



Transporte electrónico en conductores con nanoporos y la presencia de moléculas

A. P. Aslla ^{*1,2} y P. H. Rivera¹

¹Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Lima, Perú

²Universidad Nacional Tecnológica del Cono Sur de Lima, Lima, Perú

Recibido 22 diciembre 2013 –Aceptado 25 febrero 2014

En este trabajo analizamos el transporte electrónico en conductores rectangulares en las que se insertan nanoporos que restringen el flujo de portadores. Al colocar moléculas en los nanoporos se observa que existen resonancias y antiresonancias en los coeficientes de transmisión cuando las orientaciones de las moléculas son paralelas o perpendiculares al flujo de portadores. El conductor es descrito mediante el método de enlaces fuertes (*tight-binding*), el cálculo de los coeficientes de transmisión a través del sistema se realiza mediante la fórmula de Landauer en el régimen balístico a bajas temperaturas y las funciones de Green fuera del equilibrio nos permite determinar la influencia de los contactos semi-infinitos sobre el conductor con nanoporos mediante un algoritmo recursivo. La presencia de moléculas en las partes centrales de los nanoporos también son descritos por sitios en la aproximación de enlaces fuertes.

Palabras claves: Transporte cuántico, transporte balístico, funciones de Green, fórmula de Landauer.

Electron transport in conductor with nanopore and the presence of molecules

In this work, we analyze the electron transport in rectangular conductors in which we insert a nanopore which restrict the carrier flux. Actually, to setup molecules at middle of the nanopore, we observe resonances and anti-resonances in the transmission coefficient when the molecule orientation is parallel or perpendicular to carrier flux. In our case, the conductor is described by a tight binding approximation, the transmission coefficients through the system are calculated by Landauer formula considering a ballistic regime at low temperatures and the out of equilibrium Green functions to permit us calculate the coupling of the leads with conductor including the nanopore and the molecules, recursively. The presence of the molecules at middle of the nanopore are described, also, by the tight binding approximation.

Keywords: Quantum transport, ballistic transport, Green functions, Landauer formula.

El transporte de carga a través de moléculas adheridas a dos electrodos metálicos semi-infinitos experimenta una conductancia que está perfectamente cuantizada en múltiplos de la unidad cuántica de la conductancia $G_0 = 2e^2/h$.

En los últimos años, el transporte de carga a través de sistemas moleculares ha despertado el interés de diferentes grupos de investigación. Y obviamente las moléculas que despiertan mayor interés son los cuatros monómeros o nucleótidos del ácido desoxirribonucleico, ADN, que consisten de dos partes, la primera es un azúcar, desoxirribosa, con un grupo fosfato adherido, mientras que la segunda es una base que puede ser la adenina (A), guanina (G), citosina (C) o timina (T) [1]. El esqueleto del ADN está formado por dos cadenas que forman los azúcares unidos a través de los grupos fosfatos y las bases se colocan perpendiculares a las cadenas de modo que unen a las mismas

pero sin repetir la base en el mismo lugar de las dos cadenas, las bases se unen como CG y AT, o GC y TA a través de dos pares ligados de hidrógeno [1].

Se han reportado estudios teóricos sobre el transporte de carga a través de algunas secuencias de ADN [2, 3] que pueden ser considerados desde el punto de vista de la física como nanohilos conectados a electrodos metálicos que en algunos estudios son los nanoribbons de grafeno [4]. Los resultados sustentan que esas secuencias de ADN tienen un comportamiento de semiconductor y muestran que la relación corriente-voltage de los segmentos depende de la longitud del nanohilo y en particular de la secuencia de los nucleótidos [4, 5].

Por otro lado, se ha sugerido que cuando un sistema conductor no son moléculas sino una red cristalina bidimensional como el grafeno con un nanoporo conectado a

*aaslla@untecs.edu.pe

dos contactos metálicos semi-infinitos debe presentar una conductancia que podría sensar moléculas que atraviesen el nanoporo de modo que la conductancia dependiese del tipo de molécula y la orientación de la misma al atravesar el nanoporo. De esa forma se podría identificar los nucleótidos del ADN sensando las bases que presentarían una señal particular y característica en la conductancia para cada base [6–10].

En el presente trabajo, hacemos un estudio bastante básico y fundamental de un nanoporo en un conductor rectangular adherido a dos contactos metálicos semi-infinitos donde el conductor y los contactos son emulados por una red cuadrada en la aproximación *tight-binding* a primeros vecinos. Sobre el nanoporo colocamos moléculas con orientaciones en el eje x e y y consideramos que las moléculas están débilmente acopladas al conductor.

Modelo

Un conductor adherido a dos contactos metálicos semi-infinitos con potenciales químicos determinados es un sistema abierto. Esto significa que los portadores de carga que proceden de izquierda a derecha con una energía igual al potencial químico del contacto izquierdo son esparcidos (*scattered*) por las interfaces contacto izquierdo-conductor y conductor-contacto derecho, de modo que al alcanzar el contacto derecho, los portadores de carga no regresan hacia el contacto izquierdo. De la misma forma, los portadores de carga que proceden de derecha a izquierda -con una energía igual al potencial químico del contacto derecho-, sufren esparcimiento (*scattering*) en las interfaces mencionadas y una vez alcanzado el contacto izquierdo no retornan más hacia el contacto derecho.

Considerando el punto de vista reduccionista y heurístico, los contactos y el conductor pueden ser emulados por redes cuadradas rectangulares semi-infinitas de sitios atómicos en el primer caso y por una red cuadrada de forma rectangular finita de sitios atómicos en el segundo. Esto es posible porque, cuando un portador de carga se mueve en una dimensión el hamiltoniano está conformado por la energía cinética y la energía potencial que sufre el portador. Cuando se discretiza la energía cinética se genera una matriz tridiagonal y cuando se hace lo mismo con la energía potencial se obtiene una matriz diagonal. Los elementos no diagonales de la matriz de energía cinética está dado por

$$t = -\frac{\hbar^2}{2m^*a^2} \quad (1)$$

donde m^* es la masa efectiva de los portadores de carga, a es el parámetro de red de la cadena lineal y \hbar la constante de Planck dividido entre 2π . Y los elementos diagonales de la matriz están dados por $U_j + 2t$, donde U_j es la energía potencial del punto de discretización j y a t se le denomina el término de acoplamiento entre los puntos que

resultan de la discretización de un sistema unidimensional (1D) [11]. Esta matriz producida por la discretización por diferencias finitas del hamiltoniano de un flujo de portadores de carga a través de un conductor unidimensional es equivalente al hamiltoniano de una cadena unidimensional de sitios heurísticos que se acoplan considerando orbitales atómicos tipo s a primeros vecinos en la aproximación de ligaciones fuertes (*tight-binding*) con un parámetro de *hopping* t [11] que emula el fondo de la banda de conducción de un semiconductor o un semimetal, donde m^* es la masa efectiva del electrón.

Por otro lado, para una red cuadrada rectangular finita de sitios atómicos con orbitales tipo s y acoplamiento a primeros vecinos, el hamiltoniano en primera cuantización está definido como

$$H = \sum_{i,j} E_s + \sum_{i,j} t_x [|i,j\rangle \langle i+1,j| + |i+1,j\rangle \langle i,j|] + t_y [|i,j\rangle \langle i,j+1| + |i,j+1\rangle \langle i,j|] \quad (2)$$

donde t_x y t_y son los parámetros de *hopping* a lo largo del eje x e y , respectivamente, y los índices i, j indican las posiciones discretas del los sitios de la red dadas por $(x_i, y_j) = (ia_x, ja_y)$.

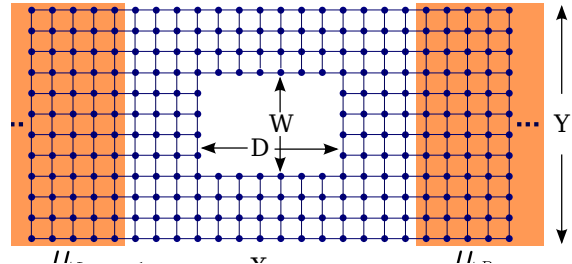


Figura 1: Representación esquemática de un nanoporo rectangular construido en una red cuadrada de forma rectangular finita conectado a dos electrodos semi-infinitos.

Un nanoporo es generado en la red cuadrada rectangular finita considerando la energía de los sitios en esa región un valor totalmente diferente mayor o menor que la energía de los sitios que rodean al nanoporo y también a los sitios de los contactos izquierdo y derecho, μ_L y μ_R , respectivamente y de la red rectangular $\mu_L - \mu_R$, como muestra el diagrama esquemático de la figura 1, donde el nanoporo de longitud D y ancho W es construido dentro de la red cuadrada finita de longitud X y ancho Y , que está conectada a los electrodos izquierdo y derecho que se identifican con los potenciales químicos μ_L y μ_R , respectivamente, el electrodo izquierdo constituye la fuente de cargas eléctricas y el electrodo derecho el sumidero. El análisis del transporte de portadores se estudia dentro de la formulación de Landauer [12, 13], donde la conductancia eléctrica G se expresa en función del coeficiente de

transmisión $T(E)$ como [14]

$$G(E) = \frac{2e^2}{h} T(E). \quad (3)$$

En este contexto, tenemos el primer proceso en que definimos la conductancia del sistema contacto izquierdo-conductor-contacto derecho; luego el segundo proceso en la que obtenemos la conductancia del sistema con un nanoporo incluido en el conductor y el tercer proceso, que involucra la presencia de moléculas en el centro del nanoporo y calculamos la conductancia del sistema.

Para simular el efecto de las moléculas -que se encuentran en el centro del nanoporo-, sobre la conductancia del sistema construimos un algoritmo que incluye el hamiltoniano de la molécula en el nanoporo considerando la interacción entre átomos de la propia molécula, así como la interacción entre la molécula con los sitios del borde que definen el nanoporo dentro de la aproximación *tight-binding*.

Funciones de Green

Para determinar los canales de transmisión en el dispositivo resolvemos la ecuación de autovalor del Hamiltoniano del sistema usando el método de las funciones de Green [11, 17]. La función de Green G_D del conductor con el nanoporo y las moléculas en el centro del nanoporo tal como se muestra en la figura 1 se obtiene como

$$G_D = \left[(E \pm i\eta)I - H_D - \Sigma_L - \Sigma_R \right]^{-1} \quad (4)$$

donde I es la matriz identidad, H_D el hamiltoniano del conductor que incluye al nanoporo y a las moléculas que se incluyen en el centro del mismo, $\pm i\eta \rightarrow 0$ es un número imaginario pequeño que permite obtener las funciones de Green retrasadas (-) y avanzadas (+); asimismo $\Sigma_{L,R}$ son las auto-energías asociadas a los electrodos izquierdo y derecho, respectivamente, y contienen toda la información de las interacciones que se producen en los contactos semi-infinitos como las interacciones electrón-fonón y electrón-electrón, los cuales no hemos considerado en el presente trabajo.

Para determinar las auto-energías de los contactos semi-infinitos usamos las ideas propuestas por Lee y Joannopoulos [15, 16] quienes consideran que los conductores semi-infinitos están formados por cadenas verticales finitas de sitios, $h_{l,r}$, que se acoplan a las cadenas verticales laterales y vecinas a izquierda y a derecha mediante una matriz diagonal, $V_{l,r}$, cuyos elementos incorporan las interacciones a primeros vecinos entre cada sitio de las cadenas verticales. Por tanto, las funciones de Green de los contactos izquierdo y derecho están dados por $g_l = V_l(1/h_l)V_l^\dagger$ y $g_r = V_r(1/h_r)V_r^\dagger$, respectivamente.

Luego las auto-energías de los contactos se determinan mediante $\Sigma_{L,R} = \Sigma_q$ siendo $\Sigma_q = H_{Dq}g_qH_{Dq}^\dagger$, siendo H_{Dq} la matriz de acoplamiento entre el conductor y

el contacto q y $H_{Dq}^\dagger = H_{qD}$ la matriz de acoplamiento del contacto q con el dispositivo. Para el cálculo de $g_{L,R}$ utilizamos el método recursivo de convergencia rápida sugerida por Sancho *et al* [18, 19].

Finalmente, el coeficiente de transmisión $T(E)$, se expresa como

$$T(E) = \text{Tr} \left[\Gamma_L G_D \Gamma_R G_D^\dagger \right] \quad (5)$$

donde $\Gamma_{L,R}$ son las funciones de acoplamiento de los contactos con el dispositivo y se determinan mediante $\Gamma_{L,R} = i(\Sigma_{L,R} - \Sigma_{L,R}^\dagger)$.

A partir de la función de Green, G_D , obtenemos también, la densidad de estados (DOS) que proporciona la cantidad de estados disponibles en un intervalo de energía,

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Tr} \left[\text{Im} \left[G_D(E) \right] \right]. \quad (6)$$

Resultados y discusión

En el presente trabajo simulamos el conductor como una red cuadrada finita de 20×20 sitios que poseen una periodicidad en las dos dimensiones de modo que los parámetros de red son $a_x = a_y$ considerando una interacción a primeros vecinos con una energía de acoplamiento $t_x = t_y$. Los contactos semi-infinitos conectados a ambos lados del conductor poseen la misma periodicidad espacial y la misma interacción energética a primeros vecinos. Debido a las reducidas dimensiones del sistema, los coeficientes de transmisión a través del conductor se cuantizan de forma tal como se observan en la figura 2.

La figura 2(a) muestra la evolución de la cuantización del coeficiente de transmisión con respecto a la energía y se puede apreciar que los valores del coeficiente de transmisión evolucionan desde 0 hasta 20. El valor 0 corresponde para los coeficientes de transmisión cuando la energía, $|E| > 4t_{x,y}$. Para estos valores de energía no existe transporte porque la energía de los portadores de carga son superiores o inferiores al ancho de la banda del sistema. Esto se corrobora observando la densidad de estados, DOS, cuyos resultados se muestran en la figura 2(b), observándose que para $|E| > 4t_{x,y}$ no existen la presencia de estados permitidos que permitan el transporte de portadores de carga.

El coeficiente de transmisión máximo de 20 ocurre porque la energía de los portadores alcanza el nivel del potencial químico $E = E_F = \mu(T = 0) = 0$, lo que implica que la mitad de la banda está llena de electrones. Asimismo, observamos que los saltos en la cuantización del coeficiente de transmisión ocurren en valores de energía donde la DOS presenta las discontinuidades de Van-Hove. Estos resultados son equivalentes con los coeficientes de transmisión y la DOS de una nanocinta formada por una red cuadrada de ancho $Y = 20a_x$, debido esencialmente a

la existencia del mismo número de canales de transmisión producidos por la cuantización espacial en la dirección y . Y en el formalismo de Landauer, los procesos de esparcimiento (*scattering*) que se producen en la red rectangular finita ocurren únicamente en las interfaces entre la red finita y los electrodos.

Los efectos en el transporte electrónico por la presencia de los nanoporos en el conductor rectangular se muestran en las figuras 2(c), (e) y (g), donde se observan que el coeficiente de transmisión disminuye conforme aumenta el ancho W del nanoporo, esto significa esencialmente que los canales de transmisión a través del conductor disminuyen. También se observa que la cuantización en nú-

meros enteros de $2e^2/h$ del coeficiente de transmisión se va diluyendo, asimismo observamos que el coeficiente de transmisión es independiente de la longitud D del nanoporo, corroborando el aspecto balístico del transporte. Las DOS que muestran las figuras 2(d), (f) y (h) indican una disminución progresiva respecto a la DOS sin poro, figura 2(a), principalmente en aquellos valores de energía donde la DOS presenta las discontinuidades de Van-Hove, esto verifica que el número de estados permitidos en el sistema y por ende los canales de transmisión a través de estos mismos estados disminuye por la presencia del nanoporo y el aumento del tamaño del nanoporo en la dirección y .

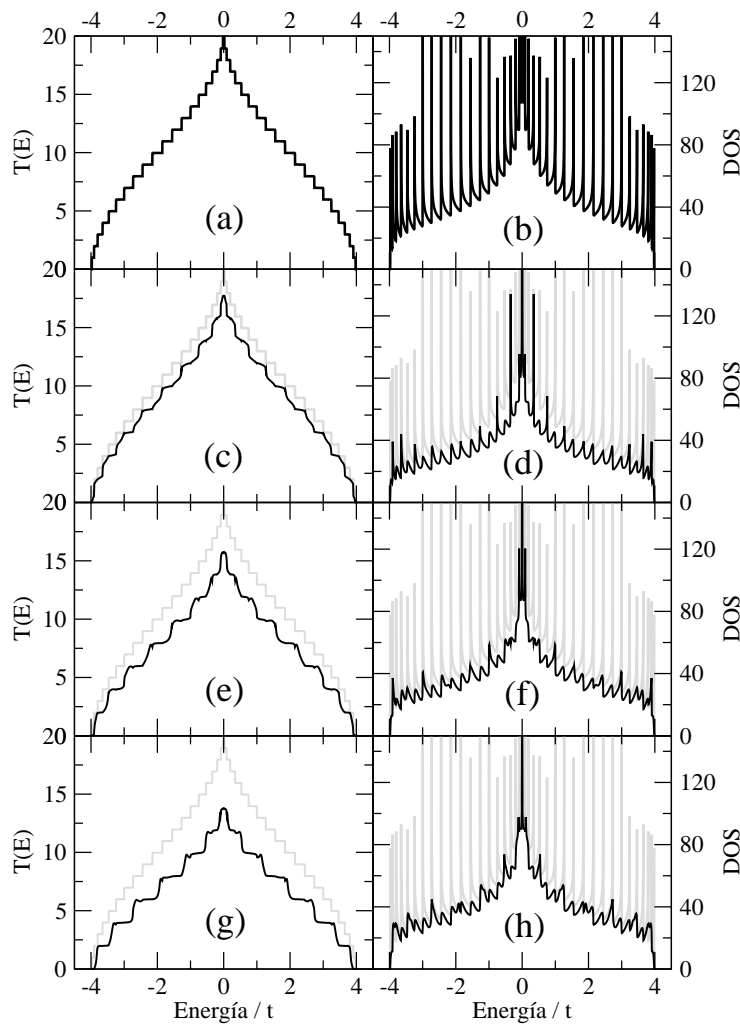


Figura 2: Se muestran los coeficientes de transmisión (izquierda) y las densidades de estados (derecha) para una red rectangular finita sin poros (a) y (b); para redes rectangulares con poros de $D = 9a_x$ y $W = 3a_y$, (c) y (d); $D = 9a_x$ y $W = 5a_y$, (e) y (f); y $D = 9a_x$ y $W = 7a_y$, (g) y (h), respectivamente.

A continuación escogemos un nanoporo cuadrado de dimensiones $D = W = 9a_x$, en el centro del mismo simulamos la presencia de una molécula unidimensional orientadas en la dirección x y luego otra molécula en la dirección y tal como se observa esquemáticamente en la Figura 3. Consideramos que las moléculas presentan una interacción entre sus átomos en el esquema *tight-binding* con parámetro de hopping t_m , de modo que el hamiltoniano molecular está dado por $H_m = \sum t_m [|i\rangle \langle i+1| + |i+1\rangle \langle i|]$, siendo $|i\rangle$ los autoestados de energía asociados a los orbitales tipo s de los sitios de los átomos. Asimismo la interacción entre el nanoporo y la molécula se asume un acoplamiento relativamente débil dentro de la aproximación *tight-binding*, de modo un átomo de la molécula interactúa con el primer sitio más próximo del nanoporo por medio del parámetro de hopping t_{mp} dado por

$$t_{mp} = -\frac{\hbar^2}{2mb^2} = -\frac{\hbar^2}{2m(r_{x,y}a_{x,y})^2} = \frac{t_{x,y}}{r_{x,y}^2} \quad (7)$$

siendo $b = r_{x,y}a_{x,y}$ la distancia en la dirección paralela x y perpendicular y a la corriente de portadores de carga.

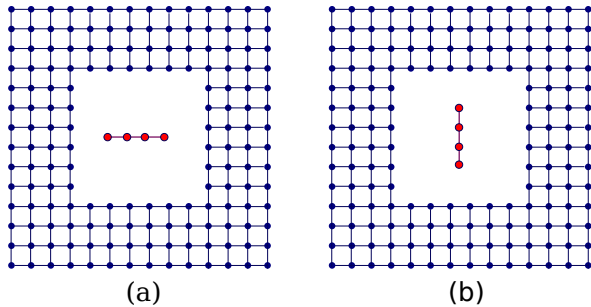


Figura 3: Representación esquemática de un nanoporo cuadrado con $D = W$ y una molécula de cuatro átomos colineales orientados en dirección paralela (a) y en la dirección perpendicular (b) al flujo de la corriente de portadores de carga.

Los resultados para el coeficiente de transmisión del sistema con un nanoporo de dimensiones $D = W = 9a_x$ en la cual se encuentra una molécula lineal de cuatro átomos con acoplamiento $t_m = t$ se muestran en la figura 4, donde las curvas en color negro representan los coeficiente de transmisión del sistema con nanoporo y la presencia de la molécula, mientras que las curvas en color azul corresponden a los coeficientes de transmisión del sistema con nanoporo sin la presencia de moléculas. La figura 4(a) corresponde al coeficiente de transmisión asociado al nanoporo con una molécula orientada paralelo al flujo de la corriente, Figura 3(a), donde se observa que la presencia de la molécula en el nanoporo produce unas oscilaciones en el comienzo de todas mesetas del coeficiente de transmisión debido a la interferencia de ondas incidentes y reflejadas en los bordes de los poros y además cuatro resonancias (ver en el *inset* de la Fig.4(a)) en cuatro valores de energía $E/t = \pm 0.62; \pm 1.62$, que corresponden estrictamente

a la distribución energética de los átomos en la molécula debido al acoplamiento entre los átomos que componen la molécula.

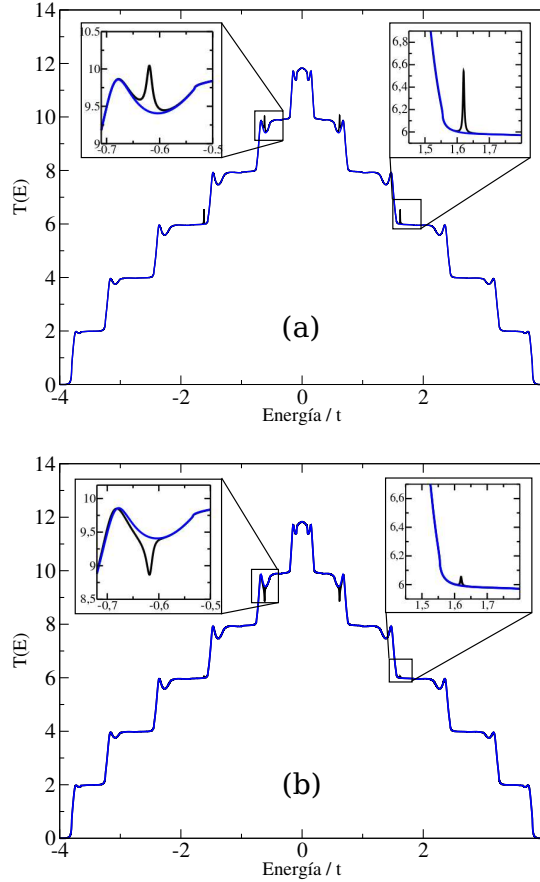


Figura 4: Se muestran los coeficientes de transmisión en un conductor con un nanoporo rectangular de dimensiones $D = W = 9a_x$, en la presencia de una molécula lineal con cuatro átomos orientada paralela (a) y perpendicularmente (b) al flujo de corriente eléctrica. En el primer caso se presentan resonancias y en el segundo anti-resonancias (ver *insets*).

En la figura 4(b) presentamos el coeficiente de transmisión del sistema con un nanoporo y con una molécula orientada perpendicularmente al flujo de portadores de carga, Figura 3(b), mostrando las mismas oscilaciones en el inicio de las mesetas y que deben a un proceso de interferencia en los bordes del nanoporo producidos por las ondas incidentes y reflejadas. Asimismo las resonancias observadas en el caso anterior próximos al potencial químico (para $T = 0$) o energía de Fermi se convierten en anti-resonancias (ver *inset* de la Fig.4(b)) mientras que para energías no muy próximas al nivel de Fermi, las resonancias disminuyen en intensidad hasta casi ser imperceptibles. Esto es un hecho interesante que presentan las moléculas lineales respecto al flujo de corriente, la distribución energética de

los estados acoplados de varios cuerpos de la molécula es invariante ante una rotación de $\pi/2$, pero ante la presencia de canales de transmisión en los contactos-conductor los autoestados de *bulk* de la molécula presenta resonancias o antiresonancias cuando su orientación es paralela o perpendicular al flujo de corriente.

Debido a que las resonancias y antiresonancias que se observan en los coeficientes de transmisión son pequeñas en intensidad, consideramos las variaciones del coeficiente de transmisión ΔT que resulta de la diferencia de los coeficientes de transmisión del sistema con nanoporo con y sin la presencia de la molécula. Los resultados que se muestran en la Figura 5 corresponden a $\Delta T(E)$ para el sistema con un nanoporo y con las moléculas orientadas paralelas al flujo de portadores de carga, cuyos componentes atómicos varían. Los resultados para una molécula con tres átomos se muestran en la Fig. 5(a) presentando las tres resonancias distribuidas de acuerdo a las energías de los estados acoplados de la molécula, $E/t = 0.0, \pm 1.43$; para una molécula compuesta por cuatro átomos, la Fig. 5(b), muestra las resonancias correspondientes a las energías de los cuatro estados acoplados $E/t = \pm 0.62, \pm 1.62$; para una molécula con 5 átomos, la Fig. 5(c), presenta las resonancias en $E/t = 0.0; \pm 1.0; \pm 1.73$; y finalmente, para una molécula compuesta por seis átomos, la Fig. 5(d), presenta las resonancias para las energías de los estados acoplados dados por $E/t = \pm 0.46, \pm 1.25, \pm 1.80$. Estos resultados indican exactamente la distribución espectral de la energía de acoplamiento de un número dado de átomos que conforman la molécula, asimismo observamos que la intensidad de las resonancias aumenta conforme el número de átomos de la molécula aumenta.

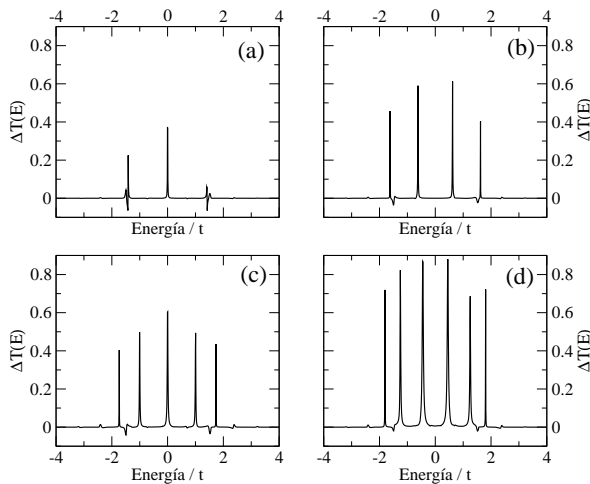


Figura 5: Variación del coeficiente de transmisión, ΔT , para un conductor con un nanoporo de dimensiones $D = W = 9a$ y con la presencia de moléculas lineales con varios átomos idénticos (a) 3 átomos, (b) 4 átomos, (c) 5 átomos y (d) 6 átomos, paralelos a la corriente de portadores de carga.

Analizamos el rol de las moléculas con diferentes con-

figuraciones que se muestran en la figura 6 que son colocadas en el centro del nanoporo rectangular de dimensiones $D = W = 9a_x$, teniendo en cuenta que cada átomo de la molécula interactúa con su vecino próximo con el parámetro de acoplamiento $t_m = t$. Los espectros correspondientes para ΔT se muestran en la figura 7, en los cuales las resonancias ocurren en las energías de los estados acoplados de regiones de la molécula que son paralelas a la corriente y las antiresonancias ocurren para energías de los estados acoplados de regiones de la molécula que son perpendiculares a la corriente. Obviamente las resonancias aumentan la conductancia y las antiresonancias la disminuyen.

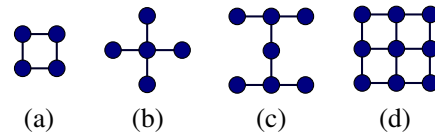


Figura 6: Diferentes tipos de moléculas que se consideran en el centro del nanoporo

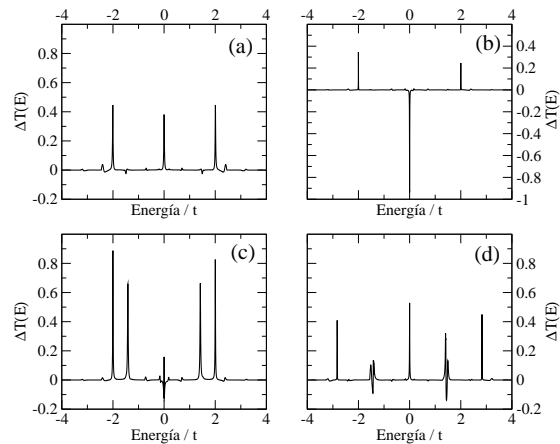


Figura 7: Variación del coeficiente de transmisión ΔT de nanoporo con $D = W = 9a$ bajo la presencia de moléculas representadas en la figura 6 respectivamente.

Finalmente, consideramos el efecto sobre la conductancia cuando la molécula está constituida por diferentes átomos. Existen dos formas de simular estos sistemas, la primera se realiza considerando valores diferentes de energía para los átomos de la molécula y la segunda, considerando valores diferentes para el acoplamiento entre los átomos de la molécula. En este trabajo, consideramos una molécula lineal compuesta por cuatro átomos y variamos los parámetros de acoplamiento para cada caso se muestran en la figura 8. En el primer caso, figura 8(a), observamos las resonancias, cuando el parámetro de acoplamiento para los átomos de la moléculas está dado por $t_m/t = 0.6$, para las energías $E/t = \pm 0.38, \pm 0.98$. Cuando los átomos de la molécula interactúan con $t_m/t = 0.8$, Fig. 8(b), las resonancias se presentan en las

energías $E/t = \pm 0.50, \pm 1.30$. Si los átomos de la molécula interactúan con $t_m/t = 1.2$, Fig. 8(c) las resonancias ocurren para las energías $E/t = \pm 0.75, \pm 1.95$, y si los átomos de la molécula interactúan con $t_m/t = 1.4$, Fig. 8(d), las resonancias se presentan en las energías $E/t = \pm 0.88, \pm 2.27$. En este último caso, para $E/t = \pm 2.27$, se presenta una resonancia y una antiresonancia, por la forma que se presenta parece ser una resonancia de Fano, en la que una resonancia de transmisión y reflexión coinciden para un valor de energía formando la línea asimétrica que se observa en este caso.

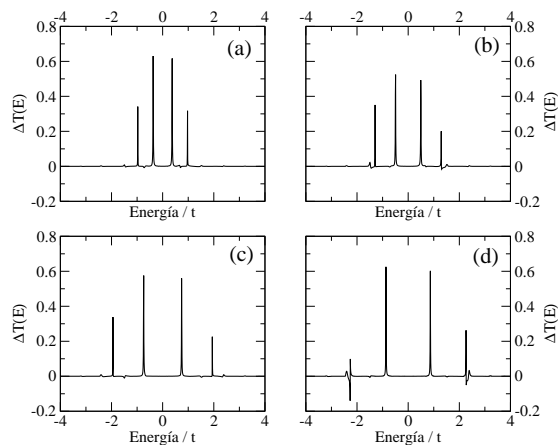


Figura 8: Variación del coeficiente de transmisión ΔT de un conductor con un nanoporo de dimensiones $D = W = 9a_x$ con la presencia de una molécula lineal de cuatro átomos que interactúan entre sí con diferentes valores de t_m/t (a) $t_m/t = 0.6$, (b) $t_m/t = 0.8$, (c) $t_m/t = 1.2$ y (d) $t_m/t = 1.4$.

Conclusiones

Las moléculas presentes en el centro del nanoporo rectangular producen resonancias en el espectro de ΔT que son característicos para cada tipo de molécula y dependiendo de los tipos y el número de átomos que lo conforman, siempre que la orientación de la molécula sea paralelo a la corriente. Cuando las moléculas están orientadas perpendicularmente a la corriente se presentan, para algunas energías de acoplamiento, antiresonancias que disminuyen la conductancia para esos valores de energía. Estas características que presentan los fenómenos de transporte en nanoestructuras proporcionan la posibilidad de utilizar los nanoporos como una técnica espectroscópica para el análisis de moléculas orgánicas, para tal fin se requiere construir una base de datos completa de cambios en la conductancia eléctrica (coeficiente de transmisión) producida por diferentes moléculas usando métodos más sofisticados como la teoría de funcionales por enlaces fuertes (*Density Functional-Tight Binding*) [20] y mejorar las técnicas experimentales que actualmente permiten medir los pequeños cambios en las características corriente-voltaje [6–10].

Agradecimientos

A. P. A. agradece a la “Asociación Familia Zúñiga y Rivero” por la beca otorgada para la redacción de la tesis de maestría que ha permitido a su vez culminar este trabajo. P. H. R. agradece al Consejo Superior de Investigación el apoyo financiero mediante los contratos N^os. 111301041, 121301071 y 131301081.

Referencias

- [1] B. Alberts, A. Johnson, J. Lewis, M. Raff, K. Roberts y P. Walter; *Molecular Biology of the Cell*, quinta edición, Garland Science, Taylor & Francis Group, New York (2008).
- [2] D. Klotsa, R. A. Römer y M. S. Turner; *Biophysical J.* **89**, 2187, (2005).
- [3] S. A. Wells, C.-T. Shih y R. A. Römer; *Int. J. Mod. Phys B* **10**, 2187, (2008).
- [4] C. J. Paez, P. A. Schulz, N. R. Wilson y R. A. Römer; *New J. Phys.* **14**, 093049, (2012).
- [5] J. Qi, N. Edirisinghe, M. G. Rabbani y M. P. Anantram; *Phys. Rev. B* **87**, 085404, (2013).
- [6] J. J. Kasianowicz, E. Brandin, D. Branton y D. W. Deamer; *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **93**, 13770 (1996).
- [7] S. Garaj, W. Hubbard, A. Reina, J. Kong, D. Branton y J. A. Golovchenko; *Nature* **467**, 190 (2010).
- [8] G. F. Schneider, S. W. Kowalczyk, V. E. Calado, G. Pandraud, H. W. Zandbergen, L. M. K. Vandersypen y C. Dekker; *Nano Lett.* **10**, 3163 (2010).
- [9] C. A. Merchant, K. Healy, M. Wanunu, V. Ray, N. Patterman, J. Bartel, M. D. Fischbein, K. Venta, Z. Luo, A. T. C. Johnson y M. Drndić; *Nano Lett.* **10**, 2915 (2010).
- [10] K. K. Saha, M. Drndić y B. K. Nikolić; *Nano Lett.* **12**, 50, (2012).
- [11] S. Datta; *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*; Primera edición, Cambridge University Press, New York (1999).
- [12] G. Metalidis y P. Bruno; *Phys. Rev. B* **72**, 235304, (2005).

- [13] D. K. Ferry, S. M. Goodnick y J. Bird; *Transport in Nanostructures*; Segunda edicion, Cambridge University Press, New York, (2009).
- [14] D. S. Fisher y P. A. Lee; Phys. Rev. B. **23**, 6851 (1981).
- [15] P. A. Lee y J. D. Joannopoulos; Phys. Rev. B **23**, 4988 (1981).
- [16] P. A. Lee y J. D. Joannopoulos; Phys. Rev. B **23**, 4997 (1981).
- [17] L. Huang, Y. C. Lai, D. K. Ferry, R. Akis y S. M. Goodnick; J. Phys.: Condens. Matter **21**, 344203, (2009).
- [18] M. P. L. Sancho, J. M. L. Sancho y J. Rubio; J. Phys. F: Met. Phys. **14**, 1205, (1984).
- [19] M. P. L. Sancho, J. M. L. Sancho y J. Rubio; J. Phys. F: Met. Phys. **15**, 851, (1985).
- [20] P. Koskinen y V. Mäkinen; Comput. Mater. Sci. **47**, 237 (2009).