

ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL

FACULTAD DE CIENCIAS

ESTUDIO DE LA FORMACIÓN DE CICATRICES CUÁNTICAS EN BILLARES CAÓTICOS CON REDES CRISTALINAS CUADRADA Y HEXAGONAL UTILIZANDO KWANT

TRABAJO DE TITULACIÓN PREVIO A LA OBTENCIÓN DEL TÍTULO DE FÍSICO
PROYECTO DE INVESTIGACIÓN

DANIEL SANTIAGO TORRES PAZMIÑO
daniel.torres@epn.edu.ec

Director: DR. LEONARDO ALBERTO BASILE
CARRASCO leonardo.basile@epn.edu.ec

QUITO, JULIO 2019

DECLARACIÓN

Yo, DANIEL SANTIAGO TORRES PAZMIÑO, declaro bajo juramento que el trabajo aquí descrito es de mi autoría; que no ha sido previamente presentado para ningún grado o calificación profesional; y que he consultado las referencias bibliográficas que se incluyen en este documento.

A través de la presente declaración cedo mis derechos de propiedad intelectual, correspondientes a este trabajo, a la Escuela Politécnica Nacional, según lo establecido por la Ley de Propiedad Intelectual, por su Reglamento y por la normativa institucional vigente.

Daniel Santiago Torres Pazmiño

CERTIFICACIÓN

Certifico que el presente trabajo fue desarrollado por DANIEL SANTIAGO TORRES PAZMIÑO, bajo mi supervisión.

Dr. Leonardo Alberto Basile Carrasco
Director del Proyecto

AGRADECIMIENTOS

Principalmente quisiera mostrar mi gratitud hacia mi director de tesis y profesor, el Dr. Leonardo Basile, su conocimiento y consejos me han ayudado a ser mejor físico y persona. Sin su ayuda el desarrollo y redacción de este proyecto de titulación habría sido complejo; los extensos debates sobre los resultados y la redacción me han ayudado a mejorar profesionalmente.

Quisiera agradecer a aquellos que en el camino se han ido, a mi abuelito Guillermo, quien ha sido mi inspiración de vida, mi guía académico, mi fuente de sabiduría y quien me cuidó en mi infancia, le estoy eternamente agradecido. Así también, a mi abuelita Inés, de quien aprendí mucho durante mi etapa universitaria, quien me dio mucho apoyo y conocimiento.

Agradezco mucho a Richard y Sofía, mis padres, que han estado luchando hombro a hombro conmigo en estos meses que tomó el desarrollo de este trabajo. A mis abuelitos que sí están, Fausto y Carmela quienes me han dado mucha tranquilidad, sabiduría y paz en estos años de formación. A José, mi hermano, quién me ha dado consejos para mejorar la redacción. En general, a los familiares que han estado a mi lado en todo este proceso.

A Marlli, mi gran apoyo, que ha estado a mi lado tardes y noches, ayudándome con su conocimiento, paciencia, cariño y amor. A mis amigos Melissa, Dario y Jefferson, cuyos consejos han sido cruciales en el desarrollo de este proyecto y su apoyo durante toda la carrera han sido uno de los motivos que me han mantenido firme en esta. A Anahí Cevallos, alumna y amiga que me ha ayudado especialmente en el proceso de redacción de este proyecto.

Quisiera de igual manera agradecer a todos aquellos profesores que han sido una inspiración en mis metas académicas. Particularmente quiero agradecer al Dr. Álvaro Dueñas, al Dr. Ramón Xulvi y al Dr. Luis Lascano, quienes han sido mis guías en los últimos años de mi formación. Igualmente a aquellos que han expandido mi mundo académico, aquellos profesores que me han permitido estar en sus clases a pesar de no estar matriculado, David Pazmiño y Juan Carlos Trujillo, quienes han sido mi inspiración dentro del mundo matemático y me han ayudado mucho en mi desarrollo en esta área.

DEDICATORIA

*A mis abuelos que no están Guillermo e Inés,
A mis abuelos que aún están Fausto y Carmela,
A mis padres Richard y Sofía,
a mi hermano José.*

Índice general

1. Introducción	1
2. Marco teórico	8
2.1. Sistemas dinámicos	8
2.1.1. Órbitas periódicas	9
2.2. Caos clásico	10
2.2.1. Exponentes de Lyapunov	12
2.3. Billares clásicos caóticos	13
2.4. Caos cuántico	17
2.4.1. Billares cuánticos	18
2.4.2. Cicatrices cuánticas	20
2.4.3. Estructuras cristalinas	21
2.5. Modelo del enlace fuerte	23
2.6. Densidad local de estados	24
3. Metodología	25
3.1. Modelo clásico	25
3.1.1. Órbitas periódicas	27
3.1.2. Exponentes de Lyapunov	30
3.2. Modelo cuántico	31
3.2.1. Implementación del modelo	32
3.2.2. Cálculo de la densidad de estados locales y comparación entre las dos redes	33

4. Resultados obtenidos	34
4.1. Exponentes de Lyapunov en billares	34
4.2. Orbitas periódicas inestables	36
4.3. Cicatrices cuánticas	38
5. Conclusiones	43
A. Código	46
A.1. Coeficientes de Lyapunov	46
A.1.1. Estadio	46
A.1.2. Anillo circular	49
A.1.3. Regresión lineal	53
A.2. Orbitas periódicas	55
A.2.1. Estadio	55
A.2.2. Anillo circular	60
A.3. Cicatrices cuánticas	63
A.3.1. Estadio	63
A.3.2. Anillo circular	67
B. Imágenes	72
B.1. Orbitas	72
B.1.1. Anillo	72
B.1.1.1. Orbitas no periódicas:	72
B.1.1.2. Orbitas tipo: Rebote con el anillo interior	73
B.1.1.3. Orbitas periódicas inestables: figuras geométricas que no se intersecan	74
B.1.1.4. Orbitas tipo: Orbitas que se intersecan	75
B.1.2. Estadio	76
B.1.2.1. Orbitas que no se intersecan	76
B.1.2.2. Orbitas que se intersecan	77
B.2. Densidad local de estados	78

B.2.1. Cicatrices cuánticas y estados no cicatrizados	78
B.2.2. Anillo circular: Radiales	79
B.2.3. Anillo circular: No radiales	81
B.2.4. Estadio: Barras paralelas al eje y	83
B.2.5. Estadio: Lineas consecutivas	85

Bibliografía	87
---------------------	-----------

Índice de figuras

1.1. En el panel izquierdo se observa la densidad de probabilidad de una función de onda cicatrizada del estadio de Bunimovich. En el panel derecho se muestra la la trayectoria periódica inestable, graficada con línea continua, sobre dicha órbita periódica [8].	2
1.2. En el panel izquierdo se muestra la variación de la conductancia ΔG sobre el anillo resaltado con líneas blancas, aquí se presentan cicatrices cuánticas señaladas con flechas rosadas. El panel derecho muestra la densidad de estados locales obtenida en simulaciones, igualmente se presentan cicatrices cuánticas en color blanco. La barra de color para el panel derecho muestra el aumento de la intensidad desde lo más oscuro a lo más claro[5].	3
1.3. Densidad de probabilidad experimental y teórica de un sistema en el que se han inducido ondas electromagnéticas. La cavidad consiste de un rectángulo de 21,8 cm x 44 cm x 6mm, con un disco circular de 10 cm de diámetro y 6mm de altura en su centro [16].	4
1.4. Esquema de los billares abiertos estudiados: a) Estadio de Bunimovich, b) Anillo circular.	5
2.1. Órbitas periódicas del sistema de Lorenz en el plano xz el panel izquierdo muestra una órbita tipo AB y en el derecho tipo AAB (2.4)[27].	9
2.2. Solución numérica al sistema de Lorenz con parámetros $\beta = 8/3$, $\rho = 28$, $\sigma = 10$	10
2.3. El panel a) muestra la separación de las trayectorias de una de las soluciones del sistema de Lorentz con parámetros $\beta = 8/3$, $\rho = 28$, $\sigma = 10$. En el panel b) observamos el logaritmo de la diferencia de las trayectorias del panel a).	11

2.4. Comportamiento de la diferencia de trayectorias en el mapa logístico para $a = 3,8$ y $x_0 = 0,3$	11
2.5. Reflexión de una partícula con cantidad de movimiento inicial \vec{p} y final \vec{p}' en el borde del billar.	13
2.6. Grafica de un billar circular con coordenadas generalizadas ψ y θ . . .	14
2.7. El panel a) muestra un ejemplo de orbita periódica donde la razón Ψ/π es racional. En el panel b) se observa una orbita no periódica para un valor de Ψ/π irracional.	15
2.8. Comportamiento de un haz de partículas rebotando en un borde convergente Γ_f (izquierda) y borde divergente Γ_d (derecha) [13].	16
2.9. Mecanismo de desenfoque: Comportamiento de un haz de partículas después de colisionar en el borde derecho y converger a su foco F , las trayectorias se separan hasta su siguiente colisión en el borde izquierdo y no vuelven a converger en el mismo foco[13].	16
2.10. Tipos de billares que se estudiarán en este proyecto.	17
2.11. En el panel a) se muestra la forma que toman las cicatrices cuánticas en el estadio de Bunimovich. El panel b) muestra las órbitas periódicas asociadas a las cicatrices cuánticas del panel a) [8].	19
2.12. El panel a) presenta la forma de la densidad de estados locales para un estado que presenta cicatrices cuánticas, correspondientes a un estadio de Bunimovich conectado a dos contactos en sus extremos. En el panel b) se presenta con línea continua la órbita periódica del sistema clásico asociada a la cicatriz cuántica del panel a).	20
2.13. El panel a) muestra la distribución de los puntos de red para una red cuadrada con sus vectores primitivos y sus ejes de simetría. En el panel b) se observa la distribución de los puntos red de una red hexagonal con sus vectores base y sus ejes de simetría.	22
2.14. El panel a) muestra la conductancia (G) obtenida experimentalmente en un anillo de grafeno. En el panel b) se presenta la variación de conductancia (ΔG) en el anillo. En a) y b) se muestran con líneas sobresalientes roja y blanca respectivamente el anillo y sus contactos.	22

3.1. El panel izquierdo muestra un cuadrante del anillo circular en el cual se dibuja el vector \vec{r}_0 y el ángulo que forma con respecto al eje x. Igualmente, en el panel derecho se puede observar una mitad del estadio de Bunimovich y la forma en que se construye el mismo vector.	26
3.2. En el panel izquierdo se muestra la región en la que se mueven las partículas en el anillo circular sombreada con color gris. Mientras que en el panel derecho se puede apreciar las regiones plana y circular del estadio esta última sombreada de color gris.	28
3.3. Los paneles a), b) y c) muestran cómo el algoritmo presentado anteriormente funciona. Para estas gráficas se tomó el centro de coordenadas o para medir. Los vectores primados representan las nuevas posiciones después de dejar evolucionar el sistema hasta un momento antes de que la partícula salga del billar.	29
3.4. En el panel izquierdo se muestran los vectores iniciales de las partículas perturbada y sin perturbar en el anillo circular. Igualmente, en el panel derecho se puede apreciar estos vectores para el estadio de Bunimovich.	30
3.5. Esquema de los billares abiertos estudiados: a) Estadio de Bunimovich con parámetros a , R y b , que representan a la mitad del ancho de la zona plana, el radio de los semicírculos y el tamaño de los contactos respectivamente, b) Anillo circular con parámetros R_1 y R_2 , siendo estos los radios interno y externo de las circunferencias que conforman el anillo.	33
4.1. En el panel a) se muestra el logaritmo de la diferencia de caminos para el anillo. En el panel b) se presenta el logaritmo de la diferencia de caminos para el estadio de Bunimovich. Ambos muestran 160 rebotes.	35
4.2. Los paneles Los paneles a, b) y c) muestran órbitas periódicas inestables para los ángulos $\Psi_a = 5\pi/18$, $\Psi_b = \pi/4$ y $\Psi_c = 13\pi/36$ respectivamente, mientras que el panel d) presenta una órbita caótica con ángulo $\Psi_d = 0,28\pi$	37

4.3. En el panel a) se muestra órbita periódica para una posición inicial $(-R - a, 0)$ y un ángulo $\Psi = \pi/4$, b) orbita caótica generada al variar el ángulo de a).	38
4.4. LDOS para: a) energía $E/\tau = -1,9692$ para $V_1/\tau = -0,4$; b) energía $E/\tau = -3,5692$ para $V_5/\tau = -2$. La barra de escala es de 60 [u.a.].	39
4.5. LDOS para el estadio de Bunimovich con red hexagonal: a) cicatriz cuántica a $E/\tau = -2,6544$ b) no se observa cicatriz cuántica a $E/\tau = -2,022$. La barra de escala es de 30 [u.a.].	40
4.6. Ldos para el anillo circular con red: a) hexagonal en $E/\tau = -1,5908$, b) cuadrada en $E/\tau = -1,0452$. La barra de escala es de 60 [u.a.].	40
4.7. Ldos para el estado de Bunimovich con red: a) hexagonal en $E/\tau = -2,8292$, b) cuadrada en $E/\tau = -1,862$. La barra de escala es de 30 [u.a.].	41
4.8. Anillo circular con red cristalina hexagonal el panel a) muestra con rojo la orientación del eje de simetría de la red perpendicular a la orientación del eje formado por los contactos, mientras que en b) la orientación del eje de simetría de la red es paralela. La barra de escala es de 60 [u.a.].	42
4.9. Estadio de Bunimovich con red cristalina hexagonal el panel a) muestra con rojo la orientación del eje de simetría de la red perpendicular a la orientación del eje formado por los contactos, mientras que en b) la orientación del eje de simetría de la red es paralela. La barra de escala es de 30 [u.a.].	42
B.1. Los paneles a) y b) muestran órbitas no periódicas con parámetros: $\theta = 0, \phi = 6,5$ y b) $\theta = 0, \phi = 10,75$ respectivamente.	72
B.2. Los paneles a) y b) muestran órbitas no periódicas con parámetros: $\theta = 0, \phi = 27,5$ y b) $\theta = 0, \phi = 32,75$ respectivamente.	73
B.3. Los paneles a) y b) muestran orbitas periódicas con rebote en el anillo interno a partir de parámetros: $\theta = 0, \phi = 5,25$ y $\theta = 0, \phi = 5,75$ respectivamente.	73
B.4. La figura muestra una orbita periódica con rebote en el anillo interno a partir de parámetros: $\theta = 0, \phi = 11,5$	73

B.5. En los paneles a) y b) se muestran orbitas periódicas con forma triangular y cuadrada respectivamente a partir de los ángulos $\phi = 30$ y $\phi = 45$	74
B.6. En los paneles a) y b) se muestran orbitas periódicas con forma pentagonal y hexagonal respectivamente a partir de los ángulos $\phi = 54$ y $\phi = 60$	74
B.7. Los paneles a) y b) muestran órbitas periódicas con parámetros: $\phi = 33,75$ y b) $\phi = 36$ respectivamente.	75
B.8. Los paneles a) y b) muestran órbitas periódicas con parámetros: $\phi = 40$ y b) $\phi = 50$ respectivamente.	75
B.9. Los paneles a) y b) muestran órbitas periódicas con parámetros: $\alpha = 45$, $\phi = 0$ y b) $\alpha = 45$, $\phi = -45$ respectivamente.	76
B.10. Los paneles a) y b) muestran órbitas periódicas con parámetros: $\alpha = 0$, $\phi = 0$ y b) $\alpha = 0$, $\phi = 60$	76
B.11. Los paneles a) y b) muestran órbitas periódicas con parámetros: $\alpha = 60$, $\phi = -30$ y b) $\alpha = 36$, $\phi = 0$	77
B.12. La figura muestra una órbita periódica con parámetro: $\alpha = 0$, $\phi = 45$.	77
B.13. LDOS para el estadio de Bunimovich con red cuadrada: a) cicatriz cuántica a $E/\tau = -1,8148$ b) no se observa cicatriz cuántica a $E/\tau = -1,2648$. La barra de escala es de 60 [u.a.].	78
B.14. LDOS para el anillo circular con red hexagonal: a) cicatriz cuántica a $E/\tau = -1,7568$, b) No se observa cicatriz cuántica a $E/\tau = -1,4828$. La barra de escala es de 60 [u.a.].	78
B.15. LDOS para el anillo circular con red cuadrada: a) cicatriz cuántica a $E/\tau = -1,3012$, b) No se observa cicatriz cuántica a $E/\tau = -0,8152$. La barra de escala es de 60 [u.a.].	79
B.16. LDOS para el anillo circular con red hexagonal: a) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,6188$ b) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,6208$. La barra de escala es de 60 [u.a.].	79
B.17. LDOS para el anillo circular con red hexagonal: a) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,5888$ b) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,6508$. La barra de escala es de 60 [u.a.].	80

B.18.LDOS para el anillo circular con red cuadrada: a) cicatriz cuántica en $E/\tau = -0,122$ b) cicatriz cuántica en $E/\tau = -0,2532$. La barra de escala es de 60 [u.a.]	80
B.19.LDOS para el anillo circular con red cuadrada: a) cicatriz cuántica en $E/\tau = -0,122$ b) cicatriz cuántica en $E/\tau = -0,2532$. La barra de escala es de 60 [u.a.]	80
B.20.LDOS para el anillo circular con red hexagonal: a) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,5588$ b) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,5828$. La barra de escala es de 60 [u.a.]	81
B.21.LDOS para el anillo circular con red hexagonal: a) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,6088$ b) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,7008$. La barra de escala es de 60 [u.a.]	81
B.22.LDOS para el anillo circular con red cuadrada: a) cicatriz cuántica en $E/\tau = -0,5336$ b) cicatriz cuántica en $E/\tau = -0,8124$. La barra de escala es de 60 [u.a.]	82
B.23.LDOS para el anillo circular con red cuadrada: a) cicatriz cuántica en $E/\tau = -0,9128$ b) cicatriz cuántica en $E/\tau = -0,9716$. La barra de escala es de 60 [u.a.]	82
B.24.LDOS para el estadio de Bunimovich con red hexagonal: a) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,7264$ b) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,9548$. La barra de escala es de 30 [u.a.]	83
B.25.LDOS para el estadio de Bunimovich con red hexagonal: a) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,9552$ b) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,9568$. La barra de escala es de 30 [u.a.]	83
B.26.LDOS para el estadio de Bunimovich con red cuadrada: a) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,3824$ b) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,4524$. La barra de escala es de 30 [u.a.]	84
B.27.LDOS para el estadio de Bunimovich con red hexagonal: a) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,7524$ b) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,8336$. La barra de escala es de 30 [u.a.]	84
B.28.LDOS para el estadio de Bunimovich con red hexagonal: a) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,2660$ b) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,8052$. La barra de escala es de 30 [u.a.]	85

B.29.LDOS para el estadio de Bunimovich con red hexagonal: a) cicatriz cuántica en $E/\tau = -2,6532$ b) cicatriz cuántica en $E/\tau = -2,8292$. La barra de escala es de 30 [u.a.]	85
B.30.LDOS para el estadio de Bunimovich con red cuadrada: a) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,4760$ b) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,4864$. La barra de escala es de 30 [u.a.]	86

Resumen

En el presente trabajo de titulación, la formación de cicatrices cuánticas en el estadio de Bunimovich y en el anillo circular es estudiada. Las características que definen el caos clásico dentro de estos sistemas son analizados. Se calculó los exponentes de Lyapunov de estos sistemas. Para el caso del billar de estadio de Bunimovich se encontró que el exponente de Lyapunov está en el orden de 10^{-2} y para el anillo circular en el orden de 10^{-3} . Se encontraron las órbitas periódicas inestables de estos sistemas utilizando un algoritmo en Fortran. Se estudiaron las cicatrices cuánticas a partir de la densidad de estados locales (LDOS) de estos sistemas. Las LDOS muestran simetrías acorde a la simetría de la red y la simetría definida por los billares. Las LDOS se calcularon utilizando Kwant.

Resumen

In this work, we studied the formation of quantum scars in the Bunimovich's stadium and the circular ring. We analyzed the characteristics that define the classic chaos within these systems. We calculated the Lyapunov coefficients for these systems. For the Bunimovich stadium billiards, we found that the Lyapunov coefficient is in the order of 10^{-2} and for the circular ring in the order of 10^{-3} . We found the unstable periodic orbits of these systems using an algorithm in Fortran. We studied quantum scars from the density of local states (LDOS) of these systems. The LDOS show symmetries according to the symmetry of the network and the symmetry defined by the billiards. We calculated the LDOS using Kwant.

Capítulo 1

Introducción

¿Las trayectorias de un electrón en un sistema acotado pueden verse reflejadas en su función de onda? La Mecánica Cuántica y la Mecánica Clásica son dos grandes áreas de la física cuyo desarrollo se extiende a enfoques distintos. El primero es un modelo microscópico y el segundo uno macroscópico del mundo. ¿Qué tan delgada es la línea que separa estos dos modelos? Entre estos dos enfoques se encuentran los sistemas mesoscópicos. Los sistemas mesoscópicos se caracterizan por no ser ni tan pequeños como para que los efectos cuánticos dominen, ni tan grandes como para que estos sean despreciables. Como resultado obtenemos que el comportamiento del sistema presenta fenómenos clásicos y cuánticos, simultáneamente [1].

Los sistemas mesoscópicos tienen dimensiones que comprenden entre unos cuantos nanómetros hasta cientos de nanómetros. Su tamaño varía entre unas cuantas moléculas hasta cientos de moléculas [2, 3]. Una de las características importantes de estos sistemas viene dada por la longitud de correlación, la cual, en los sistemas mesoscópicos, se extiende sobre todo el sistema [3]. Estos sistemas muestran fenómenos como las oscilaciones de Aharonov-Bohm, que son efectos cuánticos producidos por la interacción entre un campo magnético externo y los portadores de carga [1]. Además, se presentan dos tipos de efecto Hall cuántico: el entero y el fraccionario; entre otros fenómenos [1, 4]. Estos sistemas se pueden estudiar haciendo uso de la mecánica clásica y de la cuántica. Clásicamente utilizando los conceptos de sistemas dinámicos y el caos clásico y cuánticamente haciendo uso de la teoría del caos cuántico.

De entre todas las estructuras mesoscópicas que podemos estudiar se encuentran los anillos cuánticos, son sistemas mesoscópicos que están formados por dos

contactos y una región de dispersión con forma de anillo circular. El estudio de estos sistemas de forma teórica y experimental es importante por sus aplicaciones en dispositivos electrónicos [4, 5]. Estos sistemas, de forma experimental, se pueden construir utilizando diferentes tipos de materiales para los cuales se hace uso de la teoría de la materia condensada. Esta es una rama de la física que se encarga de estudiar las características de los materiales a través del uso de estructuras cristalinas, siendo estas una herramienta matemática que describe dónde y cómo se posicionan los átomos de un material. Para entender el comportamiento de los electrones en los materiales se utiliza una herramienta que se conoce como densidad de estados locales. Esta nos sirve para entender la forma en que se distribuye la densidad de estados sobre un sistema mesoscópico, y así también, la forma en que los electrones se distribuyen [1, 6, 7].

De forma experimental y teórica estos anillos, han mostrado la aparición de un fenómeno conocido como cicatrices cuánticas. Las cicatrices cuánticas son un fenómeno que se caracteriza por un incremento en la densidad de probabilidad de una función de onda propia del sistema al rededor de una órbita periódica inestable del sistema clásico. Se conoce como órbitas periódicas a aquellas que sus posiciones y velocidades simultáneamente se repiten en dos tiempos diferentes, y son inestables si al ser perturbadas dan una órbita distinta [8, 9]. Las funciones de onda propias obtenidas tras resolver el Hamiltoniano del sistema cuántico se conocen como funciones cicatrizadas, si la densidad de probabilidad obtenida de estas forma una cicatriz cuántica en el espacio [8]. Un ejemplo de sistema con cicatrices cuánticas es el billar de estadio de Bunimovich. Este sistema es caótico clásicamente [10]. Como se puede observar en la Figura 1.1, la función de onda muestra una cicatriz cuántica en el panel de la izquierda y su trayectoria periódica asociada con líneas continuas en el panel de la derecha derecha [9, 11, 12].

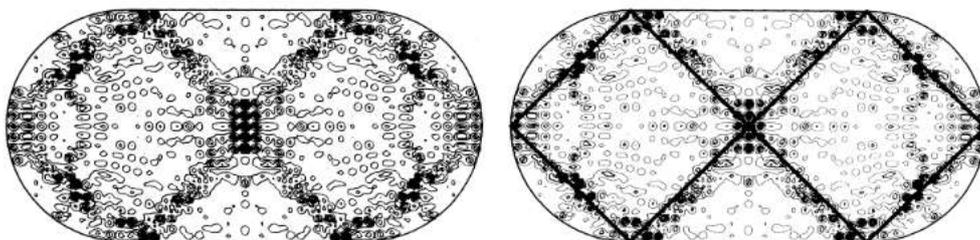


Figura 1.1: En el panel izquierdo se observa la densidad de probabilidad de una función de onda cicatrizada del estadio de Bunimovich. En el panel derecho se muestra la la trayectoria periódica inestable, graficada con línea continua, sobre dicha órbita periódica [8].

La Figura 1.2 muestra en el panel izquierdo la variación de la conductancia ΔG sobre un anillo circular conectado a dos contactos, en el cual se puede observar el fenómeno ya mencionado señalado mediante flechas rosadas; y en el panel derecho se observa la densidad local de estados calculada numéricamente, observándose el mismo fenómeno en color blanco [5].

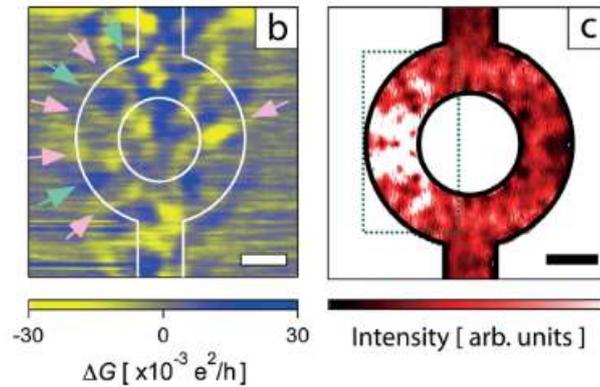


Figura 1.2: En el panel izquierdo se muestra la variación de la conductancia ΔG sobre el anillo resaltado con líneas blancas, aquí se presentan cicatrices cuánticas señaladas con flechas rosadas. El panel derecho muestra la densidad de estados locales obtenida en simulaciones, igualmente se presentan cicatrices cuánticas en color blanco. La barra de color para el panel derecho muestra el aumento de la intensidad desde lo más oscuro a lo más claro[5].

Para poder comprender este fenómeno es necesario estudiar algunas propiedades clásicas de estos sistemas. El análogo a estos sistemas en el mundo macroscópico son los billares, quienes suelen presentar fenómenos caóticos [12, 13]. La dinámica de estos sistemas se genera haciendo que las partículas se muevan libremente en su interior y al tocar el borde se reflejan siguiendo la ley de reflexión clásica.

Si extendemos la teoría del caos a la mecánica cuántica, lo que se denomina caos cuántico, las órbitas periódicas inestables clásicas se ven reflejadas en forma de cicatrices cuánticas [8, 14, 15]. Además, Sridhar and Heller [1992] observaron la presencia de estas en la densidad de probabilidad en cavidades, conocidas como cavidades resonantes, donde se confinó ondas electromagnéticas (Figura 1.3).

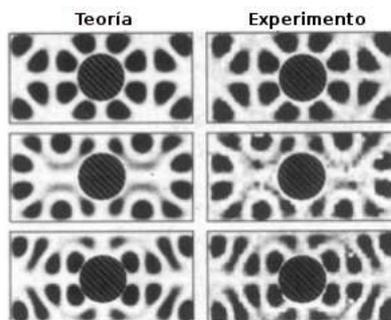


Figura 1.3: Densidad de probabilidad experimental y teórica de un sistema en el que se han inducido ondas electromagnéticas. La cavidad consiste de un rectángulo de 21,8 cm x 44 cm x 6mm, con un disco circular de 10 cm de diámetro y 6mm de altura en su centro [16].

Los estudios realizados de forma teórica así como con simulaciones en corrales cuánticos, puntos cuánticos y pozos de potencial infinitos [8, 14, 17], y de igual manera de forma experimental sobre los mismos sistemas [16, 18, 19, 20, 21] han estudiado de diferentes formas el fenómeno de las cicatrices cuánticas y su relación con los sistemas mesoscópicos. Recientemente, se ha reportado la presencia de este fenómeno en experimentos realizados en este tipo de sistemas con redes cristalinas [5]. Lo cual demuestra la importancia del estudio de los diferentes fenómenos que se pueden presentar en los sistemas mesoscópicos.

Por lo tanto, la motivación para realizar este trabajo es encontrar la forma que tienen estas cicatrices cuánticas en el estadio de Bunimovich y en el anillo circular. Debido a que, por lo presentado por Cabosart et al. [2017], las cicatrices cuánticas tienen una relación con la variación de la conductividad y la densidad de estados locales de un sistema como se mostró en la Figura 1.2. Por lo que este trabajo se enfocará en estudiar la densidad de estados locales de los sistemas ya mencionados.

El objetivo de este proyecto es estudiar la formación de las cicatrices cuánticas en los billares de estadio de Bunimovich y de anillo circular. Para ello, examinamos el comportamiento caótico de estos billares a partir del cálculo de sus coeficientes de Lyapunov, y obtenemos las órbitas periódicas inestables de estos sistemas. Se estudiará el comportamiento de la densidad local de estados a partir de las geometrías definidas por los billares mencionados. Finalmente, examinaremos el comportamiento y la forma de las cicatrices cuánticas que se obtengan en estos sistemas.

El estudio clásico se realizará utilizando un algoritmo en fortran, con el cual se

calcularán los coeficientes de Lyapunov. Esto ayudará a determinar si ambos sistemas presentan caos. Desde el punto de vista cuántico, se realizarán simulaciones utilizando redes cristalinas con la ayuda de un paquete del Kwant, especializado en transporte cuántico. Kwant es un software que utiliza el modelo de enlace fuerte para calcular las propiedades electrónicas de un sistema, como la conductividad, la densidad local de estados, entre otras. Así, con este software se calculará la densidad de estados locales de estos billares conectados a un par de contactos en sus extremos como se muestra en la Figura 1.4, donde R es el radio de la semicircunferencia del estadio de Bunimovich, R_1 y R_2 son los radios del anillo circular y b es el ancho de los contactos. Por último, a partir del paso anterior, se obtendrán varios estados de los cuales se analizarán aquellos con cicatrices cuánticas.

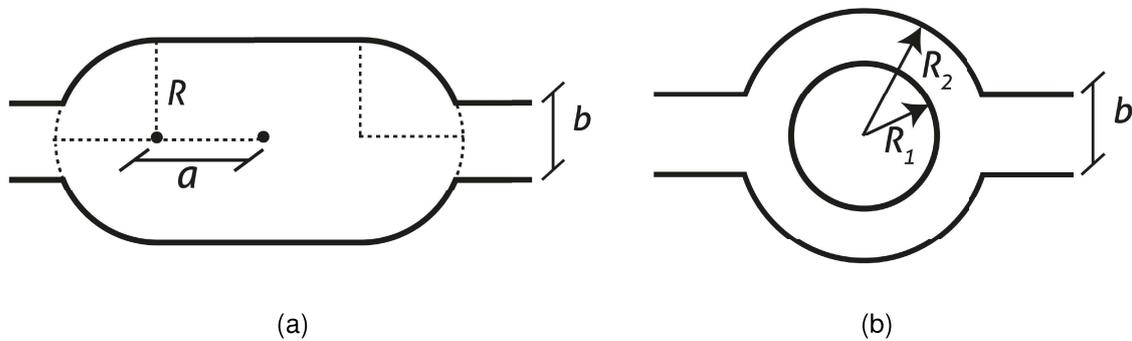


Figura 1.4: Esquema de los billares abiertos estudiados: a) Estadio de Bunimovich, b) Anillo circular.

Este trabajo de titulación se encuentra estructurado de la siguiente manera:

En el Capítulo 2 se presentan los preliminares clásicos como temas referentes a la mecánica clásica, vista desde la teoría de sistemas dinámicos (Sección 2.1). Posteriormente, se exponen conceptos relacionados con la teoría del caos (Sección 2.2), explicando brevemente las ideas importantes y las conclusiones necesarias, como los son exponentes de Lyapunov (Sección 2.2.1). Finalmente se introduce el estudio clásico de los billares (Sección 2.3), tema, en particular, necesario para abordar su contraparte cuántica en las siguientes secciones.

De igual forma, en este mismo capítulo, se muestran los temas relacionados al caos cuántico y las redes cristalinas. En la sección referente al caos cuántico (Sección 2.4), se presentan algunos conceptos básicos de la mecánica cuántica, además de introducirnos en el estudio de los sistemas caóticos clásicos usando la mecánica cuántica. En la Sección 2.4.2 exponemos los conceptos pertinentes al fenómeno de las cicatrices cuánticas y los billares cuánticos. Posteriormente se

revisan, brevemente, los conceptos relacionados a las redes cristalinas que son de utilidad para el desarrollo de este trabajo.

El capítulo 3 se centra en explicar y desarrollar la metodología necesaria para estudiar las propiedades y conceptos presentes en el capítulo 2. Este capítulo es fundamental para entender los resultados obtenidos debido a que aquí se presentarán los algoritmos utilizados para simular las propiedades que permiten determinar el caos presente en los sistemas, como son las trayectorias y los exponentes de Lyapunov del sistema. Además, el paquete de Python: Kwant, que se usó de base para obtener las cicatrices cuánticas, es abordado en este capítulo con el fin de entender el corazón de los algoritmos utilizados para estudiar los billares desde el punto de vista cuántico.

En el capítulo 4 se exponen los resultados obtenidos de las simulaciones a partir de los algoritmos explicados en el capítulo 3. En este apartado se muestran los resultados obtenidos tanto para los exponentes de Lyapunov (Sección 4.1), como para las órbitas periódicas (Sección 4.2). Además, se presentarán los resultados sobre las cicatrices cuánticas (Sección 4.3).

El capítulo final está destinado para las conclusiones de este trabajo, en este se resumen las principales conclusiones extraídas de los resultados sobre las simulaciones.

Finalmente, se presetan dos apéndices. El apéndice A contiene los códigos en Fortran y Python utilizado en este proyecto. Asimismo, el apéndice B presenta las gráficas suplementarias al capítulo 4.

Capítulo 2

Marco teórico

En este capítulo se presentan los conceptos relevantes sobre sistemas dinámicos y el caos en sistemas físicos. Además de los conceptos de física cuántica y del estado sólido que serán utilizados en este trabajo. Para todo lo referente al caos clásico, los principales resultados se muestran sin una demostración. Dichas demostraciones fueron desarrolladas ya en los cursos de mecánica clásica e introducción a los sistemas complejos; materias cubiertas en la carrera de física. Las demostraciones pueden ser encontradas en los libros [11, 22, 23, 24]. Igualmente, para los temas relacionados con mecánica cuántica y estado sólido; materias cubiertas en la carrera de física. Las demostraciones pueden ser encontradas en los libros [6, 25, 26]

2.1. Sistemas dinámicos

Un sistema dinámico se puede definir como la descripción matemática de la evolución temporal del estado de un sistema. El tiempo puede ser tanto continuo como discreto. Usualmente los sistemas dinámicos cuyo parámetro temporal es continuo se escriben en forma de *sistemas de ecuaciones diferenciales*. Si, en cambio, el tiempo es discreto, el sistema estará definido por una *relación de recurrencia* [11].

Los sistemas físicos son sistemas dinámicos que se rigen por ecuaciones diferenciales, que pueden venir de una función Hamiltoniana (2.1) que a su vez proviene del Lagrangiano del sistema [22].

$$H(q, p, t) = \sum_{i=1}^r p_i \dot{q}_i - L(q, p, t), \quad (2.1)$$

donde las variables $q_i(t)$ y $p_i(t)$ son las coordenadas generalizadas y momentos generalizados respectivamente. Las ecuaciones dinámicas que se obtienen de este son conocidas como ecuaciones hamiltonianas del movimiento.

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (2.2)$$

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (2.3)$$

2.1.1. Órbitas periódicas

Una órbita periódica, es una solución de un sistema dinámico en el que se cumple lo siguiente: para condiciones iniciales fijas \vec{q}_0 y \vec{p}_0 , en algún tiempo el sistema repite estas condiciones iniciales.

A manera de ejemplo, la Figura 2.1 muestra dos órbitas periódicas de un sistema en el plano xz . Nombramos a cada vuelta que la partícula da en el sentido positivo de las x como B y en el negativo como A. se observa, en el panel derecho, una órbita periódica simétrica al rededor del eje z en $x = 0$ que da una sola vuelta en cada sentido del eje x (AB). En el panel izquierdo se puede observar una órbita periódica asimétrica, la partícula en está órbita da dos vueltas en el sentido negativo de las x y una en el sentido positivo de las x (AAB).

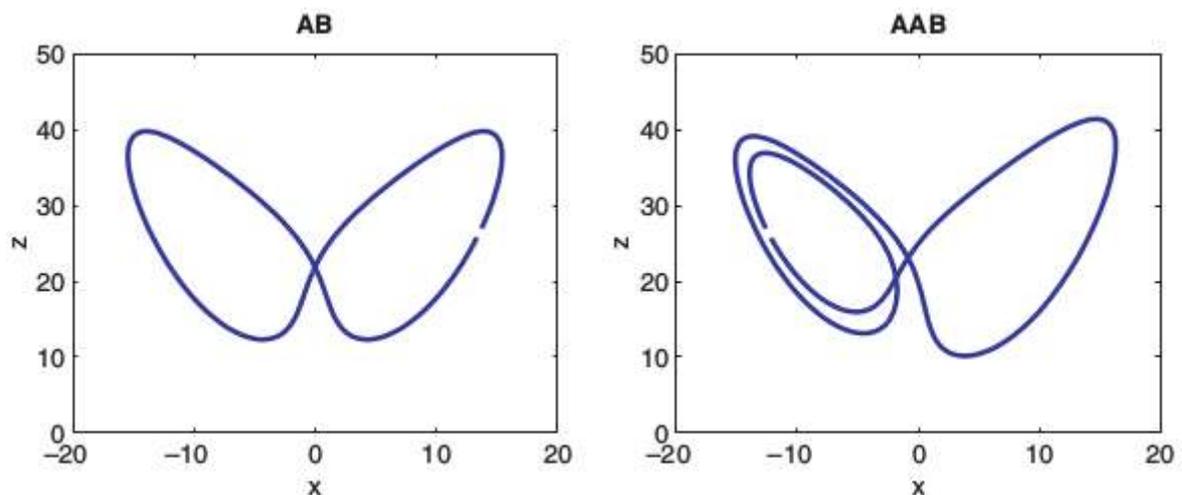


Figura 2.1: Órbitas periódicas del sistema de Lorenz en el plano xz el panel izquierdo muestra una órbita tipo AB y en el derecho tipo AAB (2.4)[27].

2.2. Caos clásico

En 1963 Edward Lorenz planteó un sistema de tres ecuaciones diferenciales acopladas (2.4) como un modelo para problemas atmosféricos. Este sistema presenta una propiedad conocida como **sensibilidad a las condiciones iniciales**. Esto quiere decir que al hacerse una pequeña perturbación sobre las condiciones iniciales se obtiene una solución diferente. Este conjunto de ecuaciones diferenciales se conoce como el **Sistema de Lorenz** y matemáticamente está descrito por el sistema

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= \sigma(y - x); \\ \frac{dy}{dt} &= x(\rho - z) - y; \\ \frac{dz}{dt} &= xy - \beta z,\end{aligned}\tag{2.4}$$

donde σ , ρ y β son números reales. Estas ecuaciones son un ejemplo de sistema complejo con variable continua [28].

El sistema de ecuaciones diferenciales (2.4), como ya se mencionó, presenta sensibilidad en las condiciones iniciales, es decir, si se realiza una pequeña perturbación sobre el sistema la diferencia entre la trayectoria inicial (sin perturbar) y la final (perturbada) diverge de forma exponencial[28]. Esto se puede observar, en las Figuras 2.3(a) y 2.3(b).

En la Figura 2.3(a) se observa cómo después de un intervalo de tiempo, específicamente en $t = 0,15$, ambas trayectorias toman caminos diferentes. Mientras que en la Figura 2.3(b), describe la forma en que el logaritmo del valor absoluto de la diferencia de trayectorias en x evoluciona, mostrando que a medida que el tiempo aumenta también lo hace la separación entre las trayectorias, y que para tiempos lo suficientemente grandes, este tiende a mantenerse constante. Así pues, ambas gráficas muestran que ambas trayectorias tienden a separarse a partir de cierto

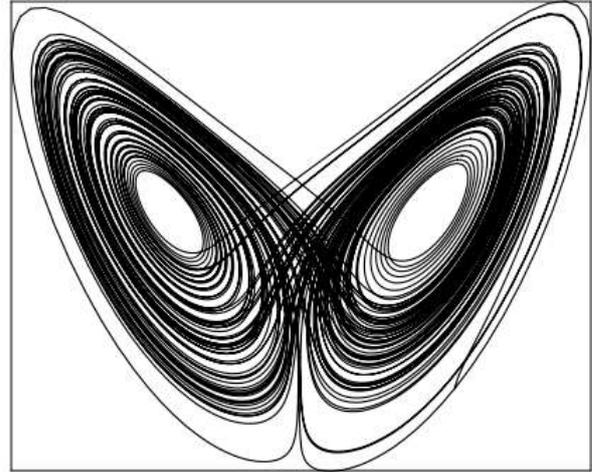


Figura 2.2: Solución numérica al sistema de Lorenz con parámetros $\beta = 8/3$, $\rho = 28$, $\sigma = 10$.

tiempo y que el logaritmo de esta separación es lineal, o que esta separación es exponencial. Además, esta separación se mantiene durante todo el recorrido, demostrando de esta forma que es imposible determinar la trayectoria perturbada a partir de la trayectoria original perdiéndose así la capacidad de predecir el recorrido.

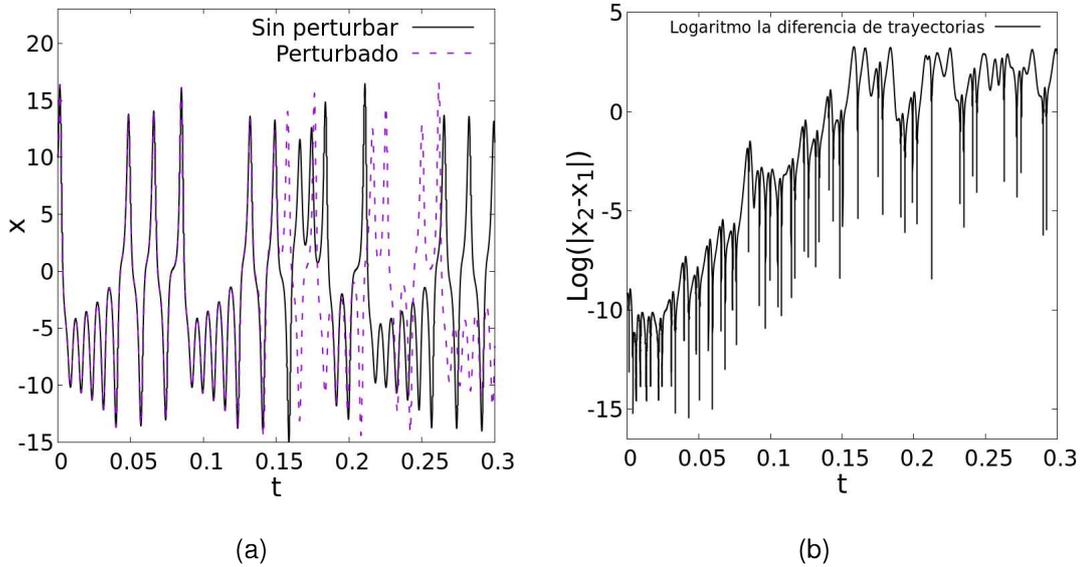


Figura 2.3: El panel a) muestra la separación de las trayectorias de una de las soluciones del sistema de Lorenz con parámetros $\beta = 8/3$, $\rho = 28$, $\sigma = 10$. En el panel b) observamos el logaritmo de la diferencia de las trayectorias del panel a).

Un sistema dinámico con tiempo discreto es el conocido **Mapa logístico**, representado por la función de recurrencia (2.5), la cual muestra una dinámica similar a la obtenida para el sistema de Lorenz. Esto quiere decir que al realizar una pequeña perturbación a las condiciones iniciales, la trayectoria original y la perturbada tienden a separarse exponencialmente (Figura 2.4) [11].

$$x_{i+1} = ax_i(1 - x_i), \quad (2.5)$$

donde a es una constante real.

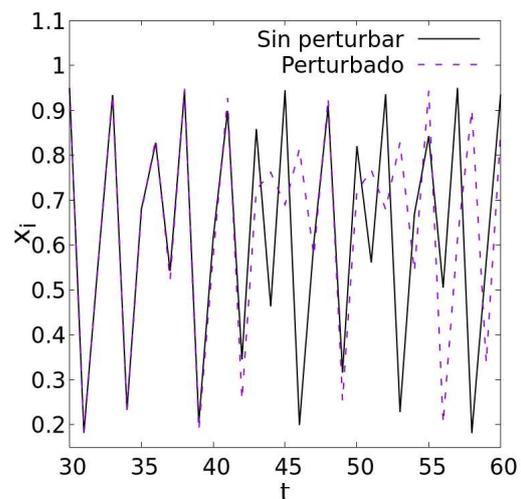


Figura 2.4: Comportamiento de la diferencia de trayectorias en el mapa logístico para $a = 3,8$ y $x_0 = 0,3$

Los sistemas (2.4) y (2.5) son ejemplos de sistemas caóticos. Para saber si la descripción matemática de un sistema presenta caos, no basta solamente con estudiar la separación de dos trayectorias infinitesimales cercanas. Sin embargo, para los sistemas que se estudiarán en este proyecto, se puede considerar que la sensibilidad a las condiciones iniciales es suficiente para ser considerados caóticos [11, 29].

2.2.1. Exponentes de Lyapunov

Para identificar la dependencia de las condiciones iniciales del sistema se definen los exponentes de Lyapunov. Estos exponentes cuantifican el grado de separación infinitesimal de dos trayectorias infinitesimalmente cercanas. En una dimensión, un sistema dinámico S asociado a una función que determina su evolución $\dot{x} = \phi(x, t)$ tiene un exponente de Lyapunov

$$\lambda_x = \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{x_0 \rightarrow 0} \frac{1}{t} \log \left| \frac{\delta x(t)}{\delta x_0} \right|, \quad (2.6)$$

donde δx_0 y $\delta x(t)$ son la separación inicial y la separación para cualquier tiempo, respectivamente, entre la trayectoria perturbada y la original. Para el caso discreto se tiene que si $x_{n+1} = f(x_n)$ es la ley que gobierna el sistema, si tomamos un x_0 fijo, el exponente de Lyapunov se puede escribir como

$$\lambda_{x_0} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \sum_{i=0}^{t-1} \log |f'(x_i)|, \quad (2.7)$$

donde t representa al parámetro dinámico [11, 12].

Para un sistema dinámico, cuya dimensión del espacio de configuración es N , el número de exponentes de Lyapunov es la dimensión de este espacio. Para este caso, si la función F gobierna la dinámica del sistema, y ésta depende explícitamente de cada coordenada y el tiempo, los exponentes de Lyapunov se calculan diagonalizando la matriz Jacobiana de F , $\delta \dot{\vec{x}} \approx J_{F(x^1, x^2, \dots, x^N)} \delta \vec{x}$ con x^i coordenadas. Para que un sistema sea caótico es necesario que al menos uno de sus exponentes de Lyapunov sea positivo y distinto de cero [11, 28, 30].

Para calcular numéricamente los exponentes de Lyapunov, un método importante se construye a partir de una regresión lineal local, realizada al diagonalizar la

matriz Jacobiana de F . Su integración entrega una ley exponencial respecto a t ,

$$\delta x^j \approx \delta x_0^j e^{\lambda^j t}, \quad (2.8)$$

donde x^j identifica la coordenada j -ésima generalizada, sobre la cual el Jacobiano de F es diagonal y λ^j es el j -ésimo exponente de Lyapunov asociado a la dirección x^j . Al tomar el logaritmo de la ecuación (2.8), ($\log \delta x^j \approx \log \delta x_0^j + \lambda^j t$), y realizar una regresión lineal a esta última expresión se obtiene, como primera aproximación, un valor para el exponente [11, 12, 31].

2.3. Billares clásicos caóticos

Un billar bidimensional B es una región del espacio en la cual las partículas se mueven libremente. Esta región B se encuentra limitada por una pared rígida en la cual las partículas son reflejadas manteniendo la regla de reflexión clásica. Esta regla implica que el momento de la partícula cambia como

$$\vec{p}' = \vec{p} - 2(\vec{p} \cdot \vec{n})\vec{n}, \quad (2.9)$$

donde \vec{n} es el vector antiparalelo al vector normal a la tangente del borde del billar en el punto (x, y) , \vec{p} es la cantidad de movimiento antes de la reflexión y \vec{p}' es la cantidad de movimiento después de la reflexión[13]. Ilustramos esta característica en la Figura 2.5.

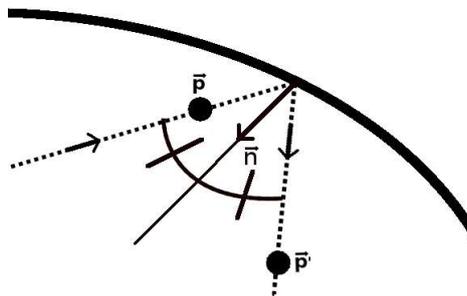


Figura 2.5: Reflexión de una partícula con cantidad de movimiento inicial \vec{p} y final \vec{p}' en el borde del billar.

La dinámica de un billar es en esencia determinista, es decir, para unas condiciones iniciales dadas se determina la posición y la cantidad de movimiento de las partículas que se mueven sobre este. Este hecho nos puede llevar a pensar que

una solución analítica es factible para todos los casos, sin embargo, la solución solo se puede escribir para tiempos pequeños frente a la condición inicial. A medida que el tiempo incrementa aumenta el número de colisiones y por lo tanto la complejidad para encontrar una solución analítica [13]. Para estudiar de mejor manera estos sistemas se utilizan técnicas numéricas y computacionales, donde asumimos que la posición de las partículas dentro del billar sigue la ley de recurrencia (2.10) y al tocar el borde la cantidad de movimiento cambia como se estableció en la ecuación (2.9).

$$\vec{r}_{i+1} = \vec{r}_i + \vec{v}_i \Delta t \quad (2.10)$$

donde \vec{r}_i y \vec{r}_{i+1} representan a la posición de la partícula antes y después de una iteración, \vec{v}_i representa la velocidad de la partícula en cada iteración y Δt el tamaño del intervalo temporal e i representa el número de iteración [13].

Cómo ejemplo podemos tomar el billar más sencillo que se puede analizar, el circular. Su frontera está dada por la ecuación $x^2 + y^2 = R^2$, donde R es el radio de la circunferencia. Las coordenadas adecuadas para estudiar este billar son: Ψ el ángulo que forma el vector velocidad con la recta tangente en el punto de colisión y θ el ángulo polar medido en sentido antihorario con respecto al eje x como se observa en la Figura 2.6. El movimiento de una partícula sobre un círculo estaría determinado por las ecuaciones recursivas:

$$\begin{cases} \theta_{n+1} = \theta_n + 2\Psi_n \\ \Psi_{n+1} = \Psi_n \end{cases} \quad (2.11)$$

donde n representa el número de reflexión después de una colisión con los bordes[13].

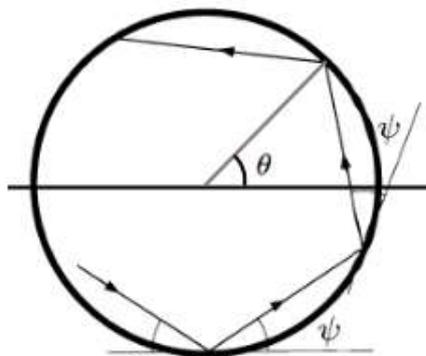


Figura 2.6: Grafica de un billar circular con coordenadas generalizadas ψ y θ .

Las trayectorias que se forman son de dos tipos: 1) Si la razón entre los ángulos Ψ y π es racional las trayectorias son periódicas tal como se muestra en el panel a) de la Figura 2.7. 2) Si la razón es irracional la trayectoria es quasiperiódica y además es densa en el billar, ilustrado en el panel b) de la Figura 2.7.

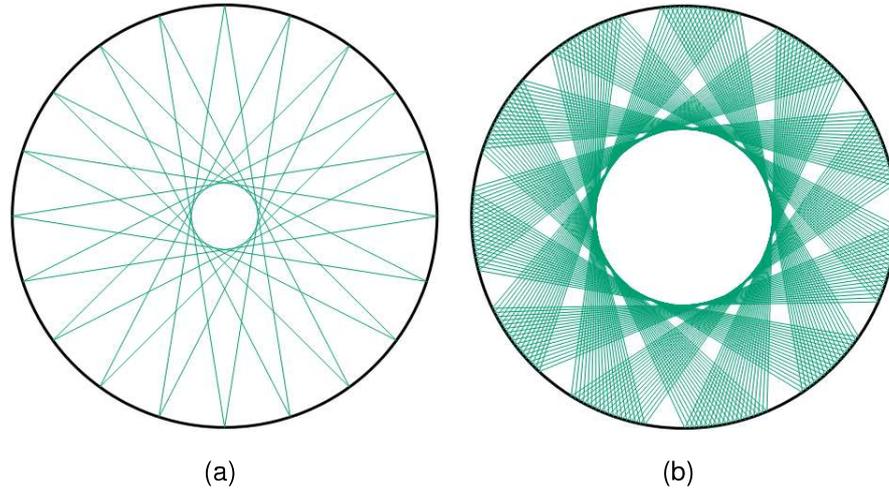


Figura 2.7: El panel a) muestra un ejemplo de orbita periódica donde la razón Ψ/π es racional. En el panel b) se observa una orbita no periódica para un valor de Ψ/π irracional.

El billar circular es el más sencillo de analizar debido a su simetría y que su borde es suave. Usando este como ejemplo se plantea, para los propósitos de este proyecto, que el borde de los billares que estudiaremos sea la unión de curvas suaves y compactas. Bajo este supuesto, se puede asociar a cada borde Γ_i una función $f_i : [a_i, b_i] \rightarrow \mathbb{R}^2$ que determina su forma. Este supuesto elimina todos aquellos bordes que no sean diferenciables, al menos, hasta su segunda derivada como lo sería un billar cuadrado, debido a sus vértices. La manera en que los bordes reflejan a las partículas está determinada por una cantidad conocida como curvatura (κ) la cual es igual al valor de la segunda derivada de la función f_i en el punto de contacto. Esta cantidad puede ser positiva, negativa o cero, y determina si los bordes son convergentes, divergentes o planos, respectivamente. Como se puede observar en la Figura 2.8, el choque de las partículas con el borde Γ_f de la izquierda provoca que estas tiendan a converger, mientras que en el lado derecho el choque de estas partículas con el borde Γ_d genera que estas se separen o que sus trayectorias diverjan. Como se ha mencionado, el tipo de borde determina si las trayectorias infinitesimalmente cercanas convergen (bordes convergentes), divergen (bordes divergentes) o se mantienen con la misma separación (bordes planos) [13].

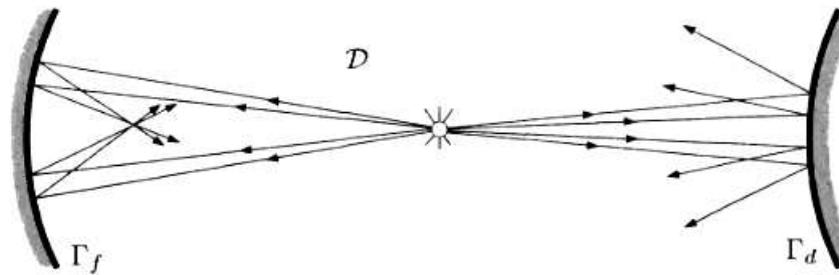


Figura 2.8: Comportamiento de un haz de partículas rebotando en un borde convergente Γ_f (izquierda) y borde divergente Γ_d (derecha) [13].

En 1970, L. Bunimovich, construyó billares caóticos a partir de bordes solamente convergentes y formados únicamente por arcos de circunferencia, siempre y cuando el camino entre colisiones sea lo suficientemente grande como para que cualquier frente de ondas o haz de partículas se dispersen. La idea principal de este mecanismo consiste en que si la distancia que recorre el haz de partículas entre el borde de salida y el foco es mayor que la distancia entre el borde de llegada y el foco, el haz de partículas no solo habría recuperado el tamaño original sino que se ha expandido tal como se puede observar en la Figura 2.9. Este mecanismo se conoce como *mecanismo de desenfoque* y los billares que hacen uso de este son conocidos como *billares de Bunimovich*.

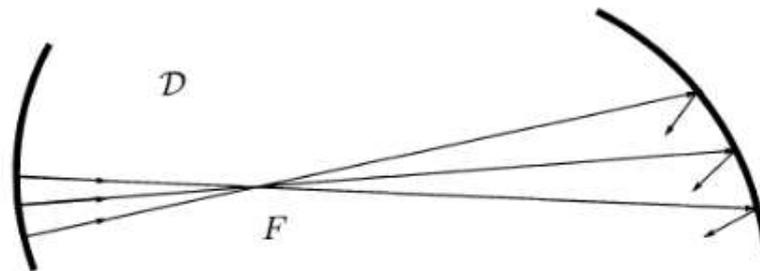
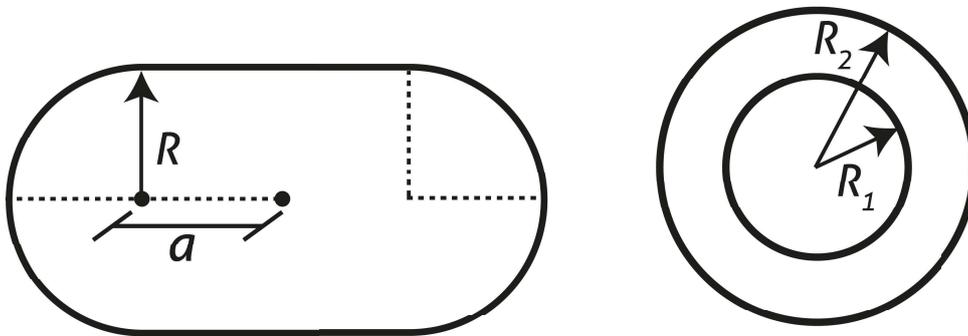


Figura 2.9: Mecanismo de desenfoque: Comportamiento de un haz de partículas después de colisionar en el borde derecho y converger a su foco F , las trayectorias se separan hasta su siguiente colisión en el borde izquierdo y no vuelven a converger en el mismo foco[13].

Como ya se observó en la sección 2.2, la dependencia de las condiciones iniciales es un indicador de la existencia de caos en sistemas dinámicos. L. Bunimovich señala que si dos trayectorias muy cercanas divergen exponencialmente en un billar se considera que este es caótico. Las condiciones para que esto suceda son dos: que existan bordes divergentes en el sistema o que el billar use el mecanismo de

desenfoque[10, 29]. Como se mencionó anteriormente, dicho mecanismo determina que para dos trayectorias infinitesimalmente cercanas, si estas se reflejan en un borde convergente lo suficientemente distanciado de la siguiente colisión estas trayectorias tienden a divergir tras pasar por el foco de convergencia como se observa en la Figura 2.9.

Este trabajo de titulación se centrará en estudiar los exponentes de Lyapunov y las órbitas periódicas de los billares de estadio de Bunimovich (Figura 2.10(a)) y el billar con forma de anillo circular (Figura 2.10(b)). Estos estadios presentan los dos tipos de mecanismos. El estadio de Bunimovich está formado por dos semicírculos de radio R separados una distancia $2a$ entre estos. El foco, debido a la separación de ambos semicírculos, se multiplica por dos, uno por cada semicírculo. Además, debido a la separación las trayectorias infinitesimalmente cercanas que describen las partículas tienden a divergir después de chocar con cada una de las semicircunferencias. En el caso del anillo circular, el círculo interior, con radio R_1 proporciona un borde divergente, el cual, como ya se explicó anteriormente, es fuente del caos en este billar y el círculo exterior de radio R_2 proporciona el borde externo convergente del billar.



(a) Estadio de Bunimovich

(b) Anillo circular

Figura 2.10: Tipos de billares que se estudiarán en este proyecto.

2.4. Caos cuántico

La mecánica cuántica se originó con el propósito de explicar el comportamiento de los sistemas microscópicos. Una de sus representaciones, la más conocida, está dada por la ecuación de Schrödinger (2.12). Esta es una ecuación en derivadas parciales la cual describe la evolución de un sistema físico dado. De forma compacta,

esta ecuación se puede escribir de la siguiente manera:

$$\mathbb{H} |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle \quad (2.12)$$

donde \mathbb{H} representa el Hamiltoniano del sistema y $|\Psi\rangle$ se conoce como la función de onda, siendo esta una solución de la ecuación (2.12). Un estado, en mecánica cuántica, se representa por esta función de onda que contiene la información del sistema cuántico por ser una solución a la ecuación de Schrödinger (2.12) [26, 30, 32].

Uno de los logros en la física del siglo XX fue describir la mayoría de sistemas clásicos en términos de la mecánica cuántica. Dentro de todos estos sistemas clásicos, existen los sistemas caóticos ya revisados en el capítulo 2.2.

La definición de caos clásico depende de las trayectorias que puede tomar un sistema como ya se revisó en la sección 2.2. En la mecánica cuántica, el hablar de trayectorias deja de tener sentido, por lo tanto todo aquello que esté relacionado con estas también. El caos, a primera vista, perdería sentido en la mecánica cuántica. Sin embargo, esto no es así, el caos cuántico toma una definición un tanto diferente. El caos cuántico es el estudio de los sistemas clásicos que presentan caos utilizando las herramientas provistas por la mecánica cuántica[32, 33].

2.4.1. Billares cuánticos

Un ejemplo de sistema que presenta caos cuántico son los billares caóticos. Como vimos en el capítulo 2.3 un billar caótico se puede definir por dos regiones, una región donde la partícula se mueve libremente y su borde en el cual la partícula rebota para mantenerse dentro del billar(2.9). Esto es, en mecánica cuántica, un pozo de potencial infinito, en el cual, la región donde la partícula se mueve libremente tiene un potencial cero y el borde se cambia por una región prohibida donde el potencial es infinito. Así, el estudio de un billar, desde el punto de vista cuántico, se plantea a partir del siguiente potencial:

$$V(x, y) = \begin{cases} 0 & ; \text{ sí } (x, y) \in B \\ +\infty & ; \text{ sí } (x, y) \notin B \end{cases} \quad (2.13)$$

donde x y y son las coordenadas de la partícula y B es el conjunto de puntos que conforman el billar. Este pozo de potencial infinito se resuelve de forma numérica

haciendo uso de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

Nos centraremos en el estudio de los billares de estadios de Bunimovich y anillo circular. Tomemos como ejemplo el estadio de Bunimovich. Este billar caótico ha sido estudiado utilizando técnicas de cuantización semiclásicas con las que se ha podido encontrar resultados importantes sobre estos [8, 32, 34]. Uno de estos resultados es la forma que toma el módulo de la función de onda a lo largo de las órbitas periódicas del sistema en su descripción clásica, tendiendo a acumularse a lo largo de estas. Este fenómeno, el cual se discutirá en la siguiente sección, toma el nombre cicatrices cuánticas tal como se mostró en la Figura 1.1 (Capítulo 1). Las Figuras 2.11(a) y 2.11(b) muestran distintos tipos de cicatrices cuánticas de modo que estas se encuentran con una tonalidad oscura con respecto al resto del billar y sus respectivas órbitas periódicas.

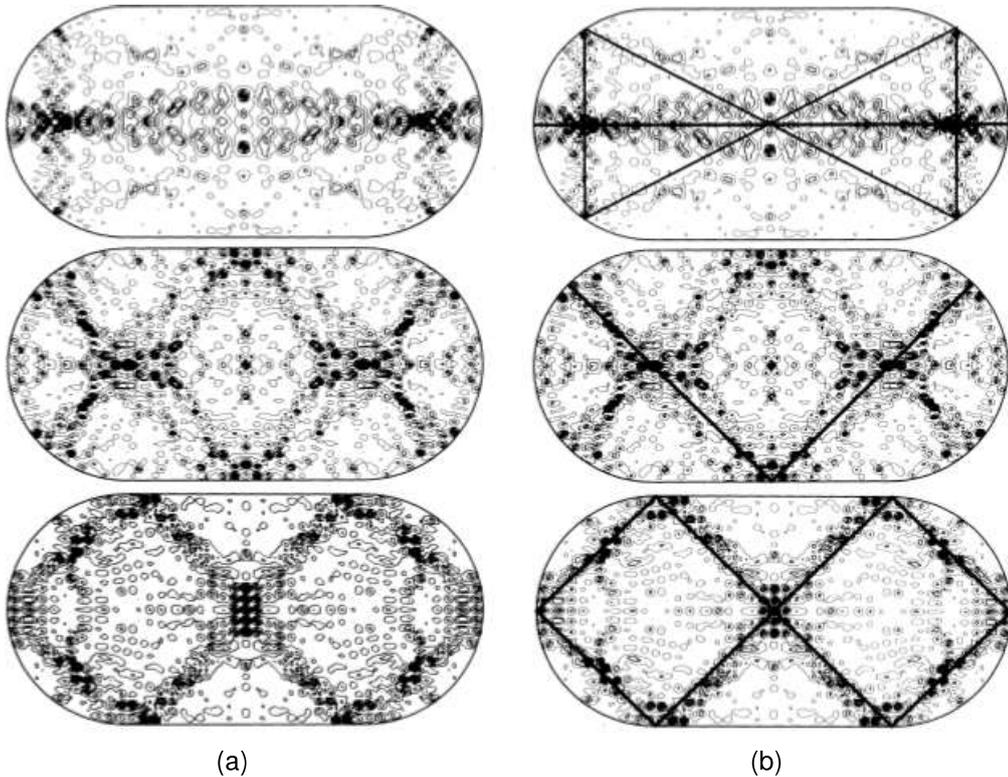


Figura 2.11: En el panel a) se muestra la forma que toman las cicatrices cuánticas en el estadio de Bunimovich. El panel b) muestra las órbitas periódicas asociadas a las cicatrices cuánticas del panel a) [8].

2.4.2. Cicatrices cuánticas

Como se vino discutiendo en el apartado anterior las cicatrices cuánticas son un fenómeno característico de los sistemas cuánticos cuya contraparte clásica es caótica. Estas se presentan cuando la densidad de probabilidad de un estado propio (Figura 2.11(a)) del sistema cuántico alcanza valores máximos sobre las órbitas periódicas inestables del sistema clásico (Figura 2.11(b)). Este fenómeno fue observado por primera vez por S.W. Mac Donald y posteriormente estudiado por Heller y nombrado por este como cicatrices cuánticas [8, 15].

El estudio de este fenómeno se ha realizado, en su mayor parte, en pozos de potencial, es decir, en sistemas cuyo interior es vacío. Sin embargo, ésta definición de billar cuántico se puede modificar para incluir una red cristalina obligando a las partículas a moverse sobre estas. Un ejemplo de estos sistemas modificados se puede observar en la Figura 2.12. El panel (a) muestra la densidad local de estados que forma una cicatriz cuántica en un billar de estadio de Bunimovich, mientras que el panel (b) resalta la órbita periódica asociada a esta cicatriz cuántica, graficándola con línea continua. Este billar se caracteriza por tener un par de aberturas en sus extremos, es decir, se encuentra conectado a dos contactos que se pueden observar en los extremos de los billares. Además, el interior de este billar posee una estructura cristalina con hexagonal.

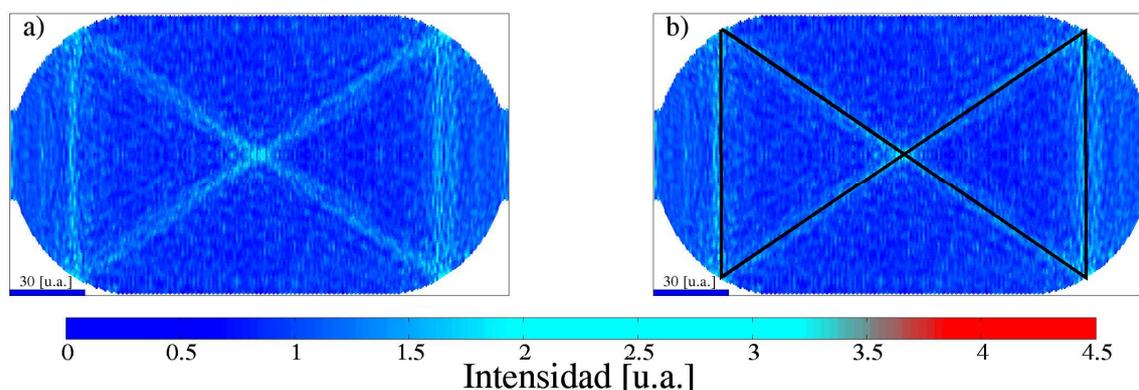


Figura 2.12: El panel a) presenta la forma de la densidad de estados locales para un estado que presenta cicatrices cuánticas, correspondientes a un estadio de Bunimovich conectado a dos contactos en sus extremos. En el panel b) se presenta con línea continua la órbita periódica del sistema clásico asociada a la cicatriz cuántica del panel a).

Se ha reportado que estas estructuras formadas a partir de la gráfica de la densidad local de estados en el espacio, no solamente se forman en este tipo de configuraciones. Experimentos realizados en corrales cuánticos a partir de ondas

microondas[16, 18], la forma que toman los rayos de luz en la sección eficaz de un tubo de fibra óptica [35], entre otros, han mostrado que estas cicatrices cuánticas pueden ser estudiadas a partir de distintas configuraciones.

2.4.3. Estructuras cristalinas

Una estructura cristalina nos ayuda a estudiar las propiedades de diferentes materiales en base a la disposición de sus átomos, debido a las propiedades periódicas que poseen dichos materiales. Estas son herramientas matemáticas que constan de un conjunto de vectores que se trasladan sobre infinitos puntos distribuidos en el espacio (red de Bravais) y una base formada por los vectores que ubican a los átomos [6].

Este estudio se centra en dos estructuras cristalinas: la red cuadrada y la red hexagonal. Los vectores que identifican a la red cuadrada son ortogonales entre sí (2.14) y además tienen la misma longitud a que representa la distancia entre los puntos de red (Figura 2.13(a)).

$$\vec{a}_1 = \begin{pmatrix} a \\ 0 \end{pmatrix}; \vec{a}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ a \end{pmatrix}. \quad (2.14)$$

La red cuadrada posee las siguientes simetrías: reflexión al rededor de ambos vectores, traslaciones sobre cada punto de red y bajo rotaciones de 90 grados al rededor de un eje perpendicular a las redes. Por otro lado se tiene la red hexagonal, esta consta de dos vectores base (2.15) no ortogonales (Figura 2.13(b)). Siendo esta la estructura cristalina característica del grafeno [36].

$$\vec{a}_1 = \frac{\sqrt{3}a}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}; \vec{a}_2 = \frac{\sqrt{3}a}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

También se puede notar que la red hexagonal posee una simetría en la dirección del vector resultante de la suma de \vec{a}_1 y \vec{a}_2 , como se ve en la Figura 2.13(b), por lo que una rotación de 90 grados no sería suficiente para mantener las propiedades de la red invariantes. Es necesario, en este caso, girar la red 180 grados para volver a observar las mismas propiedades.

Estudios como los realizados por Cabosart et al. [2017] muestran que el comportamiento de la variación de conductancia en anillos circulares, hechos con grafeno, presenta estados en los que se puede apreciar cicatrices cuánticas. Estas son, en

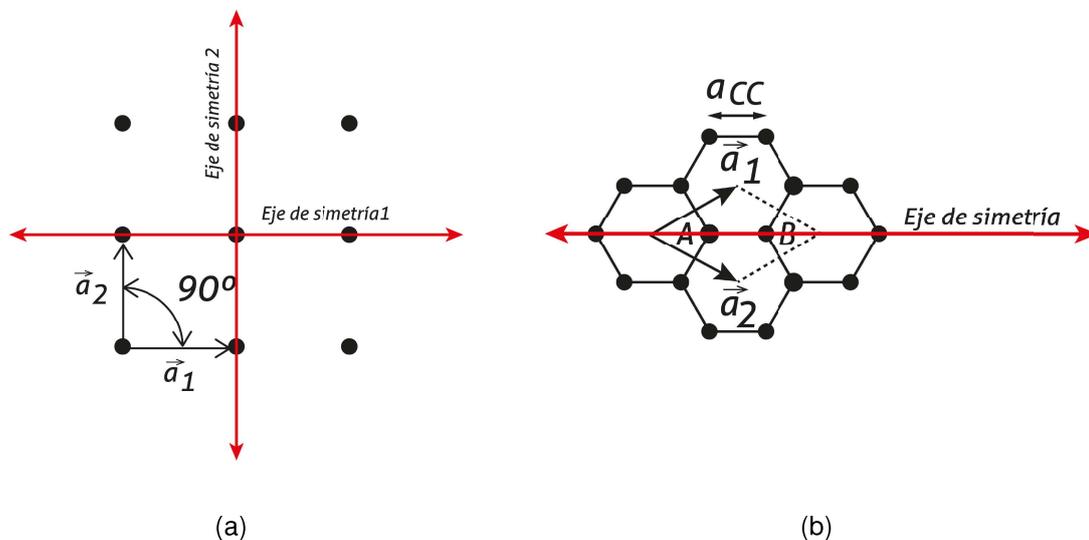


Figura 2.13: El panel a) muestra la distribución de los puntos de red para una red cuadrada con sus vectores primitivos y sus ejes de simetría. En el panel b) se observa la distribución de los puntos red de una red hexagonal con sus vectores base y sus ejes de simetría.

su mayoría, radiales y se muestran asimétricas debido a la geometría de la red cristalina y por ende a la simetría de la misma. Los estudios experimentales realizado en estructuras cristalinas, se han realizado midiendo la conductancia y sus fluctuaciones (Figura 2.14) [5] .

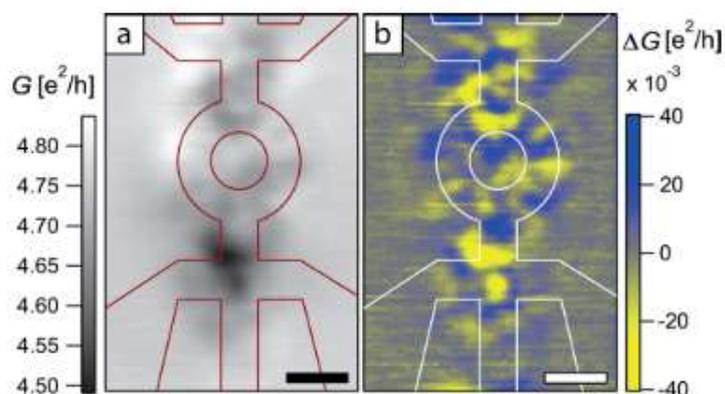


Figura 2.14: El panel a) muestra la conductancia (G) obtenida experimentalmente en un anillo de grafeno. En el panel b) se presenta la variación de conductancia (ΔG) en el anillo. En a) y b) se muestran con líneas sobresalientes roja y blanca respectivamente el anillo y sus contactos.

En este trabajo se estudiarán dos billares cuánticos abiertos: el estadio de Bu-

nimovich y el anillo circular con redes cristalinas cuadrada y hexagonal, utilizando Kwant, un software dedicado al transporte cuántico[37].

2.5. Modelo del enlace fuerte

Debido a que este tipo de sistemas presentan más de un átomo; el considerar al electrón como una partícula libre o cuasilibre no es suficiente para describir su comportamiento. Para poder entender su comportamiento es necesario añadir la interacción entre cada uno de los átomos dentro de una celda unitaria con el electrón [6].

Este modelo presenta las siguientes características:

- Se consideran átomos lo suficientemente alejados para que la proyección de las funciones propias correspondientes a cada átomo sea despreciable, es decir, $\langle n \pm 1 | n \rangle \approx 0$; y además $\langle n | n \rangle = 1$.
- Se considera que los estados ligados $|n\rangle$ tienen bien definida su energía de forma que para el hamiltoniano atómico se cumple que: $\mathbb{H}_{at} |n\rangle = E_n |n\rangle$

Considerando que V_{ij} es el potencial entre los átomos i y j del arreglo, el hamiltoniano total será la suma entre el atómico y el potencial. La solución de este sistema proporciona información sobre la energía del electrón en un estado E_i (energía on-site) y la energía de transición entre dos estados i, j τ_{ij} (Hopping) [38].

$$E_{ij} = \begin{cases} E_i & \text{sí, } i = j \\ \tau_{ij} & \text{sí, } i \neq j \end{cases} \quad (2.16)$$

Otra forma de ver esto es discretizando la ecuación de Schrödinger y considerar que todos los puntos de red son iguales. Tomando $E_i = 4\tau + V(i, j)$ y $\tau_{ij} = \tau$ llegamos a la expresión (2.17). Este hamiltoniano es muy utilizado para realizar los cálculos numéricos en esta aproximación[39].

$$H = \sum_{i,j} ((4\tau + V(i, j)) |i, j\rangle \langle i, j| - \tau(|i + 1, j\rangle \langle i, j| + |i, j\rangle \langle i + 1, j| + |i, j + 1\rangle \langle i, j| + |i, j\rangle \langle i, j + 1|)) \quad (2.17)$$

2.6. Densidad local de estados

Se define por densidad local de estados (LDOS) a la densidad de estados en un punto en particular del espacio, a partir de una energía fija y la función de onda dependiente de las coordenadas espaciales. Su forma matemática es:

$$\rho_{LDOS}(\vec{r}, E) = \sum_i \delta(E - E_i) \Psi_i^*(\vec{r}, E) \Psi_i(\vec{r}, E) \quad (2.18)$$

donde la suma sobre i recorre todos los estados cuánticos solución del problema, es decir, i representa al estado cuántico i -ésimo, E es un valor de energía fijo, E_i es el valor de la energía del estado i -ésimo, \vec{r} la posición sobre el espacio en la que analizaremos la densidad de estados y $\Psi_i(\vec{r}, E)$ la función de onda en el estado i -ésimo evaluada en la energía E y en el punto \vec{r} .

Capítulo 3

Metodología

En este capítulo se presentan las ideas necesarias para comprender las simulaciones computacionales realizadas en este trabajo. El capítulo se divide en dos secciones, la primera Sección, 3.1, explica las consideraciones necesarias para estudiar la presencia de caos en los billares de estadio de Bunimovich y de anillo circular. En la Sección 3.2 se presenta el desarrollo de los algoritmos necesarios para obtener y estudiar la formación de cicatrices cuánticas en los dos billares, en este caso billares abiertos, ya mencionados. En esta sección también se desarrollará brevemente la idea detrás del paquete de Python que se utilizará en las simulaciones.

3.1. Modelo clásico

Para el estudio del caos clásico en los dos billares bidimensionales, estadio de Bunimovich y billar de anillo clásico. Las partículas en los billares se mueven siguiendo estos puntos:

- En el interior del billar las partículas se mueven libremente.
- En el borde del billar las partículas se reflejan cumpliendo la ley (2.9).

El movimiento de las partículas se representará de la siguiente manera, tomando como notación i para las iteraciones y n para los rebotes en los bordes del billar:

$$\vec{r}_{i+1} = \vec{r}_i + \vec{v}_n \Delta t \quad (3.1)$$

En el caso del anillo circular, la posición inicial será

$$\vec{r}_0 = b(\cos \theta, \sin \theta) \quad (3.2)$$

donde b es la distancia del centro de las circunferencias al punto en que se ubica la partícula ($R_1 < b < R_2$, R_1 y R_2 se muestran en la Figura 3.1) y θ el ángulo medido desde el lado positivo del eje x cómo se muestra en la Figura 3.1(a). Para el estadio de Bunimovich, y con el fin de simplificar el procedimiento colocaremos una partícula dentro de uno de los semicírculos. Así, el vector posición inicial

$$\vec{r}_0 = (\pm(a + b \cos \alpha), b \sin \alpha) \quad (3.3)$$

donde b es la distancia desde el centro de uno de los círculos hasta el punto en que se coloca la partícula y α es el ángulo medido con respecto al eje x cómo se muestra en la Figura 3.1(b).

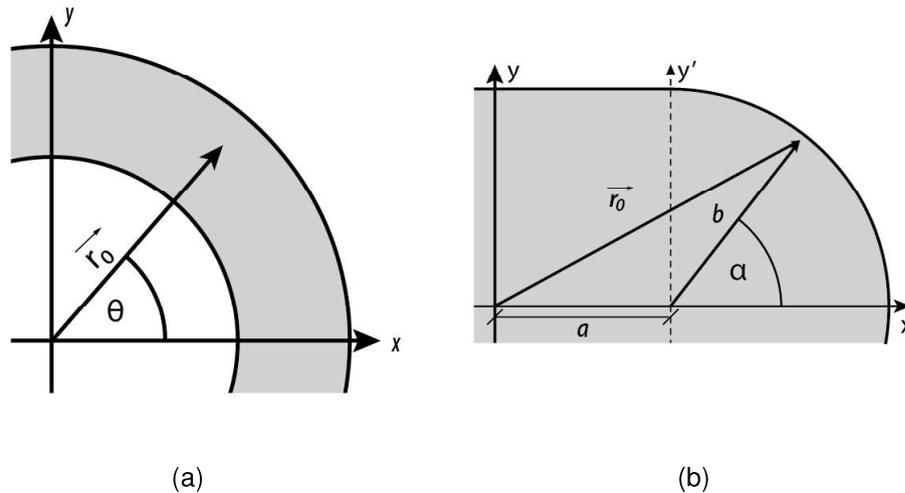


Figura 3.1: El panel izquierdo muestra un cuadrante del anillo circular en el cual se dibuja el vector \vec{r}_0 y el ángulo que forma con respecto al eje x . Igualmente, en el panel derecho se puede observar una mitad del estadio de Bunimovich y la forma en que se construye el mismo vector.

Como la velocidad varía en cada rebote se utiliza el subíndice n , el cuál representa el rebote, en cambio la posición cambia en cada iteración por lo que se utiliza i como subíndice y Δt es el intervalo temporal.

Además, para las simulaciones clásicas se optó por tomar la masa de las partículas igual a uno ($m = 1$) y el módulo de la velocidad también $|\vec{v}| = 1$, para que el

costo computacional sea menor, de esta forma la ley 2.9 se modifica de la siguiente manera:

$$\vec{v}' = \vec{v} - 2(\vec{v} \cdot \vec{n})\vec{n} \quad (3.4)$$

La velocidad inicial $\vec{v}_0 = v(\cos \phi, \sin \phi)$, se fijará de tal forma que $v = 1$ y ϕ es el ángulo que forma la velocidad con respecto a la dirección positiva del eje x.

3.1.1. Órbitas periódicas

Como ya se explicó en el Capítulo 2, las órbitas periódicas cumplen que para algunas iteraciones i_1 e i_2 y algunos rebotes n_1 y n_2 , la posición \vec{r}_i y la velocidad \vec{v}_n deben ser iguales. Con el fin de simplificar los cálculos, se puede escoger $i_1 = n_1 = 0$ por lo que solo bastaría que en algún momento de la simulación ambas variables, \vec{r}_i y \vec{v}_n sean iguales a las condiciones iniciales. Así, pues, solo bastaría encontrar otra iteración en la que se repitan las condiciones iniciales.

Para recopilar estas órbitas se aplicará el siguiente algoritmo:

1. Establecer los límites para el billar:

En el caso del billar de anillo circular el módulo de \vec{r}_i debe ser menor que el radio exterior y mayor que el radio interior, es decir, $R_1^2 < \vec{r}_i^2 < R_2^2$ como se observa en la Figura 3.2(a).

Por otro lado, para el estadio de Bunimovich se debe cumplir que si $a < |x| < R + a$, y debe ser menor que $y^2 < R^2 - (x - \text{sign}(x)a)^2$. Caso contrario si $|x| < a$, se debe cumplir que $|y| < R$ como se puede observar en la Figura 3.2(b).

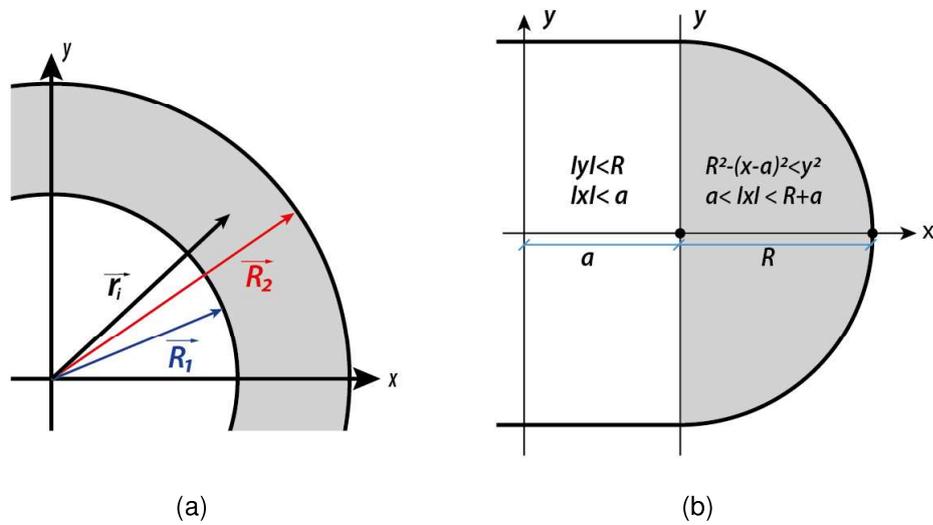


Figura 3.2: En el panel izquierdo se muestra la región en la que se mueven las partículas en el anillo circular sombreada con color gris. Mientras que en el panel derecho se puede apreciar las regiones plana y circular del estadio esta última sombreada de color gris.

2. Establecer parámetros iniciales: posiciones iniciales \vec{r}_0 , velocidades iniciales \vec{v}_0 , el intervalo temporal dt y el menor intervalo temporal dt_{min} que servirá para ajustar la precisión.
3. Establecer el algoritmo de evolución:

$$\vec{r}_{i+1} = \vec{r}_i + \vec{v}_n dt$$

4. Para cada iteración, guardamos \vec{r}_i y calculamos \vec{r}_{i+1} .
5. Si \vec{r}_{i+1} se encuentra fuera del billar se establece el siguiente algoritmo para la reflexión en el borde:
 - a) Si $dt > dt_{min}$ Regresamos al paso anterior del algoritmo sin actualizar la posición. Actualizamos dt a un valor menor, para ajustar la precisión y disminuir el error.
 - b) Si $dt = dt_{min}$ se genera una reflexión según la ley (3.4) y actualizamos la posición.

Esta parte del pseudo algoritmo se puede visualizar claramente en la Figura 3.3 en la que, para 3 intervalos temporales distintos se observa la mejor en la aproximación.

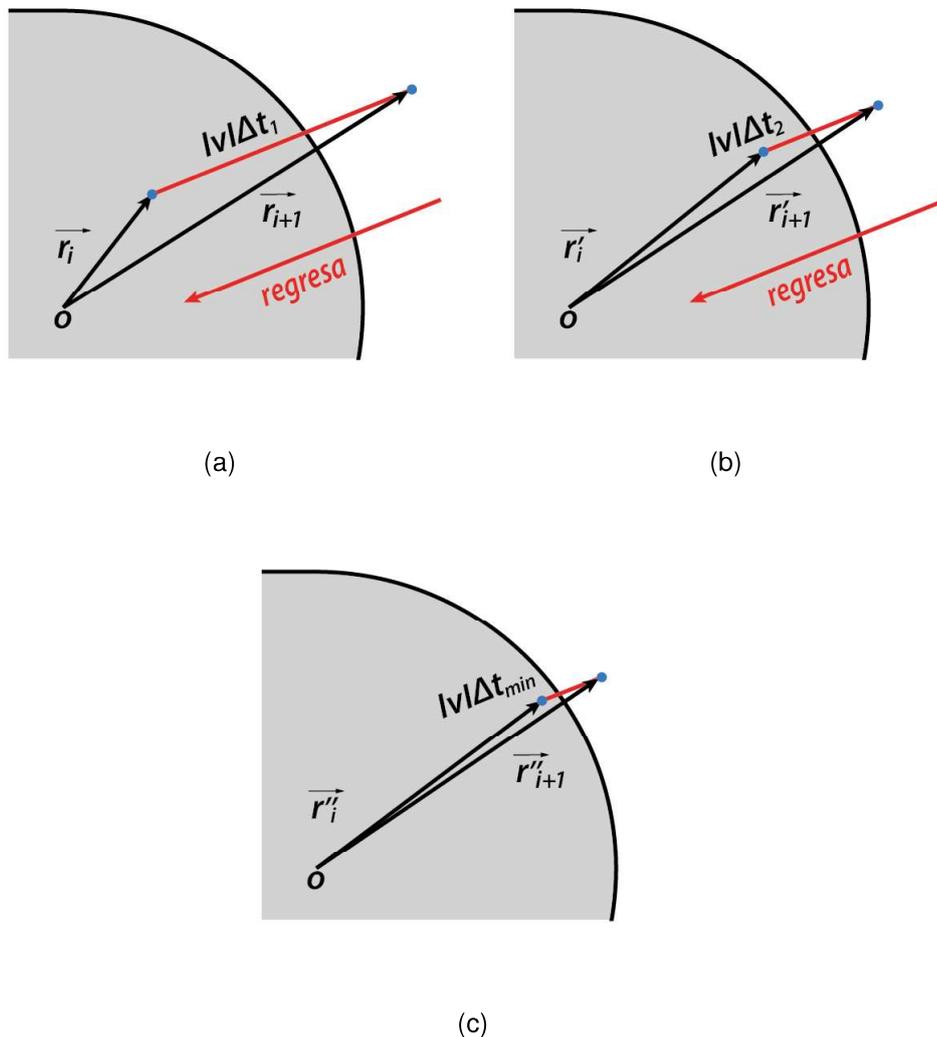


Figura 3.3: Los paneles a), b) y c) muestran cómo el algoritmo presentado anteriormente funciona. Para estas gráficas se tomó el centro de coordenadas o para medir. Los vectores primados representan las nuevas posiciones después de dejar evolucionar el sistema hasta un momento antes de que la partícula salga del billar.

6. Si la distancia entre las variables \vec{r}_i y \vec{v}_n y su condiciones iniciales, respectivamente, es menor que un valor pequeño ϵ ; se guarda la órbita recorrida aparte y se finaliza el algoritmo.

Este algoritmo nos permite conseguir cualquier precisión sin sacrificar el tiempo de computo de manera dramática debido a que el paso temporal se ajusta para todos los puntos cercanos al borde. Además, gracias a esto se puede calcular las diferentes órbitas periódicas que se obtienen en el sistema fijando únicamente las posiciones y velocidades iniciales.

3.1.2. Exponentes de Lyapunov

Para el cálculo de los exponentes de Lyapunov, se utiliza una modificación del algoritmo anterior: se genera una partícula extra en una posición cercana a la partícula inicial tal que $\vec{r}_{2i} = \vec{r}_{1i} + \vec{\delta}$, con la misma velocidad inicial. Esto genera dos trayectorias infinitesimalmente cercanas, dependientes del parámetro $\vec{\delta}$. Esta diferencia se genera tomando variando el ángulo de (3.2) o (3.3) de forma que los ángulos que generan las trayectorias perturbadas varían a partir de un parámetro ϵ , $\theta_p = \theta_0 + \epsilon$ y $\alpha_p = \alpha_0 + \epsilon$, donde θ_p , θ_0 , α_p , α_0 son los ángulos perturbados e iniciales de cada uno de los arreglos como se muestra en la Figura 3.4.

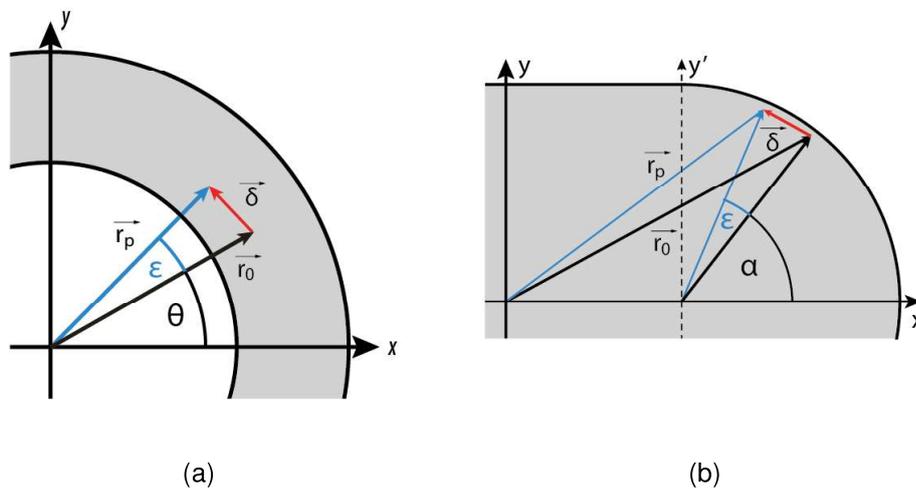


Figura 3.4: En el panel izquierdo se muestran los vectores iniciales de las partículas perturbada y sin perturbar en el anillo circular. Igualmente, en el panel derecho se puede apreciar estos vectores para el estadio de Bunimovich.

El cálculo del coeficiente de Lyapunov se toma de la regresión lineal de la gráfica $\log(|\vec{r}_{2i} - \vec{r}_{1i}|)$ vs el número de rebotes, donde este coeficiente vendría a representar el coeficiente de ajuste con respecto al número de iteraciones. Esto se muestra en el siguiente pseudo-algoritmo:

1. Se genera un θ_0 de forma aleatoria y se fija $b = (R_2 + R_1)/2$ para el anillo circular, mientras que para el estadio de Bunimovich $b = R - 1$ para asegurar que la creación de las partículas se realicen dentro del billar.
2. Se ejecuta el algoritmo creado para obtener las órbitas.
3. Se toma una cantidad de puntos N_r de los rebotes de las dos partículas.

4. Se toma la diferencia entre ambas órbitas $|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|$ para cada punto y guardamos esta información.
5. Repetimos una cantidad N_a de veces, usando posiciones iniciales diferentes.
6. Se hace un promedio de los N_a archivos de datos cuya información en cada columna es: El número de rebotes y el logaritmo de la diferencia de caminos.
7. Se realiza una regresión lineal $f(x) = \lambda * x + b$ del logaritmo natural de lo obtenido en el punto anterior para los primeros N_p datos del promedio.
8. La constante λ obtenida de la regresión lineal se guarda.

Este valor de λ obtenido del promedio de los logaritmos naturales, se toma como el exponente de Lyapunov del sistema.

3.2. Modelo cuántico

Además del estudio clásico que se realiza en el billar, se resuelve el problema cuántico para un billar cuántico en cuyo interior se coloca una red cristalina. Esto se realizará con el fin de estudiar la densidad local de estados en billares con redes cristalinas.

El software que se utilizará, Kwant, es un paquete de Python que utiliza el modelo de enlace fuerte para resolver problemas de transporte cuántico. Este paquete nos permite describir un sistema físico en función a la estructura cristalina: su forma, sus simetrías y un potencial externo. Haciendo uso del hamiltoniano discretizado del sistema 2.1 de forma simplificada. Así, para los puntos de red se establecen dos potenciales. El primero es el potencial **potencial on-site**, que se explica en el apartado 2.5, y toma el valor $E_i = 4\tau + V(i, j)$. Además se establece en los potenciales entre los enlaces de la red que se conoce como **hopping** y se escribirá como τ_l :

$$H = \sum_i E_i |i\rangle \langle i| + \sum_l \sum_{vecinos(i,j)} \tau_l (|i\rangle \langle j| + |j\rangle \langle i|) \quad (3.5)$$

donde i, j representan los puntos de red de coordenadas (x, y) y l representa los tipos de vértices que pueden existir, por simplicidad, en el caso de que todos los puntos de red sean equivalentes τ_l se redefine como τ [4].

Kwant, utiliza esta información para encontrar los vectores propios de la matriz Hamiltoniana, creando en primera instancia los puntos de red y posteriormente colocando sus valores E_i y τ_i [37]. Este paquete genera desde una posición aleatoria los puntos de red donde se ingresarán los valores del potencial de forma que se genere un grafo con todos estos. Los valores del potencial on-site ubican en los nodos del grafo que representan a los átomos del sistema y el potencial de hopping que estarán en los vértices y está relacionado a la probabilidad de transición, es decir, la probabilidad de que un electrón pase de un átomo a otro. Esta información es utilizada posteriormente para resolver el sistema a partir del algoritmo de disección anidada haciendo que Kwant sea más eficiente[37].

3.2.1. Implementación del modelo

Para definir el modelo cuántico es necesario tener la región de dispersión de forma analítica. La base de la estructura cristalina y los vectores de la red de Bravais utilizada. El siguiente pseudo-algoritmo es, a grandes rasgos, la base para crear un sistema en el paquete Kwant:

1. Establecer la base de la red y los vectores de red, es decir, los vectores necesarios para definir la estructura cristalina.
2. Establecer la forma de la región de dispersión, utilizando una función analítica de la región o unión de estas.

Para establecer la región de dispersión de los billares que se estudiarán se utiliza el primer paso del pseudo algoritmo que se usa en la generación de las trayectorias dentro de los billares clásicos.

3. Aplicación de potenciales ***on-site*** y ***hopping*** en la red.
4. Creación de contactos, utilizando una función analítica de estos

En este paso se establece el tamaño de los contactos, y el tipo de red, generalmente el mismo que se usa para la región de dispersión. Estos contactos se pueden apreciar en la Figura 3.5.

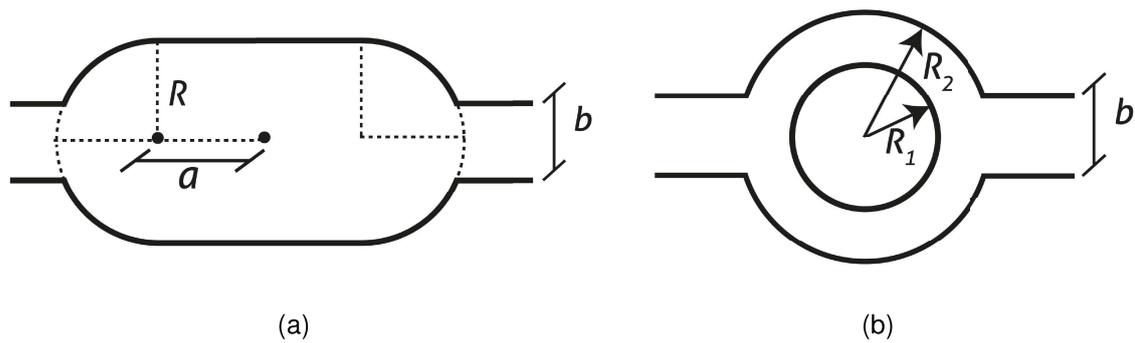


Figura 3.5: Esquema de los billares abiertos estudiados: a) Estadio de Bunimovich con parámetros a , R y b , que representan a la mitad del ancho de la zona plana, el radio de los semicírculos y el tamaño de los contactos respectivamente, b) Anillo circular con parámetros R_1 y R_2 , siendo estos los radios interno y externo de las circunferencias que conforman el anillo.

5. Aplicación de potenciales *on-site* y *hopping* en los contactos.
6. Unimos los contactos al sistema.
7. Creación del sistema.

3.2.2. Cálculo de la densidad de estados locales y comparación entre las dos redes

Como la LDOS da un valor de la densidad de probabilidad en el espacio de configuración del sistema se puede estudiar las estructuras geométricas que forma esta sobre las regiones de dispersión. Para calcular estas densidades de estados locales se puede, igualmente, utilizar una función de Kwant:

```
|| ldos = kwant.ldos(sys, energy)
```

El análisis de las estructuras formadas por las cicatrices cuánticas se realizó de forma cualitativa a partir de la observación y la comparación directa entre las diferentes estructuras formadas en los billares como la diferencia entre las cicatrices cuánticas de los dos billares.

Capítulo 4

Resultados obtenidos

En este capítulo se muestran los resultados clásicos (Sección 4.1 y 4.2) y cuánticos (Sección 4.3) de las simulaciones, tanto para el anillo circular como para billar de Bunimovich.

El billar de Bunimovich, como se observó en el capítulo 2, consta de dos semicírculos de radio R y una separación entre estas a . Para la simulación se tomó $R = 10$ y $a = R$ en unidades arbitrarias. La razón por la que se escogió esta separación es porque el comportamiento caótico del billar de Bunimovich comienza cuando la distancia de separación entre las semicircunferencias es distinta de cero [10, 29]. Para el caso del anillo circular, que consta de dos círculos concéntricos, se tomará el radio interno $R_1 = 10$ y el radio exterior $R_2 = 2 * R_1$ en unidades arbitrarias (Figura 2.10). De esta forma, la cantidad órbitas periódicas que se pueden obtener es lo suficientemente amplia.

4.1. Exponentes de Lyapunov en billares

Como se explicó en la sección 2.2.1 la separación exponencial de las trayectorias del sistema son un indicio de la presencia de caos. En las simulaciones de las trayectorias del sistema, se utilizan diferentes posiciones iniciales y pequeñas variaciones a estas para determinar los coeficientes de Lyapunov de ambos billares.

Para definir las posiciones iniciales de los sistemas se tomó un $\epsilon = 10^{-6}$ y los ángulos iniciales θ_0 y α_0 , para el anillo circular y el estadio de Bunimovich respectivamente, se toman de forma aleatoria usando el generador de números randómicos de fortran. Para la velocidad inicial se tomó un ángulo $\phi = 30$ para ambos billares.

El número de rebotes máximo que se tomó $N_r = 500$ para poder analizar la desviación entre las trayectorias en un recorrido amplio. Además, con el fin de tener un número de puntos considerable para realizar la regresión lineal, se tomó $N_a = 200$, es decir, se realizó 200 simulaciones, para obtener un promedio de estas. Con estas condiciones iniciales y a partir del algoritmo de la Sección 3.1.2 se obtuvieron las gráficas de la Figura 4.1 del logaritmo del valor absoluto de la diferencia de trayectorias donde se puede observar el comportamiento que tiene la separación de las trayectorias para ambos billares.

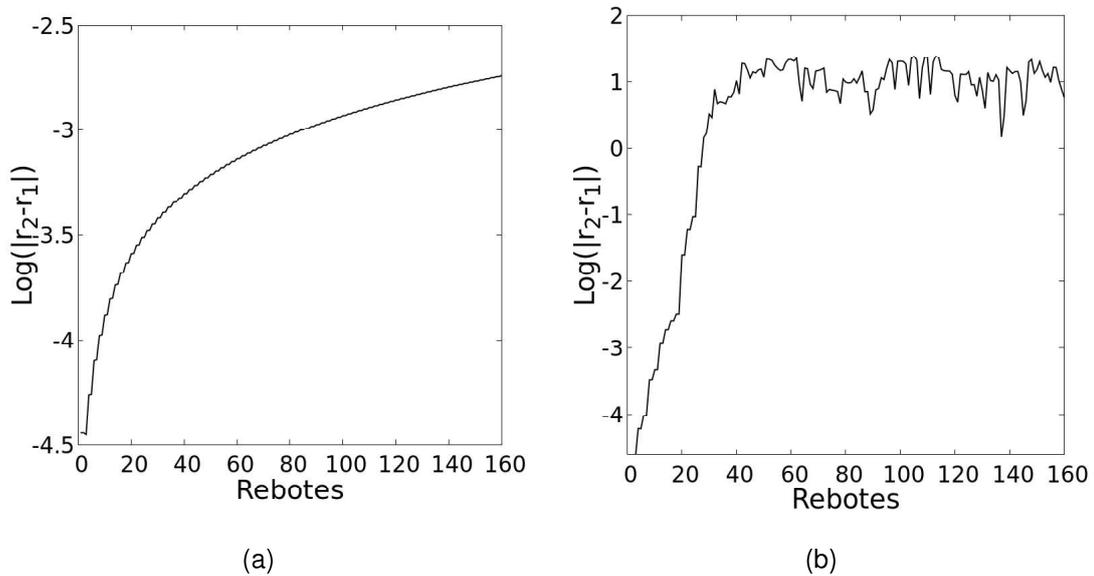


Figura 4.1: En el panel a) se muestra el logaritmo de la diferencia de caminos para el anillo. En el panel b) se presenta el logaritmo de la diferencia de caminos para el estadio de Bunimovich. Ambos muestran 160 rebotes.

Se encontró que el coeficiente de Lyapunov del anillo a partir de las regresiones lineal es $\lambda_a \approx 2,2499 \times 10^{-2}$ y para el estadio de Bunimovich el cálculo del exponente de Lyapunov se tomó únicamente hasta 40 rebotes debido a que, como se observa en la Figura 4.1(b), el comportamiento lineal del logaritmo del valor absoluto de la diferencia de trayectorias termina en ese punto y el valor obtenido es $\lambda_e \approx 0,163$. Debido a la simetría del anillo circular y que este posee un borde convergente la gráfica del logaritmo de la separación entre trayectorias tiene una pendiente menos pronunciada que en el estadio (figura 4.1(a)), ya que en este la simetría circular se pierde y, además, este billar tiene el mecanismo de desenfoque 2.3 debido a que sus dos semicircunferencias se encuentran separadas una distancia fija, este mecanismo en el estadio amplifica la separación entre trayectoria en cada colisión que se tenga en las semicircunferencias. De esta forma se obtuvo una pendiente

más pronunciada en la gráfica (figura 4.1(b)) que en la gráfica 4.1(a).

4.2. Órbitas periódicas inestables

Para barrer todo el espectro de trayectorias posibles se variaron las condiciones iniciales. En el caso del anillo circular lo único que se varió fue la velocidad debido a la simetría circular que posee este sistema. Para el billar de estadio de Bunimovich se varió tanto la velocidad como las posiciones iniciales de las partículas. Las condiciones iniciales para obtener las órbitas periódicas se tomaron sobre los bordes de los billares. En el estadio se varió la posición de la partícula al rededor de uno de los cuadrantes y para cada una de estas posiciones se varió el ángulo de la velocidad inicial para así obtener el mayor número de trayectorias posibles.

Se tomó, para la posición inicial en el caso del anillo circular el ángulo $\theta_0 = 180$, y la distancia $b = R_2$. En este caso el ángulo para la velocidad inicial se tomó $\phi = 0$. Para el caso del estadio de Bunimovich se tomó como posición inicial el ángulo $\alpha_0 = 0$ y $b = R$. Se varió el ángulo de la velocidad de las partículas en ambos billares de forma que $\phi_{n+1} = \phi_n + \pi/360$ hasta $\phi_{max} = \pi/2$ para obtener una mayor cantidad de órbitas. Además, para el estadio de Bunimovich se varió el ángulo α de la misma forma en que se varió el ángulo para la velocidad. Para la región plana del estadio de Bunimovich se tomó $\theta = \pi/2$ y $b = R$ y se varió a tal que $a_{n+1} = a_n + 10^{-2}$.

Para el anillo circular se observa un régimen similar al presentado en el círculo, es decir, el comportamiento de las partículas en el anillo siguen trayectorias totalmente determinadas por la ley de recurrencia 2.11 (Capítulo 2) (Figura 4.2(d)). Este comportamiento se tiene debido a que en el fondo el anillo es un círculo al cuál se le ha retirado una sección interior, por lo que el comportamiento similar al círculo se tendrá siempre y cuando la línea de acción de la velocidad inicial sea tangente al círculo interior. Los parámetros iniciales que cumplen esto se obtienen mientras el ángulo de disparo ϕ sea mayor que $0,1475\pi$, es decir, que no topen el círculo interior, y la razón Ψ/π sea un número racional, donde Ψ es el ángulo que forma el vector velocidad con la tangente en el punto choque con el círculo externo, las trayectorias que se forman son periódicas (figuras 4.2(a) y 4.2(b)), si Ψ/π es irracional las trayectorias no son periódicas, esto se debe a que el comportamiento del sistema es similar al del billar circular estudiado en el Capítulo 2. Existen, también, órbitas periódicas formadas por rebotes entre el círculo interior y el exterior (Figura 4.2(c)). De esto se puede extraer que las órbitas periódicas inestables de este sis-

tema toman la forma de las Figuras 4.2(a), 4.2(b) y 4.2(c), debido a que estas son órbitas periódicas y el sistema es caótico por lo obtenido en la sección anterior.

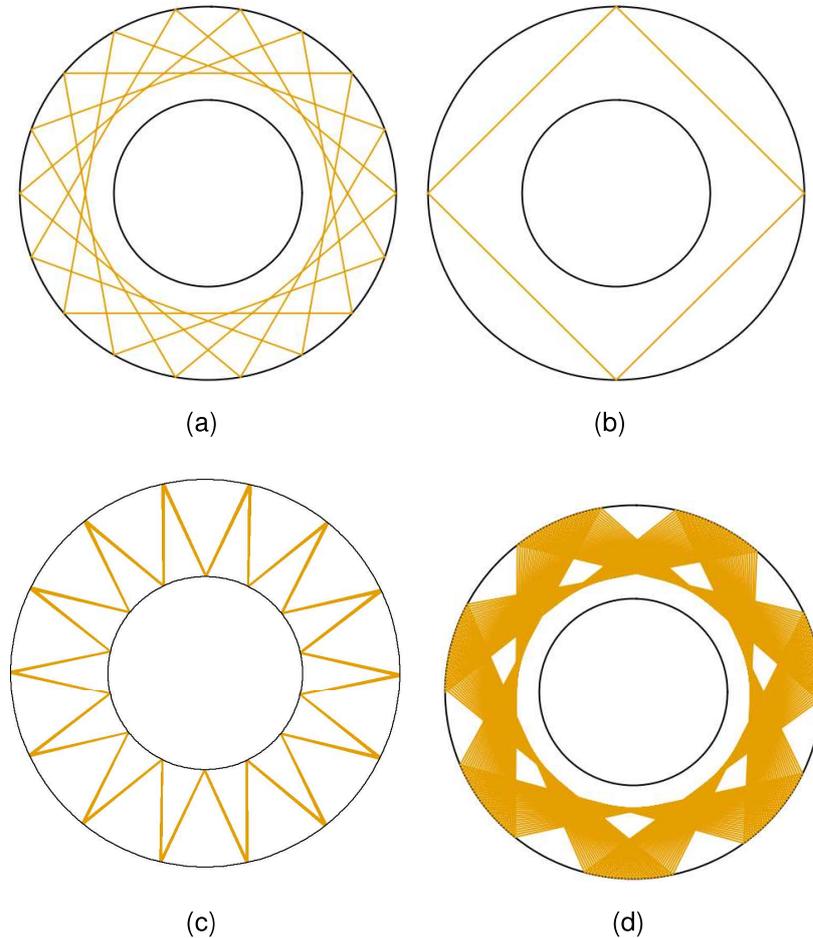


Figura 4.2: Los paneles Los paneles a, b) y c) muestran órbitas periódicas inestables para los ángulos $\Psi_a = 5\pi/18$, $\Psi_b = \pi/4$ y $\Psi_c = 13\pi/36$ respectivamente, mientras que el panel d) presenta una órbita caótica con ángulo $\Psi_d = 0,28\pi$.

En el caso del billar de estadio de Bunimovich, las órbitas periódicas no siguen una regla con respecto al ángulo, como se observa para el anillo, debido a la ruptura de la simetría circular generado al separar las dos semicircunferencias. Igualmente se observan órbitas periódicas (Figura 4.3(a)) y caóticas (Figura 4.3(b)). En el apéndice B se pueden apreciar una mayor cantidad de órbitas para ambos billares. De igual manera, las órbitas periódicas presentes en este billar son inestables por su carácter caótico.

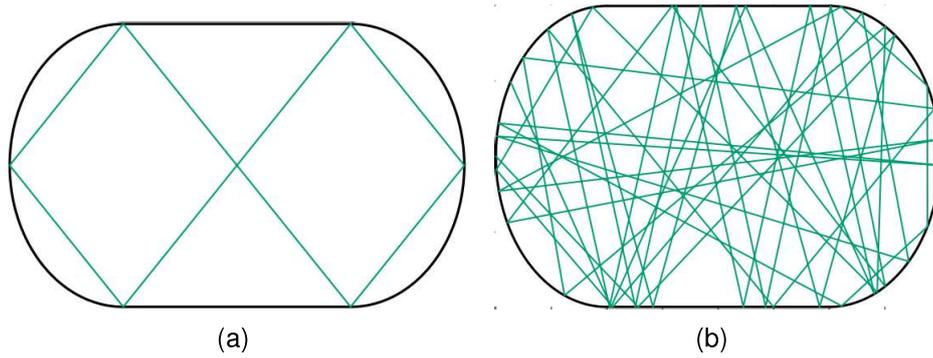


Figura 4.3: En el panel a) se muestra órbita periódica para una posición inicial $(-R - a, 0)$ y un ángulo $\Psi = \pi/4$, b) órbita caótica generada al variar el ángulo de a).

4.3. Cicatrices cuánticas

Para la sección pertinente al estudio de las estructuras mesoscópicas, se generaron billares abiertos utilizando las mismas geometrías utilizadas para el apartado clásico. Además, en las aperturas se utilizaron contactos con el mismo tipo de red y entre estos el potencial se tomó $V(x, y)$ es distinto de cero y constante.

Se realizaron las simulaciones como se describe en el capítulo 3 en la sección 3.2. Los parámetros usados para generar el billar de Bunimovich tanto para la red cuadrada y hexagonal son $R = a = 50[u.a.]$, donde R es el radio de los semicírculos y a la mitad del lado recto del estadio. En la Figura 3.5(a) se observa un ejemplo de billar abierto con el ancho de los contactos $b = 2a/3$. Por otro lado, para el anillo circular se tomó $R_1 = 80$ y $R_2 = 2R_1$, en la figura 3.5(b) se tiene un bosquejo para la forma de anillo circular con ancho de contactos $b = 2R_2/3$. Se tomaron estos parámetros para estar acorde a lo planteado clásicamente en las secciones anteriores de este capítulo y además, estar acorde a las simulaciones previas a este estudio. Además, la temperatura de la simulación es de $0[k]$. Esto se encuentra acorde a los experimentos realizados sobre anillos cuánticos, los cuales se encuentran a temperatura de helio líquido [5].

Se evaluaron 6 voltajes diferentes y las LDOS se calcularon para 200 energías distintas entre $E/\tau = 0,0$ hasta $E/\tau = -4,0$. Se encontró que la influencia del voltaje sobre la estructura genera un desplazamiento de las LDOS de forma que el gráfico de estas se corre un valor igual al potencial en la escala energética. En la gráfica 4.4 se muestran tres LDOS iguales del anillo circular para tres potenciales distintos. Esto se comprobó utilizando un algoritmo en python que compara los da-

tos para los tres potenciales en todo el espectro de energía determinando así que estos son iguales para valores de energía $E_{nuevo}/\tau = (E_0 + V_n)/\tau$ donde E_0 es la energía de la red cuando $n = 0$ para el potencial. De igual forma sucede para las demás geometrías. Gracias a este resultado es posible fijar un voltaje V_n y estudiar las LDOS sin tener que variar el potencial entre los contactos. El valor de potencial que se tomó, para simplificar la simulación, es de cero.

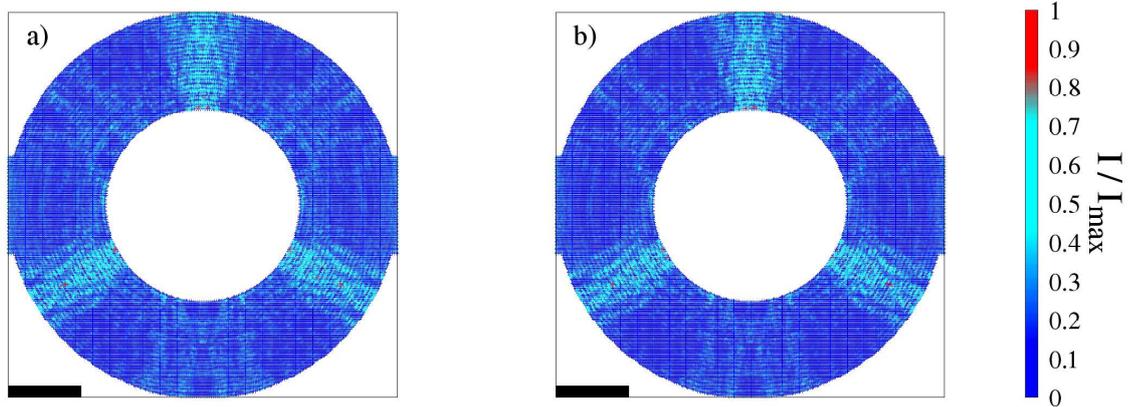


Figura 4.4: LDOS para: a) energía $E/\tau = -1,9692$ para $V_1/\tau = -0,4$; b) energía $E/\tau = -3,5692$ para $V_5/\tau = -2$. La barra de escala es de 60 [u.a.].

Posteriormente, se partió el intervalo de energía $0 < -E/\tau < 4,0$ en 9 partes iguales y estas en mil energías cada una, es decir, se estudió 9 mil valores de energía a partir de los cuales se calcularon las LDOS para cada energía. De esto se obtuvieron dos tipos de LDOS aquellas que siguen una órbita periódica, es decir, que presentan una cicatriz cuántica (Figuras 4.5 a) y aquellas que no (Figuras 4.5 b). En el apéndice B.2.1 se puede apreciar la forma de los estados cicatrizados y sin cicatrizar que tienen las diferentes estructuras.

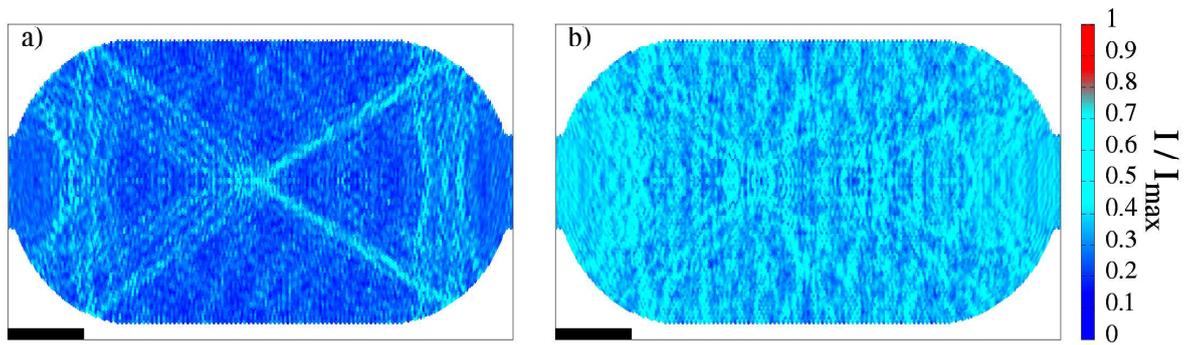


Figura 4.5: LDOS para el estadio de Bunimovich con red hexagonal: a) cicatriz cuántica a $E/\tau = -2,6544$ b) no se observa cicatriz cuántica a $E/\tau = -2,022$. La barra de escala es de 30 [u.a.].

Cada una de estas estructuras muestra diferentes tipos de cicatrices cuánticas. Para los anillos circulares se puede diferenciar entre cicatrices con formas geométricas cerradas y aquellas formadas por rebotes entre ambos bordes radiales y no radiales. Para los estadios se pueden señalar dos tipos de cicatrices: aquellas formadas por dos o más líneas paralelas consecutivas y las formadas por una sola línea no consecutiva que cruzan todo el estadio. La figura 4.6 (a) y (b) exhiben cicatrices cuánticas radiales para el anillo circular para la red hexagonal y cuadrada respectivamente. Se puede observar que para la red hexagonal, el número de cicatrices cuánticas es distinto en la parte superior (flechas rojas) e inferior del anillo (flechas verdes). Asimismo, La figura 4.7 (a) y (b), para el estadio de Bunimovich con red hexagonal y cuadrada respectivamente, muestra cicatrices cuánticas formadas por líneas continuas. Los demás tipos de cicatrices cuánticas para ambas estructuras se pueden observar en los apéndices B.2.2-B.2.5.

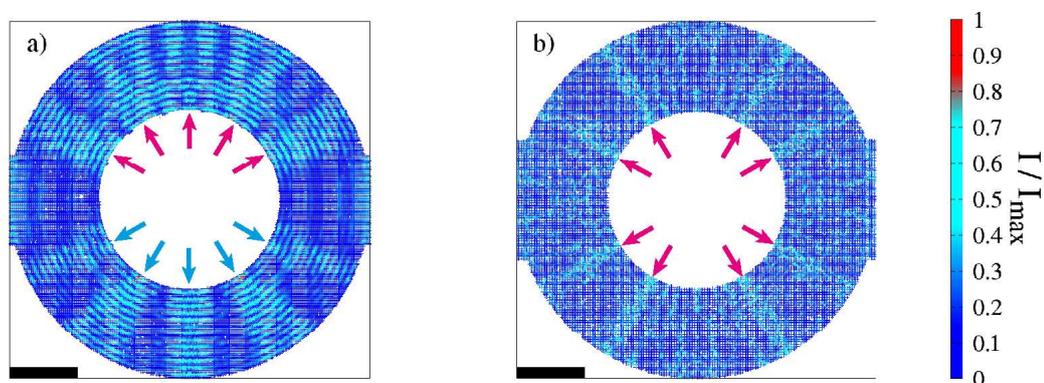


Figura 4.6: Ldos para el anillo circular con red: a) hexagonal en $E/\tau = -1,5908$, b) cuadrada en $E/\tau = -1,0452$. La barra de escala es de 60 [u.a.].

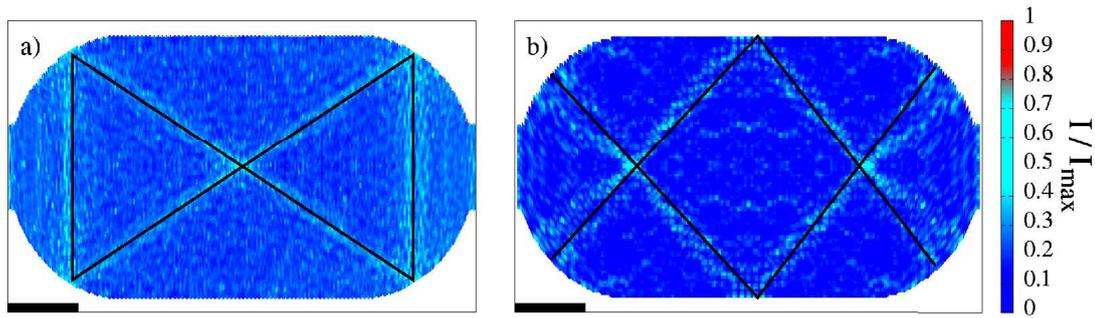


Figura 4.7: Ldos para el estado de Bunimovich con red: a) hexagonal en $E/\tau = -2,8292$, b) cuadrada en $E/\tau = -1,862$. La barra de escala es de 30 [u.a.].

Debido a que las redes utilizadas presentan simetrías, las cicatrices cuánticas que se forman son diferentes en las dos redes. Como ya se explicó en el capítulo 2 la red cuadrada tiene una simetría sobre los ejes formados por sus vectores directores, que es análogo a tener simetría entre arriba y abajo (eje X) e izquierda y derecha (eje Y). La red hexagonal solo tiene simetría sobre la bisectriz del ángulo que forman sus vectores directores, para visualizarlo de mejor manera podemos hacer coincidir esta con el eje X o el eje Y. Las cicatrices cuánticas formadas sobre ambas redes tienden a llevar la simetría tanto de la figura geométrica con la que formamos la región de dispersión y la red. La interacción entre estos dos tipos de simetrías produce las asimetrías o simetrías observadas en las cicatrices cuánticas.

Para los billares de estadio de Bunimovich y anillo circular para la red cuadrada se puede observar que las cicatrices cuánticas y los estados no cicatrizados han heredado la simetría correspondiente a dicha red (Figuras 2.13(b)). Sin embargo, para las redes hexagonales, se ha observado que algunas de las LDOS que presentan cicatrices cuánticas no tienen la simetría heredada de la red (Figura 2.13(b)).

Al rotar la orientación de la red cristalina, los ejes de simetría de la red cristalina también cambia. Esta rotación también genera una variación en la orientación de las simetrías presentes en las cicatrices cuánticas. Esto se puede observar en la red hexagonal, la cual, al contar de un solo eje de simetría. Al rotarla con respecto al eje formado por los contactos de los billares, genera que las cicatrices cuánticas roten siguiendo la simetría de la red como se puede observar en el anillo circular (Figura 4.8). Igualmente, esta asimetría se puede observar en el estadio de Bunimovich con red hexagonal (Figura 4.9).

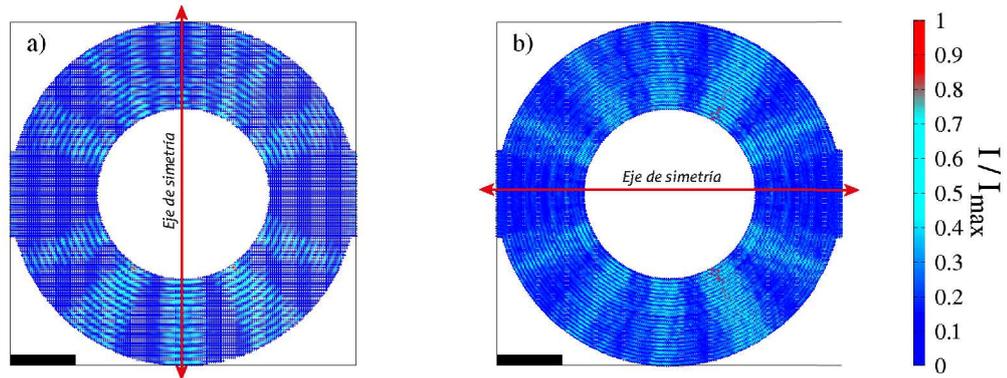


Figura 4.8: Anillo circular con red cristalina hexagonal el panel a) muestra con rojo la orientación del eje de simetría de la red perpendicular a la orientación del eje formado por los contactos, mientras que en b) la orientación del eje de simetría de la red es paralela. La barra de escala es de 60 [u.a.].

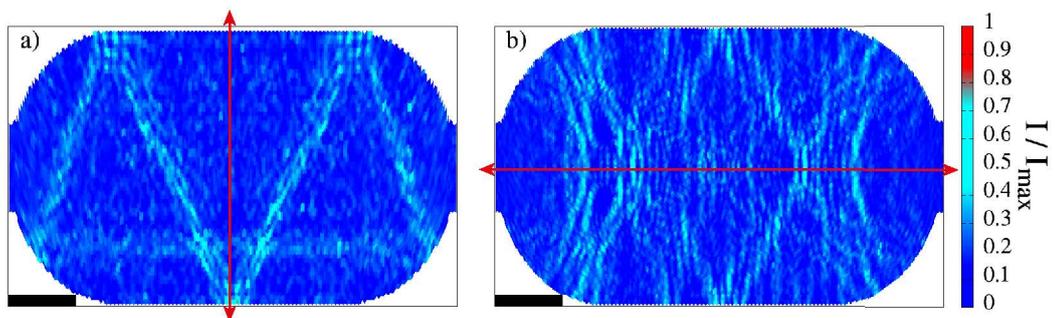


Figura 4.9: Estadio de Bunimovich con red cristalina hexagonal el panel a) muestra con rojo la orientación del eje de simetría de la red perpendicular a la orientación del eje formado por los contactos, mientras que en b) la orientación del eje de simetría de la red es paralela. La barra de escala es de 30 [u.a.].

Capítulo 5

Conclusiones

En este trabajo se ha estudiado el estadio de Bunimovich y el anillo circular de forma clásica y cuántica. Con el fin de determinar que los sistemas son caóticos, se calculó los exponentes de Lyapunov de ambos billares. Asimismo, se identificó los tipos de órbitas periódicas que se forman en estos. También se estudió el comportamiento de la densidad local de estados en estructuras cuya región de dispersión tiene la forma de estos billares y, además, están formadas por una red cristalina cuadrada o hexagonal. Esto permitió comparar el comportamiento de las cicatrices cuánticas para estos dos sistemas. Se observó que las LDOS tienen diferencias en su forma y simetría dependiendo de las propiedades geométricas de la región de dispersión que define la estructura y de la red cristalina presente en los sistemas así como Cabosart et al. [2017] encontraron en su estudio. Además, se estudió la dependencia de las LDOS del voltaje aplicado a los contactos del billar.

Desde el punto de vista clásico, para el estadio de Bunimovich y el anillo circular, se implementó un algoritmo que calcula los exponentes de Lyapunov. El valor de estos exponentes para los sistemas mencionados es del orden de 10^{-2} para el anillo circular, y de 10^{-1} para el estadio de Bunimovich, teniendo este último una mayor sensibilidad a las condiciones iniciales. Esto determinó que 1) ambos sistemas son caóticos debido a que sus exponentes son distintos de cero y positivos, 2) que son billares que cumplen con el mecanismo de Bunimovich, o simplemente contienen secciones cóncavas que tienden a generar una divergencia en las trayectorias cercanas siendo esto un indicio de la presencia del caos en estos sistemas.

El estudio de la dinámica de las partículas usando el algoritmo propuesto en la Sección 3.1. Se identificó los tipos de órbitas formadas, además, que son inestables por su carácter caótico.

Las órbitas encontradas en el anillo circular son de tres tipos: 1) aquellas que forman figuras geométricas cuyos lados no se intersecan, 2) las formadas por figuras geométricas cuyos lados se intersecan y 3) aquellas formadas entre el círculo interior y el círculo exterior incluyendo aquellas que son radiales resultados que se pueden observar en los paneles a) y b) de la Figura 4.2. Igualmente, para el billar con forma de estadio de Bunimovich, se encontró tres tipos de órbitas: 1) aquellas que cruzan verticalmente el estadio en la zona plana del billar, 2) aquellas que se forman por la unión consecutiva de líneas (Figuras 4.3(a)) que se intersecan y 3) aquellas que no se intersecan. Debido a la presencia de caos en estos sistemas y a la existencia de órbitas periódicas inestables, se concluye que existen cicatrices cuánticas, como las halladas por Heller para el pozo de potencial con forma de estadio de Bunimovich, en el pozo de potencial con forma anillo circular[8, 15]. Esto, además, se puede apoyar por hecho de que Cabosart et al. [2017] encontraron cicatrices cuánticas en anillos circulares formados por grafeno.

En el estudio cuántico de estos sistemas presentado en la Sección 2.4.2, se encontró que las funciones de densidad de estados locales para las cuatro estructuras (estadio y anillo con las dos redes) sufren un corrimiento en el espectro de energías al aplicarse una diferencia potencial en sus contactos. Esto se da de forma que la energía en la que se localiza una cicatriz cuántica al variar el potencial se corre una distancia igual a la diferencia de potencial como se puede observar en la Figura 4.4 donde se muestran dos anillos cuánticos en el mismo estado para diferentes energías, el primero con un potencial igual a $V_1/\tau = -0,4$ y el segundo $V_1/\tau = -2$ con $\tau = 0,25$. Este corrimiento en las LDOS sobre las energías sirvió de base para estudiar el comportamiento de los billares sin considerar un potencial en los contactos y de esta forma simplificar el problema.

Se observó, también, en la Sección 2.4.2 que las estructuras presentan diferentes tipos de cicatrices cuánticas. Para el anillo circular se obtuvieron formas 1) geométricas cerradas y 2) radiales, como las presentadas en el artículo [5]. En el caso del estadio de Bunimovich se aprecian dos tipos de cicatrices cuánticas, 1) aquellas que cortan verticalmente al estadio dentro de la región plana de este y se presentan varias en una misma energía, y 2) aquellas que se forman por la unión de varias líneas. De igual manera, para los mismos billar cambiando la estructura cristalina se obtienen los mismos tipos de cicatrices cuánticas anteriormente presentados.

Con respecto a la forma de las cicatrices cuánticas se puede diferenciar claramente entre la red cuadrada y hexagonal. Esto se debe a la forma en que la sime-

tría de los billares es afectada por la simetría de la red; especialmente en aquellos donde la red hexagonal está presente. Los billares construidos con la red cuadrada presentan simetría a lo largo de los ejes formados por los vectores de la red (Capítulo 2 Figura 2.13(a)). El panel (b) de la Figura 2.13 muestra que los billares formados por la red hexagonal solo tienen simetría en uno de los ejes. Las LDOS obtenidas sobre estas redes muestran claramente esto, especialmente en los anillos circulares donde las LDOS radiales experimentan una asimetría no solo en su posición si no también en su intensidad (Apéndice B Figuras B.16 y B.18). Además, la misma red al ser rotada muestra diferencias debido a esta simetría (Capítulo 4 Figuras 4.8 y 4.9), esto muestra que la densidad de estados de energía sobre las estructuras siguen la simetría de la red en los niveles de energía donde tenemos cicatrices cuánticas. Lo cual se traduce en una mayor conductancia a lo largo de estas.

Como trabajo posterior se debería estudiar el comportamiento de los portadores de carga sobre las cicatrices cuánticas. También, es necesario crear una función que compare ambas redes cristalinas para las diferentes estructuras. Además, se debería comparar entre orientaciones distintas de la red de forma numérica. Esta información serviría para establecer las diferencias entre las redes y la orientación de esta con respecto al eje formado por los contactos de los billares. Otra propuesta sería cambiar la alineación de los contactos que tienen los sistemas, lo que permitiría estudiar el comportamiento de las cicatrices cuánticas si el eje de los contactos no está alineado con respecto a ningún eje de simetría.

Apéndice A

Código

El presente anexo muestra el código desarrollado para esta tesis. La sección A.1 muestra el código utilizado para encontrar los coeficientes de Lyapunov del modelo clásico para el estadio de Bunimovich y el anillo circular. En la sección A.2 se presenta el código utilizado para calcular las órbitas en ambos billares. En la sección A.3 se presenta el código de Python usando el paquete Kwant para la obtención de las densidades locales de estados para ambos billares.

A.1. Coeficientes de Lyapunov

A.1.1. Estadio

```
PROGRAM Estadiolyap

IMPLICIT NONE

REAL*8, PARAMETER::R=10.d0, a=1.d0*R, v00=1.d0, PI
    =3.1415926535897932384626433832795028841971d0, dphi=0.1d-5, dtta=
    PI/45.d0
REAL*8::dt, phi, tta, tta0, phi0
INTEGER::Nmax=10**8
INTEGER, PARAMETER::ZMAX=500
REAL*8, DIMENSION(ZMAX*3/5)::xx, yy, nn
REAL*8, DIMENSION(2)::x0, v0
REAL*8, DIMENSION(2,2)::x, v
REAL*8, DIMENSION(2)::e
REAL*8::m, an1, an2
```

```

REAL*8::sx,sy,sxx,syy,sxy,s,aa,bb,cov,rpear
REAL*8,DIMENSION(2)::x1,x2,v1,v2
CHARACTER(LEN=12)::charI,charni
INTEGER::i,f,n,z,ni,nimax,clock,mm
INTEGER,DIMENSION(2)::k
CALL SYSTEM_CLOCK(clock)
CALL RANDOM_SEED(clock)

x=0
v=0
e=0.d0
tta0=PI/6.d0
phi=0.d0
tta=-tta0
dt=1.d-6
Nmax=10**9
f=1
Nimax=200

DO ni=35,89
  CALL RANDOM_NUMBER(phi)
  phi=phi*2*PI
  DO n=1,2
    WRITE(charI,'(I0)')n
    OPEN(n,FILE='x'//trim(chari))
    x(:,n)=(/-(R-1)*dcos(phi)-a,(R-1)*dsin(phi)/)
    v(:,n)=(/v00*dcos(tta),v00*dsin(tta)/)
    k=0
    z=0
    WRITE(n,*)k,x(:,n),datan(x(2,n)/x(1,n)),0
    phi=phi+dphi
  ENDDO

DO WHILE(k(1).LE.2.OR.k(2).LE.2)

DO n=1,2
  x(:,n)=x(:,n)+v(:,n)*dt
ENDDO

DO n=1,2
  IF (abs(x(1,n))<=a) THEN
    IF (abs(x(2,n))>R) THEN
      m=v(2,n)/v(1,n)
      x(1,n)=(sign(R,x(2,n))-x(2,n))/m+x(1,n)
      e=(/0.d0,-1.D0*sign(1.d0,x(2,n)/)

```

```

v(:,n)=v(:,n)-2*dot_product(v(:,n),e)*e
k(n)=k(n)+1
IF(k(1).EQ.1.AND.k(2).EQ.1) THEN
    EXIT
ELSE
    z=z+1
    DO mm=1,2
        WRITE(mm,*)k,x(:,mm),datan(x(2,mm)/x(1,mm)),z
    ENDDO
ENDIF
ELSE
    k(n)=0
ENDIF
ELSE
    IF ((x(1,n)-sign(a,x(1,n)))**2+x(2,n)**2)>R**2) THEN

        e=(-1.DO*(x(1,n)-sign(a,x(1,n))),-1.DO*x(2,n)/)
        e=e/sqrt(sum(e**2))
        v(:,n)=v(:,n)-2*dot_product(v(:,n),e)*e
        k(n)=k(n)+1
        IF(k(1).EQ.1.AND.k(2).EQ.1) THEN
            EXIT
        ELSE
            z=z+1
            DO mm=1,2
                WRITE(mm,*)k,x(:,mm),datan(x(2,mm)/x(1,mm)),z
            ENDDO
        ENDIF
    ELSE
        k(n)=0
    ENDIF
ENDIF

ENDDO
IF(Z.GE.ZMAX) THEN
    EXIT
ENDIF
ENDDO

DO n=1,2
    CLOSE(n)
ENDDO

```

```

m=0.d0
OPEN(1,FILE="x1")

OPEN(2,FILE="x2")
WRITE(charnI,'(I0)')ni
OPEN(3,FILE=trim(charni))
DO i=1,zmax
  READ(1,*)k,x1,an1
  READ(2,*)k,x2,an2
  m=m+log(abs(x2(1)-x1(1))**2+abs(x2(2)-x1(2))**2)/2
  WRITE(3,*)i,log(abs((x2(1)-x1(1))**2+(x2(2)-x1(2))**2))/2
ENDDO
CLOSE(1)
CLOSE(2)
CLOSE(3)

enddo

END PROGRAM Estadiolyap

```

A.1.2. Anillo circular

```

PROGRAM Anillo_lyap

IMPLICIT NONE

REAL*8,PARAMETER::R1=10.d0,R2=2.d0*R1,v00=1.d0,PI
  =3.1415926535897932384626433832795028841971d0,dphi=PI/45.d0,dtta
  =PI/45.d0
REAL*8::dt,phi,tta,tta0,phi0
INTEGER::Nmax=10**8
INTEGER,PARAMETER::ZMAX=500
REAL*8,DIMENSION(ZMAX*3/5)::xx,yy,nn
REAL*8,DIMENSION(2)::x0,v0
REAL*8,DIMENSION(2,2)::x,v
REAL*8,DIMENSION(2)::e
REAL*8::an1,an2
REAL*8::sx,sy,sxx,syy,sxy,s,aa,bb,cov,rpear
REAL*8,DIMENSION(2)::x1,x2,v1,v2
CHARACTER(LEN=12)::charI
INTEGER::i,f,n,z,m,ni,nimax,clock
INTEGER,DIMENSION(2)::k
CALL SYSTEM_CLOCK(clock)
CALL RANDOM_SEED(clock)

```

```

x=0
v=0
e=0.d0
tta0=PI/6.d0
phi=0.d0
tta=tta0
dt=1.d-6
Nmax=10**9
Nimax=200
f=1
k=0

DO ni=1,Nimax
CALL RANDOM_NUMBER(phi)
phi=phi*PI/4.d0
DO n=1,2
WRITE(charI,'(I0)')n
OPEN(n, FILE='x'//trim(chari))
x(:,n)=(/-R2*dcos(phi),R2*dsin(phi)/)
v(:,n)=(/v00*dcos(tta),v00*dsin(tta)/)
k=0
WRITE(n,*)k,x(:,n),datan(x(2,n)/x(1,n)),0
phi=phi+dphi
ENDDO
z=0
k=0
DO WHILE(k(1).LE.2.OR.k(2).LE.2)

DO n=1,2
x(:,n)=x(:,n)+v(:,n)*dt
ENDDO
DO n=1,2

IF ((x(1,n)**2+x(2,n)**2)<R1**2) THEN

e=(/x(1,n),x(2,n)/)
e=e/sqrt(sum(e**2))
v(:,n)=v(:,n)-2*dot_product(v(:,n),e)*e
k(n)=k(n)+1
IF(k(1).EQ.1.AND.k(2).EQ.1) THEN
EXIT
ELSE
z=z+1

```

```

        DO m=1,2
            WRITE(m,*)k,x(:,m),datan(x(2,m)/x(1,m)),z
        ENDDO
    ENDIF

ELSE IF ((x(1,n)**2+x(2,n)**2)>R2**2) THEN

    e=(-1.D0*x(1,n),-1.D0*x(2,n)/)
    e=e/sqrt(sum(e**2))
    v(:,n)=v(:,n)-2*dot_product(v(:,n),e)*e
    k(n)=k(n)+1
    IF(k(1).EQ.1.AND.k(2).EQ.1) THEN
        EXIT
    ELSE
        z=z+1
        DO m=1,2
            WRITE(m,*)k,x(:,m),datan(x(2,n)/x(1,n))
        ENDDO
    ENDIF

ELSE

    k(n)=0

ENDIF

ENDDO
    IF(z.GE.Zmax) THEN
        exit
    endif

ENDDO
DO n=1,2
    CLOSE(n)
ENDDO

m=0.d0
OPEN(1,FILE="x1")

OPEN(2,FILE="x2")

OPEN(3,FILE="STAT")
DO i=1,zmax

```

```

READ(1,*)k,x1,an1
READ(2,*)k,x2,an2
m=m+log(abs(x2(1)-x1(1))**2+abs(x2(2)-x1(2))**2)/2
WRITE(3,*)i,log(abs(x2(1)-x1(1))**2+abs(x2(2)-x1(2))**2)/2
ENDDO
CLOSE(1)
CLOSE(2)
CLOSE(3)

xx=0.d0
yy=0.d0
nn=0.d0
sx=0.d0
sy=0.d0
sxx=0.d0
syy=0.d0
sxy=0.d0
s=0.d0

OPEN(3,FILE="STAT")

DO i=1,zmax/5
  READ(3,*)xx(i),yy(i)
ENDDO

DO i=1,zmax*3/5
  READ(3,*)xx(i),yy(i)
ENDDO

CLOSE(3)

DO i=1,zmax*2/5
  s=s+1.d0
  sx=sx+xx(i)
  sy=sy+yy(i)
  sxx=sxx+xx(i)*xx(i)
  sxy=sxy+yy(i)*xx(i)
ENDDO

aa=(sxx*sy-sx*sxy)/(s*sxx-sx*sx)
bb=(s*sxy-sx*sy)/(s*sxx-sx*sx)
cov=-sx/(s*sxx-sx*sx)
rpear=(sxy-sx*sy/(zmax*2/5))/((zmax*2/5-1)*sx*sy)

```

```

OPEN(4, FILE="Lineal")

DO m=1, ni
  READ(4, *) xx(i), yy(i)
ENDDO

  WRITE(4, *) aa, bb

CLOSE(4)
Enddo
END PROGRAM Anillo_lyap

```

A.1.3. Regresión lineal

```

PROGRAM stat
IMPLICIT NONE
  INTEGER, PARAMETER :: Nd=500, Na=200
  REAL*8, DIMENSION(Nd, Na) :: x
  REAL*8, DIMENSION(Nd) :: pro
  REAL*8, DIMENSION(Nd) :: t, sig
  INTEGER :: i, j, k
  REAL*8 :: aa, bb, rpear, cov, sx, sy, sxx, syy, sxy, s, rss
  CHARACTER(LEN=12) :: charna
  pro=0.d0
  DO i=1, Na
    WRITE(charna, '(IO)') na
    OPEN(1, FILE=trim(charna))
      DO j=1, nd
        READ(1, *) t(j), x(j, i)
      ENDDO
    CLOSE(1)
  ENDDO

  DO i=1, Na
    DO j=1, Nd
      pro(j)=pro(j)+x(j, i)
    ENDDO
  ENDDO
  pro=pro/Nd
  OPEN(1, FILE="PROM.DAT")

  DO j=1, Nd
    WRITE(1, *) j, pro(j)
  ENDDO

```

```

        ENDDO

sx=0.d0
sy=0.d0
sxx=0.d0
syy=0.d0
sxy=0.d0
s=0.d0

CLOSE(3)
OPEN(4,FILE="Lineal")
k=0
DO j=10,500,10
sx=0.d0
sy=0.d0
sxx=0.d0
syy=0.d0
sxy=0.d0
RSS=0.d0
s=0.d0
k=k+1
DO i=1,j
    s=s+1.d0
    sx=sx+t(i)
    sy=sy+pro(i)
ENDDO

sx=sx/j
sy=sy/j

DO i=1,j
    sxx=sxx+(sx-t(i))**2
    sxy=sxy+(sx-t(i))*(sy-pro(i))
    syy=syy+(sy-pro(i))**2
ENDDO

aa=sxy/sxx
bb=sy-aa*sx
rpear=sxy/sqrt(sxx*syy)
RSS=syy*(1-rpear**2)

WRITE(4,*)j,aa,bb,rpear,RSS

```

```

ENDDO

END PROGRAM stat

```

A.2. Orbitas periódicas

A.2.1. Estadio

```

PROGRAM Estadio

IMPLICIT NONE

REAL*8, PARAMETER::R=10.d0, a=3.d0*R, v00=1.d0, PI
    =3.1415926535897932384626433832795028841971d0
REAL*8, PARAMETER::dphi=PI/(1.d0*180.d0), dtta=PI/(1.d0*180.d0), EPS
    =1.D-5
REAL*8::dt, phi, tta, tta0, phi0
INTEGER::Nmax
REAL*8, DIMENSION(2)::x0, v0
REAL*8, DIMENSION(2)::x, v,iaux
REAL*8, DIMENSION(2)::e
REAL*8::m

CHARACTER(LEN=12)::charI, charl
INTEGER::i, k, f, l, t, nn

OPEN(1, FILE="periodicas.dat")
OPEN(0, FILE="err.dat")
call system('mkdir orbits')
e=0.d0
phi=0.d0
Nmax=10**9
f=2
l=0
DO WHILE (phi<PI/2)
    x0=(-a-R*dCOS(phi), R*dSIN(phi))
    tta=-PI/2-phi

```

```

k=0
f=2
WRITE(charl, '(I0)')l
call system( 'mkdir '//trim(charl))
DO WHILE(tta<PI/2+phi)

WRITE(charI, '(I0)')f-1
OPEN(f, FILE=trim(charl)//'/'//'orb'//trim(chari))
x=(-a-R*dcos(phi),R*dsin(phi))
v=(/v00*dcos(tta),v00*dsin(tta))
k=0
WRITE(f,*)0,x,v,10.D-13
t=0
nn=0
dt=1.d-1
i=0
DO WHILE(t<300.and.k<2.and.i<100*Nmax)

xaux=x+v*dt
IF (abs(xaux(1))<=a) THEN
  IF (abs(xaux(2))>R) THEN
    nn=nn+1
    IF(nn.eq.1) THEN
      dt=1.d-3
    ELSE IF(nn.eq.2) THEN
      dt=1.d-8
    ELSE
      dt=10.d-13
    ENDIF
    IF(nn<=3) CYCLE
    t=t+1
    k=k+1
    x=xaux
    m=v(2)/v(1)
    x(1)=(sign(R,x(2))-x(2))/m+x(1)
    e=(/0.d0,-1.D0*sign(1.d0,x(2)))/)
    v=v-2*dot_product(v,e)*e
    IF(k.EQ.1) THEN
      WRITE(f,*)t,x,v,dt
    ENDIF
    IF(abs(x(1)-x0(1))<EPS.and.abs(x(2)-x0(2))<EPS.and.k<=1.
      and.t>1) THEN
      WRITE(1,*)l,f-1,x,x0,v,v0,k
      call system( 'cp '//trim(charl)//'/'//'orb'//trim(chari

```

```

        )// 'orbits/orbits'//trim(charl)//'orbit'//trim(
        chari))
    EXIT
ENDIF
nn=0
dt=1.d-1
ELSE
    k=0
    x=iaux
ENDIF
ELSE
    IF (((iaux(1)-sign(a,iaux(1)))**2+iaux(2)**2)>R**2) THEN
        nn=nn+1
        IF(nn.eq.1) THEN
            dt=1.d-3
        ELSE IF(nn.eq.2) THEN
            dt=1.d-8
        ELSE
            dt=10.d-13
        ENDIF
        IF(nn<=3) CYCLE
        t=t+1
        k=k+1
        x=iaux
        e=(-1.D0*(x(1)-sign(a,x(1))),-1.D0*x(2)/)
        e=e/sqrt(sum(e**2))
        IF(k.EQ.1) THEN
            WRITE(f,*)t,x,v,dt
        ENDIF
        v=v-2*dot_product(v,e)*e
        IF(abs(x(1)-x0(1))<EPS.and.abs(x(2)-x0(2))<EPS.and.k<=1.
            and.t>1) THEN
            WRITE(1,*)l,f-1,x,x0,v,v0,k
            call system( 'cp '//trim(charl)//'/'//'orb'//trim(chari
                )// 'orbits/orbits'//trim(charl)//'orbit'//trim(
                chari))
            EXIT
        ENDIF
        nn=0
        dt=1.d-1
    ELSE
        k=0
        x=iaux
    ENDIF

```

```

ENDIF

IF(k.GE.2) THEN
    WRITE(0,*)f-1,x,x0,v,v0,k
    EXIT
ENDIF
i=i+1

ENDDO
tta=tta+dtta
CLOSE(f)
f=f+1
ENDDO
l=l+1
phi=phi+dphi
ENDDO

dt=1.D-1
x0=(/-a,R/)
DO WHILE (x(1)<0)
    tta=-PI
    k=0
    f=2
    WRITE(charl,'(IO)')l
    call system('mkdir '//trim(charl))
    DO WHILE(tta<PI)
        WRITE(charI,'(IO)')f
        OPEN(f, FILE=trim(charl)//'/ '//'orb'//trim(charI))
        x=x0
        v=(/v0*dcos(tta),v0*dsin(tta)/)
        WRITE(f,*)0,x,v,datan(x(2)/x(1))
        k=0
        t=0
        i=0
        DO WHILE(t<300.and.k<2.and.i<100*nmax)

            xaux=x+v*dt

            IF (abs(xaux(1))<=a) THEN
                IF (abs(xaux(2))>R) THEN
                    nn=nn+1
                    IF(nn.eq.1) THEN
                        dt=1.d-3
                    ELSE IF(nn.eq.2) THEN

```

```

        dt=1.d-8
ELSE
        dt=10.d-13
ENDIF
IF(nn<=3) CYCLE
t=t+1
k=k+1
x=iaux
m=v(2)/v(1)
x(1)=(sign(R,x(2))-x(2))/m+x(1)
e=(/0.d0,-1.D0*sign(1.d0,x(2)))/
v=v-2*dot_product(v,e)*e

IF(k.EQ.1) THEN
        WRITE(f,*)t,x,v,dt
ENDIF

IF(abs(x(1)-x0(1))<EPS.and.abs(x(2)-x0(2))<EPS.and.k<=1.
and.t>1) THEN
        WRITE(1,*)l,f-1,x,x0,v,v0,k
        call system('cp '//trim(charl)//'/'//'orb'//trim(chari
)//' orbits/orbits'//trim(charl)//'orbit'//trim(
chari))
        EXIT
ENDIF
nn=0
dt=1.d-1

ELSE
        k=0
        x=iaux
ENDIF
ELSE
IF (((iaux(1)-sign(a,iaux(1)))**2+iaux(2)**2)>R**2) THEN
        nn=nn+1
        IF(nn.eq.1) THEN
                dt=1.d-3
        ELSE IF(nn.eq.2) THEN
                dt=1.d-8
        ELSE
                dt=10.d-13
        ENDIF
        IF(nn<=3) CYCLE
        t=t+1

```

```

        k=k+1
        x=iaux
        e=(-1.D0*(x(1)-sign(a,x(1))),-1.D0*x(2)/)
        e=e/sqrt(sum(e**2))
        v=v-2*dot_product(v,e)*e
        IF(k.EQ.1) THEN
            WRITE(f,*)t,x,v,dt
        ENDIF
        IF(abs(x(1)-x0(1))<EPS.and.abs(x(2)-x0(2))<EPS.and.k<=1.
            and.t>1) THEN
            WRITE(1,*)l,f-1,x,x0,v,v0,k
            call system('cp '//trim(charl)//'/'//'orb'//trim(chari
                )//' orbits/orbits'//trim(charl)//'orbit'//trim(
                chari))
            EXIT
        ENDIF
        nn=0
        dt=1.d-1
    ELSE
        k=0
        x=iaux
    ENDIF
ENDIF

IF(k.GE.2) THEN
    WRITE(0,*)f-1,x,x0,v,v0,k
    EXIT
ENDIF
i=i+1

ENDDO
tta=tta+dtta
CLOSE(f)
f=f+1

ENDDO
l=l+1
x0(1)=x0(1)+1.d-2
ENDDO
END PROGRAM Estadio

```

A.2.2. Anillo circular

```

PROGRAM orban

IMPLICIT NONE

REAL*8, PARAMETER:: R1=10. d0 , R2=2. d0*R1 , v00=1. d0 , PI
    =3. 1415926535897932384626433832795028841971 d0 , EPS=1. D-5
REAL*8, PARAMETER:: dang=PI/(4. d0*180. d0)
INTEGER:: Nmax
REAL*8:: dt
REAL*8, DIMENSION(2):: x0, v0
REAL*8, DIMENSION(2):: x, v,iaux
REAL*8, DIMENSION(2):: e
REAL*8:: m, ang, phi, ax
INTEGER:: I, k, f, n, r, nn
CHARACTER(LEN=12):: charI, charl

OPEN(2, FILE="periodicas.dat")
OPEN(0, FILE="err.dat")
call system( 'mkdir orbits' )

k=0
e=0. d0
phi=0. d0
ang=0
x0=(/-R2*dcos(phi), R2*dsin(phi)/)
v0=(/v00*dcos(ang), v00*dsin(ang)/)
Nmax=5*10**2
f=0

DO WHILE (ang.LE.PI/2. D0)

    r=0
    f=f+1
    WRITE(charI, '(IO)') f-1
    OPEN(1, FILE="orb"//trim(charI))
    x=x0

    v0=(/v00*dcos(ang), v00*dsin(ang)/)
    v=v0
    N=0
    k=0
    WRITE(1, *) r, x, v, 1. d-14
    nn=0

```

```

dt=1.d-1
DO WHILE(k.LE.2.AND.R.LE.300)
  n=n+1
  xaux=x+v*dt
  ax=xaux(1)**2+xaux(2)**2
  IF (ax<R1**2) THEN
    nn=nn+1
    IF(nn.eq.1) THEN
      dt=1.d-3
    ELSE IF(nn.eq.2) THEN
      dt=1.d-8
    ELSE
      dt=1.d-14
    ENDIF
    IF(nn<=3) CYCLE
    r=r+1
    k=k+1
    x=xaux
    e=(/x(1),x(2)/)
    e=e/sqrt(sum(e**2))
    v=v-2*dot_product(v,e)*e
    WRITE(1,*)r,x,v,dt
    IF(abs(x(1)-x0(1))<EPS.AND.abs(x(2)-x0(2))<EPS) THEN
      WRITE(2,*)r,f-1,k,x,x0,v,v0
      call system('cp orb'//trim(chari)//' orbits/orbit'//trim(
        chari))
      EXIT
    ENDIF
    nn=0
    dt=1.d-1

  ELSE IF (ax>R2**2) THEN
    nn=nn+1
    IF(nn.eq.1) THEN
      dt=1.d-3
    ELSE IF(nn.eq.2) THEN
      dt=1.d-8
    ELSE
      dt=1.d-14
    ENDIF
    IF(nn<3) CYCLE
    r=r+1
    k=k+1
    x=xaux

```

```

e=(-1.D0*x(1) ,-1.D0*x(2) /)
e=e/sqrt(sum(e**2))
v=v-2*dot_product(v,e)*e

WRITE(1,*)r,x,v,dt
IF(abs(x(1)-x0(1))<EPS.AND.abs(x(2)-x0(2))<EPS) THEN
  WRITE(2,*)r,f-1,k,x,x0,v,v0
  call system('cp orb'//trim(chari)//' orbits/orbit'//trim(
    chari))
  EXIT
ENDIF
nn=0
dt=1.d-1

ELSE
  k=0
  x=xaux

ENDIF

IF(k.GE.2) THEN
  WRITE(0,*)f-1,x,x0,v,v0,k
  EXIT
ENDIF

ENDDO

CLOSE(1)
ang=ang+dang
ENDDO

END PROGRAM orban

```

A.3. Cicatrices cuánticas

A.3.1. Estadio

Red cuadrada

```

import kwant
import os
from math import sqrt, atan2, cos, pi, sin, floor, atan, ceil, tanh

```

```

from matplotlib import pyplot
from cmath import exp
import scipy.sparse.linalg as sla
import numpy as np

lat=kwant.lattice.square()
a=50
R=50

def make_sys(t=-0.25):

    def stadium(pos):
        (x, y) = pos
        if abs(x)<a and abs(y)<a:
            return x,y
        else:
            return (x-np.sign(x)*a)**2+y**2<R**2

    sys = kwant.Builder()
    sys[lat.shape(stadium, (0,0))] = -4*t
    sys[lat.neighbors()] = t
    sym = kwant.TranslationalSymmetry((1, 0))
    lead = kwant.Builder(sym)

    def contactos(pos):
        (x, y) = pos
        return (-a/3<=y<=a/3)

    lead[lat.shape(contactos, (10, 0))] = -4*t
    lead[lat.neighbors()] = -t
    sys.attach_lead(lead)
    sys.attach_lead(lead.reversed())
    return sys

def main():
    sys = make_sys()
    sys = sys.finalized()
    particion_energias=1000

    for n in range(0,5):
        e_min=0.1*n
        e_max=e_min+0.1
        energy=e_min

```

```

energias = np.linspace(e_min, e_max, particion_energias)
gg='graficas'+str(n)
ff='archivos'+str(n)
if not os.path.exists(gg):
    os.makedirs(gg)
if not os.path.exists(ff):
    os.makedirs(ff)

position=[sys.sites[i].pos for i in range(len(sys.sites))]
ldosm=np.asarray(position)

for energy in energias:

    fil=str(int(energy*10000))
    ldos = kwant.ldos(sys, energy)
    np.savetxt(ff+"/"+fil,np.concatenate((ldosm,ldos.
        reshape(len(sys.sites),1)),axis=1),delimiter=" ",
        newline='\n')
    kwant.plotter.map(sys, ldos, num_lead_cells=1, file=gg+"/
        "+fil)

if __name__ == '__main__':
    main()

```

Red hexagonal

```

import kwant
import os
from math import sqrt, atan2, cos, pi, sin, floor, atan, ceil, tanh
from matplotlib import pyplot
from cmath import exp
import scipy.sparse.linalg as sla
import numpy as np
lat=kwant.lattice.general([(sqrt(3)/2, 1/2), (0, 1)],[(0, 0), (1 /
    (2*sqrt(3)),1/2)])

a,b=lat.sublattices

a1=50
R=50

```

```

def make_sys(t=-0.25):

    def stadium(pos):
        (x, y) = pos
        if abs(x)<a1 and abs(y)<a1:
            return x,y
        else:
            return (x-np.sign(x)*a1)**2+y**2<R**2

    sys = kwant.Builder()
    sys[lat.shape(stadium, (0,0))] = -4*t
    sys[lat.neighbors()] = t
    sym = kwant.TranslationalSymmetry((sqrt(3), 0))
    lead = kwant.Builder(sym)

    def contactos(pos):
        (x, y) = pos
        return (-a1/3<=y<=a1/3)

    lead[lat.shape(contactos, (1, 0))] = -4*t
    lead[lat.neighbors()] = t
    sys.attach_lead(lead)
    sys.attach_lead(lead.reversed())
    return sys

def main():
    sys = make_sys()
    sys = sys.finalized()

    particion_energias=1000

    for n in range(2,9):
        e_min=0.1*n
        e_max=e_min+0.1
        energy=e_min

        energias = np.linspace(e_min, e_max, particion_energias)
        gg='graficas'+str(n)
        ff='archivos'+str(n)
        if not os.path.exists(gg):
            os.makedirs(gg)
        if not os.path.exists(ff):
            os.makedirs(ff)

```

```

position=[sys.sites[i].pos for i in range(len(sys.sites))]
ldosm=np.asarray(position)

for energy in energias:

    fil=str(int(energy*10000))
    ldos = kwant.ldos(sys, energy)
    np.savetxt(ff+"/"+fil,np.concatenate((ldosm,ldos.
        reshape(len(sys.sites),1)),axis=1),delimiter=" ",
        newline='\n')
    kwant.plotter.map(sys, ldos, num_lead_cells=1, file=gg+"/
        "+fil)

if __name__ == '__main__':
    main()

```

A.3.2. Anillo circular

Red cuadrada

```

import kwant
import os
from math import sqrt, atan2, cos, pi, sin, floor, atan, ceil, tanh
from matplotlib import pyplot
from cmath import exp
import scipy.sparse.linalg as sla
import numpy as np

lat=kwant.lattice.square()
R1=80
R2=R1*2

def make_sys(t=-0.25):

    def ring(pos):
        (x, y) = pos
        r = x ** 2 + y ** 2
        return (R1 ** 2 < r < R2 ** 2)

    sys = kwant.Builder()
    sys[lat.shape(ring, (R1+1,R1+1))] = -4*t

```

```

sys[lat.neighbors()] = t
sym = kwant.TranslationalSymmetry((1, 0))
lead = kwant.Builder(sym)

def contactos(pos):
    (x, y) = pos
    return (-R2/3<=y<=R2/3)

lead[lat.shape(contactos, (10, 0))] = -4*t
lead[lat.neighbors()] = -t
sys.attach_lead(lead)
sys.attach_lead(lead.reversed())
return sys

def main():
    sys = make_sys()
    sys = sys.finalized()

    particion_energias=1000

    for n in range(0,5):
        e_min=0.1*n
        e_max=e_min+0.1
        energy=e_min

        energias = np.linspace(e_min, e_max, particion_energias)
        gg='graficas'+str(n)
        ff='archivos'+str(n)
        if not os.path.exists(gg):
            os.makedirs(gg)
        if not os.path.exists(ff):
            os.makedirs(ff)

        position=[sys.sites[i].pos for i in range(len(sys.sites))]
        ldosm=np.asarray(position)

        for energy in energias:

            fil=str(int(energy*10000))
            ldos = kwant.ldos(sys, energy)
            np.savetxt(ff+"/"+fil,np.concatenate((ldosm,ldos.
                reshape(len(sys.sites),1)),axis=1),delimiter=" ",

```

```

        newline='\n')
    kwant.plotter.map(sys, ldos, num_lead_cells=1, file=gg+"/
        "+fil)

if __name__ == '__main__':
    main()

```

Red hexagonal

```

import kwant
import os

from math import sqrt, atan2, cos, pi, sin, floor, atan, ceil, tanh
from matplotlib import pyplot
from cmath import exp
import scipy.sparse.linalg as sla
import numpy as np

lat=kwant.lattice.general([(sqrt(3)*1.0,0),(0,3*1.0)],[(0,0),(0.5*
sqrt(3)*1.0,1.0/2),(0.5*sqrt(3)*1.0,3*1.0/2),(0,2*1.0)])

R1=80
R2=R1*2

def make_sys(t=0.25,pot=0.0):
    def ring(pos):
        (x, y) = pos
        r = x ** 2 + y ** 2
        return (R1 ** 2 < r < R2 ** 2)

    sys = kwant.Builder()
    sys[lat.shape(ring, (R1+1,R1+1))] = 4*t+pot
    sys[lat.neighbors()] = -t
    sym = kwant.TranslationalSymmetry((sqrt(3),0))
    lead = kwant.Builder(sym)

    def contactos(pos):
        (x, y) = pos
        return (-R1/2<=y<=R1/2)

```

```

lead[lat.shape(contactos , (R2-1,0))] = 4*t+pot
lead[lat.neighbors()] = -t
sys.attach_lead(lead)
sys.attach_lead(lead.reversed())
return sys

def main():
    sys = make_sys()
    sys = sys.finalized()

    particion_energias=1000

    for n in range(2,9):
        e_min=0.1*n
        e_max=e_min+0.1
        energy=e_min

        energias = np.linspace(e_min, e_max, particion_energias)
        gg='graficas'+str(n)
        ff='archivos'+str(n)
        if not os.path.exists(gg):
            os.makedirs(gg)
        if not os.path.exists(ff):
            os.makedirs(ff)

        position=[sys.sites[i].pos for i in range(len(sys.sites))]
        ldosm=np.asarray(position)

        for energy in energias:

            fil=str(int(energy*10000))
            ldos = kwant.ldos(sys, energy)
            np.savetxt(ff+"/"+fil,np.concatenate((ldosm,ldos.
                reshape(len(sys.sites),1),axis=1),delimiter=" ",
                newline='\n'))
            kwant.plotter.map(sys, ldos, num_lead_cells=1,file=gg+"/"+
                "+fil)

if __name__ == '__main__':

```

```
|| main()
```

Apéndice B

Imágenes

En este capítulo se presenta una serie de gráficas complementarias al capítulo de resultados.

B.1. Órbitas

B.1.1. Anillo

B.1.1.1. Órbitas no periódicas:

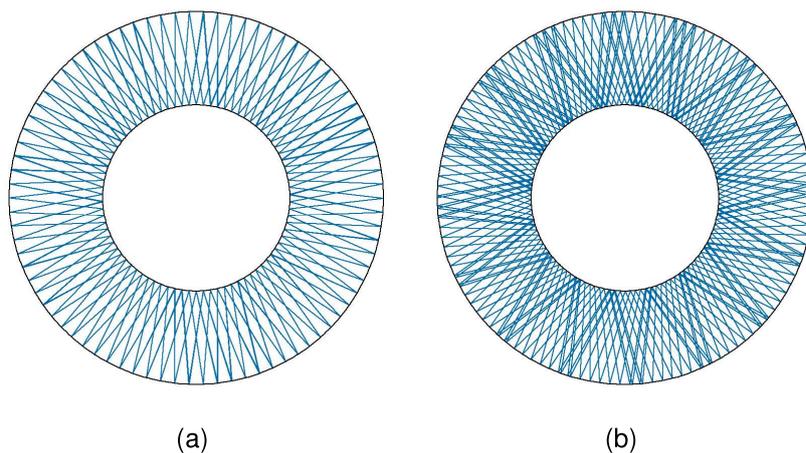


Figura B.1: Los paneles a) y b) muestran órbitas no periódicas con parámetros: $\theta = 0$, $\phi = 6,5$ y b) $\theta = 0$, $\phi = 10,75$ respectivamente.

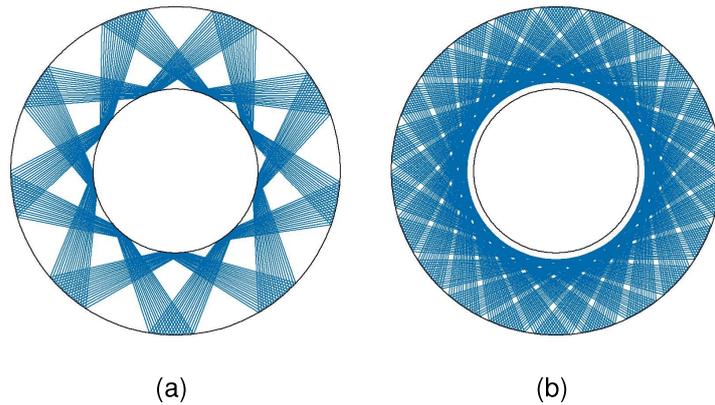


Figura B.2: Los paneles a) y b) muestran órbitas no periódicas con parámetros: $\theta = 0$, $\phi = 27,5$ y b) $\theta = 0$, $\phi = 32,75$ respectivamente.

B.1.1.2. Órbitas tipo: Rebote con el anillo interior

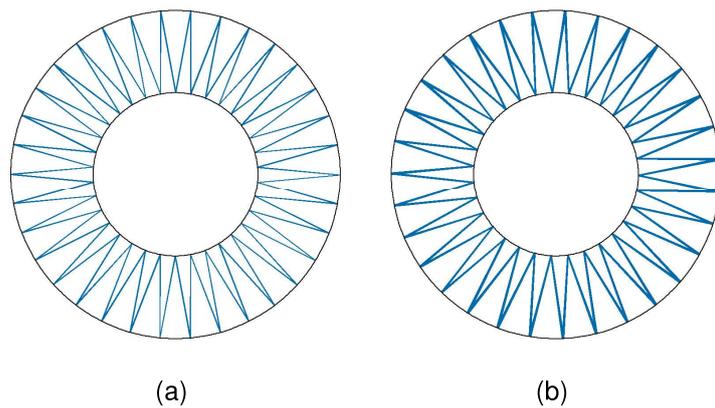


Figura B.3: Los paneles a) y b) muestran órbitas periódicas con rebote en el anillo interno a partir de parámetros: $\theta = 0$, $\phi = 5,25$ y $\theta = 0$, $\phi = 5,75$ respectivamente.

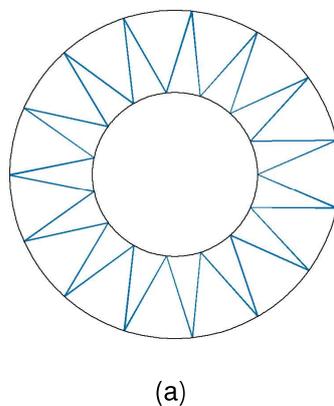


Figura B.4: La figura muestra una órbita periódica con rebote en el anillo interno a partir de parámetros: $\theta = 0$, $\phi = 11,5$.

B.1.1.3. Orbitas periódicas inestables: figuras geométricas que no se intersecan

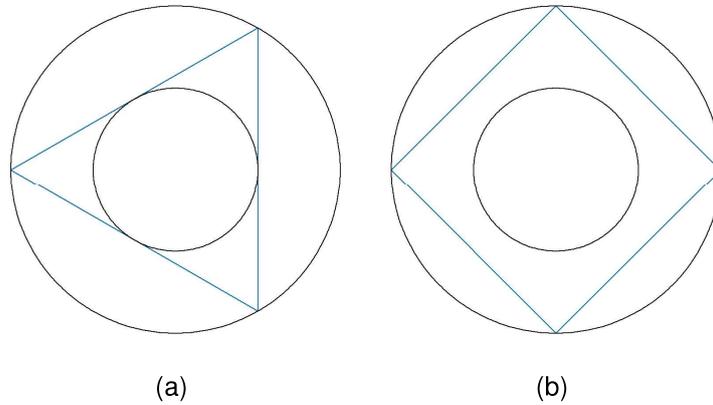


Figura B.5: En los paneles a) y b) se muestran orbitas periódicas con forma triangular y cuadrada respectivamente a partir de los ángulos $\phi = 30$ y $\phi = 45$.

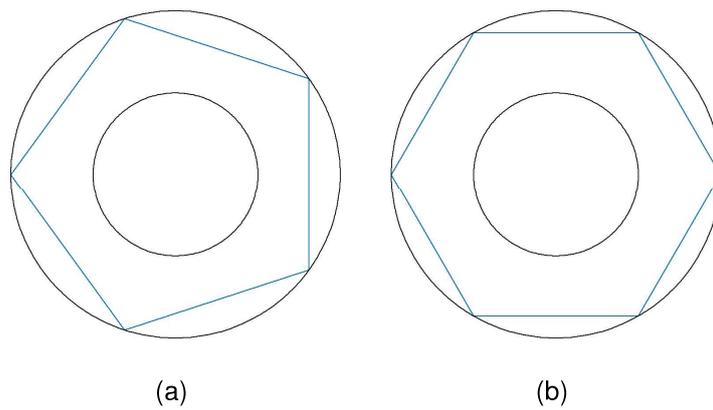


Figura B.6: En los paneles a) y b) se muestran orbitas periódicas con forma pentagonal y hexagonal respectivamente a partir de los ángulos $\phi = 54$ y $\phi = 60$.

B.1.1.4. Órbitas tipo: Órbitas que se intersecan

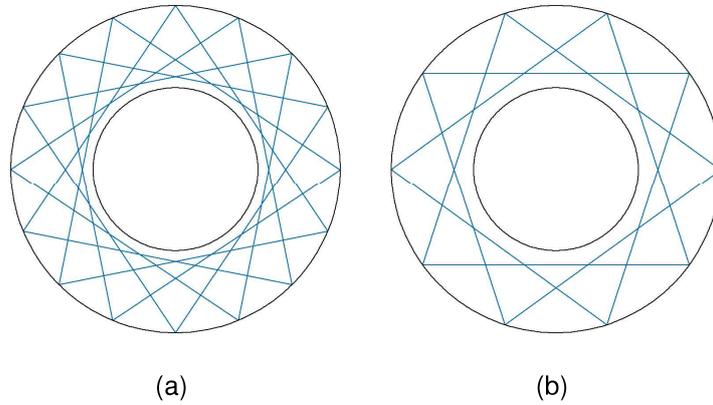


Figura B.7: Los paneles a) y b) muestran órbitas periódicas con parámetros: $\phi = 33,75$ y b) $\phi = 36$ respectivamente.

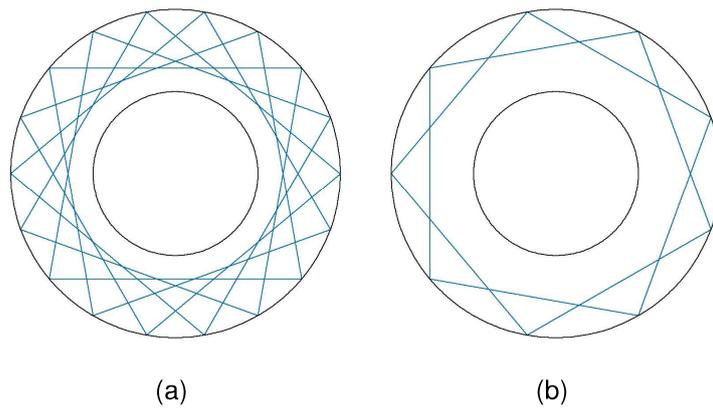


Figura B.8: Los paneles a) y b) muestran órbitas periódicas con parámetros: $\phi = 40$ y b) $\phi = 50$ respectivamente.

B.1.2. Estadio

B.1.2.1. Órbitas que no se intersecan

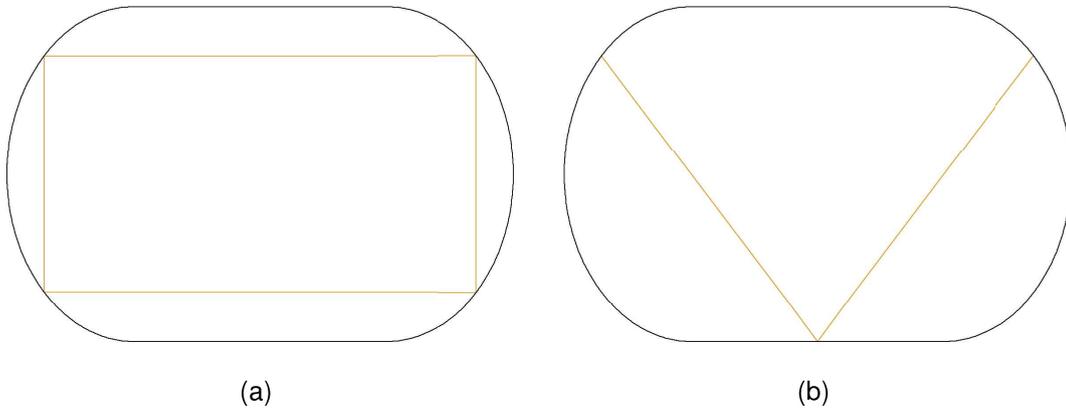


Figura B.9: Los paneles a) y b) muestran órbitas periódicas con parámetros: $\alpha = 45$, $\phi = 0$ y b) $\alpha = 45$, $\phi = -45$ respectivamente.

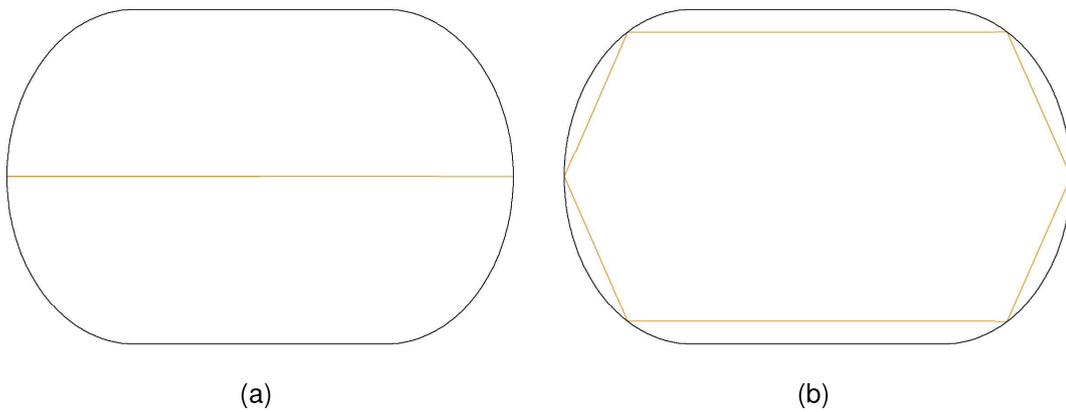


Figura B.10: Los paneles a) y b) muestran órbitas periódicas con parámetros: $\alpha = 0$, $\phi = 0$ y b) $\alpha = 0$, $\phi = 60$

B.1.2.2. Órbitas que se intersecan

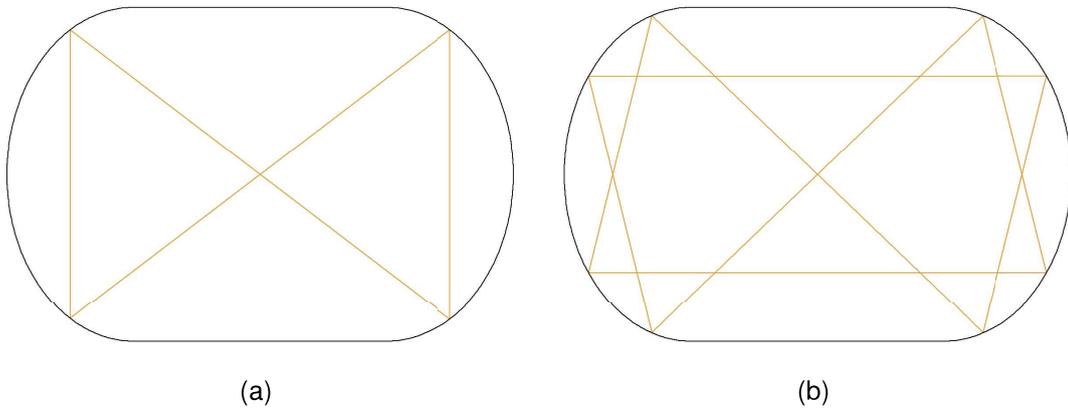


Figura B.11: Los paneles a) y b) muestran órbitas periódicas con parámetros: $\alpha = 60$, $\phi = -30$ y b) $\alpha = 36$, $\phi = 0$

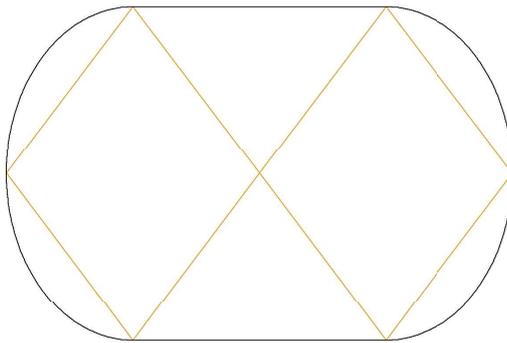


Figura B.12: La figura muestra una órbita periódica con parámetro: $\alpha = 0$, $\phi = 45$

B.2. Densidad local de estados

B.2.1. Cicatrices cuánticas y estados no cicatrizados

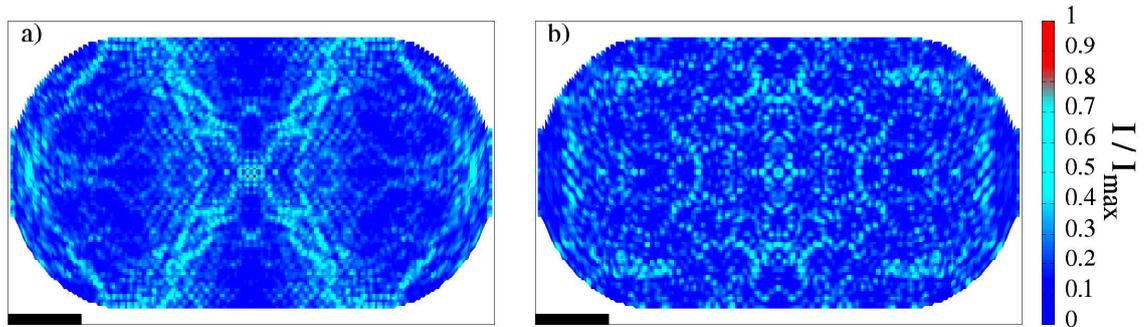


Figura B.13: LDOS para el estadio de Bunimovich con red cuadrada: a) cicatriz cuántica a $E/\tau = -1,8148$ b) no se observa cicatriz cuántica a $E/\tau = -1,2648$. La barra de escala es de 60 [u.a.].

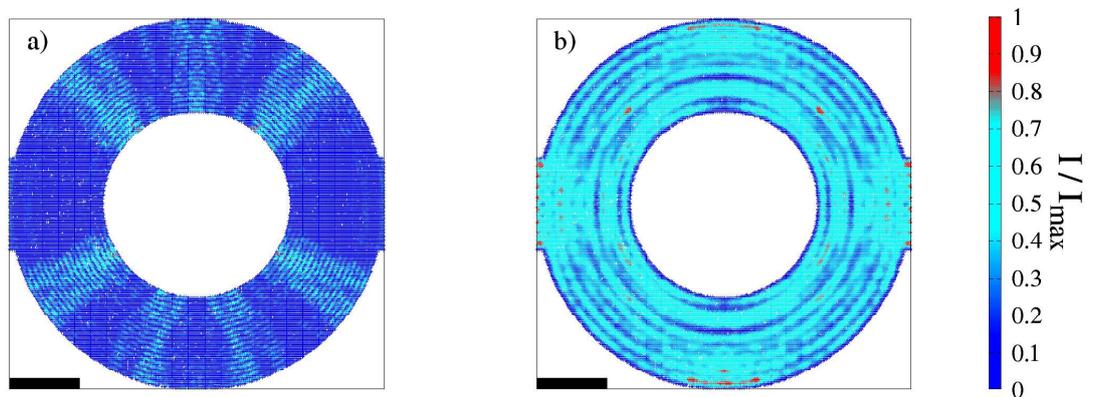


Figura B.14: LDOS para el anillo circular con red hexagonal: a) cicatriz cuántica a $E/\tau = -1,7568$, b) No se observa cicatriz cuántica a $E/\tau = -1,4828$. La barra de escala es de 60 [u.a.].

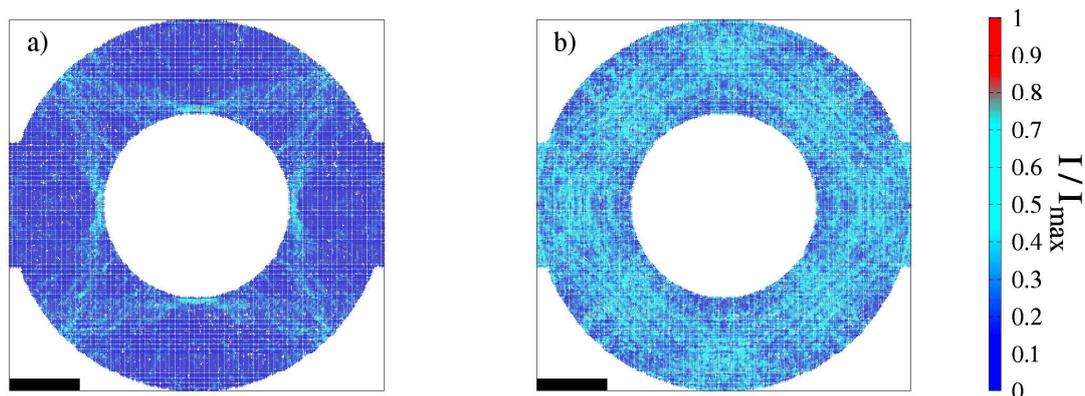


Figura B.15: LDOS para el anillo circular con red cuadrada: a) cicatriz cuántica a $E/\tau = -1,3012$, b) No se observa cicatriz cuántica a $E/\tau = -0,8152$. La barra de escala es de 60 [u.a.].

B.2.2. Anillo circular: Radiales

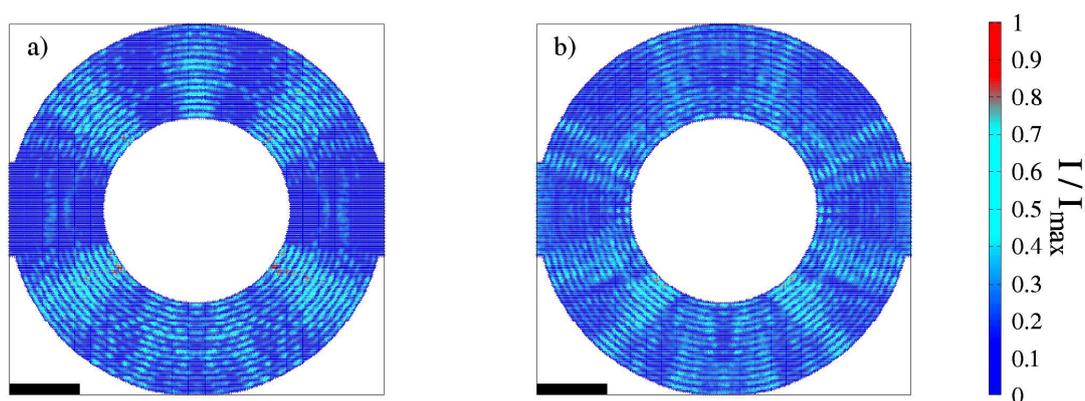


Figura B.16: LDOS para el anillo circular con red hexagonal: a) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,6188$ b) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,6208$. La barra de escala es de 60 [u.a.].

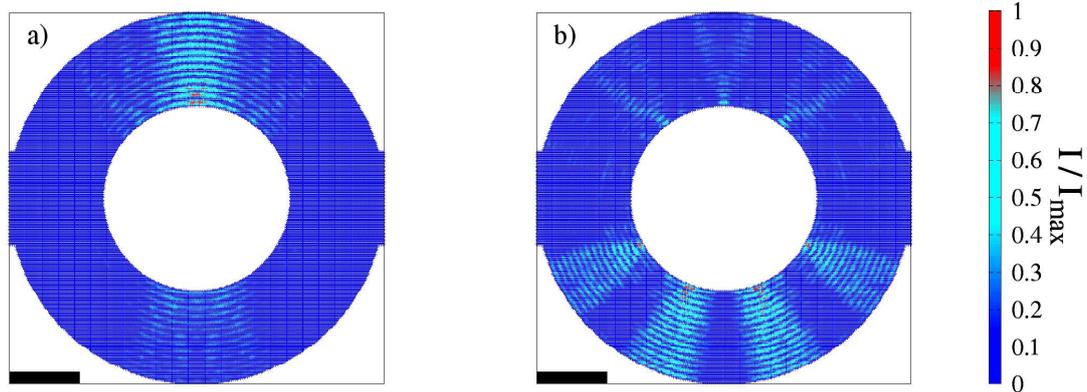


Figura B.17: LDOS para el anillo circular con red hexagonal: a) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,5888$ b) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,6508$. La barra de escala es de 60 [u.a.].

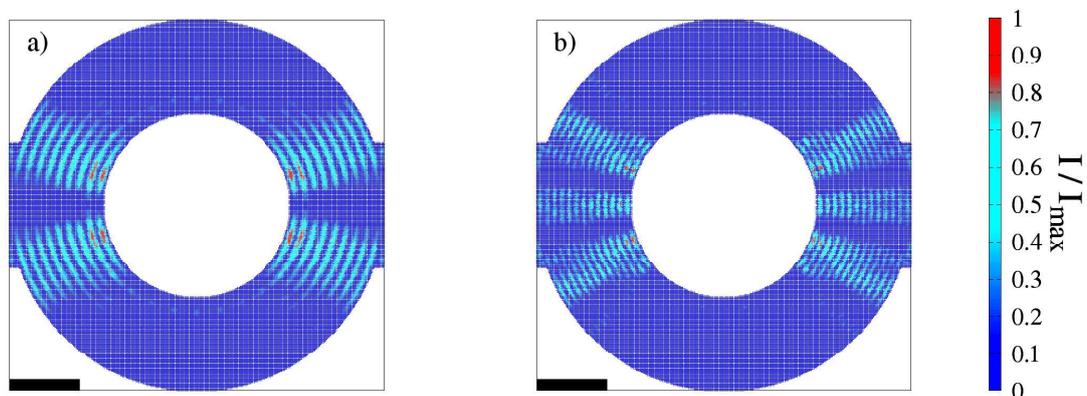


Figura B.18: LDOS para el anillo circular con red cuadrada: a) cicatriz cuántica en $E/\tau = -0,122$ b) cicatriz cuántica en $E/\tau = -0,2532$. La barra de escala es de 60 [u.a.].

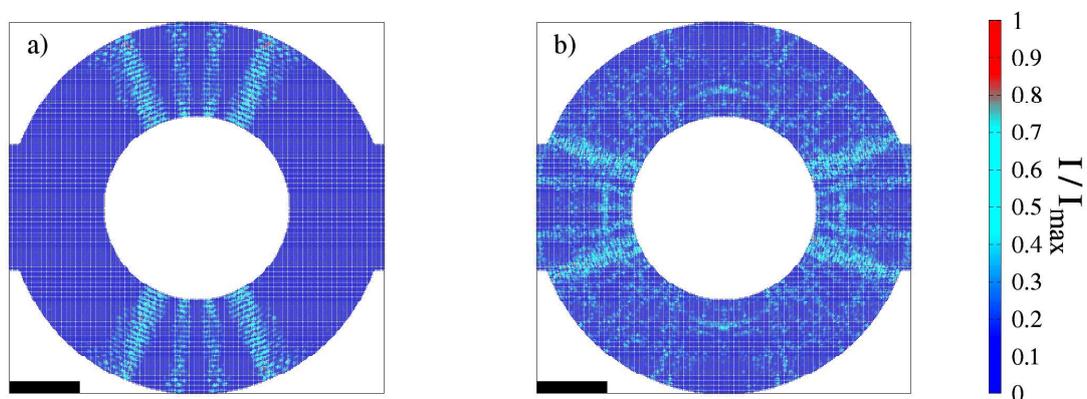


Figura B.19: LDOS para el anillo circular con red cuadrada: a) cicatriz cuántica en $E/\tau = -0,122$ b) cicatriz cuántica en $E/\tau = -0,2532$. La barra de escala es de 60 [u.a.].

B.2.3. Anillo circular: No radiales

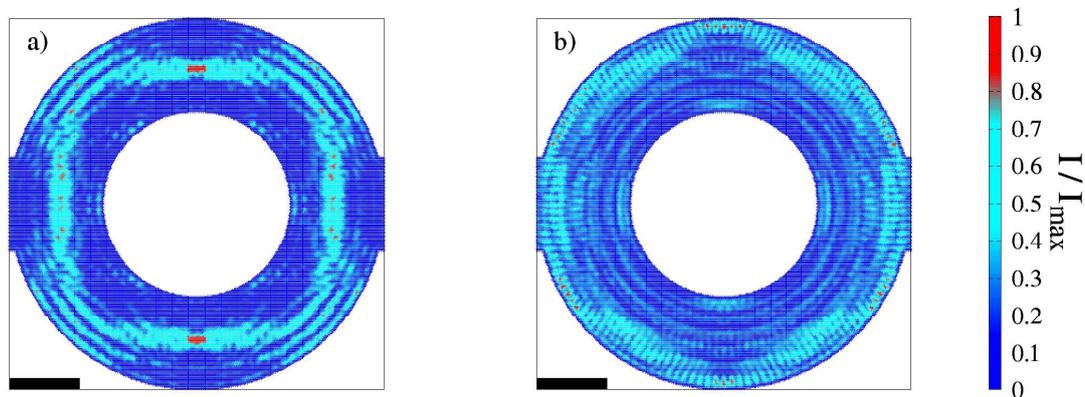


Figura B.20: LDOS para el anillo circular con red hexagonal: a) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,5588$ b) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,5828$. La barra de escala es de 60 [u.a.].

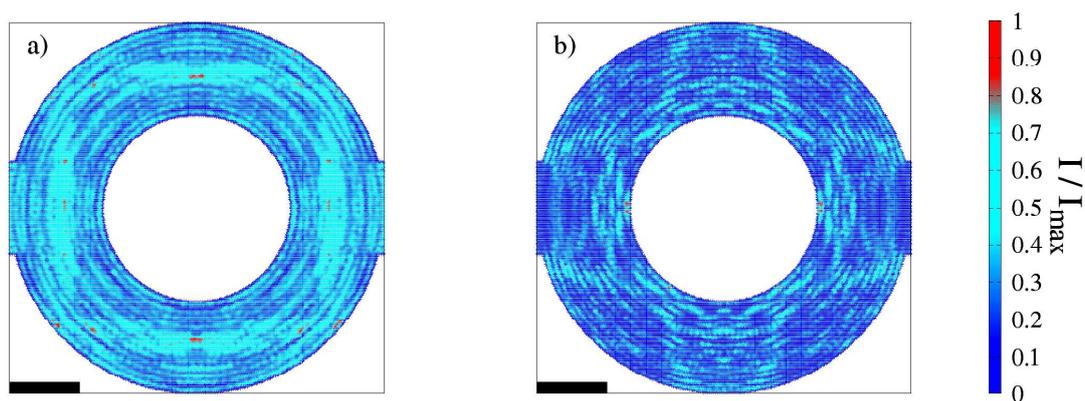


Figura B.21: LDOS para el anillo circular con red hexagonal: a) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,6088$ b) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,7008$. La barra de escala es de 60 [u.a.].

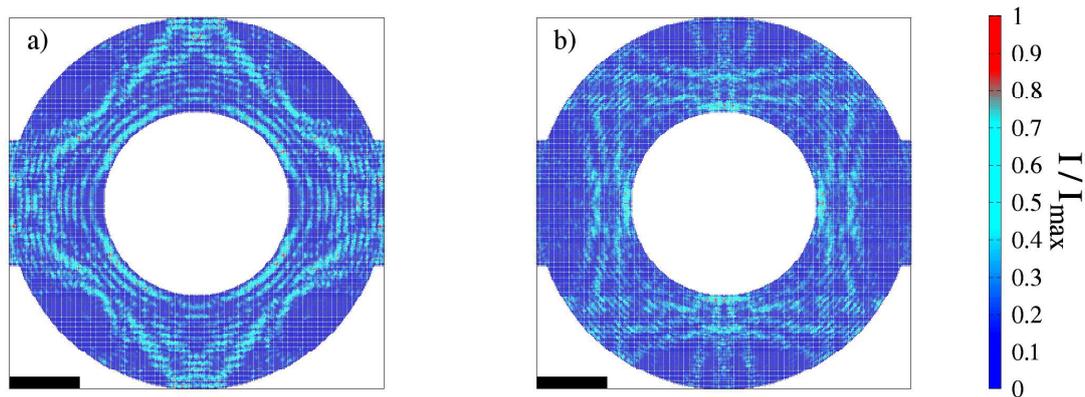


Figura B.22: LDOS para el anillo circular con red cuadrada: a) cicatriz cuántica en $E/\tau = -0,5336$ b) cicatriz cuántica en $E/\tau = -0,8124$. La barra de escala es de 60 [u.a.].

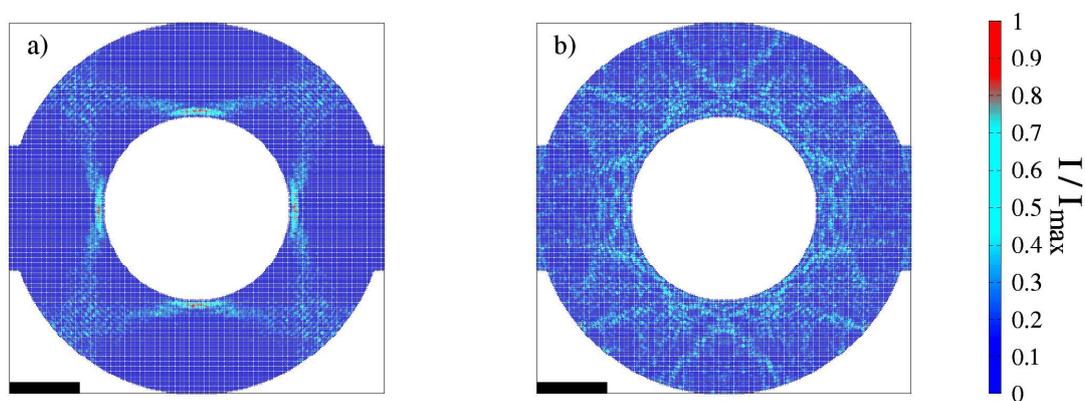


Figura B.23: LDOS para el anillo circular con red cuadrada: a) cicatriz cuántica en $E/\tau = -0,9128$ b) cicatriz cuántica en $E/\tau = -0,9716$. La barra de escala es de 60 [u.a.].

B.2.4. Estadio: Barras paralelas al eje y

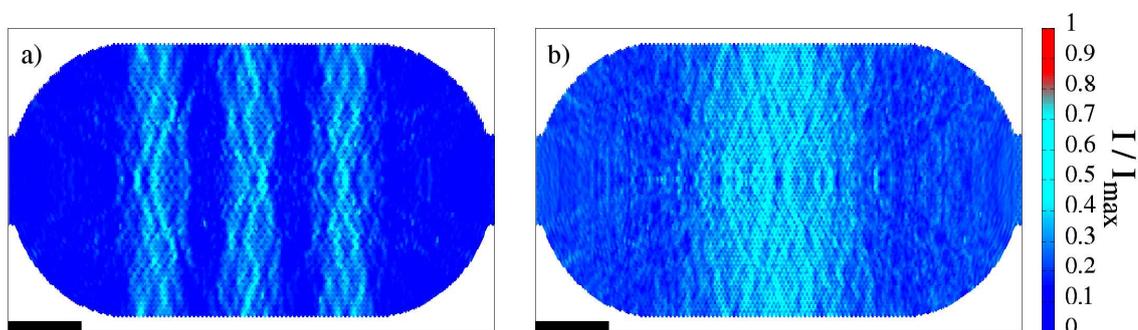


Figura B.24: LDOS para el estadio de Bunimovich con red hexagonal: a) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,7264$ b) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,9548$. La barra de escala es de 30 [u.a.].

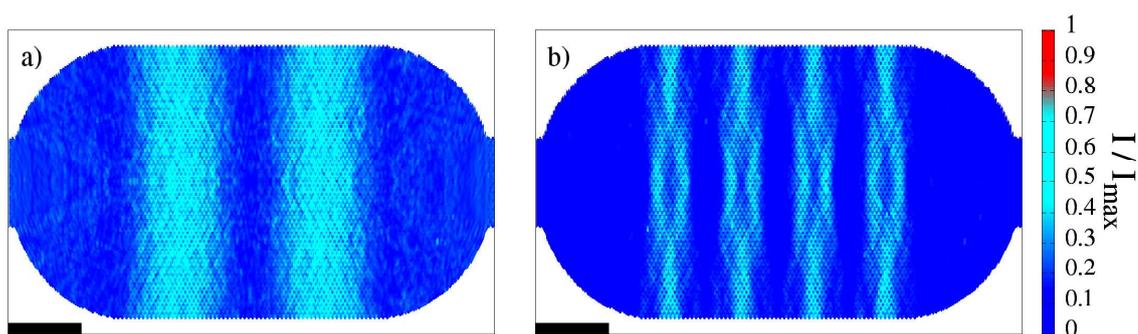


Figura B.25: LDOS para el estadio de Bunimovich con red hexagonal: a) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,9552$ b) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,9568$. La barra de escala es de 30 [u.a.].

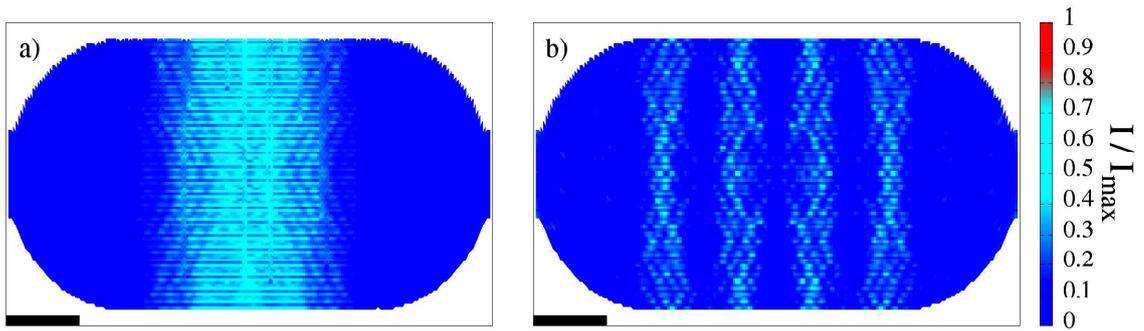


Figura B.26: LDOS para el estadio de Bunimovich con red cuadrada: a) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,3824$ b) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,4524$. La barra de escala es de 30 [u.a.].

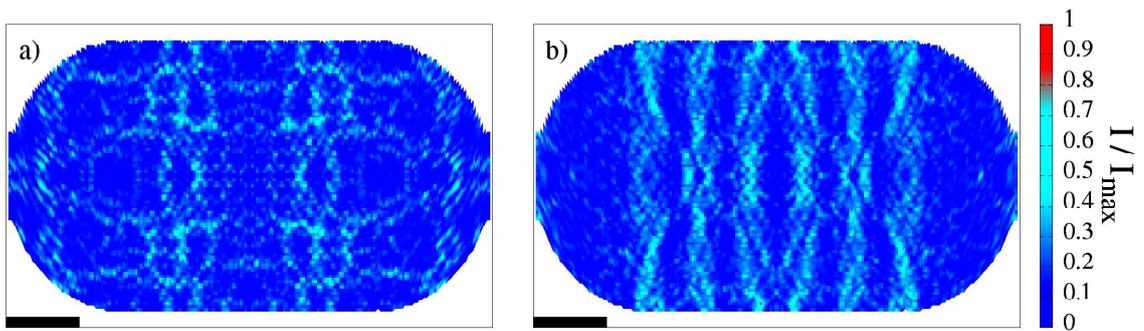


Figura B.27: LDOS para el estadio de Bunimovich con red hexagonal: a) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,7524$ b) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,8336$. La barra de escala es de 30 [u.a.].

B.2.5. Estadio: Líneas consecutivas

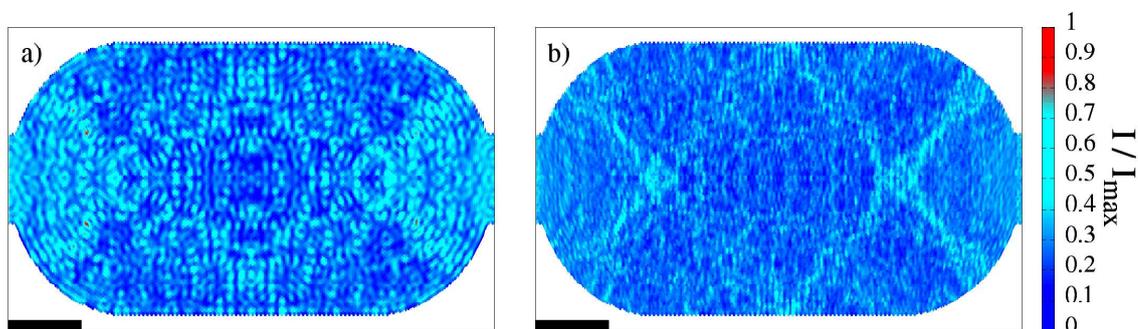


Figura B.28: LDOS para el estado de Bunimovich con red hexagonal: a) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,2660$ b) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,8052$. La barra de escala es de 30 [u.a.].

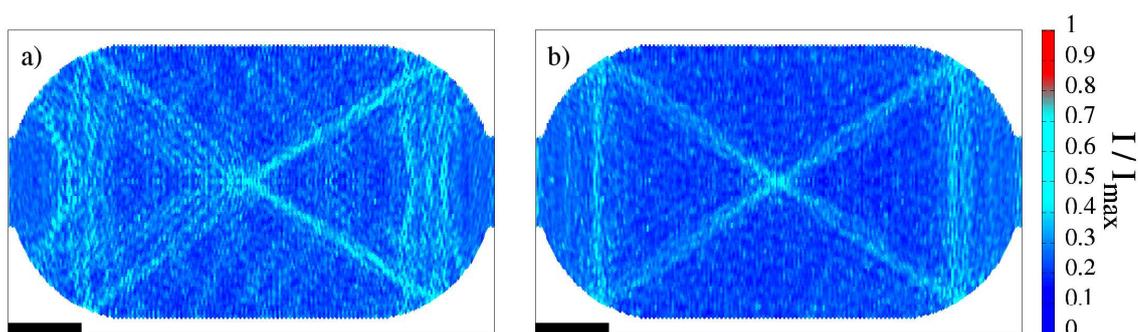


Figura B.29: LDOS para el estado de Bunimovich con red hexagonal: a) cicatriz cuántica en $E/\tau = -2,6532$ b) cicatriz cuántica en $E/\tau = -2,8292$. La barra de escala es de 30 [u.a.].

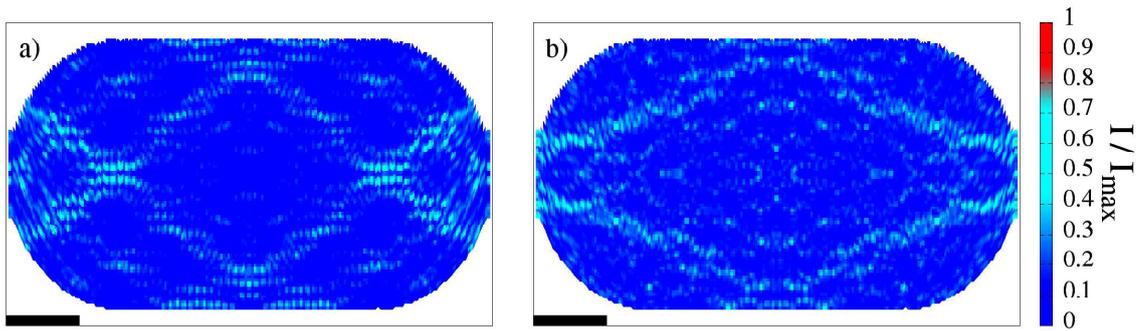


Figura B.30: LDOS para el estadio de Bunimovich con red cuadrada: a) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,4760$ b) cicatriz cuántica en $E/\tau = -1,4864$. La barra de escala es de 30 [u.a.].

Bibliografía

- [1] T.J. Thornton. Mesoscopic devices. *Reports on Progress in Physics Mesoscopic*, 1995.
- [2] Yoshimasa Murayama. *Mesoscopic systems: fundamentals and applications*. John Wiley & Sons, 2008.
- [3] Yoseph Imry. Physics of mesoscopic systems. In *Directions in Condensed Matter Physics: Memorial Volume in Honor of Shang-keng Ma*, pages 101–163. World Scientific, 1986.
- [4] Javier Munárriz Arrieta. *Modelling of Plasmonic and Graphene Nanodevices*. Springer, 2014.
- [5] Damien Cabosart, Alexandre Felten, Nicolas Reckinger, Andra Iordanescu, Sébastien Faniel, and Benoit Hackens. Recurrent quantum scars in a mesoscopic graphene ring. *Nano letters*, 2017.
- [6] Charles Kittel et al. *Introduction to solid state physics*, volume 8. Wiley New York, 1976.
- [7] Walter A Harrison. *Electronic structure and the properties of solids: the physics of the chemical bond*. Courier Corporation, 2012.
- [8] Eric J. Heller. Bound-state eigenfunctions of classically chaotic hamiltonian systems: Scars of periodic orbits. *Physical Review Letters*, 53(16):1515–1518, 1984.
- [9] Mark Kvale. Unstable periodic orbits. *PHYSICAL REVIEW A*, 46(10):6334–6339, 1992.
- [10] L. A. Bunimovich. On ergodic properties of certain billiards. *Functional Analysis and Its Applications*, 8(3):254–255, 1974.

- [11] Edward Ott. *Chaos in dynamical systems*. Cambridge university press, 2002.
- [12] K. Alligood, T. Sauer, and J. Yorke. *CHAOS: An Introduction to Dynamical Systems*. Springer-Verlag New York, New York, 1996.
- [13] Nikolai Chernov and Roberto Markarian. *Chaotic billiards*. Number 127 in Mathematical Surveys and Monographs. American Mathematical Soc., 2006.
- [14] Mitsuyoshi Tomiya, Shoichi Sakamoto, and Eric J Heller. Periodic Orbit Scar in Propagation of Wavepacket.
- [15] L Kaplan. Linear and Nonlinear Theory of Eigenfunction Scars. 206:171–206, 1998.
- [16] S Sridhar and EJ Heller. Physical and numerical experiments on the wave mechanics of classically chaotic systems. *Physical Review A*, 46(4):R1728, 1992.
- [17] J. M.J. Giannoni, A.Voros and Zinn-Justin. Chaos et physique quantique, 1989.
- [18] S Sridhar. Experimental observation of scarred eigenfunctions of chaotic microwave cavities. *Physical review letters*, 67(7):785, 1991.
- [19] A Kudrolli and S Sridhar. Experiments on quantum chaos using microwave cavities: Results for the pseudo-integrable I-billiard. *Pramana*, 48(2):459–467, 1997.
- [20] Y-H Kim, M Barth, H-J Stöckmann, and JP Bird. Wave function scarring in open quantum dots: A microwave-billiard analog study. *Physical Review B*, 65(16):165317, 2002.
- [21] R Akis and DK Ferry. Ballistic transport and scarring effects in coupled quantum dots. *Physical Review B*, 59(11):7529, 1999.
- [22] Herbert Goldstein. *Classical mechanics*. Pearson Education India, 2011.
- [23] Florian Scheck. *Mechanics: from Newton's laws to deterministic chaos*. Springer Science & Business Media, 2010.
- [24] Walter Greiner. *Classical Mechanics: systems of particles and Hamiltonian dynamics*. Springer Science & Business Media, 2009.
- [25] Richard P Feynman, Albert R Hibbs, and Daniel F Styer. *Quantum mechanics and path integrals*. Courier Corporation, 2010.

- [26] Nouredine Zettili. Quantum mechanics: concepts and applications, 2003.
- [27] Divakar Viswanath. Symbolic dynamics and periodic orbits of the lorenz attractor. *Nonlinearity*, 16(3):1035, 2003.
- [28] Colin Sparrow. *The Lorenz equations: bifurcations, chaos, and strange attractors*, volume 41. Springer Science & Business Media, 2012.
- [29] Leonid A. Bunimovich. Mechanisms of chaos in billiards: Dispersing, defocusing and nothing else. *Nonlinearity*, 31(2):R78–R92, 2018.
- [30] Robert C Hilborn et al. *Chaos and nonlinear dynamics: an introduction for scientists and engineers*. Oxford University Press on Demand, 2000.
- [31] Michael T Rosenstein, James J Collins, and Carlo J De Luca. A practical method for calculating largest lyapunov exponents from small data sets. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 65(1-2):117–134, 1993.
- [32] Sandro. Wimberger. *Nonlinear dynamics and quantum chaos: An Introduction*. SPRINGER, 2016.
- [33] Michael V Berry. Chaos and the semiclassical limit of quantum mechanics (is the moon there when somebody looks?). *Quantum Mechanics: Scientific perspectives on divine action*, 41, 2001.
- [34] Martin C Gutzwiller. Periodic orbits and classical quantization conditions. *Journal of Mathematical Physics*, 12(3):343–358, 1971.
- [35] Valérie Doya, Olivier Legrand, Fabrice Mortessagne, and Christian Miniatura. Light scarring in an optical fiber. *Physical review letters*, 88(1):014102, 2001.
- [36] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M R Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. The electronic properties of graphene. *Reviews of Modern Physics*, 81(1):109–162, 2009.
- [37] Christoph W. Groth, Michael Wimmer, Anton R. Akhmerov, and Xavier Waintal. Kwant: A software package for quantum transport. *New Journal of Physics*, 16:1–19, 2014.
- [38] Neil W Ashcroft and N David Mermin. Solid state physics, 2010.
- [39] Supriyo Datta. *Quantum transport: atom to transistor*. Cambridge university press, 2005.