(\varepsilon_{\alpha}) \Phi_1^R \Phi_1^{R\dagger}, \\
&= \int N_1(\omega^2) \sum_{\alpha} \delta(\omega^2 - \varepsilon_{\alpha}) \Phi_1^R \Phi_1^{R\dagger} d\omega^2, \\
\omega \Phi_1^R \Phi_1^{R\dagger} &= \int \frac{\hbar}{2\pi} N_1(\omega^2) A_1 d\omega^2, \tag{2.49}
\end{aligned}$$

onde A_1 é a função espectral

$$A_1 = 2\pi \sum_{\alpha} \delta(\omega^2 - \varepsilon_{\alpha}) \Phi_1^R \Phi_1^{R\dagger}. \quad (2.50)$$

onde $N_1(\omega^2)$ é a distribuição de Bose-Einstein. Isto reflete o fato que os fônons nos contatos são distribuídos de acordo com a distribuição de Bose-Einstein em uma distribuição contínua de autoestados descritos pela função espectral. Com isso, podemos utilizar

$$\omega \Phi_1^{R\dagger} \Phi_1^R \Rightarrow \int \frac{\hbar}{2\pi} N_1(\omega^2) A_1 d\omega^2 \quad (2.51)$$

para obter

$$\omega S_1 S_1^{\dagger} = \omega \tau_1 \Phi_1^R \Phi_1^{R\dagger} \tau_1^{\dagger} \Rightarrow \int \frac{\hbar}{2\pi} N_1(\omega^2) \tau_1 A_1 \tau_1^{\dagger} d\omega^2 = \int \frac{\hbar}{2\pi} N_1(\omega^2) \Gamma_1 d\omega^2 \quad (2.52)$$

onde $N_1(\omega^2)$ é a distribuição de Bose-Einstein no Contato 1 no auto-estado ω^2 . Combinando as equações 2.47 e 2.52 e integrando em relação a ω obtém-se

$$fluxoEntrada = \int \frac{\hbar\omega}{2\pi} N_1(\omega) Tr(\Gamma_1 A) d\omega. \quad (2.53)$$

O termo correspondente ao fluxo de saída na equação 2.46 pode ser avaliado, utilizando a equação 2.23 como

$$\begin{aligned} fluxoSaida &= \\ &= \frac{\omega Tr[\psi^{\dagger} \tau_1 g_1^{\dagger} \tau_1^{\dagger} \psi - \psi^{\dagger} \tau_1 g_1 \tau_1 \psi]}{2i}, \\ &= \frac{\omega}{2i} Tr \left[S^{\dagger} G^{\dagger} \tau_1 g_1^{\dagger} \tau_1^{\dagger} G S - S^{\dagger} G^{\dagger} \tau_1 g_1 \tau_1 G S \right] \\ &= \frac{\omega Tr[S^{\dagger} G^{\dagger} G S (\tau_1 g_1^{\dagger} \tau_1^{\dagger} - \tau_1 g_1 \tau_1)]}{2i}, \end{aligned}$$

Multiplicando o numerador e o denominador por i

$$\begin{aligned}
&= -\frac{\omega}{2} Tr\{S^\dagger G^\dagger GS[\tau_1 i(g_1^\dagger - g_1)\tau_1^\dagger]\} \\
&= \frac{\omega}{2} Tr\{S^\dagger G^\dagger GS[\underbrace{\tau_1 i(g_1 - g_1^\dagger)\tau_1^\dagger}_{A_1}]\} \\
&= \frac{\omega}{2} Tr[S^\dagger G^\dagger GS(\underbrace{\tau_1 A_1 \tau_1^\dagger}_{\Gamma_1})] \\
&= \frac{\omega Tr[GSS^\dagger G^\dagger \Gamma_1]}{2}. \tag{2.54}
\end{aligned}$$

Combinando as equações 2.25, 2.28 e 2.29 encontra-se

$$\begin{aligned}
\omega SS^\dagger &= \omega S_1 S_1^\dagger + \omega S_2 S_2^\dagger \\
&\Rightarrow \int \frac{\hbar}{2\pi} N_1(\omega^2) \tau_1 A_1 \tau_1^\dagger d\omega^2 + \int \frac{\hbar}{2\pi} N_2(\omega^2) \tau_2 A_2 \tau_2^\dagger d\omega^2 \\
&= \int \frac{\hbar}{2\pi} N_1(\omega^2) \Gamma_1 d\omega^2 + \int \frac{\hbar}{2\pi} N_2(\omega^2) \Gamma_2 d\omega^2 \tag{2.55}
\end{aligned}$$

O termo fluxo de saída se torna

$$\begin{aligned}
fluxoSaida &= \int \frac{\hbar\omega}{2\pi} Tr[G(N_1(\omega)\Gamma_1 + N_2(\omega)\Gamma_2)G^\dagger \Gamma_1] d\omega \\
&= \int \frac{\hbar\omega}{2\pi} Tr[N_1(\omega)A_1\Gamma_1 + N_2(\omega)A_2\Gamma_1] d\omega \tag{2.56}
\end{aligned}$$

O fluxo de energia total entre o Contato 1 e o Dispositivo é então

$$\begin{aligned}
J_1 &= \\
&= \int \frac{\hbar\omega}{2\pi} Tr[\Gamma_1 A] N_1(\omega) - Tr[N_1(\omega)A_1\Gamma_1 + N_2(\omega)A_2\Gamma_1] d\omega \\
&= \int \frac{\hbar\omega}{2\pi} \{Tr[\Gamma_1 A - A_1\Gamma_1] N_1(\omega) - Tr[A_2\Gamma_1] N_2(\omega)\} d\omega \\
&= \int \frac{\hbar\omega}{2\pi} \{Tr[\Gamma_1 (G\Gamma_1 G^\dagger + \underbrace{G\Gamma_2 G^\dagger}_{A_2} - G\Gamma_1 G^\dagger)] - Tr[A_2\Gamma_1] N_2(\omega)\} d\omega \\
&= \int \frac{\hbar\omega}{2\pi} Tr[\Gamma_1 A_2] [N_1(\omega) - N_2(\omega)] d\omega
\end{aligned}$$

$$= \int \frac{\hbar\omega}{2\pi} \text{Tr}[\Gamma_1 G \Gamma_2 G^\dagger] [N_1(\omega) - N_2(\omega)] d\omega \quad (2.57)$$

Da mesma maneira, o fluxo de energia total entre o Contato 2 e o Dispositivo pode ser expresso como

$$\begin{aligned} J_1 &= \int \frac{\hbar\omega}{2\pi} \text{Tr}[\Gamma_2 A_1] [N_2(\omega) - N_1(\omega)] d\omega \\ &= \int \frac{\hbar\omega}{2\pi} \text{Tr}[\Gamma_2 G \Gamma_1 G^\dagger] [N_2(\omega) - N_1(\omega)] d\omega \end{aligned} \quad (2.58)$$

Finalmente, o fluxo de calor pode ser escrito na forma de Landauer (20) como

$$J = \int \frac{\hbar\omega}{2\pi} \Xi(\omega) [N_1(\omega) - N_2(\omega)] d\omega \quad (2.59)$$

onde a função de transmissão é

$$\Xi(\omega) = \text{Tr}[\Gamma_1 G \Gamma_2 G^\dagger] = \text{Tr}[\Gamma_2 G \Gamma_1 G^\dagger] \quad (2.60)$$

A condutância térmica κ é a razão entre o fluxo de calor J e a diferença de temperatura,

$$\kappa = \frac{J}{\Delta T} \quad (2.61)$$

A figura 8 mostra o fluxograma descrevendo algoritmicamente o procedimento para calcular a função de transmissão e o fluxo de calor utilizando o formalismo de funções de Green atomísticas.

2.8 Localização de Anderson

Tradicionalmente, a física da matéria condensada tem se concentrado na investigação de cristais perfeitos. Porém, materiais reais apresentam impurezas, defeitos ou distorções

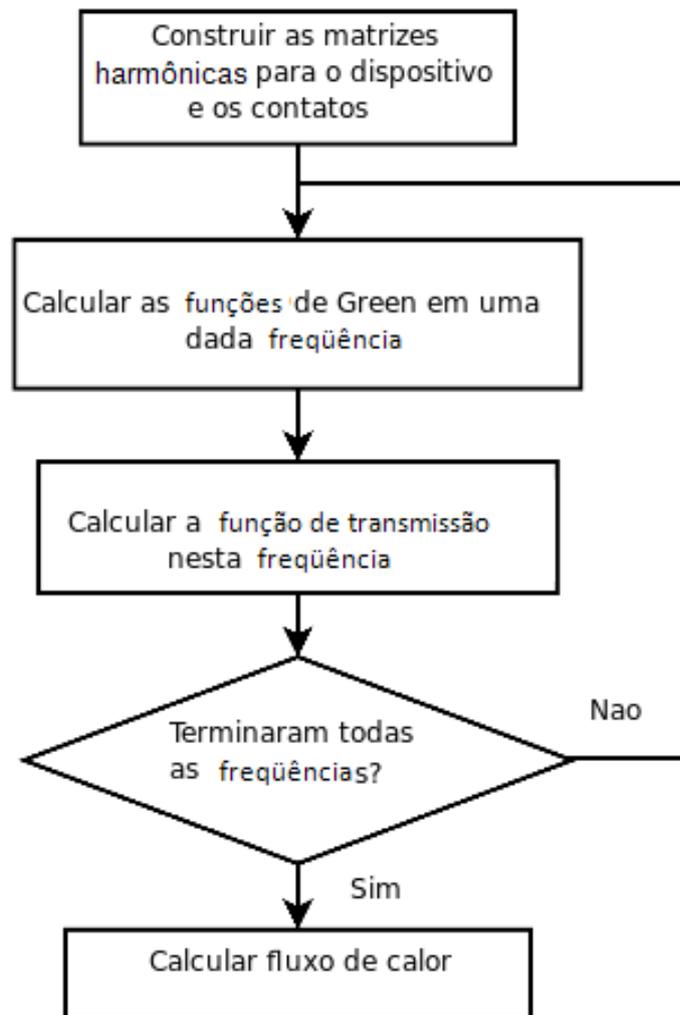


Figura 8: Fluxograma para o cálculo da condutância térmica.

na rede cristalina. Se estes desvios a partir da estrutura cristalina são significativos diz-se que o sistema em consideração encontra-se desordenado.

O modelo de Anderson (12) é amplamente utilizado para investigar o fenômeno de localização de estados eletrônicos em materiais desordenados e propriedades de transporte eletrônico em dispositivos mesoscópicos. Ele é baseado no Hamiltoniano *tight-binding* na representação de sítios

$$H = \sum_i \varepsilon_i |i\rangle \langle i| + \sum_{i \neq j} t_{ij} |i\rangle \langle j| \quad (2.62)$$

onde $|i\rangle$ é um estado localizado no sítio i e t_{ij} são os parâmetros de *hopping* que geralmente são restritos aos primeiros vizinhos. Os potenciais nos sítios ε_i são números aleatórios, escolhidos a partir de alguma distribuição $P(\varepsilon)$

Quando a função de onda eletrônica experimenta o potencial periódico de uma geometria cristalina, o elétron é capaz de propagar-se através do material com interações elétron-elétron não muito freqüentes. No entanto, quando desordem é inserida na rede cristalina, eventos de interferência ondulatória ocasionados por múltiplos eventos de espalhamento aleatórios são predominantes (10). Em última análise, estes eventos, provenientes de um meio desordenado, são responsáveis por tornar as funções de onda eletrônicas localizadas.

Neste sentido, o modelo de Anderson é frequentemente utilizado para descrever uma transição de fase quântica entre autoestados eletrônicos estendidos para localizados, denominada transição metal-isolante (11). No entanto, aparentemente, este é um fenômeno ondulatório geral, válido também para ondas fonônicas, conforme vem sendo reportado na literatura. É importante observar que esta é apenas uma descrição qualitativa e ilustrativa do modelo, sendo o mesmo extremamente complexo.

2.9 Percolação

Para explicar o conceito de percolação podemos considerar um papel quadriculado no qual um conjunto dos quadra-

dos que o constituem é aleatoriamente pintado. Os grupos de quadrados pintados adjacentes definem um cluster. Se somente uma pequena quantidade dos quadrados é pintada é improvável que o cluster se estenda de um lado ao outro do papel.

No entanto, se uma grande quantidade de quadrados é pintada é provável que o cluster percole pelo papel. Realmente, para um papel de tamanho infinito, existe uma porção única de quadrados aleatoriamente pintados que define uma transição de fase de um papel sem clusters de percolação infinitos para um papel com um cluster de percolação infinito (39).

Este modelo puramente geométrico é o mais simples no qual uma transição de fase ocorre. A percolação é altamente relevante em uma variedade de sistemas físicos, como por exemplo, a transição metal-isolante e o transporte iônico em vidros e compósitos (39).

Neste trabalho, são realizadas diversas medidas, sendo interessante fornecer uma definição para este conceito. Uma medida é uma forma de atribuir um tamanho numérico a um conjunto de tal forma que se o conjunto é decomposto em um número finito ou contável de pedaços de uma forma razoável, então o tamanho total é a soma do tamanho dos pedaços (40).

Esta definição é interessante uma vez que a dimensão de correlação, que é uma medida da dimensão fractal de um conjunto de dados, é de grande importância para este trabalho. Uma medida de dimensão comumente usada em geometrias fractais é a dimensão de Hausdorff (40), não utilizada aqui. Além da dimensão de correlação, três tipos de correlações são utilizadas para fundamentar as hipóteses realizadas sobre

a natureza dos autoestados presentes no nanodispositivo na presença de desordem.

2.10 Correlações

As correlações utilizadas fornecem estimadores para avaliar os resultados obtidos durante a investigação do transporte de fônons nas redes fractais. Possivelmente, elas explicam a transição de estados fractônicos para fonônicos quando desordem estrutural é inserida nos mesmos. Estas correlações são: *Pearson product-moment correlation*, a dimensão de correlação e a função de correlação de pares.

A *Pearson product-moment correlation* é definida pela razão entre a covariância de duas variáveis de entrada e seus desvios padrão.

$$C_1(r) = \frac{\sum_{i=1}^n (L_i^o - \bar{L}^o)(L_i^r - \bar{L}^r)}{\sqrt{\left[\sum_{i=1}^n (L_i^o - \bar{L}^o)^2 \right] \left[\sum_{i=1}^n (L_i^r - \bar{L}^r)^2 \right]}} \quad (2.63)$$

onde L^o e L^r são as densidades de estados locais média na ausência e na presença de desordem, respectivamente, e \bar{L}^o e \bar{L}^r as respectivas médias. As curvas associadas a correlação de Pearson apresentam uma dependência exponencial da forma $C_1(r) \sim e^{-r/\xi}$. O expoente ξ é definido como o nível de correlação de desordem sendo utilizado como uma estimativa de quanta desordem o sistema pode tolerar antes de estatisticamente se tornar um estado diferente.

A dimensão de correlação é calculada através da soma de correlação, que é uma estimativa da integral de correlação,

para as curvas da função de transmissão, definida por

$$C_2(\varepsilon) = \frac{1}{N^2} \sum_{\omega_i^2 > \omega_j^2}^N \Theta(\varepsilon - \|T(\omega_i^2) - T(\omega_j^2)\|) \quad (2.64)$$

onde Θ é a função de Heaviside e $T(\omega_x^2)$ é a função de transmissão.

As curvas apresentam uma dependência exponencial da forma $C(\varepsilon) = \varepsilon^{\nu}$ onde ν é a dimensão de correlação. A dimensão de correlação fornece uma estimativa sobre a dimensionalidade do sistema. Neste caso, ela possui valores entre 0 e 1. Os valores 0 e 1 são associados a uma dimensão euclidiana enquanto que os valores intermediários caracterizam uma dimensão fractal.

Finalmente, a função de correlação de pares, C_3 , é avaliada. Ela é algoritmicamente calculada como a probabilidade de encontrar dois pontos separados por uma distância r que satisfazem um determinado critério. Esta função é utilizada para obter o tamanho médio dos *clusters* via:

$$C_4(r) = \frac{\sum_{i=0}^N i C_3^r(i)}{\sum_{i=0}^N C_3^r(i)} \quad (2.65)$$

Esta correlação apresenta um decaimento exponencial da forma $C_4(r) \sim e^{-r/\zeta}$, onde ζ é definido como o comprimento de localização de desordem. Este parâmetro pode ser utilizado com um estimador da localização de estados a medida que o nível de desordem é variado. Exposto isto, o método utilizado para investigar o transporte de fônons nas geometrias fractais descritas é explicado no próximo capítulo.

3 MÉTODO

A investigação do transporte de fônons utilizando o formalismo de funções de Green compreende diversas etapas. Primeiramente, tensores harmônicos são gerados para descrever a conexão entre diversos graus de liberdade atômicos. Esta etapa utiliza as posições atômicas em equilíbrio e um modelo de energia potencial interatômico harmônico. Então, as funções de Green são avaliadas utilizando as matrizes harmônicas para calcular a transmissão de fônons dependente da frequência.

A função de transmissão é então integrada no intervalo completo do espectro de frequência, em temperaturas específicas, para obter o fluxo de calor entre os contatos. A condutância térmica é obtida pela razão entre o fluxo de calor e o gradiente de temperatura. Os nanodispositivos fractais, anexados aos contatos de fonte e dreno unidimensionais são mostrados na figura 9.

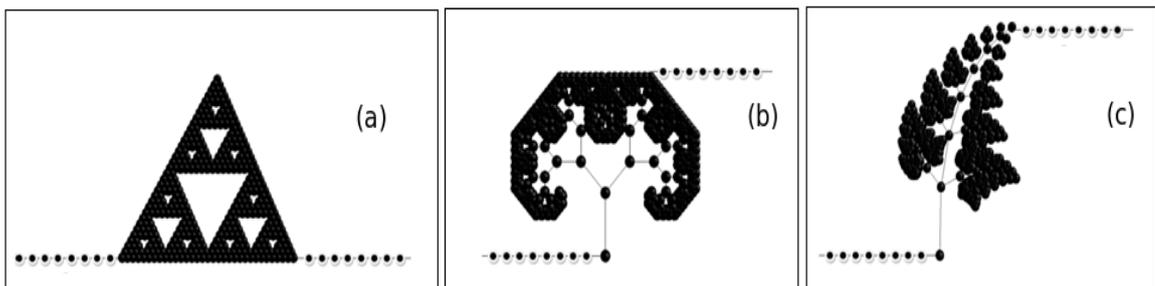


Figura 9: Fractais modelados: (a) Triângulo de Sierpinski, (b) Barnsley Fern, (c) Self-contacting Tree.

O dreno de fônons é fixo em uma determinada região do fractal enquanto que a fonte é aplicada em diversos pontos para calcular a função de transmissão.

3.1 Matriz Dinâmica

No formalismo de funções de Green atomísticas, grupos de átomos e suas interações são representados por uma matriz dinâmica, definida em termos de um potencial interatômico U . Este potencial pode assumir diferentes formas como, por exemplo, o potencial interatômico harmônico de Harrison (41) e o potencial de Stillinger-Weber (SW) (42), popularmente utilizados para estudar o transporte de fônons em redes de Si.

No entanto, nós não estamos interessados em propriedades específicas de um material individual. Ao invés disso, nosso objetivo é analisar propriedades gerais de geometrias fractais. Portanto, nós simplificamos o potencial interatômico como um potencial de mola de Hooke geral entre sítios. Então, é possível obter a matriz dinâmica diretamente via dinâmica de rede. O operador Lagrangiano do sistema é dado por

$$L = \frac{1}{2}m \sum_{i=1}^N \dot{u}_i^2 - \frac{1}{4} \sum_{j \neq i} k_{ij} (u_i - u_j)^2 \quad (3.1)$$

onde m é a massa de cada sítio, u_n é o deslocamento a partir do equilíbrio da n -ésima posição do sítio e k_{ij} é a constante de mola. O índice j , no segundo somatório, percorre todos os vizinhos do índice i . Neste modelo, considera-se as constantes de mola inversamente proporcionais a sua distância euclidiana. Em seguida, utiliza-se a equação de Euler-Lagrange

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{u}_k} \right) - \frac{\partial L}{\partial u_k} = 0 \quad (3.2)$$

para obter a equação de movimento

$$m\ddot{u}_i + \sum_{j \neq i} k_{ij}(u_i - u_j) = 0. \quad (3.3)$$

Supondo soluções exponenciais da forma $u_i = \tilde{u}_i e^{i\omega t}$ e $u_j = \tilde{u}_j e^{i\omega t}$ e substituindo na equação 3.3, obtem-se a equação de movimento no domínio da frequência

$$\sum_{j \neq i} \frac{k_{ij}}{m} (\tilde{u}_i - \tilde{u}_j) = \omega^2 \tilde{u}_i \quad (3.4)$$

A matriz dinâmica pode ser obtida diretamente da equação 3.4 percorrendo todos os vizinhos j do índice i . Com a matriz dinâmica, a função de Green associada ao grupo de átomos pertencentes ao nanodispositivo pode ser avaliada. O acoplamento entre os contatos e o nanodispositivo é realizado através das matrizes de autoenergia Σ_1 e Σ_2 , conforme explícito na equação 2.24.

3.2 Autoenergias

As matrizes de autoenergia dos contatos são calculadas utilizando uma cadeia unidimensional de sítios. Similar ao cálculo da matriz dinâmica, utiliza-se dinâmica lagrangeana para obter a equação de movimento associada. O operador Lagrangeano para este sistema pode ser escrito como

$$L = \frac{1}{2} m \sum_{n=1}^{\infty} \dot{u}_n^2 - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} C_{n+1,n} (u_{n+1} - u_n)^2. \quad (3.5)$$

onde $C_{n+1,n}$ é a constante de mola entre os átomos $n+1$ e n . Utilizando a equação de Euler-Lagrange 3.2, obtêm-se a equação

de movimento

$$m\ddot{u}_n = C_{n+1,n}[u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n]. \quad (3.6)$$

Para simplificar a notação, $C_{n+1,n}$ passa a ser escrito somente por C . Supondo soluções exponenciais da forma $u_n = e^{i(kna - \omega t)}$ e substituindo na equação 3.6, obtemos uma relação de dispersão (35) entre ω^2 e k

$$\omega^2 = \frac{2C}{m}[1 - \cos(ka)] \quad (3.7)$$

Este valor de ω é utilizado para obter a função de Green associada aos contatos. Seguindo (38), uma expansão das autofunções da matriz dinâmica pode ser expressa por

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l e^{i(kla - \omega t)} |l\rangle \quad (3.8)$$

Com a expansão expressa em 3.8, utiliza-se a seguinte expressão para calcular a função de Green, na notação de operadores (38)

$$G(z) = \sum_k \frac{|\Phi_k\rangle \langle \Phi_k|}{z - E(k)} \quad (3.9)$$

Os elementos de matriz associados a $G(z)$ são

$$G(l, m; z) = \langle l | G(z) | m \rangle = \sum_k \frac{\langle l | \Phi \rangle \langle \Phi | m \rangle}{z - E(k)} \quad (3.10)$$

Substituindo a equação 3.8 em 3.10, utilizando as condições de ortogonalização dos autoestados e transformando o somatório em k , em uma integral (22), obtém-se

$$G(l, m; z) = \frac{L}{2\pi N} \int dk \frac{e^{ika(l-m)}}{z - E(k)} \quad (3.11)$$

Fazendo a seguinte equivalência

$$E(k) = \omega^2 = \frac{2C}{m} [1 - \cos(ka)] \quad (3.12)$$

obtem-se a seguinte equação para a função de Green associada as autoenergias, sendo $\frac{L}{N} = a$ e $V = \frac{C}{m}$

$$\begin{aligned} G(l, m; z) &= \frac{L}{2\pi N} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk \frac{e^{ika(l-m)}}{z - \frac{2C}{m} [1 - \cos(ka)]} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\phi \frac{e^{i\phi(l-m)}}{z - 2V + 2V \cos\phi}, \phi = ka \end{aligned} \quad (3.13)$$

Para avaliar a integral, se observa primeiramente que ela depende do valor absoluto $|l - m|$. Em seguida, a integral é transformada em uma integral da variável complexa $\omega = e^{i\phi}$ ao longo de um círculo unitário. O resultado é

$$G(l, m; z) = \frac{1}{2\pi} \oint d\omega \frac{\omega^{|l-m|}}{\omega^2 + 2\omega x + 1} \quad (3.14)$$

A partir deste ponto, os pólos e resíduos são calculados para obter a autoenergia

$$G(l, m; z) = \frac{\pm i}{[\omega_0^2 - (\omega^2 - \omega_0)^2]^{\frac{1}{2}}} \quad (3.15)$$

onde ω_0 são os modos naturais de vibração. Lembrando da equação 2.60 para a função de transmissão, repetida abaixo

$$\Xi(\omega) = Tr[\Gamma_1 G \Gamma_2 G^\dagger] \quad (3.16)$$

e da relação existente entre Γ e a autoenergia Σ

$$\Gamma = i[\Sigma - \Sigma^\dagger] \quad (3.17)$$

é possível, uma vez conhecidas as matrizes de autoenergia, avaliar a função de transmissão de fônons entre pontos distintos da nanoestrutura. Com a função de transmissão calculada, a condutância térmica é obtida através da equação 2.59.

$$J = \int \frac{\hbar\omega}{2\pi} \Xi(\omega) [N_1(\omega) - N_2(\omega)] d\omega \quad (3.18)$$

3.3 Algoritmos

Essencialmente, do ponto de vista estrutural, a matriz dinâmica é uma matriz de vizinhanças. A construção desta matriz para fractais com um número de pontos arbitrários e fornecendo a possibilidade de inserção de desordem nas geometrias associadas requer um procedimento algorítmico. Devido as suas características geométricas, especialmente a auto-similaridade, geralmente utiliza-se recursividade para a criação dos fractais. A cada nível de auto-similaridade, o número de pontos aumenta consideravelmente, muitas vezes, tornando o problema intratável. O pseudo-código abaixo é responsável pela criação do fractal de Sierpinski.

Pseudo-código Sierpinski

- 1: **function** CRIARSIERPINSKI(autoSim, v1, v2, v3)
- 2: **if** autoSim == 1 **then**
- 3: v1.adicionaVizinho(v2)

```
4:     v1.adicionaVizinho(v3)
5:     v2.adicionaVizinho(v3)
6:     else
7:         vertex1 = divideAresta(v1, v2)
8:         vertex2 = divideAresta(v1, v3)
9:         vertex3 = divideAresta(v2, v3)
10:    criarSierpinski(autoSim-1, v1, vertex1, vertex2)
11:    criarSierpinski(autoSim-1, vertex1, v2, vertex3)
12:    criarSierpinski(autoSim-1, vertex2, vertex3, v3)
13:    end if
14: end function
```

onde `autoSim` é o nível de auto-similaridade, `v1`, `v2` e `v3`, são vértices associados ao fractal. A estratégia utilizada consiste basicamente na construção de um triângulo exterior. Para cada nível de auto-similaridade, as arestas constituintes são divididas igualmente, formando três novos triângulos. Este procedimento é recursivamente executado até que o nível de auto-similaridade seja igual a 1.



Figura 10: Fractal de Sierpinski para níveis de auto-similaridade 1, 2, 3, 4 e 5, respectivamente.

O pseudo-código descrevendo a construção do fractal Barnsley Fern é descrito abaixo 3.3. Este algoritmo utiliza alguns parâmetros adicionais para controlar o ângulo e o tamanho das ramificações, *branchAngle* e *branchRatio*, respec-

tivamente.

Pseudo-código Fern

```
1: function CRIARFERN(v, a, rad, prof)
2:   v.adicionaVizinho(vizinho)
3:   if prof > 0 then
4:     a+=bendAngle
5:     prof = prof - 1
6:     criarFern(vizinho, a - branchAngle, rad*branchRatio,
7:     prof)
8:     criarFern(vizinho, a + branchAngle, rad*branchRatio,
9:     prof)
10:  end if
11: end function
```

A figura 11 apresenta este fractal com níveis de auto-similaridade de 1 a 5.

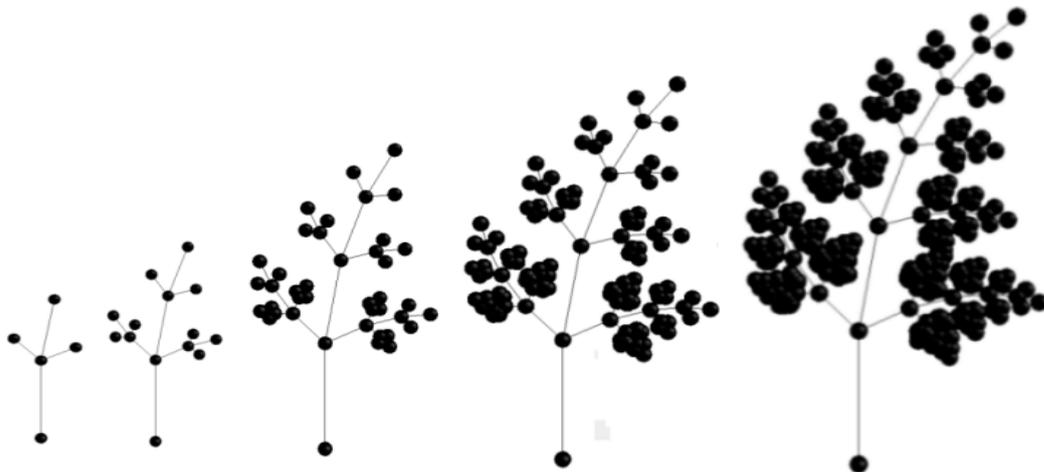


Figura 11: Fractal de Fern para níveis de auto-similaridade 1, 2, 3, 4 e 5, respectivamente.

Finalizando a descrição dos pseudo-códigos, a *Self-contacting Tree* é gerada pelo algoritmo descrito em 3.3

Tree

```

1: function CRIARTREE(v, rl, ra, prof)
2:   v.adicionaVizinho(vizinho)
3:   if prof > 0 then
4:     criarTree(vizinho, rl*sizeFactor, ra + angleFactor, prof
- 1)
5:     criarTree(vizinho, rl*sizeFactor, ra + angleFactor, prof
- 1)
6:   end if
7: end function

```

Similarmente aos demais fractais, a Tree é gerada utilizando recursividade. O algoritmo utiliza dois parâmetros de controle, *sizeFactor* e *angleFactor*, para controlar aspectos geométricos relacionados ao crescimento do fractal, como tamanho das ramificações e o ângulo entre elas, respectivamente.

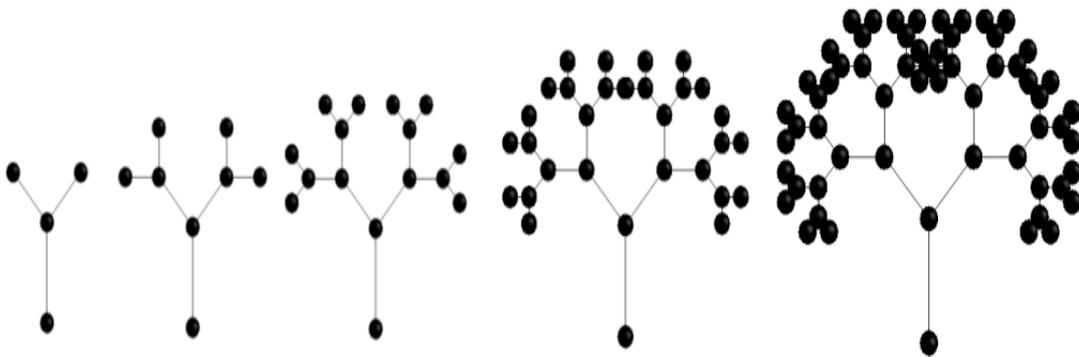


Figura 12: Fractal Tree para níveis de auto-similaridade 1, 2, 3, 4 e 5, respectivamente.

A figura 12 apresenta a evolução da Tree com o nível de auto-similaridade. Utilizando estes algoritmos, a matriz

dinâmica dos fractais associados é construída e utilizada nas equações de transporte de fônons.

3.4 Metodologia

Para realizar as simulações de transporte de fônons utilizando funções de Green foi desenvolvido um software. A linguagem de programação Java foi adotada e a biblioteca matemática *Apache Commons Math* foi utilizada. O sistema de interesse, que consiste nos fractais já citados, é modelado utilizando um sistema massa-mola considerando homogeneidade de massas e constantes de mola inversamente proporcionais a distância euclidiana entre dois sítios.

Neste sentido, quanto mais distante dois pontos vizinhos encontram-se no espaço, menor é a sua constante de mola, implicando em uma menor interação entre os respectivos sítios. A massa de cada sítio, neste modelo, é arbitrariamente escolhida e definida com o valor 1.3. A partir deste ponto, é possível calcular a matriz dinâmica para níveis de auto-similaridade arbitrários. No entanto, no contexto deste trabalho, os níveis escolhidos foram 6, 5 e 8 para os fractais de *Sierpinski*, *Fern* e *Tree*, respectivamente.

Portanto, a determinação da matriz dinâmica é a quantidade necessária para o cálculo das funções de Green associadas aos fractais que, juntamente com as matrizes de autoenergia Σ_1 e Σ_2 fornecem os requisitos para a construção dos modelos de nanodispositivos em consideração. A partir disso, as propriedades de transporte de interesse como densidade de estados total e local, função de transmissão e condutância térmica podem ser calculadas.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

O interesse deste trabalho consiste em compreender aspectos de transporte térmico, seja por intermédio de *fractons* ou fônons, em geometrias fractais e as implicações associadas à desordem estrutural nos parâmetros de transporte de interesse, como função de transmissão de fônons, condutância térmica e densidade de estados total e local. Os resultados indicam um comportamento distinto, em comparação com a literatura, destes parâmetros na presença de desordem.

Para explicar este comportamento, a transição de autoestados pertencentes a um regime de transporte fractônico para fonônico é considerada. Em uma geometria fractal, o transporte térmico é essencialmente governado pelo transporte de *fractons*.

No entanto, quando a rede associada a geometria fractal correspondente tem sua homogeneidade destruída devido à inserção de desordem, embora ainda apresente características fractais, o regime *fractônico* é quebrado. Neste sentido, argumenta-se que autoestados fonônicos, juntamente com autoestados *fractônicos* remanescentes, participam do transporte térmico.

A hipótese aqui construída para explicar os resultados obtidos consiste em considerar uma transição de autoestados fractônicos para fonônicos sendo os últimos, localizados ou estendidos. Para isso, uma séria de correlações é utilizada para obter indicadores que forneçam subsídios para fundamentar esta hipótese.

Fractais são produzidos com diferentes níveis de desor-

dem. Aqui, desordem é definida pela escolha aleatória de sítios da rede e a reorganização aleatória das ligações que o mesmo faz. É definido um percentual de sítios a serem aleatoriamente escolhidos e o seu padrão de interconexão é alterado. A função de transmissão é calculada para diferentes configurações da fonte de fônons, mantendo o dreno em uma posição fixa do fractal associado.

4.1 Sierpinski

O fractal de Sierpinski é o primeiro a ser investigado. A figura 13 mostra a densidade de estados local média para os níveis de desordem 0, 20, 40 e 60%. O comprimento de correlação de desordem ξ para este fractal é 2.83. Isto indica que pequenos níveis de desordem deveriam ser suficientes para quebrar a formação de estruturas fractônicas na densidade de estados local média e mover o sistema para um regime de estados fonônicos.

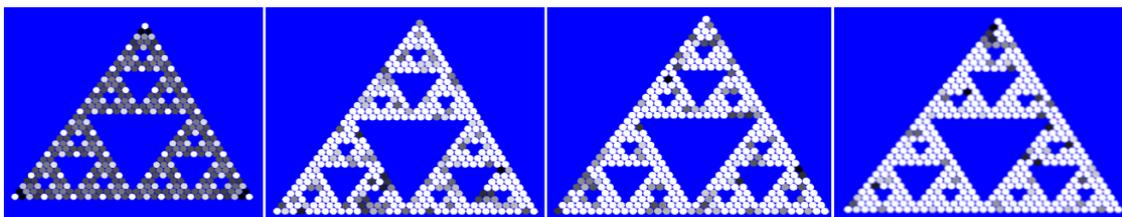


Figura 13: Densidade de estados local média para os níveis de desordem 0, 20, 40 e 60%.

Para verificar isso, um mapa da densidade de estados média para diferentes níveis de desordem é produzido, conforme a figura 14. Este mapa mostra a existência de uma densidade de estados mais distribuída sobre o espectro de frequências para pequenos níveis de desordem.

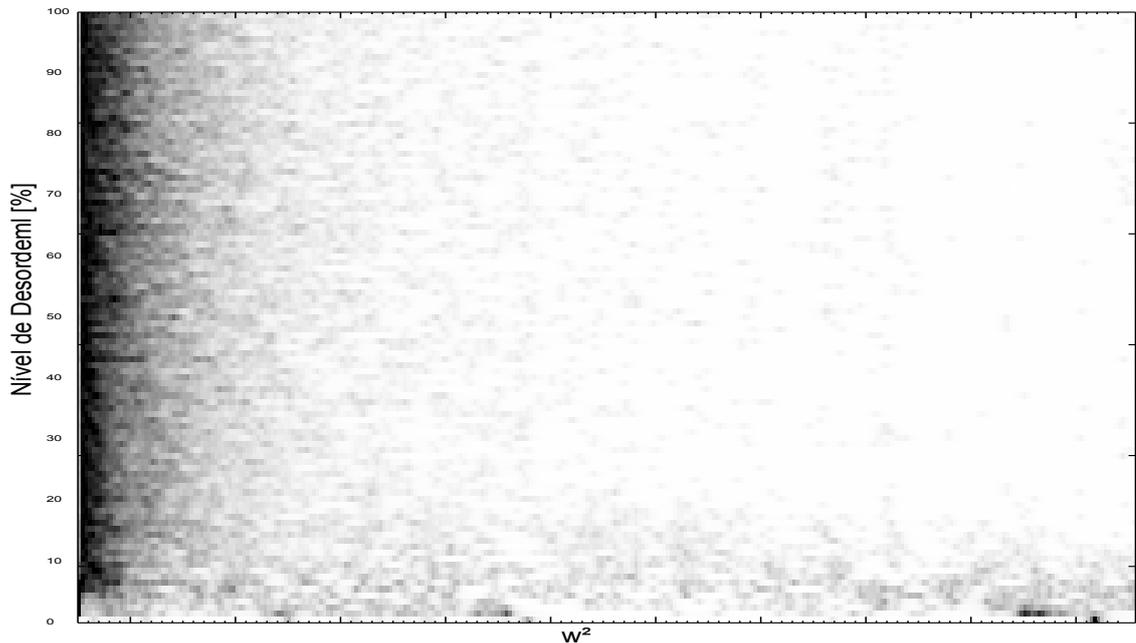


Figura 14: Mapa da densidade de estados média em função do nível de desordem.

Isto poderia indicar uma transição de uma densidade de estados fractal distribuída sobre todas as frequências para um regime de estados caracterizados por fônons. A dimensão de correlação, ν , pode fornecer subsídios para explicar esta transição. A curva da dimensão de correlação como uma função do nível de desordem é mostrada na figura 15.

Para pequenos níveis de desordem a dimensão de correlação aproxima-se de valores próximos a unidade indicando a transição de uma geometria fractal para euclidiana. Com o aumento no nível de desordem, o sistema progressivamente reduz a sua dimensão de correlação até entrar em um regime de dimensão fractal estatística próximo do nível de desordem 20%.

Isto significa que há a formação de fônons devido a quebra do caráter fractal da densidade de estados na ausência de

desordem. A variação na dimensão de correlação com a desordem torna explícita a dependência das propriedades vibracionais da rede e a natureza dos autoestados com o nível de desordem.

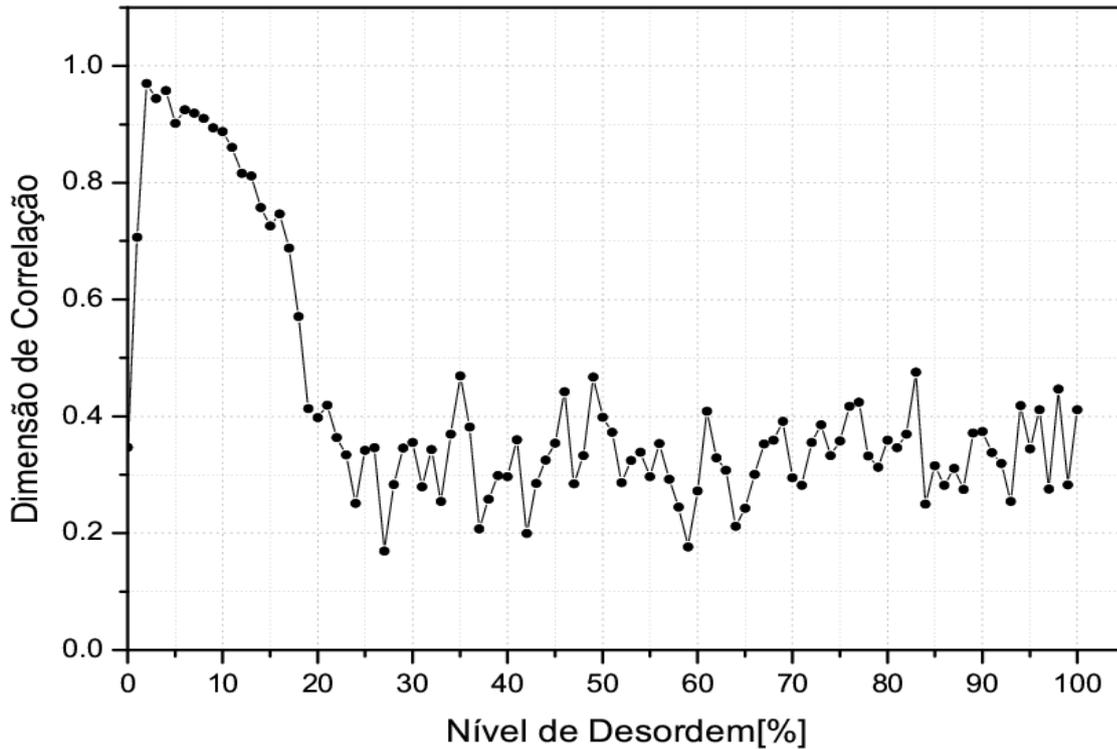


Figura 15: Dimensão de correlação da densidade de estados média em função do nível de desordem.

A relação existente entre a transmissão de fônons e o nível de desordem é explorada utilizando a função de correlação de pares para calcular o tamanho médio dos clusters. Um mapa da transmissão de fônons em função da desordem também é utilizado. Existe uma relação entre o tamanho médio dos clusters e a função de transmissão.

A figura 16 mostra a variação no tamanho médio do cluster com relação a 0% de desordem. O tamanho médio do cluster aumenta rapidamente para pequenos níveis de desordem.

Isto pode indicar que embora desordem tenha sido inserida no sistema, pode haver um melhor acoplamento entre pontos no fractal a medida que estados fractônicos são quebrados e clusters de percolação são formados. Este resultado é um tanto diferente daquele que a localização de Anderson prediz para redes regulares.

A medida que o sistema entra em um regime de dimensão fractal estatística próximo ao nível de desordem 20%, o tamanho do cluster retorna ao seu tamanho original. Para os níveis de desordem posteriores, o mesmo é gradualmente reduzido, embora apresente oscilações, implicando em um aumento progressivo na localização dos estados. Nesta situação, localização de Anderson aparenta ser mais adequada.

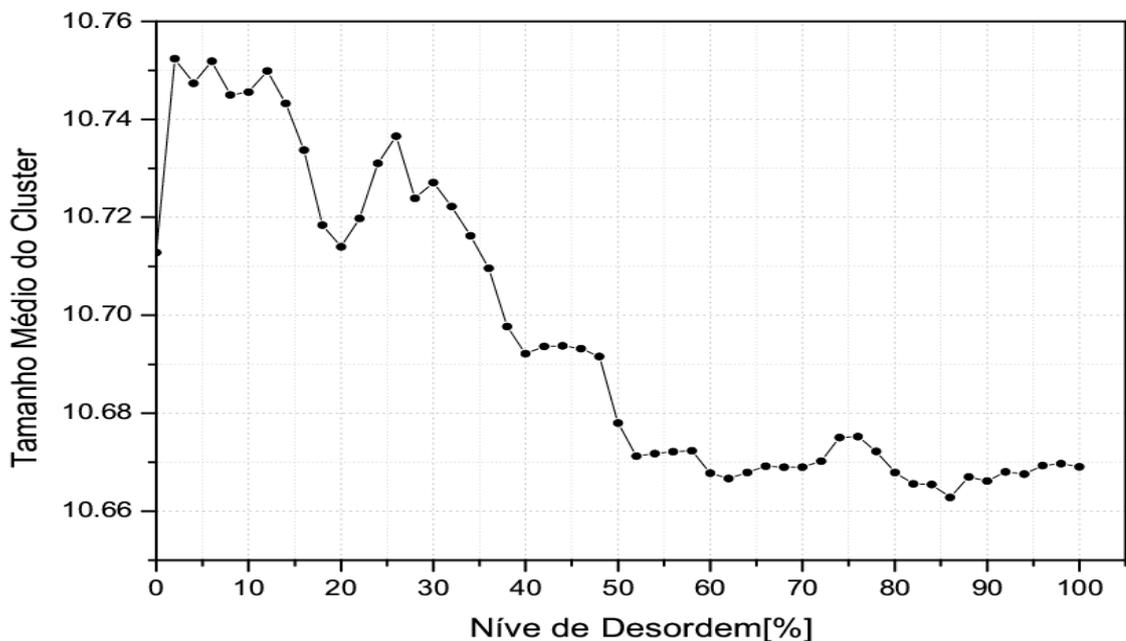


Figura 16: Tamanho médio do cluster em função do nível de desordem.

Este comportamento é investigado na figura 17 onde um mapa da função de transmissão de fônons média é produzido

para diferentes níveis de desordem. Novamente, existe um comportamento distinto para níveis de desordem inferiores a 20%. Neste intervalo de desordem a transmissão estende-se por um amplo intervalo do espectro de frequências enquanto que para níveis de desordem mais altos, aparenta estar mais concentrada na região de baixas frequências do espectro.



Figura 17: Mapa da transmissão média em função do nível de desordem.

Interessantemente, há a formação de uma banda de transmissão próxima ao nível de desordem 20%. Para investigar a formação desta banda, a dimensão de correlação das curvas de transmissão é calculada e mostrada na figura 18. Para pequenos níveis de desordem a dimensão de correlação aumenta implicando em uma transmissão aparentemente proveniente de geometrias euclidianas. Próximo ao nível de desordem 5% observa-se uma queda na dimensão de correlação exatamente como ocorre na dimensão de correlação da densi-

dade de estados total, figura 15, embora mais evidente.

Após o sistema entrar em um regime de dimensão fractal estatística no nível de desordem próximo a 20%, a dimensão de correlação é consideravelmente reduzida. No entanto, há um pico significativo entre os níveis de desordem 20% e 30% proveniente de um aumento no tamanho médio do cluster. Como o acoplamento é aumentado, isto sugere a formação de uma banda de fônons estendidos, como mostrado na figura 17.

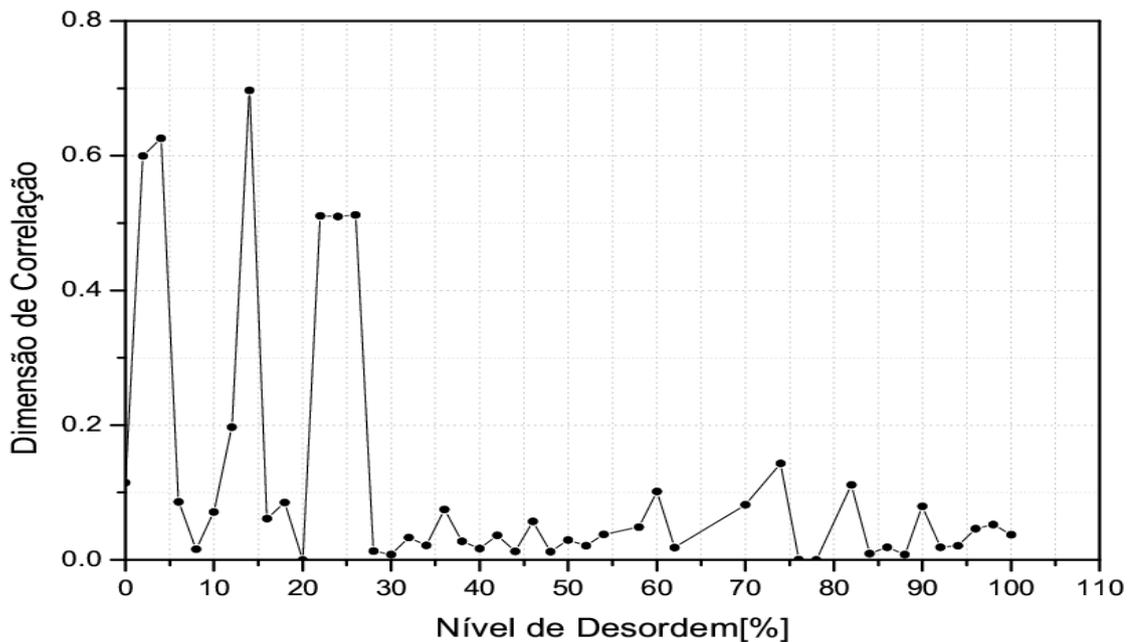


Figura 18: Dimensão de correlação da transmissão média em função do nível de desordem.

No entanto, este comportamento é rapidamente quebrado à medida que o nível de desordem aumenta e o tamanho médio do cluster diminui fazendo com que o sistema seja direcionado para um regime de localização. Neste ponto, uma estimativa da condutância térmica é obtida utilizando a soma das funções de transmissão nos níveis de desordem associados. A figura 19 mostra a curva da soma da transmissão.

Existe uma correlação entre as figuras 18 e 19 que indica a existência de um nível de desordem crítico no qual a soma da transmissão, e por consequência a condutância térmica, aumenta. Isto implica que pequenos níveis de desordem poderiam retirar o sistema de um comportamento de estados fractônicos para estados fonônicos espacialmente estendidos, que aumenta a soma da transmissão devido a um melhor acoplamento de diferentes pontos do fractal. Níveis de desordem mais altos potencialmente forçam o sistema a um regime de localização como predito no modelo de Anderson e reduzem a soma da transmissão.

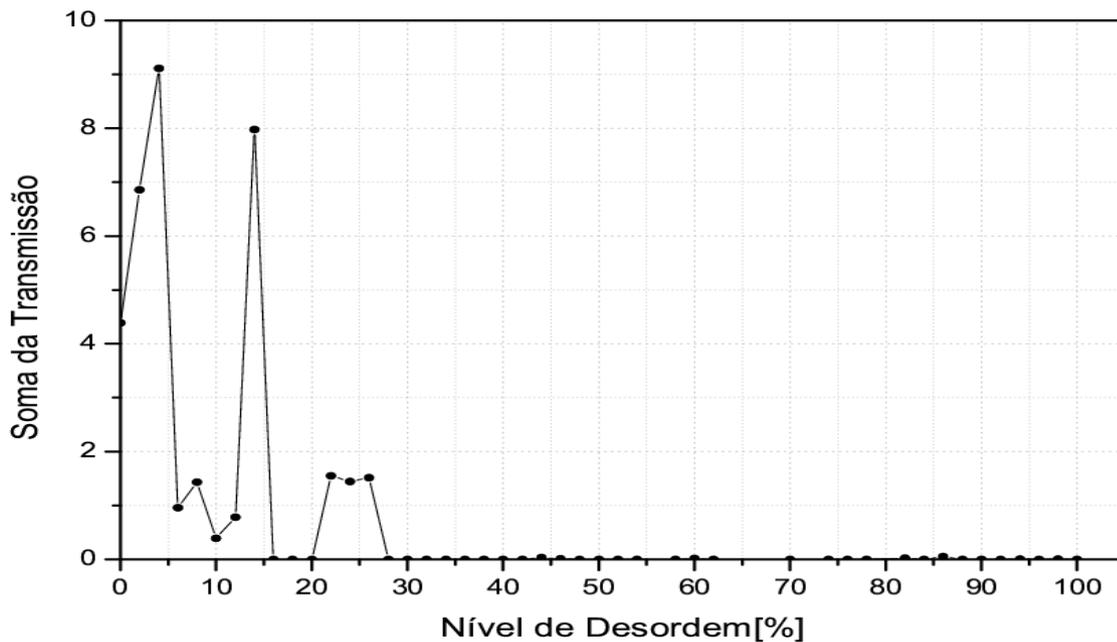


Figura 19: Soma da transmissão média em função do nível de desordem.

O fractal de Sierpinski apresenta o comportamento mais interessante no sentido que as curvas associadas aos fractais *Fern* e *Tree* são mais comportadas. Portanto, os resultados são brevemente descritos abaixo enquanto que os respectivos

gráficos encontram-se nos apêndices.

4.2 Barnsley Fern e Self-Contacting Tree

A discussão destes dois fractais é semelhante aquela desenvolvida para a rede de Sierpinski. O comprimento de correlação de desordem ξ para os fractais Barnsley Fern e Self-contacting Tree são 35.52 e 12.12, respectivamente. Comparando estes comprimentos de correlação com o ξ associado ao fractal de Sierpinski, 2.83, é possível argumentar que os fractais de Fern e Tree são mais insensíveis a desordem que o fractal de Sierpinski.

Portanto, níveis maiores de desordem são necessários para quebrar a formação de estruturas fractônicas nestes dois fractais. Isto dificulta a visualização de uma transição clara entre autoestados fractônicos para fonônicos embora ela possivelmente aconteça, conforme ilustram os resultados apresentados nos apêndices.

Em ambos os fractais se observa uma transição de uma densidade de estados, tipicamente fractal, que se estende por todo o intervalo de frequências do espectro para uma densidade de estados situados na região de frequências mais baixas. A quebra do regime fractônico gera fônons que podem estar localizados ou estendidos.

Além disso, observa-se que a curva de dimensão de correlação da densidade de estados, assim como no fractal de Sierpinski, apresenta um comportamento bem definido em níveis de desordem próximos a 20%, onde a dimensão de correlação chega a valores próximos de 1, indicando uma possível perda da natureza fractal do conjunto de dados.

O mapa de transmissão para estes dois fractais sugere a formação de uma banda de fônons estendidos que não apresenta uma correlação evidente com o tamanho médio dos clusters para a função de transmissão. No fractal de *Fern*, as regiões possíveis para a formação desta banda encontram-se próximas aos níveis de desordem 55% e 85%. Observando o gráfico da dimensão de correlação para a função de transmissão, observa-se dois picos proeminentes nestes pontos de desordem. Isto sustenta o argumento relacionado a formação de autoestados fonônicos estendidos.

Interessantemente, o comportamento da soma da transmissão, de forma análoga ao fractal de Sierpinski, possui flutuações. Isto indica que determinadas configurações de desordem favorecem a condutância térmica através da formação de clusters de percolação na região do dispositivo. No entanto, para outras configurações de desordem, o comportamento esperado pelo modelo de Anderson é obtido.

O mapa de transmissão do fractal *Tree* indica a formação de uma banda de fônons estendidos no nível de desordem de 60%. O gráfico da dimensão de correlação da transmissão apresenta um pico em torno do nível de desordem de 60% fundamentando também o argumento já descrito.

Porém, a soma da transmissão para este fractal apresenta oscilações muito pequenas, embora aumente para níveis de desordem entre 0% e 10% e em torno de 60%, 80% e 90%. Este fractal apresenta o comportamento mais compatível com o modelo de Anderson, onde a inserção de desordem tende a reduzir a condutância térmica. Os dois próximos capítulos apresentam os gráficos obtidos para estes dois fractais.

5 RESULTADOS PARA O BARSLEY FERN

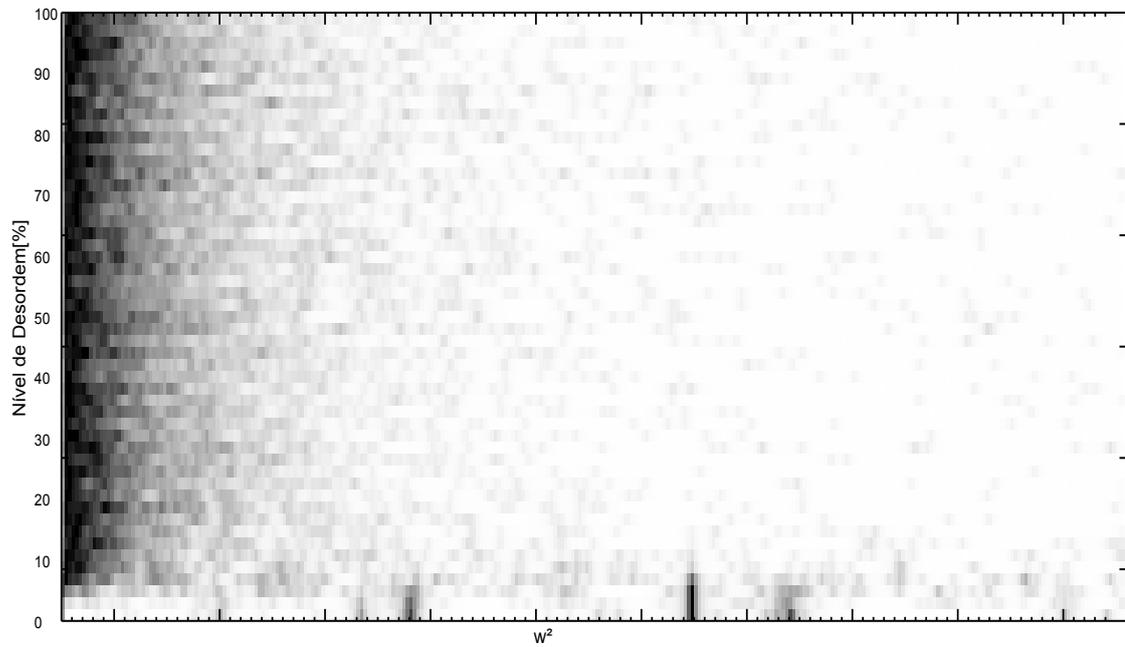


Figura 20: Mapa da densidade de estados média em função do nível de desordem.

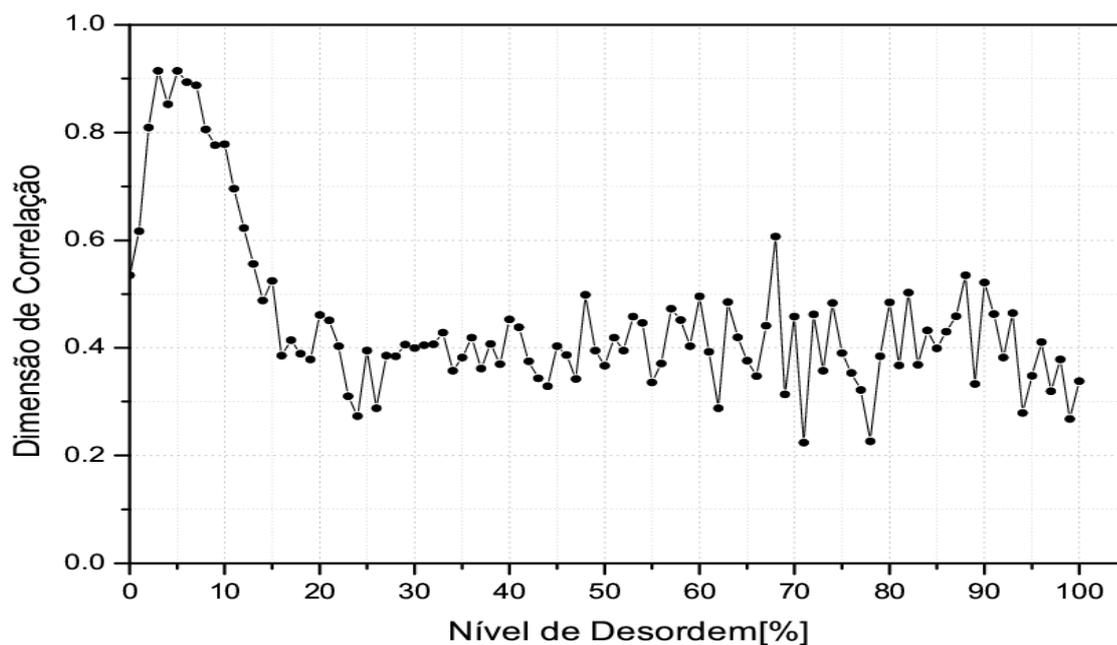


Figura 21: Dimensão de Correlação da densidade de estados média em função no nível de desordem.

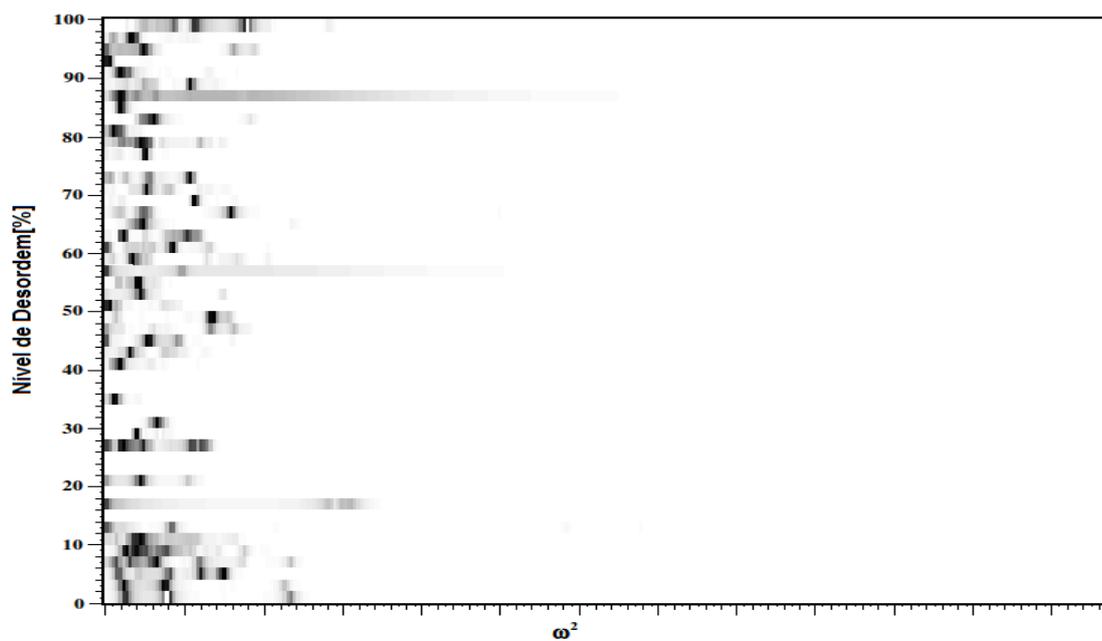


Figura 22: Mapa da transmissão média em função do nível de desordem.

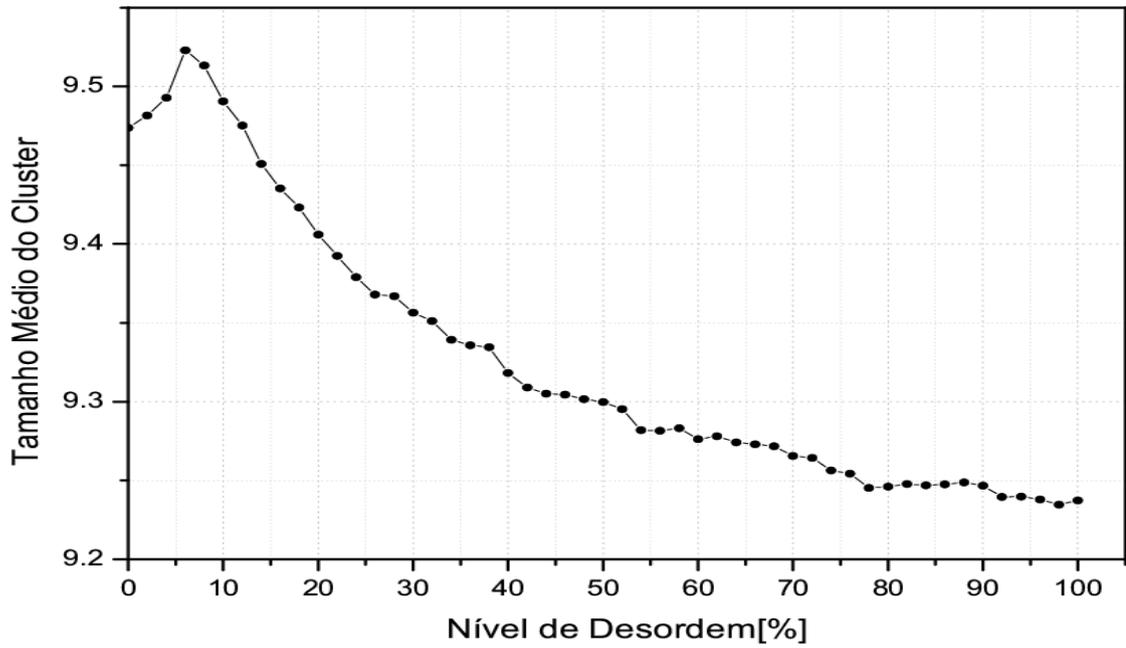


Figura 23: Tamanho médio do cluster em função no nível de desordem.

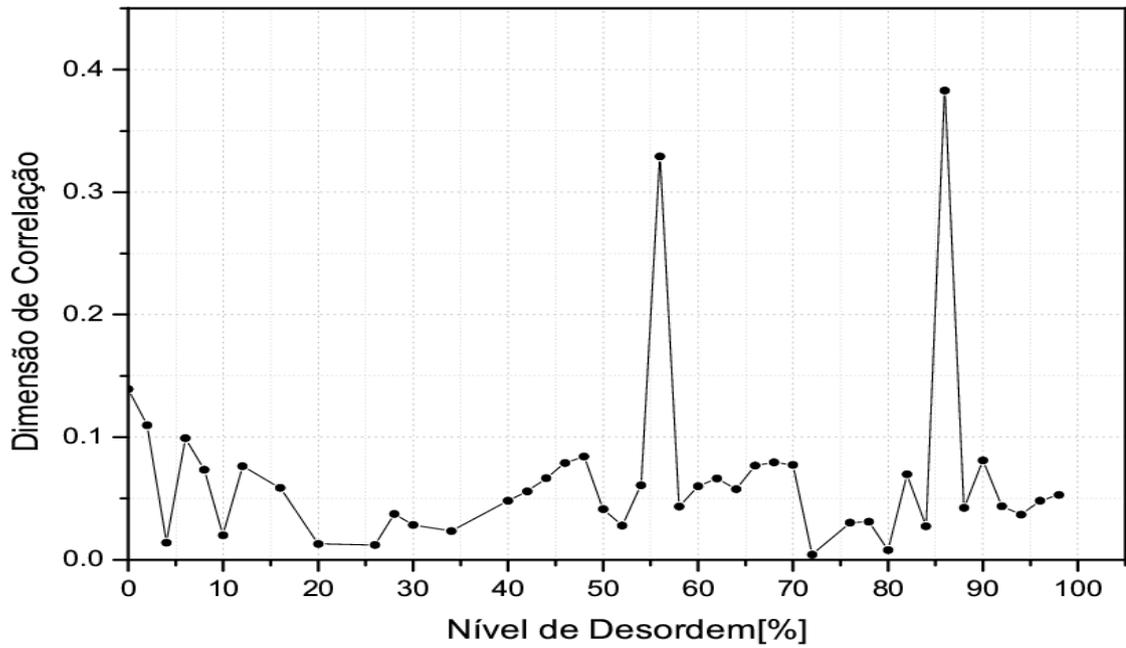


Figura 24: Dimensão de Correlação da transmissão média em função no nível de desordem.

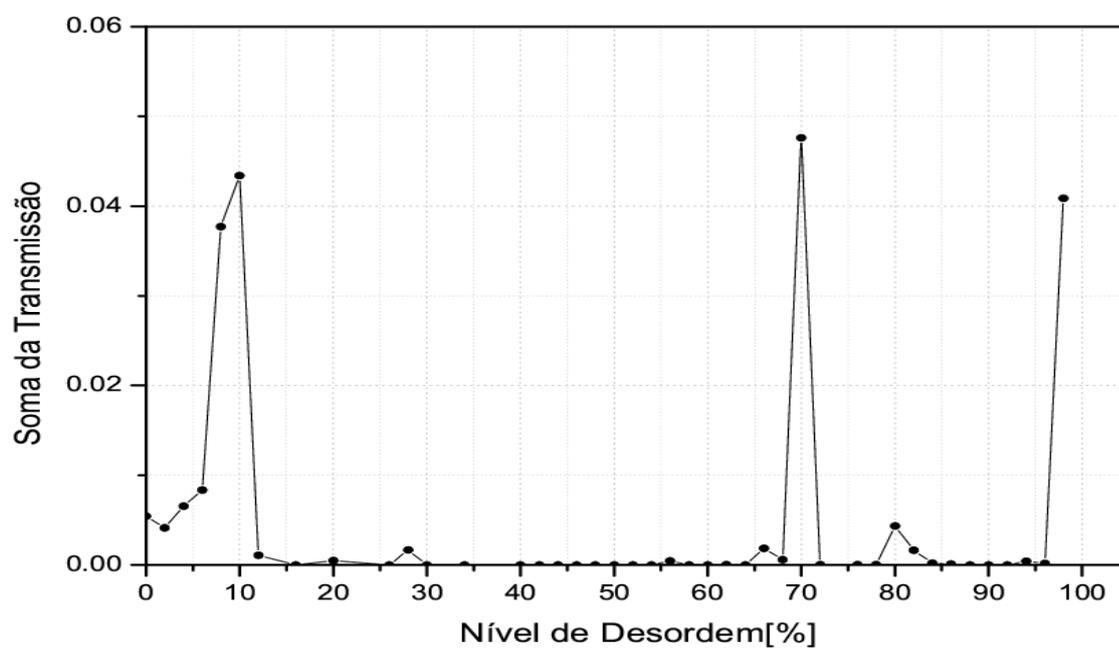


Figura 25: Soma da transmissão média em função no nível de desordem.

6 RESULTADOS PARA A SELF-CONTACTING TREE

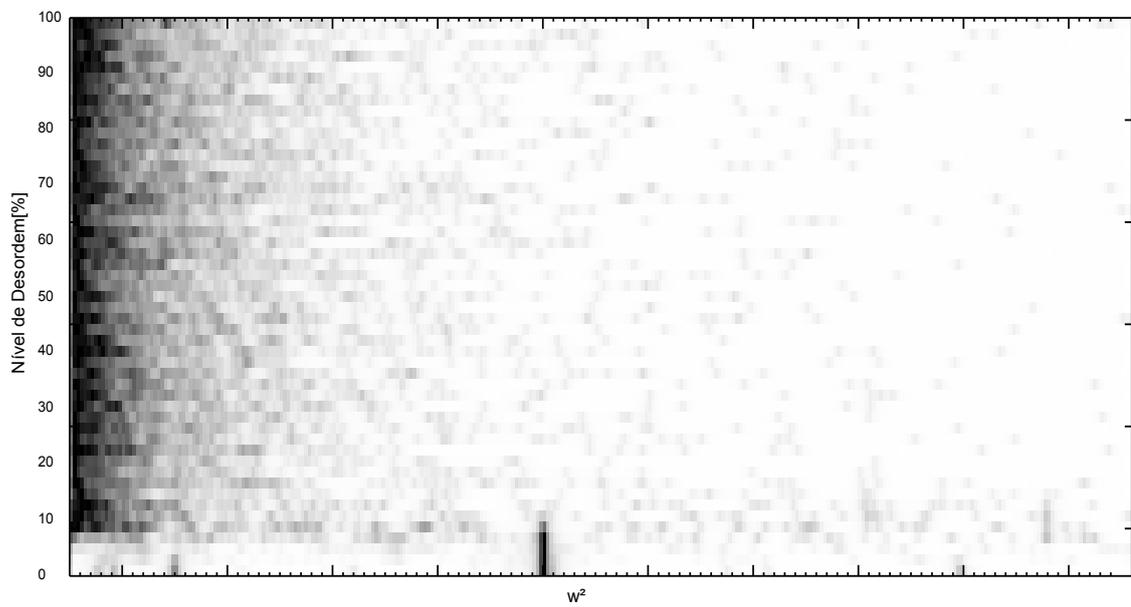


Figura 26: Mapa da densidade de estados média em função do nível de desordem.

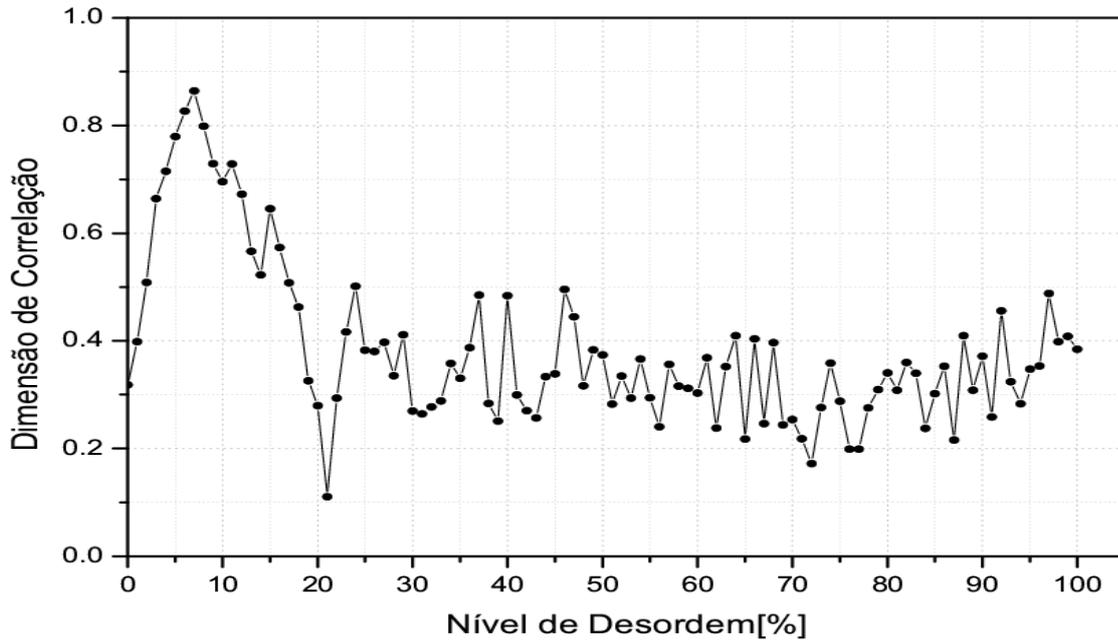


Figura 27: Dimensão de Correlação da densidade de estados média em função no nível de desordem.

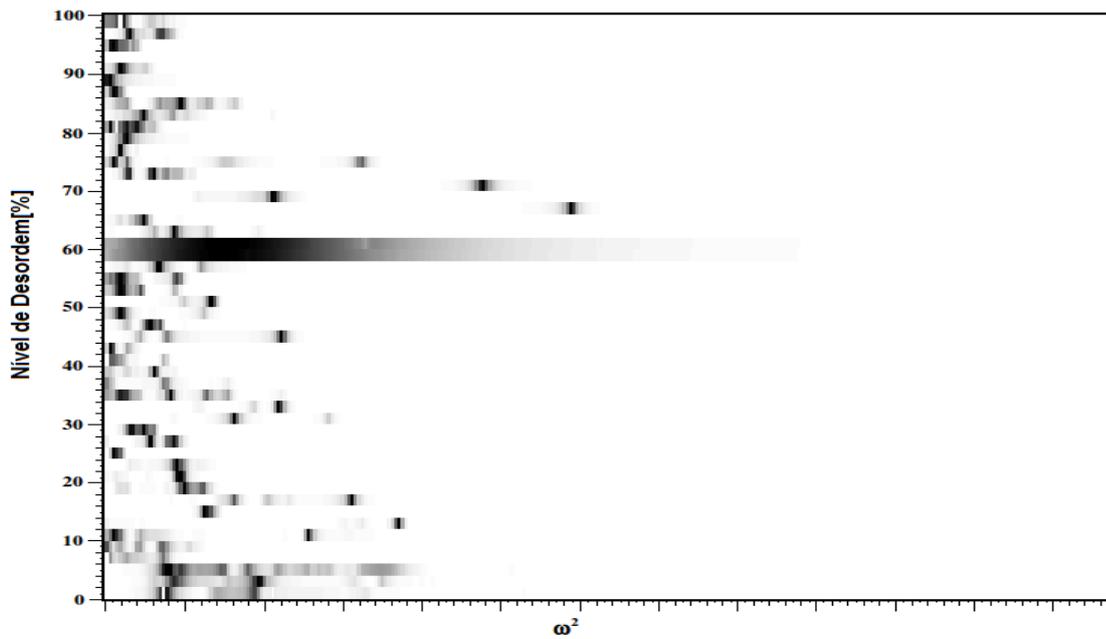


Figura 28: Mapa da transmissão média em função do nível de desordem.

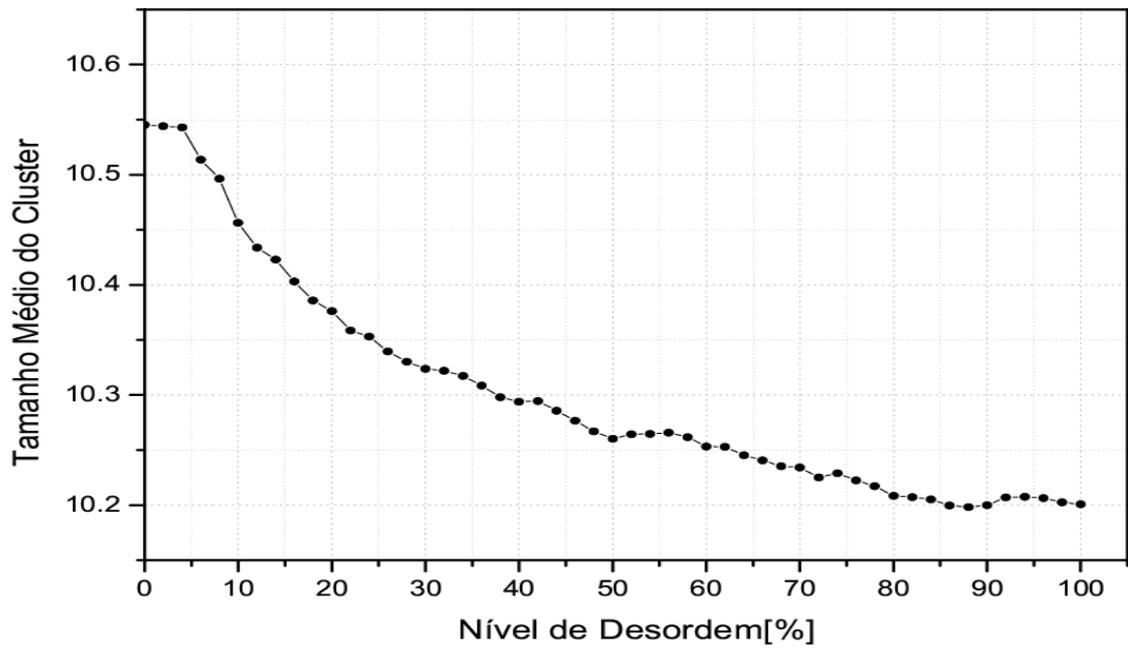


Figura 29: Tamanho médio do cluster em função no nível de desordem.

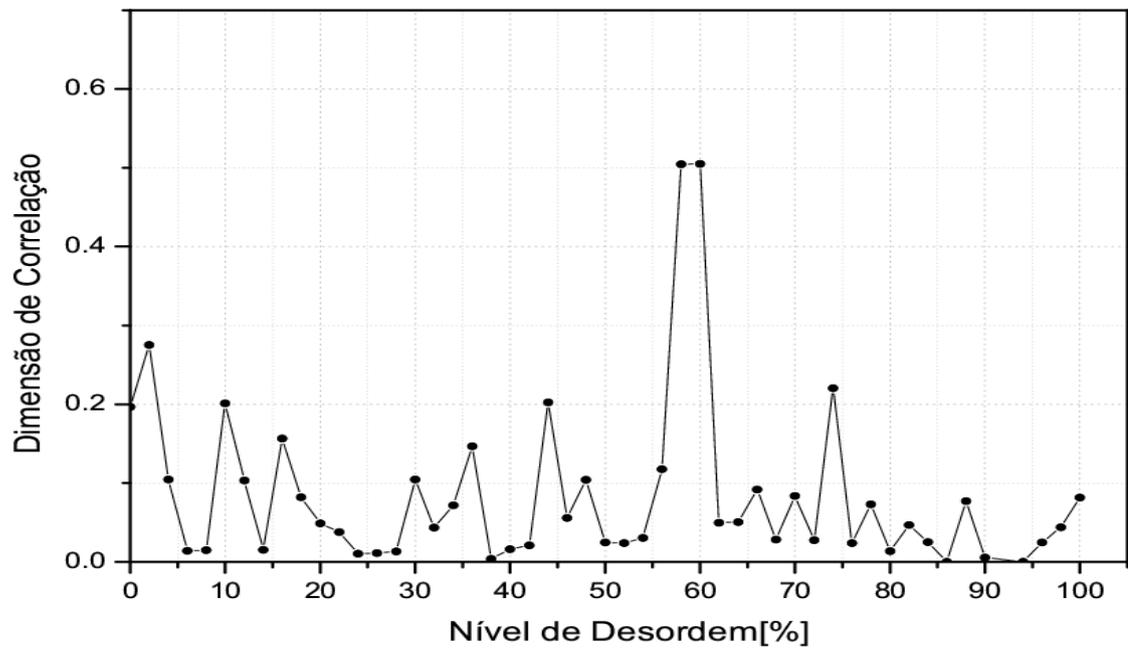


Figura 30: Dimensão de Correlação da transmissão média em função no nível de desordem.

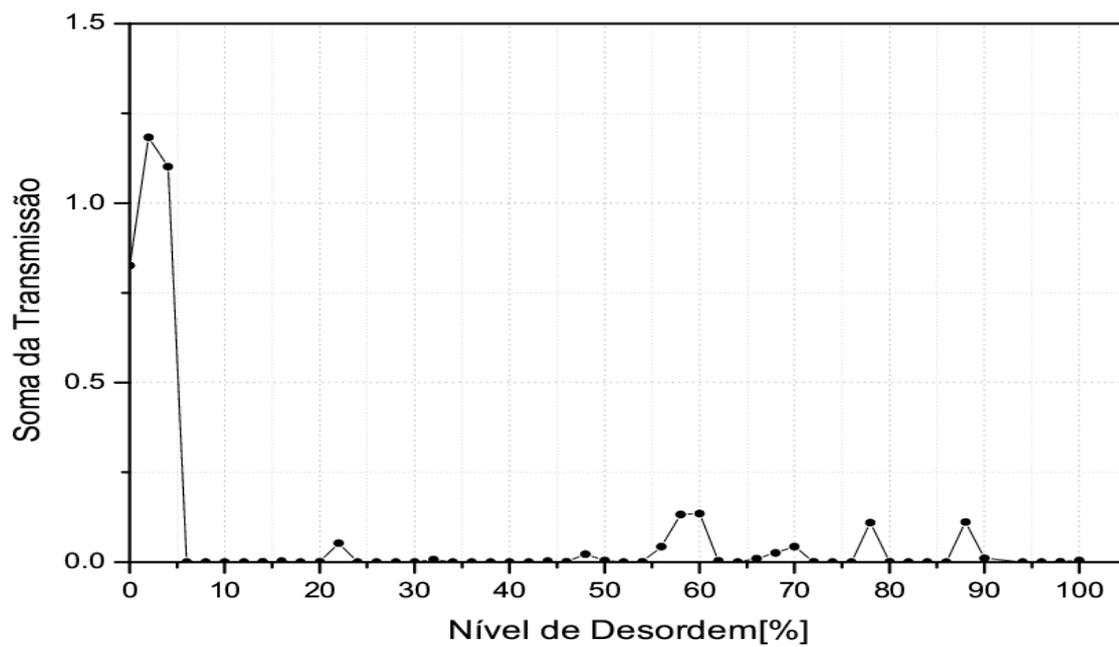


Figura 31: Soma da transmissão média em função no nível de desordem.

7 CONCLUSÃO E TRABALHOS FUTUROS

O transporte térmico, seja por intermédio de fractons ou fônons, é investigado em geometrias fractais na ausência e presença de desordem, respectivamente. Três tipos de fractais são analisados: o triângulo de *Sierpinski*, *Barnsley Fern* e a *Self-contacting Tree*.

A densidade de estados total e local, transmissão de fônons e estimativas da condutância térmica são calculadas para os três fractais e as implicações associadas a inserção de desordem nestas estruturas são analisadas. O triângulo de Sierpinski apresenta os resultados mais explícitos.

A densidade de estados neste fractal apresenta um espectro característico a partir do qual é possível verificar a existência de fractons nas propriedades vibracionais da rede associada. No entanto, quando desordem é inserida no sistema, este espectro é alterado, indicando a quebra do regime fractônico e estados fonônicos passam a integrar o transporte térmico. Da mesma forma, a densidade de estados local também fornece subsídios para avaliar a formação e quebra de estados fractons no sistema.

A dimensão de correlação da densidade de estados total é sensível ao nível de desordem e fornece uma forma de avaliar o caráter local das vibrações da rede. É conhecido que fractons possuem funções de onda localizadas devido a geometria fractal. A medida de dimensão poderia então ser utilizada para avaliar a formação de fônons no sistema uma vez que, uma dimensão de correlação 1 conferiria uma natureza euclidiana aos autoestados.

Isto ocorre para o intervalo de desordem de 0% a 20%, onde a dimensão de correlação da densidade de estados aproxima-se de 1. No entanto, para níveis de desordem maiores, a dimensão de correlação diminui, indicando aumento em localização dos autoestados, e entrando em um regime de dimensão fractal estatística.

No entanto, a formação de fônons devido a quebra de estruturas fractônicas pode fornecer um melhor acoplamento entre pontos no fractal, como indicado pelo tamanho médio dos clusters, e a transmissão de fônons no sistema aumenta. Este comportamento ocorre principalmente no intervalo de baixas frequências.

Conforme indica o mapa de transmissão de fônons, um comportamento distinto para baixas frequências do espectro também é observado. Para níveis de desordem mais altos, a transmissão encontra-se mais localizada no espectro de baixas frequências enquanto que para pequenos níveis, ela ocorre por um intervalo mais amplo do espectro.

A localização destes estados é observada na dimensão de correlação das curvas de transmissão, onde no intervalo de 20% a 30% de desordem, a dimensão de correlação aumenta, indicando uma possível extensão dos autoestados. Interessantemente, uma banda de transmissão neste mesmo intervalo de desordem é formada no mapa de transmissão, fundamentando os argumentos relacionados a localização dos autoestados.

Níveis de desordem mais altos apresentam uma dimensão de correlação menor sugerindo um aumento progressivo na localização dos autoestados resultando em menor probabilidade de transmissão entre pontos distintos. A soma da função

de transmissão fornece uma estimativa da condutância térmica através do sistema.

Para níveis de desordem inferiores a 30%, ela apresenta um comportamento distinto daquele frequentemente descrito na literatura e previsto pela localização de Anderson. Os resultados até então apresentados indicam uma redução da condutância térmica com o nível de desordem. Isto é esperado pelo modelo de Anderson. A inserção de desordem em uma geometria cristalina ou regular gera diversos mecanismos de espalhamento aleatórios que localizam as funções de onda, neste caso, dos fônons. Estes trabalhos não relatam oscilações na condutância térmica ou um aumento da mesma com o nível de desordem.

Trabalhos relacionados a termoeletricidade, por exemplo, têm maximizado ZT minimizando a condutância térmica pela inserção de desordem no sistema. Isto indica um comportamento singular das geometrias fractais investigadas, sendo o comportamento da condutância térmica dependente do nível de desordem inserido.

Em fractais, as propriedades vibracionais são localizadas. A inserção de desordem quebra o regime fractônico e gera fônons espacialmente estendidos resultando em um aumento da transmissão de fônons entre pontos distintos e por consequência, da condutância térmica. Níveis de desordem maiores, localizam estes autoestados, levando o sistema a um regime de dimensão fractal estatística reduzindo a condutância térmica.

Portanto, em geometrias fractais, especificamente nos fractais aqui considerados, existem determinados intervalos

de desordem nos quais o modelo de Anderson pode não ser aplicável. Estes intervalos podem ser dependentes do fractal. Por exemplo, o fractal de Sierpinski apresenta este comportamento para níveis de desordem inferiores a 30. Para níveis de desordem superiores, as previsões associadas ao modelo de Anderson são observadas.

Para o fractal de Fern, observa-se um comportamento bastante distinto, sendo que o intervalo de desordem singular encontra-se entre 30% e 60%. Neste fractal, mesmo níveis de desordem altos resultam em um aumento na condutância térmica. Já o fractal Tree, possui um comportamento semelhante ao Sierpinski.

Os resultados indicam um comportamento distinto do transporte térmico daquele frequentemente apresentado indicando que, possivelmente, o modelo de Anderson pode não descrever adequadamente os autoestados associados a fractais em determinados intervalos de desordem. Este trabalho pode ter implicações tecnológicas associadas ao desenvolvimento de pesquisas com termoeletricidade, condução térmica em frequências específicas e intervalos de desordem específicos, utilizando materiais com geometria fractal.

7.1 Trabalhos Futuros

Estudos relacionados ao transporte eletrônico em geometrias fractais são necessários para uma melhor compreensão das aplicações potenciais de materiais com esta característica em termoeletricidade. Questões pertinentes envolveriam o comportamento associado ao transporte eletrônico e fonônico nestas geometrias. Com isso, seria possível calcular a figura

de mérito ZT e como esta quantidade é influenciada pela introdução de desordem no sistema.

Um trabalho experimental considerando a síntese destas geometrias, como já foi feito com o hexágono de Sierpinski, também seria interessante. A inserção de desordem através da dopagem do material ou a observação de como a dopagem influencia as características elétricas e térmicas seria interessante. A possibilidade de utilização de aerogéis como material no qual estas investigações seriam feitas é bastante promissora.

Um estudo que poderia ter aplicações em nanomedicina seria o desenvolvimento de nanomateriais que respondam termicamente a frequências específicas. Isto poderia ser utilizado em terapias onde somente determinadas regiões são aquecidas induzindo morte celular para tratar doenças como câncer, por exemplo.

REFERÊNCIAS

- [1] HYPERREF. Disponível em: <http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Sierpinski_pyramid.jpg>.
- [2] Disponível em: <<http://underdown.wordpress.com/2007/10/15/iterated-function-systems-and-fractals/>>.
- [3] Disponível em: <<http://www.enchgallery.com/fractals/fractalpages/orange%20tree.htm>>.
- [4] Disponível em: <[http://es.wikipedia.org/wiki/Archivo:Brillouin_Zone_\(1st,_FCC\).svg](http://es.wikipedia.org/wiki/Archivo:Brillouin_Zone_(1st,_FCC).svg)>.
- [5] DATTA, S. *Quantum Transport: Atom to Transistor*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2005.
- [6] MANDELBROT, B. B. *The fractal geometry of nature*. [S.l.]: New York: W. H. Freeman, 1983.
- [7] ORBACH, R. Dynamics of fractal networks. *Science*, v. 231, p. 814–819, 1986.
- [8] MA, D.; STOICA, A. D.; WANG, X.-L. Power-law scaling and fractal nature of medium-range order in metallic glasses. *Nature Materials*, v. 8, p. 1629–1634, 2009.
- [9] RICHARDELLA, A. et al. Visualizing critical correlations near the metal-insulator transition in gal-xmnxas. *Science*, v. 327, p. 665–669, 2010.
- [10] FIETE, G. A.; LOZANNE, A. de. Seeing quantum fractals. *Science*, v. 327, p. 652–653, 2010.
- [11] CROY, A.; RÖMER, R.; SCHREIBER, M. Localization of electronic states in amorphous materials: Recursive green's function method and the metal-insulator transition at $e = 0$. *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, v. 52, p. 203–226, 2006.
- [12] ANDERSON, P. W. Absence of diffusion in certain random lattices. *Physical Review Online Archive*, v. 109, p. 1492–1505, 1958.

-
- [13] HOPKINS, P. E.; SERRANO, J. R. Phonon localization and thermal rectification in asymmetric harmonic chains using nonequilibrium green's function formalism. *Physical Review B*, v. 80, p. 201408, 2009.
- [14] YAMAMOTO, T.; WATANABE, K. Nonequilibrium green's function approach to phonon transport in defective carbon nanotubes. *Physical Review Letters*, v. 96, p. 255503, 2006.
- [15] ALEXANDER, S.; ORBACH, R. Density of states on fractals: Fractons. *Le Journal de Physique-Lettres*, v. 43, p. 625–631, 1982.
- [16] VLAHOS, L. et al. Normal and anomalous diffusion: A tutorial. *Order and Chaos*, arXiv:0805.0419v1, p. arXiv:0805.0419v1, 2008.
- [17] MINGO, N.; YANG, L. Phonon transport in nanowires coated with an amorphous material: An atomistic green's function approach. *Physical Review B*, v. 68, p. 245406, 2003.
- [18] STOLTZ, G.; LAZZERI, M.; MAURI, F. Thermal transport in isotopically disordered carbon nanotubes: a comparison between green's functions and boltzmann approaches. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 21, p. 245302, 2009.
- [19] ZHANG, W.; MINGO, N.; FISHER, T. S. Simulation of phonon transport across a non-polar nanowire junction using an atomistic green's function method. *Physical Review B*, v. 76, p. 195429, 2007.
- [20] ZHANG, W.; FISHER, T.; MINGO, N. The atomistic green's function method: An efficient simulation approach for nanoscale phonon transport. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, v. 48, p. 333–349, 2007.
- [21] DATTA, S. Nanoscale device modeling: the green's function method. *Superlattices and Microstructures*, v. 28, p. 26, 2000.

- [22] DATTA, S. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1995.
- [23] SEVINÇLI, H.; CUNIBERTI, G. Heat conduction in disordered semiconductor carbon nanotubes. *arxiv*, p. 3, 2009.
- [24] BULUSU, A. *COUPLED QUANTUM – SCATTERING MODELING OF THERMOELECTRIC PERFORMANCE OF NANOSTRUCTURED MATERIALS USING THE NON-EQUILIBRIUM GREEN'S FUNCTION METHOD*. Tese (Doutorado) — Vanderbilt University, 2007.
- [25] MAJUMBAR, A. Thermoelectricity in semiconductor nanostructures. *Science*, v. 6, p. 777–778, 2004.
- [26] BULUSU, A.; WALKER, D. G. Quantum modeling of thermoelectric performance of strained si/ge/si superlattices using nonequilibrium green's function method. *Journal of Applied Physics*, v. 102, p. 073713, 2007.
- [27] OHTA, H. et al. Giant thermoelectric seebeck coefficient of a two-dimensional electron gas in sr₂io₃. *Nature Materials*, v. 6, p. 129–134, 2007.
- [28] CAO, Y. Q.; ZHU, T. J.; ZHAO, X. B. Low thermal conductivity and improved figure of merit in fine-grained binary pbte thermoelectric alloys. *Journal of Physics D: Applied Physics*, v. 42, p. 015406–015411, 2009.
- [29] NI, X. et al. Disorder enhances thermoelectric figure of merit in armchair graphane nanoribbons. *Applied Physics Letters*, v. 95, p. 192114, 2009.
- [30] ZHANG, N. X. M. *Nanomedicine: A systems engineering approach*. [S.l.]: Pan Stanford, 2009.
- [31] MOHANAN, J. L.; ARACHCHIGE, I. U.; BROCK, S. L. Porous semiconductor chalcogenide aerogels. *Science*, v. 307, p. 397–400, 2005.
- [32] CASAS, L. et al. Silica aerogel-iron oxide nanocomposites: structural and magnetic properties. *Journal of Non-Crystalline Solids*, v. 285, p. 37–43, 2001.

- [33] ANDREWS, D. L. et al. Dendrimer light-harvesting: intramolecular electrostatics and mechanisms. *Dalton Transactions*, v. 45, p. 10006–10014, 2009.
- [34] NEWKOME, G. R. et al. Nanoassembly of a fractal polymer: A molecular sierpinski "hexagonal gasket". *Science*, v. 312, p. 1782–1785, 2006.
- [35] KITTEL, C. *Introduction to solid state physics*. [S.l.: s.n.], 1995.
- [36] LEITE, R. C. de C.; CASTRO, A. R. B. de. *Física do Estado Sólido*. [S.l.]: São Paulo: Edgard Blucher, 1978.
- [37] HOOK, J. R.; HALL, H. *Solid State Physics*. [S.l.]: John Wiley and Sons, 1991.
- [38] ECONOMOU, E. *Green functions in quantum physics*. [S.l.]: Springer, 2006.
- [39] CHRISTENSEN, K.; MOLONEY, N. R. *Complexity and Criticality*. [S.l.]: Imperial College Press, 2005.
- [40] FALCONER, K. *Fractal Geometry: Mathematical Foundations and Applications*. [S.l.]: Wiley, 2006.
- [41] HARRISON, W. A. *Electronic Structure and Properties of Solids: The Physics of the Chemical Bond*. [S.l.]: Dover Publications, 1989.
- [42] STILLINGER, F. H.; WEBER, T. A. Computer simulation of local order in condensed phases of silicon. *Physical Review B*, v. 31, p. 5262–5271, 1985.