

03471



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS
DIVISION DE ESTUDIOS DE POSGRADO

SIMULACION ANALOGICA DE LOS EFECTOS
ANARMONICOS EN UNA RED CUASI-
PERIODICA BIDIMENSIONAL.

T E S I S

Que para obtener el Grado Académico de

MAESTRA EN CIENCIAS
(Ciencia de Materiales)

p r e s e n t a

ROSALBA FUENTES RAMIREZ

México, D. F.

1993

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

INDICE

INTRODUCCION

CAPITULO 1: Fundamentos sobre Materiales Sólidos

- 1.1 Materiales Ordenados**
- 1.2 Materiales Desordenados**
- 1.3 Excitaciones Elementales en Sólidos**

CAPITULO 2: Cuasicristales

- 2.1 Materiales Cuasicristalinos**
- 2.2 Modelos para explicar los cuasicristales**
- 2.3 Funciones Cuasiperiódicas**
- 2.4 La Secuencia de Fibonacci**
- 2.5 La Red de Penrose**

CAPITULO 3: Simulación Analógica

- 3.1 Bases de la simulación**
- 3.2 Descripción de la Red Cuasiperiódica**
- 3.3 Respuesta Espectral de la Red**
- 3.4 Distribuciones Espaciales de Amplitud**
- 3.5 Efectos no Lineales en los Eigenmodos**

CONCLUSIONES

APENDICE

- A.1 Simetría Cinco**
- A.2 Ecuaciones del Circuito**

BIBLIOGRAFIA

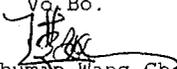
RESUMEN

En este trabajo, se estudia la localización de la función de onda en una red bidimensional artificial, tanto para el caso periódico como cuasiperiódico.

A través de esta simulación, de tipo analógica, se tiene también la posibilidad de analizar los efectos no lineales en los modos propios de vibración, lo cual, es importante por ejemplo para el caso de la expansión térmica y otros, por que las ecuaciones diferenciales que describen el comportamiento anarmónico no tiene solución exacta en general.

Los resultados obtenidos sugieren que el comportamiento de una red cuasiperiódica a temperaturas elevadas sera muy similar al de una red periódica, esto es, por ejemplo, la conductividad térmica y el calor específico de un cuasicristal real deben tener el mismo comportamiento que un cristal, cuando la interacción anarmónica se convierte en una parte importante de las interacciones.

Vo. Bo.


Dr. Chumin Wang Chen
Asesor

Introducción

Los cuasicristales descubiertos en la década de los ochentas (Shechtman, 1984), presentan un nuevo tipo de orden atómico, ni cristalino ni amorfo. La importancia del estudio de este material se debe, por un lado a que ha provocado una revisión detallada sobre los conceptos básicos en la física del estado sólido y, por otro lado ha abierto una nueva universalidad de materiales, los cuales podrían tener importantes aplicaciones tecnológicas, puesto que la estructura de bandas en dicho material es completamente exótica en el sentido de que presenta bandas permitidas y prohibidas de ancho infinitesimal y de forma fractal.

La localización de la función de onda en los cuasicristales constituye uno de los aspectos más controvertidos. Los estudios teóricos, predicen la existencia de *eigen*-estados críticos en redes cuasiperiódicas de una (Kohmoto, 1987) y dos dimensiones (Ma, 1989), por lo tanto, se esperan peculiaridades en las propiedades de transporte derivadas de dichas funciones de onda (Ueda, 1987). Sin embargo, actualmente existe una falta de concordancia entre los resultados experimentales y los teóricos, por ejemplo, los resultados de transporte en cuasicristales reales todavía son poco claros y no presentan las peculiaridades esperadas (Biggs, 1990). Sin embargo, se han obtenido resultados muy interesantes en sistemas cuasiperiódicos artificiales. Como ejemplos de éstos se tienen: primeramente, la realización de una superred siguiendo la secuencia de Fibonacci (Merlin, 1985). El espectro obtenido de la dispersión Raman en dicha superred, ha mostrado la existencia de dobles incommensurados de la zona de Brillouin para las bandas acústicas (Wang, 1988). Otra realización consiste en un arreglo de juntas de Josephson en forma de red de Penrose (Behrooz, 1987). El espectro de la susceptibilidad magnética muestra una distribución de picos que sigue la razón áurea (Springer, 1987). Otro estudio más relevante para estudiar la localización de la función de onda en cuasicristales, consiste en conectar un conjunto de diapasones también en forma de la red de Penrose y se excitan con ondas acústicas (He, 1989). Sin embargo, en este último experimento por un lado se requieren equipos sofisticados y, por otro lado la cuantificación exact. de la amplitud de onda es sumamente difícil.

En esta tesis, se reporta una observación directa de la localización de la función de onda en una red cuasiperiódica artificial, la cual consiste en un conjunto de osciladores *LC*, interconectados de acuerdo a la red de Penrose. El experimento se realiza aplicando una corriente alterna monocromática a la red y se miden los *eigen*-modos vibracionales de la red (Wang, 1991 y Fuentes, 1992), ya que existe la equivalencia entre las ecuaciones de Kirchhoff y las ecuaciones de movimiento de los fonones isotrópicos. Este experimento tiene la virtud de ser sencillo e ilustrativo, y no requiere de equipos complejos. Con el fin de aislar los efectos de la cuasiperiodicidad se realizó también el mismo experimento en una red periódica bidimensional.

Por otro lado, como la suposición de oscilaciones atómicas pequeñas parece ser razo-

nable para la mayoría de los sólidos, uno concluiría que las correcciones anarmónicas son de interés exclusivamente para cálculos de alta precisión. Sin embargo, esto es incorrecto, ya que en muchos fenómenos físicos la participación de las interacciones anarmónicas es determinante, como es el caso de la expansión y conducción térmica, o la variación de los *eigen*-modos fonónicos con la temperatura. Con esta simulación analógica, se tiene la posibilidad de analizar los efectos no lineales en los *eigen*-modos de vibración. Los efectos no lineales se observan con facilidad en dicha simulación analógica aumentando el voltaje de alimentación del experimento, puesto que la amplitud de vibración se asocia con el voltaje local. Esto representa una alternativa y es otro objetivo importante, dado que, las ecuaciones diferenciales anarmónicas no tienen solución exacta en general.

La presente tesis, está organizada de la manera siguiente: en el primer capítulo se revisan los conceptos físicos fundamentales para sistemas tanto periódicos como desordenados. En el segundo se define la cuasiperiodicidad y se analizan dos ejemplos concretos: la cadena de Fibonacci y la red de Penrose. El tercer capítulo describe en detalle el experimento, desde el método de construcción, los elementos utilizados y su caracterización, hasta la medición de la distribución de amplitud. Asimismo, se analiza el corrimiento de los *eigen*-valores debido a los efectos no lineales.

Capítulo 1

FUNDAMENTOS SOBRE MATERIALES SOLIDOS

Los materiales pueden clasificarse en metales, cerámicos, polímeros y materiales compuestos (Askeland, 1985). Cada uno de estos materiales tiene distintas propiedades y por lo tanto, distintas aplicaciones. En los materiales existe una estrecha relación entre estructura y sus propiedades. El comportamiento físico de éstos, se describe por medio de sus propiedades mecánicas, eléctricas, magnéticas, ópticas y térmicas. La estructura de un material puede analizarse desde dos niveles: la estructura atómica y el ordenamiento atómico del material. Ambos afectan a su comportamiento físico. En el nivel de la estructura de los átomos, se considera que la distribución de los electrones afecta de manera significativa al comportamiento del material, influyendo el arreglo electrónico en la forma en que se unen los átomos entre sí. En el siguiente nivel, el ordenamiento atómico, se refiere a la organización de los átomos en el espacio. Algunos materiales tienen una organización atómica regular denominada estructura cristalina, y otras llamadas amorfas no presentan una distribución atómica ordenada. Por ejemplo, el caso del carbono en su estructura de diamante, el tipo de unión que presenta es direccional, entonces entre más se superponen los orbitales de ligadura, más intensa es la unión y consecuentemente posee extrema dureza. Ahora bien, con objeto de analizar el ordenamiento atómico, tomemos un caso notable de polimorfismo: el diamante y el grafito. Las diferencias entre ambos radica exclusivamente en el tipo de estructura que presentan. El diamante como se mencionó, tiene enlaces direccionales con ángulos bien definidos entre sí tridimensionalmente y presenta propiedades de un aislante. En cambio, el grafito tiene sus átomos unidos covalentemente según ordenaciones hexagonales planas con uniones débiles del tipo Van der Waals entre los planos. Por esto, el grafito es anisotrópico en sentido de que conduce la electricidad y el calor mucho más fácilmente en direcciones paralelas a los planos que perpendicularmente a ellos. En resumen, el ordenamiento atómico es un factor importante que determina las propiedades macroscópicas de un material. Dicha determinación, a partir de la naturaleza microscópica del sólido es precisamente uno de los objetivos

principales de la Ciencia de Materiales.

1.1 MATERIALES ORDENADOS

La materia puede encontrarse en estado sólido, líquido o gaseoso, dependiendo principalmente de las fuerzas de interacción entre las partículas que la constituyen y de las condiciones externas tales como la presión y la temperatura. El estado sólido es el que posee la mayor fuerza de interacción en general y puede dividirse en base a su ordenamiento atómico en dos categorías: los amorfos y los cristalinos. A grandes rasgos, se puede decir que los amorfos poseen poca o ninguna regularidad en la forma en que los átomos están acomodados en el espacio. En cambio, los cristales son estructuras atómicas ordenadas tridimensionalmente.

Para estudiar la geometría de los cristales existe una abstracción matemática de su estructura atómica, la cual está representada por una red regular de puntos, en la que cada punto puede ser ocupado por uno o un grupo de átomos. Esta red puede generarse por tres vectores de traslación fundamentales (\vec{a} , \vec{b} , \vec{c}), tales que en todos los aspectos el arreglo atómico visto desde el punto \vec{R} es idéntico al que corresponde al punto

$$\vec{R}' = \vec{R} + n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c} = \vec{R} + \vec{T}, \quad (1.1)$$

donde \vec{T} es el vector de traslación y n_1 , n_2 y n_3 son números enteros.

En un cristal las operaciones de traslación determinan el modo de repetición y, la simetría puntual fija las posiciones de los átomos en la celda unitaria, la cual, constituye la menor subdivisión de la red que retiene sus características generales. Ahora bien, en una estructura cristalina sólo son compatibles, con la simetría de traslación exigida por la ecuación (1.1), las operaciones de simetría de rotación $2\pi/n$ donde n puede tomar únicamente los valores 1, 2, 3, 4, y 6. Por lo tanto, una de las simetrías de rotación prohibida es la de quinto orden, (ver apéndice A.1). Sólo existen catorce arreglos posibles de puntos, en un espacio tridimensional, que retienen la simetría completa de un cristal. A estos arreglos se les conoce como redes de Bravais.

Para las estructuras cristalinas, la red recíproca juega un papel importante en muchos estudios analíticos, como por ejemplo, la teoría de difracción en cristales. La red recíproca puede generarse por tres vectores de traslación fundamentales (\vec{a}^* , \vec{b}^* , \vec{c}^*), los cuales están relacionados con los tres vectores de traslación (\vec{a} , \vec{b} , \vec{c}) de la red directa de la siguiente forma:

$$\vec{a}^* = \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} \quad (1.2)$$

$$\vec{b}^* = \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} \quad (1.3)$$

$$\vec{c} = \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} \quad (1.4)$$

La red recíproca es el conjunto de todos los vectores de onda \mathbf{k} que producen ondas planas con la periodicidad de una red de Bravais dada. Dicho analíticamente, \mathbf{k} corresponde a la red recíproca de una red de Bravais de un conjunto de puntos \vec{R}_i , tal que la relación $e^{i\mathbf{k} \cdot (\vec{r} + \vec{R}_i)} = e^{i\mathbf{k} \cdot \vec{r}}$ se cumple para cualquier \vec{r} y para todo \vec{R}_i en la red de Bravais. Por lo tanto, la red recíproca puede caracterizarse como el conjunto de vectores de onda \mathbf{k} que satisfacen $e^{i\mathbf{k} \cdot \vec{R}} = 1$, para toda \vec{R} en la red de Bravais. La red recíproca tiene la virtud de que todas las propiedades del sólido pueden estudiarse dentro de la primera zona de Brillouin (Kittel 1976). Esto se debe a que el origen (el punto Γ) del espacio recíproco corresponde al infinito del espacio directo.

En los sólidos cristalinos, los átomos muestran un ordenamiento de largo alcance. Existen dos tipos de orden de largo alcance, uno orientacional y otro traslacional. Por ejemplo, consideremos una red bidimensional periódica (Fig.1.1) en la cual cada punto posee una jaula hexagonal (celda unitaria) a su alrededor, de tal forma que la red pueda descomponerse en celdas unitarias hexagonales. El orden orientacional de largo alcance puede observarse en la característica de que todos los hexágonos tienen la misma orientación, ésto es, los lados de cada hexágono son paralelos a los lados de los otros hexágonos a través de toda la red. Por otro lado, el orden traslacional se nota si dibujamos una familia de líneas paralelas en la red, espaciadas con una distancia exactamente igual, que puede trasladarse de un lugar a otro y coincidir con las líneas de cualquier otra familia en otra parte de la red.

La regularidad del acomodamiento de los átomos en un sólido se debe en gran medida a las condiciones geométricas impuestas por la direccionalidad de las uniones entre los átomos. Dichas uniones se determinan a partir de la función de onda electrónica. Por lo tanto, el estudio del comportamiento electrónico no sólo es importante en la caracterización de las propiedades del sólido, sino también en la propia formación del mismo.

Existen diversos modelos que intentan describir el comportamiento de los electrones en los sólidos cristalinos. Uno de los primeros fue propuesto por Drude en 1900, el cual funciona moderadamente bien sólo en los cristales metálicos monovalentes y, se le conoce como el modelo del electrón libre (McKelvey, 1972). Entre sus logros más importantes se encuentra la predicción aproximada de la relación entre la conductividad eléctrica y la térmica de los electrones. El modelo desprecia tanto la interacción entre los electrones entre sí como con los iones positivos. Sommerfeld en 1927 mejoró el modelo considerando que los electrones actúan como las partículas libres de un gas sometidas sólo a las limitaciones de la estadística de Fermi-Dirac. Sin embargo, dicho modelo no es capaz de explicar por qué los materiales presentan propiedades de conducción que varían desde un buen conductor hasta un típico aislante, entre los cuales la diferencia de la conductividad es de aproximadamente 30 órdenes de magnitud. Para este fin surgió la teoría de bandas, la cual considera la simetría traslacional del sistema y la presencia de un solo electrón

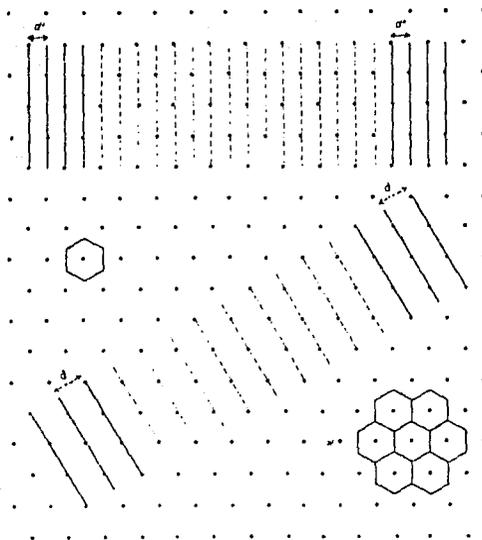


Figura 1.1: Las dos clases de orden de largo alcance que son inherentes en cristales convencionales son ilustradas en una red periódica bidimensional: El patrón puede ser descompuesto en hexágonos con un átomo en su centro. Entonces, el hexágono como celda unitaria del cristal (esquina inferior derecha) tiene la misma orientación en cualquier otra parte (como el del centro a la derecha). Lo que indica el orden orientacional en la red. El orden traslacional es demostrado usando la familia de líneas paralelas que corre de la esquina inferior izquierda a la parte central a la derecha de la red, cuando la líneas son dibujadas cada punto es incluido en una o en otra y la distancia entre ellas es exactamente la misma. Hay varias familias, otra es dibujada en la parte superior de la figura, la distancia entre las líneas puede variar de una familia a otra. La posición y dirección de las líneas en cualquier parte de la red puede ser determinada por traslación (moviéndolas a cualquier otra parte de la red).

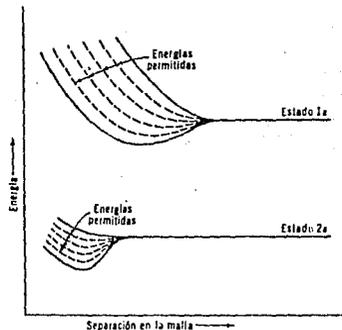


Figura 1.2: En la molécula lineal de seis átomos de hidrógeno, al acercar los átomos el acoplamiento entre los átomos aumenta y los niveles de energía se dividen como se observa. En un sólido puede llegar a considerarse los niveles atómicos ensanchados a bandas de energía permitida.

sometido a un potencial periódico, el cual incluye la distribución periódica de carga de los iones situados en los puntos reticulares y el potencial promedio aportado por los demás electrones de valencia. A partir de esta teoría se puede calcular las funciones de onda del electrón, llamadas funciones de Bloch, que son soluciones de la ecuación de Schrödinger para un potencial periódico, y están dadas (Kittel, 1976) por :

$$\psi_{\mathbf{k}}(\vec{r}) = U_{\mathbf{k}}(\vec{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\vec{r}}, \quad (1.5)$$

donde $U_{\mathbf{k}}(\vec{r})$ tiene el período de la red cristalina, es decir, $U_{\mathbf{k}}(\vec{r}) = U_{\mathbf{k}}(\vec{r} + \vec{T})$. Un electrón descrito por estas funciones de Bloch, tiene la misma probabilidad de estar en todas las celdas unitarias de la red. A estos estados se les denomina estados extendidos.

Con el fin de entender el origen de las bandas electrónicas en sólidos, consideraremos primeramente dos átomos idénticos que se aproximan entre sí. Al ser átomos idénticos, éstos poseen los mismos estados electrónicos del átomo. Al entrar en interacción entre sí cada par de estados electrónicos degenerados se desdoblan en dos niveles con energías diferentes. Para un sistema de N átomos, se formarán N niveles por cada nivel del átomo aislado y estos N niveles estarán asociados con una o más bandas (Fig. 1.2). En ciertos casos existe superposición de bandas, por ejemplo, el sodio metálico. Los espacios entre las bandas permitidas son energías prohibidas, denominándoseles, bandas prohibidas o

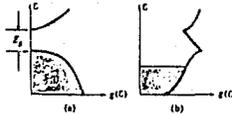


Figura 1.3: En un aislante existe una región prohibida de energía que separa el nivel ocupado más alto y el nivel desocupado más bajo (a). En un metal la frontera se encuentra en una región de niveles permitidos (b).

brechas de energía. Dependiendo de dicha brecha de energía los materiales pueden ser caracterizados (Fig. 1.3). Es decir, a temperatura cero absoluto los aislantes presentan una brecha de energía entre la cima de la banda llena más alta y el fondo de la banda vacía más baja. En los conductores, no existe dicha brecha de energía. En cambio, cuando la temperatura es diferente de cero, en los semiconductores existe la probabilidad de que algunos electrones sean excitados y crucen la brecha de energía a la banda desocupada más baja, ya que en estos materiales, la dimensión de la brecha de energía es menor que 3 eV. (McKelvey, 1976).

En un cristal real, el potencial que experimenta un electrón es de suma complejidad, y no se conoce en general *a priori*. La manera de enfrentar esta dificultad, se basa en la teoría de perturbaciones a través de dos enfoques diferentes: la aproximación del electrón casi libre y la aproximación de enlace firme (*tight binding*). En la aproximación del electrón casi libre, se considera que la energía total del electrón es mayor que la energía potencial periódica. En estas condiciones, las bandas permitidas son anchas y las prohibidas angostas. En cambio, en la aproximación del enlace firme se considera que la energía potencial del electrón representa casi toda la energía. En este caso, las bandas permitidas son angostas. Las funciones de onda y niveles de energía permitidos de todo el cristal estarán íntimamente relacionados con las funciones de onda y niveles de energía de los átomos aislados respectivamente. La aplicación de la aproximación correcta depende del tipo de material particular en cada caso.

En el modelo de enlace firme, las funciones de onda se basan en las funciones de Wannier que son transformadas de Fourier de las funciones de Bloch. Las funciones de Wannier constituyen una base alternativa para expresar la solución general de la ecuación de Schrödinger, y son ortogonales y centradas en los puntos de la red (Kittel, 1976). Dichas funciones no se conocen *a priori*, ya que constituyen la solución del problema.

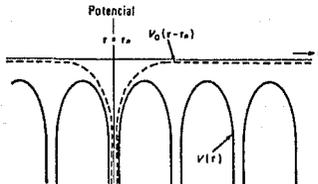


Figura 1.4: Funciones de potencial usado en el cálculo de la aproximación de enlace firme.

Por lo tanto, en la práctica las sustituyen por los orbitales atómicos (ψ_0), como una aproximación de las funciones de Wannier. De esta forma, la función de onda electrónica del sólido $\psi_{\mathbf{k}}(\vec{r})$ se escribe como una superposición lineal de funciones de onda atómicas de la siguiente forma:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\vec{r}) = N^{1/2} \sum_n e^{i\mathbf{k} \cdot \vec{r}_n} \psi_0(\vec{r} - \vec{r}_n) . \quad (1.6)$$

donde \vec{r}_n es la posición del n -ésimo átomo y la suma se realiza sobre todos los puntos de la red. Esta función de onda satisface la ecuación de Schrödinger para todo el cristal, con un potencial $V(\vec{r})$ (Fig. 1.4) que representa el campo periódico de la red cristalina, éste es,

$$H\psi_{\mathbf{k}} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right) \psi_{\mathbf{k}} = E\psi_{\mathbf{k}} \quad (1.7)$$

El operador hamiltoniano se puede escribir como la suma de dos partes,

$$H = H_0 + H' , \quad (1.8)$$

siendo

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_0(\vec{r} - \vec{r}_n) \quad (1.9)$$

y

$$H' = V(\vec{r}) - V_0(\vec{r} - \vec{r}_n) , \quad (1.10)$$

donde H' representa el hamiltoniano de perturbación para el electrón en el cristal en comparación con el átomo aislado.

La energía electrónica $E(\mathbf{k})$ se puede encontrar determinando el valor esperado de H , (McKelvey, 1976), obteniéndose:

$$E(\mathbf{k}) = \int \psi_{\mathbf{k}}^*(H_0 + H')\psi_{\mathbf{k}} dv \quad (1.11)$$

$$E(\mathbf{k}) = E_0 + \frac{1}{N} \sum_m \left\{ \sum_n e^{i\mathbf{k}(\vec{r}_n - \vec{r}_m)} \int \psi_0^*(\vec{r} - \vec{r}_m)[V(\vec{r}) - V_0(\vec{r} - \vec{r}_n)]\psi_0(\vec{r} - \vec{r}_n) dv \right\}. \quad (1.12)$$

En el cristal por la periodicidad la suma se realiza sobre todos los valores de n , cada término de la suma sobre m nos dará el mismo valor. Esto es, el valor de la suma sobre m será el de cualquier término de la suma (para mayor claridad, tomaremos cuando $m = 0$) multiplicado por el número (N) de términos de dicha suma. Por tanto, la ecuación para la energía se puede escribir como sigue:

$$E(\mathbf{k}) = E_0 + \sum_n e^{i\mathbf{k}\vec{r}_n} \int \psi_0^*(\vec{r})[V(\vec{r}) - V_0(\vec{r} - \vec{r}_n)]\psi_0(\vec{r}) dv, \quad (1.13)$$

donde la suma se realiza sobre todos los átomos del cristal. Sin embargo, puesto que la función atómica ψ_0 decrece rápidamente con la distancia y, puesto que las magnitudes de las integrales en la Ec. (1.13) están gobernadas esencialmente por el grado de superposición entre dos funciones de onda centradas en átomos separados por distancias \vec{r}_n , las contribuciones de los términos de la suma se reducen con gran rapidez conforme aumenta \vec{r}_n . Por lo tanto, como una primera aproximación se considerarán sólo los términos de vecinos más cercanos. Y se supone que las funciones de onda ψ_0 son esféricas (estados s). La extensión a los estados p es directa (Mott, 1958).

Para $n = 0$, la integral de la Ec. (1.13) se convierte en

$$\int \psi_0^*(\vec{r})[V(\vec{r}) - V_0(\vec{r})]\psi_0(\vec{r}) dv = \alpha, \quad (1.14)$$

mientras que, para los átomos más cercanos,

$$\int \psi_0^*(\vec{r})[V(\vec{r}) - V_0(\vec{r})]\psi_0(\vec{r} - \vec{r}_n) dv = \beta, \quad (1.15)$$

en donde \vec{r}_n es un vector que relaciona al átomo en el origen con el átomo vecino más cercano. De esta forma podemos escribir la, Ec. (1.13), como sigue

$$E_{\mathbf{k}} = E_0 + \alpha + \beta \sum_n e^{i\mathbf{k}\vec{r}_n}. \quad (1.16)$$

A esta última relación se le conoce como la relación de dispersión.

Por otro lado, utilizando la notación de Dirac y en la representación de las funciones de Wannier, el hamiltoniano de enlace firme dentro de la aproximación de vecinos más cercanos puede escribirse como:

$$H = \epsilon_0 \sum_i |i\rangle\langle i| + \beta \sum_{\langle i,j \rangle} |i\rangle\langle j|, \quad (1.17)$$

donde $|i\rangle$ es la función de Wannier centrada en el sitio i y el conjunto de sitios $\{i\}$ forman la red. Los elementos diagonales de la matriz del hamiltoniano (ϵ_0) representa la energía de ocupación en el sitio i y los elementos fuera de diagonal de la matriz (β) son las amplitudes de transferencia de un electrón del sitio i al sitio j , siendo i y j vecinos más cercanos, el cual se indica por $\langle i, j \rangle$.

Una forma de resolver la ecuación de Schrödinger correspondiente a este hamiltoniano es por medio de las funciones de Green. La función de Green independiente del tiempo puede definirse (Economou 1983) como la solución de la ecuación diferencial inhomogénea del tipo

$$[E - H(r)]G(r, r'; E) = \delta(r - r'), \quad (1.18)$$

donde la energía es una variable compleja ya que la función de Green presenta singularidades en el eje real de E . $H(r)$ es el operador hamiltoniano independiente del tiempo, y posee un conjunto completo de *eigen*-funciones $\{\phi_n(r)\}$, es decir,

$$H(r)\phi_n(r) = E_n\phi_n(r), \quad (1.19)$$

donde, $\{\phi_n(r)\}$ satisface las mismas condiciones a la frontera que $G(r, r'; E)$.

El estudio de las funciones de Green en el caso cuántico resulta más conveniente realizarlo utilizando la notación de Dirac, para lo cual escribimos las siguientes definiciones

$$\begin{aligned} \phi_n(r) &\equiv \langle r | \phi_n \rangle, \\ \delta(r - r')H(r) &\equiv \langle r | H | r' \rangle, \\ G(r, r'; E) &\equiv \langle r | G(E) | r' \rangle, \\ \langle r | r' \rangle &\equiv \delta(r - r'), \\ \int dr |r\rangle\langle r| &= 1. \end{aligned}$$

En esta notación se puede escribir

$$(E - H)G(E) = 1$$

$$H|\phi_n\rangle = \lambda_n|\phi_n\rangle$$

$$\begin{aligned} \langle \phi_n | \phi_m \rangle &= \delta_{nm} \\ \sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| &= 1. \end{aligned}$$

Si los *eigen*-valores de $E - H$ no son cero, es decir, si $E \neq \{\lambda_n\}$, podemos escribir la función de, $G(E)$, como:

$$G(E) = \frac{1}{E - H}. \quad (1.20)$$

De donde obtenemos

$$G(E) = \frac{1}{E - H} \sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = \sum_n \frac{1}{E - H} |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = \sum_n \frac{|\phi_n\rangle \langle \phi_n|}{E - \lambda_n}. \quad (1.21)$$

Entonces, la función de Green, que se define a través de la ecuación $(E - H)G = 1$, está dada por:

$$G(E) = \sum_k \frac{|k \rangle \langle k|}{E - E(k)}, \quad (1.22)$$

donde en lugar el conjunto completo de *eigen*-funciones ϕ_n se sustituye por

$$|k \rangle = N^{-1/2} \sum_l e^{ikl} |l\rangle \quad (1.23)$$

y $E(k) = E_0 + \alpha + \beta \sum_l e^{ikl}$. Aquí, $|k \rangle$ y $|l \rangle$ son las funciones de Bloch y de Wannier, respectivamente. Los elementos de matriz para $G(E)$ están dados de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} G(l, m; E) &\equiv \langle l | G(E) | m \rangle = \sum_k \frac{\langle l | k \rangle \langle k | m \rangle}{E - E(k)} \\ &= \frac{\Omega}{2\pi N} \int_{1BZ} dk \frac{e^{ik(l-m)}}{E - E(k)}, \end{aligned} \quad (1.24)$$

el símbolo $1BZ$ indica que la integral se realiza dentro de la primer zona de Brillouin.

Las singularidades de $G(E)$ que se encuentran en el eje real de E pueden ser usadas para calcular la densidad de estados por unidad de volumen (Economou, 1983)

$$\rho(r; \lambda) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im} \{ G^\pm(r, r'; E) \}. \quad (1.25)$$

Para una red unidimensional, $E(k) = \epsilon_0 + 2\beta \cos(ka)$, siendo $\epsilon_0 = E_0 + \alpha$. Entonces, en este caso la función de Green tiene la siguiente forma:

$$G(l, m; E) = \frac{L}{2\pi N} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk \frac{e^{ik(l-m)}}{E - \epsilon_0 - 2\beta \cos(ka)}. \quad (1.26)$$

Evaluando esta integral, encontramos que la densidad de estados por sitio está dada como:

$$\rho(E) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im} \{ G^\pm(l, l; E) \} = \frac{\theta(2\beta - |E - \epsilon_0|)}{\pi \sqrt{4\beta^2 - (E - \epsilon_0)^2}}, \quad (1.27)$$

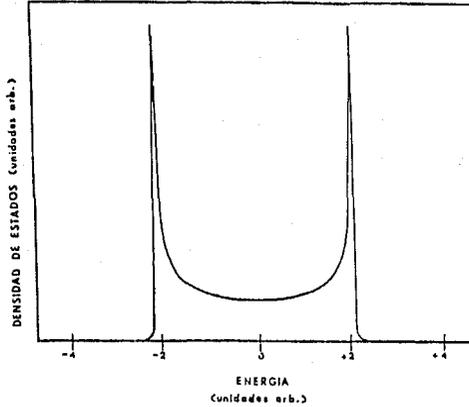


Figura 1.5: Densidad de estados electrónicos de una cadena periódica infinita que resulta del modelo de amarre fuerte. Los parámetros empleados en este modelo son: $\epsilon_0 = 0$ y $\beta = -1$, así como una pequeña parte imaginaria en la energía.

donde $\theta(2\beta - |E - \epsilon_0|)$ es la función escalón. La densidad de estados para una cadena lineal infinita se muestra en la figura 1.5 donde $\epsilon_0 = 0$, $\beta = -1$ y con una pequeña parte imaginaria en la energía (10^{-3}). Cabe señalar que la densidad de estados para la cadena lineal tiene singularidades de Van Hove (Kittel, 1976) en $E = \epsilon_0 \pm 2\beta$ y que los estados permitidos se encuentran dentro de estos límites.

En el caso de una red cuadrada, $E(\mathbf{k}) = \epsilon_0 + 2\beta[\cos(k_1 a) + \cos(k_2 a)]$. Por lo tanto, la función de Green es:

$$G(l, m; E) = \frac{a^2}{(2\pi)^2} \int_{1BZ} d^2 k \frac{e^{i\mathbf{k}(l-m)}}{E - \epsilon_0 - 2\beta[\cos(k_1 a) + \cos(k_2 a)]} \quad (1.28)$$

donde $\mathbf{k}(l - m) = a[k_1(l_1 - m_1) + k_2(l_2 - m_2)]$. Aquí l_1, l_2, m_1, m_2 son enteros, a es la constante de red y en este caso la primera zona de Brillouin es el cuadrado

$$-\pi/a \leq k_1 < \pi/a$$

$$-\pi/a \leq k_2 < \pi/a$$

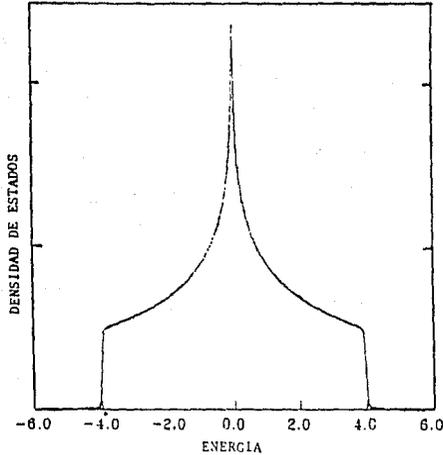


Figura 1.6: Densidad de estados electrónicos para el caso de una red cuadrada, periódica e infinita, que resulta del hamiltoniano de amarre fuerte. Los parámetros empleados en este hamiltoniano son: $\epsilon_0 = 0$ y $\beta = -1$, así como una pequeña parte imaginaria en la energía.

Evaluando la integral anterior (Economou 1983), encontramos que la densidad de estados por sitio para el caso de dos dimensiones viene dada por:

$$\rho(E) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im}(G^{\pm}(l, l; E)) = \frac{2}{2\pi^2\beta} \theta(2\beta - |E - \epsilon_0|) \mathbf{K} \left(\sqrt{1 - \frac{(E - \epsilon_0)^2}{4\beta^2}} \right), \quad (1.29)$$

donde \mathbf{K} es la integral elíptica completa de primera clase. En la figura 1.6 se muestra gráficamente la solución de la ecuación anterior para $\epsilon_0 = 0$, $\beta = -1$ y con una pequeña parte imaginaria en la energía del orden de 10^{-6} .

El método de las funciones de Green permite conocer la evolución temporal de un sistema, ya que todas las cantidades físicas medibles pueden escribirse en términos de la función de Green. Se puede considerar a estas funciones como propagadores, por lo que pueden visualizarse físicamente como funciones que correlaciona la acción externa a un sistema con la respuesta del mismo en cualquier otro punto del espacio-tiempo.

En resumen, se conocen las dos soluciones extremas del problema de los estados electrónicos en sólidos, que son por un lado la de ondas planas, y por el otro, los estados atómicos individuales. En el primer caso, el potencial y la parte periódica de las funciones de Bloch se expresan como una combinación lineal de ondas planas, reduciéndose el problema de la ecuación de Schrödinger a resolver una ecuación secular. En el otro caso, se tienen las funciones de Wannier que son funciones centradas en los sitios i , parecidas a las funciones orbitales atómicos, pero ortogonales entre sí.

En una red periódica ideal los electrones no son dispersados por la red, puesto que las funciones de Bloch son coherentes con la distribución atómica. Por lo tanto, la resistencia eléctrica de un cristal perfecto idealizado es cero. En sólidos reales los efectos térmicos y los defectos inherentes crean el fenómeno resistivo eléctrico. Sin embargo, la existencia de los fonones -los modos normales de vibración- no siempre obstruyen la conducción eléctrica. Por ejemplo, los fonones son fundamentales para la existencia de la superconductividad (Bardeen, 1957). Un conocimiento detallado de los modos normales es importante para predecir muchas propiedades físicas de los sólidos.

1.2 MATERIALES DESORDENADOS

La mayoría de los materiales que existen en el universo son sistemas desordenados en su estructura, y se pueden clasificar según el tipo de desorden que presenten. El desorden sustitucional, se obtiene cuando ciertos átomos de un cristal perfecto se cambian por otros aleatoriamente. Por ejemplo, en una aleación $A_x B_{1-x}$ donde x es la concentración de átomos A . En este caso puede todavía definirse una red cristalina, pero se desconoce qué tipo de átomo se encontrará en cada lugar y se provoca que la vecindad de la impureza se distorsione de alguna manera. Otro tipo de desorden es el topológico, en el que no hay rastro de una red cristalina. En particular, las dislocaciones son el tipo más débil de desorden topológico. Existen también, el desorden en las ligaduras, cuya existencia en el material da como resultado amorfos durables, por ejemplo el caso del silicio amorfo, ya que las ligaduras covalentes son altamente direccionales causando restricciones que deben ser satisfechas. Así la mayor diferencia entre el silicio cristalino y el amorfo reside en la variación en los ángulos de los enlaces, lo que provoca la pérdida de la periodicidad. Por último también existe desorden en la orientación del momento magnético en ciertos materiales magnéticos, (Ziman, 1979). Cabe mencionar que hasta la fecha no se ha logrado encontrar una explicación unificada a todos los materiales desordenados proveniente de principios básicos, incluso es difícil agruparlos, pues generalmente se parecen más a ellos mismos en su fase cristalina que a otro material con un desorden diferente (Taguena, 1983).

Los materiales desordenados no presentan orden de largo alcance, sin embargo, sigue existiendo otro tipo de orden: el orden de corto alcance. Existen correlaciones entre un átomo y sus vecinos cercanos que son importantes para cierto tipo de propiedades. Un

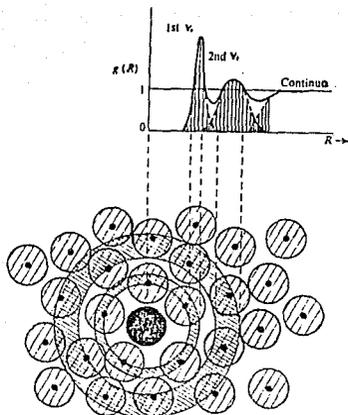


Figura 1.7: Características de la función de distribución radial en un material desordenado.

parámetro que puede ayudar en el análisis del orden de corto alcance es la función de distribución radial $g(R)$, definida como la probabilidad de encontrar un átomo en una esfera de radio R alrededor del origen escogido. La función de distribución radial para un cristal perfecto dará picos agudos que corresponden a los sitios atómicos vecinos. En el caso desordenado el problema es más complejo y la interpretación es más difícil. En la figura 1.7 se puede observar que el primer pico está relacionado con los primeros vecinos, el segundo que se encuentra menos definido corresponde a los segundo vecinos y de ahí en adelante cada vez es más difícil la interpretación para el sólido amorfo. El área debajo del primer pico debe dar el número de primeros vecinos z , y así sucesivamente para los demás, pero debido a que la respuesta se va haciendo tan ancha ya no se puede precisar exactamente el área comprendida,

$$z = \int_{1er\text{pico}} g(R) 4\pi R^2 dR. \quad (1.30)$$

Cabe hacer notar que la función de distribución radial se determina por los experimentos de difracción, debido a que ésta se encuentra relacionada con el factor de estructura $S(q)$, el cual a su vez se determina a partir de la distribución de la intensidad del haz difractado $I(q)$ (Ziman, 1979), de la siguiente manera:

$$S(q) = 1 + n \int g(R) e^{-iq \cdot R} d^3 R \quad (1.31)$$

y,

$$I(q) = N^{-1} S(q) |u(q)|^2 \quad (1.32)$$

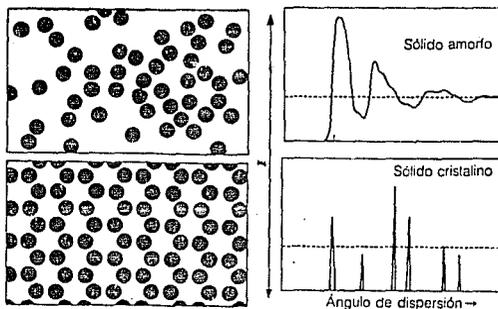


Figura 1.8: Intensidad de la radiación dispersada como función del ángulo de dispersión.

donde $u(q)$ es la transformada de Fourier de un potencial atómico simple, q es el vector de dispersión, n densidad de sitio y N densidad por unidad de volumen. En la figura 1.8 se muestra I para los casos de sólido amorfo y cristalino.

Por otro lado, cuando hay desorden, aunque se sigue hablando de bandas, ya no existe un esquema común, sino modelos particulares. Sin embargo existen algunos conceptos y características generales con los cristales. Por ejemplo, en lo que se refiere al estudio de las propiedades electrónicas la densidad de estados $N(E)$ sigue siendo un concepto clave y válido en los sistemas desordenados. La densidad de estados multiplicada por un incremento de energía da el número de estados que puede tomar un cierto electrón en dicho intervalo de energía. Los resultados experimentales de la densidad de estados para cristales y materiales desordenados no son muy diferentes, excepto que se pierden detalles finos y aparecen nuevos estados llamados localizados. Un estado localizado implica que el electrón queda atrapado en cierta región del espacio y por lo tanto, no contribuyen a la conducción en forma convencional. Existe otra forma de conducción por saltos, en la cual el electrón tendrá que tunear de una zona localizada a otra. Esto es, en los sólidos desordenados, se tienen también, bandas permitidas y prohibidas en sentido de movilidad. En estas últimas, existen algunos estados permitidos parecidos en parte a los estados locales ordinarios de los cristales cuando poseen defectos. Y como los estados localizados debido a los defectos forman una banda que se encuentra en la banda prohibida de movilidad.

El análisis de las bandas energéticas de un sólido desordenado se efectúa resolviendo

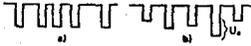


Figura 1.9: Energía potencial a) modelo de Lifshitz b) modelo de Anderson.

La ecuación de Schrödinger para un electrón en un campo de potencial aperiódico. El potencial aperiódico puede ser descrito a través de dos modelos (Fig. 1.9): En el modelo de Lifshitz se representa a través de desplazar cada átomo una distancia aleatoria, en cambio, el modelo de Anderson se agrega una energía potencial U_0 aleatoria a cada pozo de potencial.

Puede lograrse una definición cuantitativa de la localización a través del potencial utilizado por Anderson. En este modelo se plantea que los átomos que ocupan los puntos de una red tridimensional tienen un único estado de autoenergía E_n para el sitio n . Ahora bien, si todos los E_n son iguales se tiene una banda de energía cuyo ancho es I . Para el caso de los estados en una red desordenada, se considera una distribución estadística de E_n sobre un rango de ancho U_0 . Entonces, en el instante $t = 0$ el electrón se encuentra en uno de los pozos. Cuando t tiende a infinito, Anderson obtuvo que el cociente U_0/I , indica si el estado es extendido o localizado. Esto es, si el cociente es mayor que cierto valor crítico, no hay difusión y todos los estados serán localizados. En cambio, en el caso de que el cociente sea menor que el valor crítico, el cual depende de la naturaleza del sistema, en el centro de la banda surgen estados deslocalizados (Fig. 1.10). Puede decirse, que en el modelo de Anderson habrá más estados localizados, conforme aumenta el desorden. Se puede demostrar que en sistemas unidimensionales este valor tiende a cero (Ziman, 1979). Otro análisis al respecto, es la relación de la localización con la dimensionalidad, en este sentido, se encuentra que en el caso unidimensional todas las *eigen*-funciones son localizadas con un infinitesimal desorden (Mott y Twose, 1961). El caso bidimensional la situación es muy similar al unidimensional. Para sistemas de tres dimensiones existen tanto estados localizados como extendidos dependiendo del valor del cociente entre el parámetro del desorden y el ancho de la banda (Ziman, 1979).

Mott en 1977 postula que el espectro de la densidad de estados puede ser dividido por las llamadas líneas de movilidad dentro de rangos donde casi todos los estados son localizados o todos son extendidos. La dependencia de la densidad de estados respecto a la energía, se muestra en la figura 1.11, tanto para un cristal, así como para una estructura desordenada. La diferencia entre las propiedades de dieléctricos, semiconductores y metales que presentan los sólidos desordenados dependerá del nivel de Fermi. Si éste se encuentra en la región de estados no localizados, se tendrá un metal. Si el nivel de Fermi

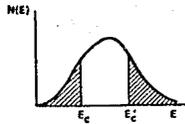


Figura 1.10: Densidad de estados en el modelo de Anderson. Los estados localizados son representados por las zonas rayadas.

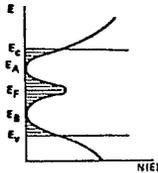


Figura 1.11: Dependencia de la densidad de estados respecto a la energía para a) un cristal, b) y c) sólidos amorfos. Los estados localizados se han representado por zonas rayadas.

a temperaturas bajas está en el intervalo de energía ocupado por los estados localizados, será semiconductor o dieléctrico. Existiendo dos tipos de conducción en este caso: 1) la traslación de los portadores de carga por los estados no localizados, excitando electrones de estados localizados a no localizados. 2) la traslación por saltos de un estado localizado a otro (Pávlov, 1987).

1.3 EXCITACIONES ELEMENTALES EN SÓLIDOS

A partir de la década de los cincuentas, el método de la teoría de campos ha resuelto exitosamente problemas como las oscilaciones colectivas de plasmas en metales y la superconductividad. Tal éxito ha provocado una introducción sistemática del concepto de excitaciones elementales en el estudio de los sólidos. Con dicha teoría se ha logrado que la mayoría de los problemas teóricos pueden ser tratados desde un punto de vista y método unificados.

Los sólidos es un sistema macroscópico formado del orden de 10^{23} partículas por mol y, constituye un sistema complejo de muchas partículas. Consecuentemente se tiene que resolver un sistema de ecuaciones del mismo orden cuando se intenta aplicar la mecánica cuántica a los sólidos. Sabemos que hoy día por medio de supercomputadoras se han resuelto sólo problemas del orden de 10^5 ecuaciones acopladas.

La teoría de excitaciones elementales nos brinda un nuevo enfoque para tratar problemas de muchos cuerpos. Describe el estado del sistema, a partir de su estado base, simplemente contando el número de cuantos del movimiento colectivo de las partículas microscópicas en el sólido, bajo determinadas interacciones. Es decir, se estudian solamente los primeros estado excitados, siendo de gran utilidad cuando la perturbación externa es pequeña. Con esta teoría se reduce el problema de muchos cuerpos a un gas ideal de cuasipartículas con energía y quasi-momento bien definidos. En un cristal perfecto, la simetría traslacional asegura que cualquier excitación elemental se puede especificar por un vector de onda k , que se encuentra dentro de la primera zona de Brillouin, y un indicador de banda j . Siendo b^{\dagger} y b los operadores de creación y aniquilación de la excitación, respectivamente, el Hamiltoniano correspondiente tiene la siguiente forma:

$$H = \sum_{j,k} E_j(k) b_j^{\dagger}(k) b_j(k) \quad (1.33)$$

donde $E_j(k)$ es la energía de la excitación (j, k) y los operadores satisfacen determinadas relaciones de conmutación.

Las excitaciones elementales en sólidos pueden clasificarse en colectivas y locales. Las colectivas son definidas como cuantos del movimiento colectivo de las partículas microscópicas en el sólido. Por ejemplo: los fonones o cuantos de vibración de la red,

los plasmones u oscilaciones colectivas de los electrones en los metales y los magnones o cuantos de ondas de espín. Estas excitaciones se caracterizan por tener pequeña desviación del parámetro de orden que identifica al estado base del sistema y generalmente son bosones. Por otro lado, las locales son excitaciones individuales, por ejemplo: los polarones o cuantos de movimiento conjunto del electrón y los iones positivos, y los excitones o cuantos que describen el movimiento correlacionado entre un electrón y un hueco.

Como un ejemplo de las excitaciones elementales, a continuación se analizará en detalle los cuantos de vibración en sólidos o fonones. Se ha considerado según la mecánica cuántica que los átomos en los sólidos, independientemente de si son ordenados o desordenados, vibran siempre alrededor de su posición de equilibrio. Esto significa que se estudia ya no una red estática, sino dinámica, en la cual, los desplazamientos de los átomos respecto a su posición de equilibrio sean siempre mucho menores respecto a la distancia interatómica. Esto conduce a la aproximación armónica, que ha dado resultados en excelente concordancia con las propiedades del sólido observadas. Los movimientos de los átomos están correlacionados. Y a estos movimientos coherentes de todos los átomos del sólido se les denomina modos normales de vibración que tienen una frecuencia de vibración asociada. A estos modos normales de vibración se les conoce como: cuanto de vibración o fonón.

Considérese el caso de una cadena lineal de N átomos neutros con la misma masa M y separado cada átomo de sus vecinos por una distancia a referida a sus posiciones de equilibrio. Se supone que cada átomo vibra a lo largo de la recta, y que posee en este sistema un solo grado de libertad, en tanto que el sistema en conjunto, cuenta con N grados de libertad. Entonces l indica la posición de equilibrio de los átomos en la cadena. Y $q_l(t)$ el desplazamiento en cierto instante t del l -ésimo átomo respecto de su posición de equilibrio en el punto de coordenada $x_l = la$. Considerando que el acoplamiento entre los átomos puede caracterizarse por una fuerza armónica en términos del modulo f y que el átomo considerado sólo interacciona en mayor medida con los dos átomos vecinos más próximos. Entonces, la fuerza resultante (cuasielástica) que actúa sobre el átomo l -ésimo es:

$$F_l = f(q_{l+1} - q_l) - f(q_l - q_{l-1}) = f(q_{l+1} + q_{l-1} - 2q_l) \quad (1.34)$$

De acuerdo a la segunda ley de Newton, la ecuación de movimiento del l -ésimo átomo puede expresarse

$$M \frac{d^2 q_l}{dt^2} = f(q_{l+1} + q_{l-1} - 2q_l) \quad (1.35)$$

Para ver resolución de la ecuación de movimiento es importante declarar las condiciones de frontera, las cuales permiten establecer el intervalo de las variaciones de los números de onda y su número de valores permisibles en tal intervalo. Entonces, se asume que la cadena es un ciclo cerrado porque las coordenadas están sujetas a la condición de frontera periódica $q_{l+N} = q_l$. La solución de la ecuación de movimiento tiene la forma

$$q_l(t) = \frac{1}{N^{1/2}} e^{ikla} B_{\mathbf{k}}(t), \quad (1.36)$$

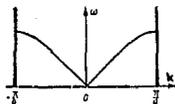


Figura 1.12: Ley de dispersión para una cadena atómica

en donde sólo N vectores de onda (k) son no equivalentes, k es el número de onda y las funciones e^{ikla} son ortogonales. En la primera zona de Brillouin esos vectores son

$$k = \frac{2l\pi}{Na} \quad (1.37)$$

donde l es un entero con intervalo $-N/2 < l < N/2$. El factor $\frac{1}{\sqrt{N}}$ garantiza la normalización. $B_k(t)$ es una amplitud que depende del número de onda y puede determinarse su variación respecto al tiempo, sustituyendo la ecuación del número de onda en la ecuación de movimiento. A partir de lo anterior puede encontrarse la relación entre número de onda y frecuencia, conocida como relación de dispersión para la propagación de una onda en una cadena atómica lineal (Fig. 1.12).

$$\omega = 2\left(\frac{f}{M}\right)^{\frac{1}{2}} |\sin(k\frac{a}{2})| \quad (1.38)$$

donde puede verse que la frecuencia de las oscilaciones del l -ésimo átomo no depende de la posición l . Ahora bien, puede deducirse que para $|k| = 2\pi/\lambda = \pi/a$, la frecuencia cíclica de las vibraciones alcanza el valor máximo. Por otro lado, la velocidad de propagación de la onda acústica en esta cadena lineal de átomos depende de la longitud de onda. La Ec.1.38 describe las ondas que se propagan con una velocidad de fase ($v_f = \omega/k$) y con una velocidad de grupo ($v_g = d\omega/dk$), que se anula en $k = \pi/a$, esto, significa que dichos modos de vibración caracterizan en esta cadena a las ondas estacionarias.

La solución general de la ecuación lineal de movimiento se puede escribir como la superposición de ondas del tipo de la Ec. (1.36), y dado que $H = T + V$, con $T = \sum_i \frac{1}{2} \dot{q}_i^2$, $V = \frac{1}{2} f \sum_i (q_i - q_{i+1})^2$ y $\dot{q}_i = \frac{1}{M} p_i$, podemos escribir el hamiltoniano como:

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2M} + \frac{1}{2} f \sum_i (q_i - q_{i+1})^2, \quad (1.39)$$

El sistema de masas puntuales está descrito por las coordenadas q_1 a q_N y los momentos canónicos correspondientes p_1 a p_N , los cuales, cumplen las relaciones conmutativas siguientes:

$$p_n q_l - q_l p_n = \frac{\hbar}{i} \delta_{ln} \quad (1.40)$$

$$q_i q_n - q_n q_i = 0 \quad (1.41)$$

y

$$p_n p_l - p_l p_n = 0. \quad (1.42)$$

Entonces, ya que

$$q_l = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{N^{1/2}} e^{i\mathbf{k}l\mathbf{a}} B_{\mathbf{k}} + B_{\mathbf{k}}^*, \quad (1.43)$$

si se introducen nuevas amplitudes $b_{\mathbf{k}}$ y $b_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ de acuerdo a

$$B_{\mathbf{k}}(t) = \left[\frac{\hbar}{2Mw_{\mathbf{k}}} \right]^{1/2} b_{\mathbf{k}}, \quad (1.44)$$

con la relación de conmutación:

$$b_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}'}^{\dagger} - b_{\mathbf{k}'}^{\dagger} b_{\mathbf{k}} = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \quad (1.45)$$

el hamiltoniano en función de los nuevos operadores $b_{\mathbf{k}}$ y $b_{\mathbf{k}}^{\dagger}$, se expresa:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \hbar w_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \hbar w_{\mathbf{k}} \quad (1.46)$$

El segundo término representa la energía de la vibración en el punto cero y puede ser omitida si éste es escogido apropiadamente. De manera que la ecuación de Schrodinger para la cadena lineal atómica es:

$$\left(\sum_{\mathbf{k}} \hbar w_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{\mathbf{k}} \right) \Phi = E \Phi. \quad (1.47)$$

La solución (Haken, 1976)

$$\Phi_{n_{\mathbf{k}}} = \prod_{\mathbf{k}} \frac{1}{(n_{\mathbf{k}}!)^{1/2}} (b_{\mathbf{k}}^{\dagger})^{n_{\mathbf{k}}} \Phi_0, \quad (1.48)$$

se interpreta como: En el estado estacionario las ondas de la red de número de onda \mathbf{k} son ocupadas por $n_{\mathbf{k}}$ partículas llamadas fonones. El operador $n_{\mathbf{k}} = b_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ da el número de cuantos en el estado \mathbf{k} , en un medio elástico será el número de fonones ocupando la onda \mathbf{k} .

Capítulo 2

CUASICRISTALES

En 1984, Shechtman y colaboradores, encontraron un material que parecía violar uno de los más viejos y fundamentales teoremas de la cristalografía, precisamente el de la exclusión de la simetría de quinto orden. Este descubrimiento despertó gran agitación, así como también confusión en muchos círculos científicos. Estos materiales poseen una estructura exótica, diferente tanto de los cristales como de los amorfos, esto es, no es periódica ni es aleatoria. Los patrones observados por Shechtman, del material $Al_{0.86}Mn_{0.14}$ enfriado rápidamente (10^6 grados Kelvin/seg.), mostraron simetría correspondiente al grupo puntual ($m\bar{3}5$) icosaedroal en ciertas zonas. En la figura 2.1 se muestran los patrones de esta aleación con simetría icosaedroal (seis ejes de simetría rotacional de quinto orden, diez de tercer orden y quince de segundo orden). El grano analizado presenta un orden a largo alcance orientacional, pero no simetría traslacional, es decir, parece tener un orden que es inherente a los cristales, pero simétrico en formas que son imposibles físicamente para cualquier sustancia cristalina. El orden atómico observado en estos materiales representaba a un nuevo tipo, ni cristalino ni amorfo. Entonces, se define a los cuasicristales como estructuras con orden aperiódico de largo alcance con simetrías de rotación cristalográficamente prohibidas (ejes de rotación de quinto, octavo, décimo y doceavo orden), (Goldman, 1993). Estudios teóricos inmediatos al descubrimiento del cuasicristal icosaedroal mostraron (Levine, 1984) que la red icosaedroal tiene una transformada de Fourier que coincide exactamente con el patrón obtenido en forma experimental por Shechtman. Se ha considerado además, que son proyecciones de una estructura periódica en un espacio de mayor dimensión, lo cual se discutirá en detalle más adelante. Este hallazgo y las investigaciones al respecto han generado una detallada revisión de los conceptos tanto en la física del estado sólido como en la cristalografía. Por ejemplo, en la cristalografía han permitido ampliar las tablas de los grupos espaciales, avanzar en la comprensión del desorden. Por otro lado en la física del estado sólido se ha obtenido, entre otras cosas, estructuras de bandas completamente exóticas. Por último, se ha realizado un gran esfuerzo en la búsqueda de aleaciones cuasicristalinas termodinámicamente estables. Hoy día, se conocen decenas de familias diferentes de cuasicristales.

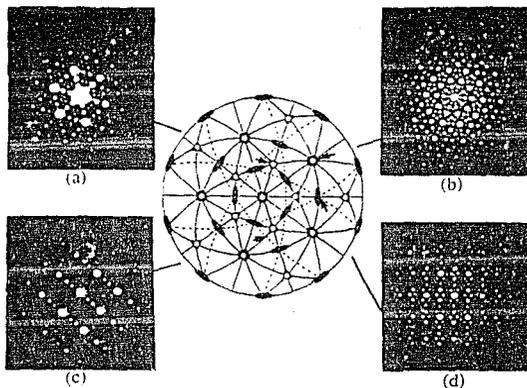


Figura 2.1: Patrones de difracción de electrones de un grano simple de la fase icosaedroal.

2.1 MATERIALES CUASICRISTALINOS

En general, en un material sólido el comportamiento es característico del arreglo atómico, como se discutió en el capítulo anterior. Los cristales poseen simetría traslacional, la cual está ausente en los amorfos. En cambio, los cuasicristales son estructuras que pertenecen a una nueva clase de orden atómico exhibiendo orden traslacional cuasiperiódico de largo alcance y orden de largo alcance orientacional con simetría cristalográfica prohibida, (Fig. 2.2). Las primeras aleaciones cuasicristalinas, fueron de la fase icosaedroal siendo obtenidas por templado rápido de la aleación $AlMn$ y resultando termodinámicamente metaestables. Sin embargo, se tienen otros cuasicristales, por ejemplo, la fase decagonal de $AlMn$ (Bendersky, 1985) y fases octagonal y dodecagonal de aleaciones de Si-metales de transición (Ishimasa, 1985 y Chen, 1988).

Durante el segundo lustro de los ochentas, se han realizado grandes esfuerzos para sintetizar aleaciones cuasicristalinas, porque se registro la existencia de algunas fases termodinámicamente estables, así como el alto grado de orden estructural en ciertas fases, de esta forma, las investigaciones tanto teóricas como experimentales, han provocado el

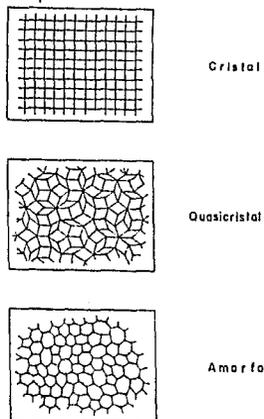


Figura 2.2: Arreglos bidimensionales de las estructuras cristalina, cuasicristalina y amorfa.

impetú por buscar propiedades inusuales en la red cuasiperiódica (Poon, 1992) Además de la aleación observada por Shechtman, existen muchas otras, que pueden ser unidimensionales $AlCuCo$, $AlNiSi$ y $AlCuMn$ (He, 1988), bidimensionales, como la original fase $T AlMn$ o decahedral (Bendersky, 1985) y tridimensionales como la fase icosaedral de $AlMn$ (Chen, 1986). Dichas aleaciones cuasicristalinas, ya no sólo son variaciones de la familia Al-Mn, hay nuevas familias. Dentro de los sistemas de metales simples están: $i(AlMgAg)$, $i(AlMgCu)$, $i(AlMgZn)$, que son metaestables; $i(AlMgZn)$ y $i(GaMgZn)$, que son más estables que la familia anterior. Otro sistema es $i(AlLiCu)$, $i(AlMgCu)$, donde la primera es una fase termodinámicamente estable.

Entre los sistemas que contienen metales de transición y presentan fase icosaedral, por mencionar algunos están: $i(TiZrNi)$, $i(AlVCu)$, $i(AlMnSi)$ que son metaestables y $i(AlFeCu)$ y $i(AlRuCu)$ que son estables. Otro sistema más encontrado en esta fase es $i(PdUSi)$. Dentro de los materiales con simetría decagonal, se tienen aquellos que forman una nueva clase de materiales anisotrópicos con periodicidad a lo largo de su eje z y estructura cuasiperiódica con simetría rotacional de décimo orden en el plano perpendicular al eje z . Por ejemplo, se tiene los tres sistemas metaestables $d(AlMn)$, $d(AlFe)$, $d(AlPd)$ y el sistema estable con $d(AlCuCo)$ y $d(AlNiCo)$ (Poon, 1992). Cuasicristales octagonales se han obtenido de: $o(MnSi)$, $o(MnAl)$, $o(CrNiSi)$, $o(VNiSi)$, $o(MoNiSi)$ (Kuo, 1990). Con fase dodecagonal están $VNiSi$, $CuNi$, $BiMn$, etc. La mayoría de las aleaciones muestran un alto grado de desorden estructural, éste ha sido atribuido a la

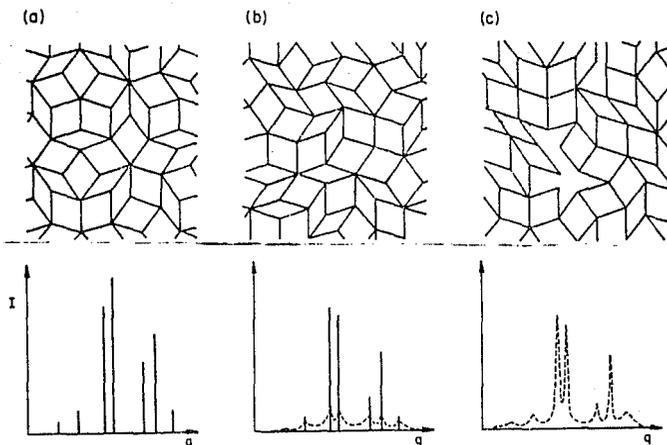


Figura 2.3: Ejemplos de las tres clases de estructuras geométricas para explicar los cuasicristales. a) Red de Penrose bidimensional perfecta, b) red al azar y c) vidrio icosaédrico. Y la comparación con sus patrones de difracción esquemáticos.

presencia de desorden de fases. Los fonones, fasones y dislocaciones corresponden a traslaciones, distorsiones y rearrreglos de las celdas unitarias, en el caso de los fasones su importancia física en cuasicristales, tanto desde el punto de vista estructural como el de las propiedades, ha sido estudiada ampliamente (Socolar, 1986; Levine, 1985; Bak, 1985).

2.2 MODELOS PARA EXPLICAR LOS CUASICRISTALES

Para explicar los cuasicristales existen tres hipótesis según Henley (1987), ver figura 2.3: El cuasicristal perfecto, ejemplo la red de Penrose (Fig. 2.3a); cuasicristal al azar (Fig. 2.3b) y el modelo vidrio icosaédrico (Fig. 2.3c). En la primera hipótesis, para explicar el orden de largo alcance orientacional que presenta la estructura del cuasicristal encontrado por Shechtman, se utilizó una herramienta adicional: la teoría matemática

del enrejado o embaldosado. Penrose encontró como tapizar sin dejar huecos un plano de manera aperiódica utilizando dos clases de figuras (por ejemplo dos rombos de tamaños distintos), las cuales deben unirse siguiendo ciertas reglas de acoplamiento. La red de Penrose será estudiada con más detalle en una sección posterior. Este modelo describe las propiedades principales de los cuasicristales, relativamente bien, su dificultad estriba en explicar los procesos de crecimiento y en decifrar el considerable desorden evidente que presentan casi todos los cuasicristales.

En la segunda hipótesis, considérese el caso de hacer un arreglo con las mismas redes rombricas usadas en la red de Penrose, pero sin seguir ninguna regla de acoplamiento, excepto que se junten por los vértices y que no haya huecos o traslapes entre los rombos. La última hipótesis, en el modelo vítreo Stephens propone para los cuasicristales una estructura amorfa, en el sentido de que no hay orden traslacional de largo alcance, aunque existe un orden químico de corto alcance que da lugar a agregados atómicos empaquetados densamente de acuerdo a una simetría icosaédrica local. La unión es aleatoria. El modelo considera la interacción local al juntar grupos de átomos en alguna forma al azar, considera que los grupos tienen la misma orientación pero debido al crecimiento fortuito la estructura contiene muchos defectos. Con este crecimiento fortuito se incluyen en la estructura muchos huecos o hendiduras donde los grupos icosaédricos no llenan. En la figura 2.3 también pueden observarse esquematizados los patrones de difracción calculados. Mostándose la Intensidad como función del vector de onda q . Con el modelo vítreo, se sobreestima el grado de ensanchamiento de los picos en los patrones de difracción. Los patrones de difracción experimentales presentan un cierto ensanchamiento, el cual, no corresponde a ninguna fuente de desorden conocida (defectos), y se especula, que esto, es resultado de el nuevo desorden llamado fasones. Todos estos modelos convergen en una idea fundamental que es incorporar el desorden tipo fasonico a la estructura cuasicristalina (Stephens, 1991).

En el caso particular de cuasicristales perfectos, una de las características claves es llamada autosimilaridad de la estructura, esto es, cualquier región de la red repite su configuración cuasiperiódicamente muchas veces (Teorema de Conway). La autosimilaridad no sólo es de interés estructural, sino también tiene importantes impactos sobre las propiedades electrónicas. Estos materiales muestran como resultado de la competición entre la localización y deslocalización del electrón debida a la no periodicidad y la autosimilaridad, que pueden conducir a un nuevo tipo de estructura electrónica. Resultados al respecto son obtenidos para el caso unidimensional, conocido como cadena de Fibonacci. Demostrándose (Kohmoto, 1987) que el espectro de energía es un conjunto Cantor y singularmente continuo. Asimismo, los *eigen*-estados electrónicos son de naturaleza crítica, es decir, no son extendidos ni localizados, sino, son autosimilares en el espacio real. Estados electrónicos críticos han sido sugeridos también para redes cuasicristalinas bidimensionales (Sutherland, 1986).

Existen distintos métodos matemáticos para generar estructuras cuasiperiódicas, por ejemplo deflación, el método dual generalizado y el método de corte y proyección. En este

último, la idea principal, consiste en proyectar una red periódica en un cierto espacio a un subespacio de dimensión menor. No todos los puntos de la red son proyectados, sino, sólo aquellos que caen dentro de una región definida por el subespacio y la celda unidad de la red periódica; a dicha región se le llama banda (Fig. 2.4). Para el caso particular de los fasones, se pueden obtener a partir de una variación infinitesimal del ángulo de proyección en el método de corte y proyección. Una ilustración sencilla de este método se dará en la sección referida a la Secuencia Fibonacci.

2.3 FUNCIONES CUASIPERIODICAS

Los cuasicristales pueden analizarse desde el punto de vista de las funciones cuasiperiódicas (Besicovitch, 1932), ya que puede describirse a los sólidos cuasicristalinos por medio de potenciales cuasiperiódicos. La teoría de funciones cuasiperiódicas fué desarrollada como una generalización de las funciones perfectamente periódicas. En esta teoría una función $f(x)$, definida sobre todo el espacio real, es cuasiperiódica si y solo si: para toda $\epsilon > 0$, existe una $\tau(\epsilon, f) \in \mathfrak{R}$, tal que $f(x + \tau) - f(x) < \epsilon$, para toda x en el dominio de la función. El caso periódico se obtiene cuando $\epsilon = 0$ y τ es el período.

Ahora bien, las funciones cuasiperiódicas pueden obtenerse a través de la generalización de la transformada de Fourier para funciones multiperiódicas, dada por:

$$F(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_l A_l e^{i \sum_m r_m a_m x_m}, \quad (2.1)$$

donde las r_m 's son números racionales y las a_m 's son números irracionales y linealmente independientes. La función multiperiódica F , en general, tiene períodos incommensurados entre sí y las a 's son irracionales. De esta forma se puede definir cualquier función cuasiperiódica como la parte diagonal de una función multiperiódica en un espacio de mayor dimensión; es decir,

$$f(x) = \text{diag}[F(x_1, x_2, \dots, x_N)] = F(x, x, \dots, x). \quad (2.2)$$

La secuencia de Fibonacci, es el caso más simple de este tipo de funciones, y puede construirse a partir de la función $f(x) = \text{sen}(2\pi x) + \text{sen}(2\pi\sigma x)$, donde

$$\sigma = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{5}) \quad (2.3)$$

es la razón áurea. Bajo este tratamiento matemático, puede decirse que cualquier función cuasiperiódica puede expresarse como la parte diagonal de una función multiperiódica de mayor dimensión. Es a partir de esta propiedad, por lo que pueden construirse estructuras cuasiperiódicas usando el llamado método de corte y proyección.

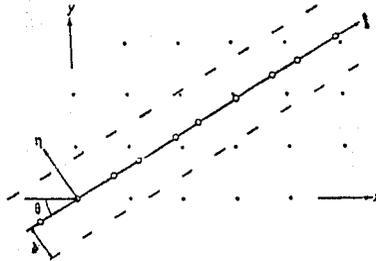


Figura 2.4: Construcción de la secuencia de Fibonacci por medio del método de corte y proyección. La secuencia está formada por un arreglo cuasiperiódico de segmentos cortos y largos.

2.4 SECUENCIA DE FIBONACCI

La secuencia Fibonacci pertenece a la familia de objetos cuasiperiódicos, y es una serie que puede ser generada por la regla simple de inflación mostrada en la figura 2.5. Cada generación de la secuencia es contruida de la adhesión de las dos generacionrd anteriores. Esto es, dado un segmento largo l y uno corto s en cada generación, llegarán a ser ls y l , respectivamente en la generación siguiente. Para el caso numérico la secuencia de Fibonacci se define por la relación recursiva $F_{n+1} = F_n + F_{n-1}$. Este método da una

S	1
L	1
LS	2
LSL	3
LSLS	5
LSLSL	8
LSLSLSLS	13
LSLSLSLSLSLSLSL	21

Figura 2.5: Generación de una secuencia de Fibonacci.

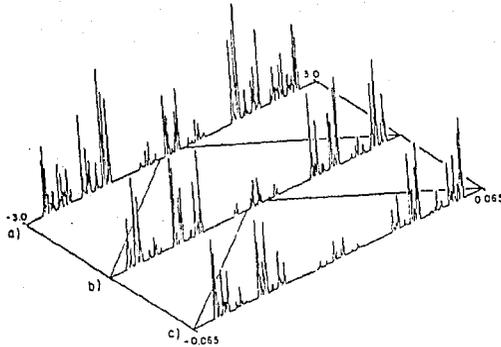


Figura 2.6: Densidad local de estados para el sitio central en una cadena de Fibonacci de generación $n = 50$ (2.036×10^{10} átomos). (figura tomada de Wang, 1990).

noción clara del número de generación y el número de elementos que se contiene en cada generación y además, es la base para el proceso de renormalización usado por Wang (1990), e para analizar cadenas de Fibonacci de tamaño macroscópico.

Otra manera de construir esta secuencia es el método de corte y proyección (Elser, 1985), el cual, consiste en proyectar los puntos de un hiperspacio de N -dimensiones hacia una hipersuperficie de D -dimensiones. En el caso particular de la secuencia de Fibonacci, se puede partir de una red rectangular multiperiódica bidimensional (donde la razón entre los lados del rectángulo es σ) cuyos puntos se proyectan hacia una línea recta que forma un ángulo de 45 grados con el eje x (Fig.2.4). Los puntos que se proyectan son los que se encuentran dentro de una cierta distancia d alrededor de la línea recta l . De esta forma, se obtiene una secuencia de segmentos largos y cortos que siguen el orden de Fibonacci.

Los sistemas cuasiperiódicos tienen una estructura exótica de bandas electrónicas (Kohmoto, 1986), y se ha demostrado que el espectro electrónico es un conjunto cantor singularmente continuo (Kohmoto, 1987); es decir, el espectro consiste de bandas permitidas infinitamente delgadas embebidas en bandas prohibidas también de ancho infinitesimal, y que además exhibe una simetría autosimilar. En otro reporte (Wang, 1990), se ha calculado la densidad local de estados para el sitio medio de una generación $n = 50$ de la cadena de Fibonacci con aproximadamente 10^{10} átomos (Fig. 2.6). En dicha figura se puede notar el comportamiento autosimilar del espectro, lo que se ilustra a través de la doble amplificación de la región de energía alrededor de la porción central, esto es, se

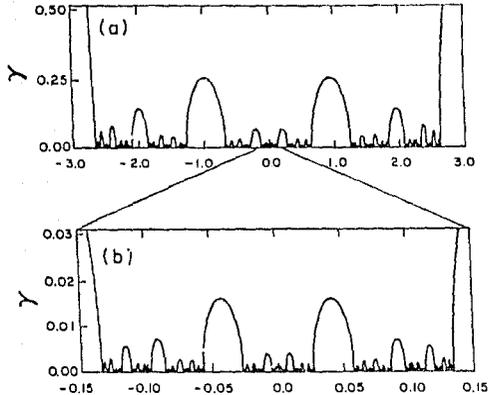


Figura 2.7: (a) Exponentes de Lyapunov $\gamma(E)$, para una cadena de Fibonacci de $\sim 10^{10}$ átomos. (b) Amplificación de la región alrededor de $E = 0$.

observa la estructura fractal del espectro de la densidad de estados, puesto que la distribución de bandas permitidas y bandas prohibidas es autosimilar, esto es, una región pequeña del espectro amplificada reproduce idénticamente al espectro completo.

Por otro lado, la localización de los estados electrónicos en los cuasicristales se ha estudiado extensivamente. Se sabe que coexisten tres tipos de estados: extendidos, localizados y críticos (Liu, 1987). Los críticos (Kohmoto, 1987) que se definen como estados ni localizados ni completamente extendidos, sino con funciones de onda auto-similares en el espacio real. En sistemas desordenados un buen método para estudiar el problema de la localización es calcular los exponentes de Lyapunov. Para estados localizados exponencialmente se identifican (Deylon, 1985) con el inverso de la longitud de localización. Mientras que para estados localizados no exponencialmente aún siguen proporcionándonos cierta idea del grado de localización en que se encuentra el estado, a pesar de no ser el inverso de la longitud de la localización. Con esta técnica se investigó la localización de los estados electrónicos en la cadena de Fibonacci (Wang, 1990) renormalizando las matrices de transferencia, con lo que se calcularon los exponentes para la generación $n = 50$ con los mismos parámetros de la figura 2.6. Se nota que en la figura 2.7 la distribución de las bandas está mejor definida que en el espectro de las densidades de estado, ya que los exponentes no contienen partes imaginarias en la energía. También es evidente la estructura fractal y que el estado central $E = 0$, siempre es extendido. Los estados más localizados se encuentran en medio de la llamada banda prohibida.

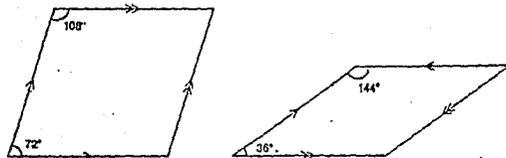


Figura 2.8: Par de rombos para generar una red de Penrose

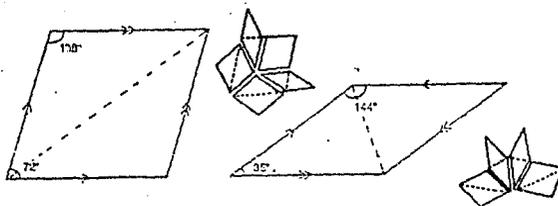


Figura 2.9: Regla de deflación de un rombo gordo y no delgado.

2.5 LA RED DE PENROSE

En 1974 Roger Penrose, estableció una teoría con la que puede formarse un mosaico cuasiperiódico. La forma de este par de mosaicos puede ser modificada, pero sea cual fuese, se ha comprobado que posee simetría rotacional de quinto orden. El par de formas más simples son dos rombos (Fig. 2.8), (Gardner, 1977 y Mejía-Lira, 1988), en los cuales todas las aristas poseen la misma longitud. La pieza grande tiene ángulos que miden 72 y 108 grados y, la delgada, ángulos de 36 y 144 grados. El emaladosado se logra cumpliendo ciertas reglas de construcción (Gardner, 1977). La red de Penrose puede generarse por varios algoritmos. (a) Por el método de corte y proyección, como un caso especial de la proyección de una red periódica de cinco dimensiones hacia dos dimensiones. Asimismo como el arreglo icosaédrico es el resultado de la proyección de una red periódica en seis dimensiones hacia tres dimensiones (Guyot, 1989). (b) Por la deflación, que es una regla de subdivisión que aplicada al mosaico origina, ofrece la propiedad notable de que dado un mosaico es posible obtener otro con piezas más chicas (Fig. 2.9). Por ejemplo una regla de deflación puede ser la relación de recurrencia de la secuencia de Fibonacci. Por lo tanto, para un mosaico de Penrose la proporción entre los dos tipos de rombos converge

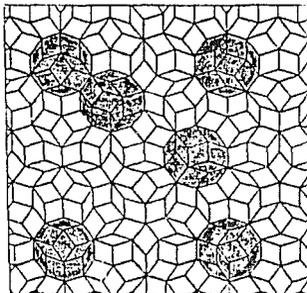


Figura 2.10: Orden de largo alcance orientacional en una red de Penrose, se observa que los lados de los decágonos tienen la misma orientación

a la razón dorada para un número grande de piezas.

Se han obtenido patrones de difracción de un mosaico de Penrose, los cuales muestran picos de Bragg delgados orientados de acuerdo a direcciones definidas por los vértices de pentágono. Los picos se encontraban separados sobre cada una de las direcciones a una distancia uno o la razón dorada. Por otro lado, Nelson (1986) explica de manera sencilla, en la red de Penrose el orden orientacional si se escogen decágonos en la red cuasiperiódica, los cuales tienen la misma orientación, es decir, los lados de cada decágono son paralelos a los lados de los otros a través de toda la red. Entonces, la red de Penrose tiene orden orientacional de largo alcance (Fig. 2.10). En caso de que las reglas de acomodamiento no sean obedecidas, por ejemplo, un decágono de la red Penrose bidimensional puede ser extraído y vuelto a colocar en otra forma que viole las reglas de acomodamiento, en el mismo lugar y aún mantener la misma orientación, el cuasicristal mantiene su orden orientacional de largo alcance. También de una manera muy sutil, puede mostrarse que la red de Penrose tiene un tipo de orden traslacional cuasiperiódico, el cual se observa al sombrear los rombos bajo la condición de que tengan lados paralelos a cierta dirección. Esto forma una serie de líneas irregulares dentadas, las cuales son paralelas y están aproximadamente espaciadas en forma regular, en similitud con la figura 1.1. Puede decirse que las redes Penrose tienen un orden traslacional cuasiperiódico de largo alcance (Fig. 2.11).

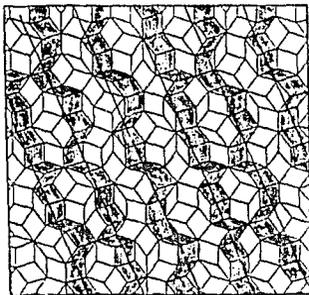


Figura 2.11: Orden de largo alcance traslacional (cuasiperiódico) en una red de Penrose. Las líneas dentadas pueden ser trasladadas a otra parte del la red y corresponder.

Se ha sugerido que la red de Penrose puede modelar materiales reales (Levine, 1984). De esta manera la propuesta de modelos de cuasicristales basados en mosaicos de Penrose tridimensionales originó el estudio de estructuras matemáticas cuasiperiódicas. Sin embargo, aunque los modelos basados en el mosaico de Penrose han tenido una gran aceptación, la correspondencia entre ellos y los resultados experimentales todavía no es satisfactoria, ya que los patrones de difracción predichos por la teoría son picos de Bragg con una anchura dada por una función delta, mientras que los patrones observados tienen un ancho finito. Steinhardt ha propuesto la explicación de que esta diferencia, sea consecuencia de defectos estructurales producidos durante el crecimiento del cuasicristal. En algunas de las direcciones de los patrones las diferencias no son muy notorias. Parte del problema se debe a la incertidumbre que existe acerca de cómo se deben colocar los átomos en las celdas de la estructura para reproducir los resultados experimentales.

Debido a la falta de resultados experimentales concluyentes con respecto a la localización de los átomos en la red de Penrose, se puede plantear el problema de electrones desde dos puntos de vista: a) que los átomos estén colocados en los vértices de la red (Aguilera, 1987) b) que los átomos estén colocados en el centro de los rombos (Tsunetsugu, 1991). Para el problema de vértices Wang y Barrio desarrollaron un método dentro del grupo de renormalización con el fin de analizar la estructura de bandas electrónicas de cúmulos grandes (Wang, 1991). En la figura 2.12 se muestra la densidad de estados local para una red de penrose con 14550 átomos. En esta figura se puede observar la estructura

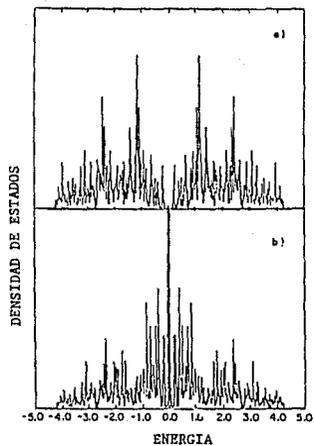


Figura 2.12: Densidad de estados local para una red de Penrose de generación $n = 23$ (14550 sitios). a) y b) corresponden a sitios inmediatos en la mitad de la red (figura tomada de Wang, 1992).

de bandas s constituida por un conjunto de bandas y gaps. Hasta el momento, estos resultados no se han podido comprobar experimentalmente debido a que los experimentos son poco claros y no presentan las peculiaridades esperadas (Biggs, 1990).

Hasta el momento, la localización de los estados electrónicos en los cuasicristales es un problema sin resolver. En el estudio de este problema es conveniente utilizar la solución, correspondiente a los estados atómicos individuales, o sea, utilizar las funciones de Wannier, debido a que los cuasicristales se consideran sistemas aperiódicos y sus estados electrónicos son generalmente más localizados. Dicha localización representa una nueva clase debido a las características particulares que muestra. En general, la estructura de bandas para estos materiales es muy complicada, por eso, estudiarlos a través del hamiltoniano de enlace firme simplifica un poco la tarea, ya que no se requiere espacio recíproco. La estructura que pueden mostrar estos materiales despierta interés en el tipo de propiedades que podrían esperarse, las cuales dada las condiciones tal vez serían completamente inusuales.

Capítulo 3

SIMULACION ANALOGICA

La obtención de mono-quasicristales de dimensiones macroscópicas se ha encontrado con grandes dificultades, y mientras se desarrollan técnicas para tal objetivo, las propiedades electrónicas se han analizado a través de modelos quasicristalinos artificiales. La estructura de bandas electrónicas para los quasicristales en general es muy complicada. Sin embargo, una manera simple consiste en aislar los efectos de la cuasiperiodicidad, utilizando el hamiltoniano de enlace firme para bandas s . Se sabe que los electrones tipo s y los fonones isotrópicos tienen el mismo comportamiento, excepto por un corrimiento en la energía, dentro del formalismo de enlace firme (Economou, 1983). Por lo tanto, podemos estudiar el comportamiento electrónico en quasicristales a partir de una simulación vibracional. En general la interferencia de ondas debido a la cuasiperiodicidad es de interés, ya que dicha interferencia es simple en una red periódica y presenta interferencia destructiva al cumplirse la ley de Bragg. Ahora bien, como los electrones y fonones muestran comportamiento ondulatorio, la localización de los estados es precisamente resultado de dicha interferencia. Con el nuevo método, que a continuación se describe, es posible observar directamente la localización de ondas en sistemas cuasiperiódicos bidimensionales. Consiste en aplicar corriente alterna a una red de osciladores LC interconectados de acuerdo a la red de Penrose. Esta simulación analógica realizada en una red cuasiperiódica bidimensional, en particular, puede ayudarnos en análisis de materiales quasicristalinos, como es el caso de la fase decagonal de la aleación $AlMn$, la cual presenta una red de Penrose bidimensional en el plano y es periódica en el tercer eje.

3.1 TEORIA DE LA SIMULACION

En analogía con la mecánica un circuito simple LC se asemeja a un sistema de una masa amarrada a un resorte en que, entre otras cosas, ambos sistemas tienen una frecuencia

característica de oscilación dada por :

$$\omega_0 = \frac{1}{\sqrt{LC}} \quad (3.1)$$

Cuando se tiene un conjunto de osciladores LC interconectados, las frecuencias características se determinan a partir de las leyes de Kirchhoff para estados estacionarios (ver Apéndice A.2). Las leyes de Kirchhoff para estados estacionarios pueden escribirse convenientemente de la siguiente forma

$$i\omega CV_n + \frac{1}{i\omega L} \sum_m (V_n - V_m) = 0, \quad (3.2)$$

donde la inductancia L y la capacitancia C tienen el mismo valor para todos los elementos, V_n es el voltaje medido en el sitio n , cuando se excita el sistema mediante una onda estacionaria de frecuencia ω . Aquí, la sumatoria se extiende a todos los sitios m directamente conectados al sitio n .

Las Ecs. 3.2, constituyen un problema de valores propios y tienen la misma solución que la ecuación secular:

$$-M\omega^2 U_n + K \sum_m (U_n - U_m) = 0 \quad (3.3)$$

para los desplazamientos U_n de masas M interconectadas a través de -resortes isotrópicos de constante de fuerza K . Las Ecs. 3.3, se identifican como las ecuaciones de movimiento, ya sea para los fonones isotrópicos o para los electrones s dentro de la aproximación de amarre fuerte, debido a que la densidad de estados para electrones y fonones, dentro del modelo de enlace firme, es similar excepto por un corrimiento en la energía para el caso de los electrones s , como se observa en la ecuación

$$(e_n - E)c_n + \sum_m \beta_{nm} c_m = 0 \quad (3.4)$$

la cual es obtenida a partir de la función $|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$ y el hamiltoniano de enlace firme. En la Ec. 3.4, c_n es la componente correspondiente al sitio n de la función propia, β es la integral de transferencia, E es el valor propio y e_n es la auto-energía del sitio n . Nótese que las ecuaciones de Kirchhoff y las ecuaciones de movimiento tanto de fonones isotrópicos como de electrones s son equivalentes, es decir, el voltaje local V_n en las ecuaciones de Kirchhoff equivaldría al desplazamiento local U_n en las ecuaciones de movimiento de los fonones isotrópicos, o al c_n para el caso de los electrones s . Esta equivalencia es de esperarse, puesto que en los tres casos se trata de ondas en redes discretas.

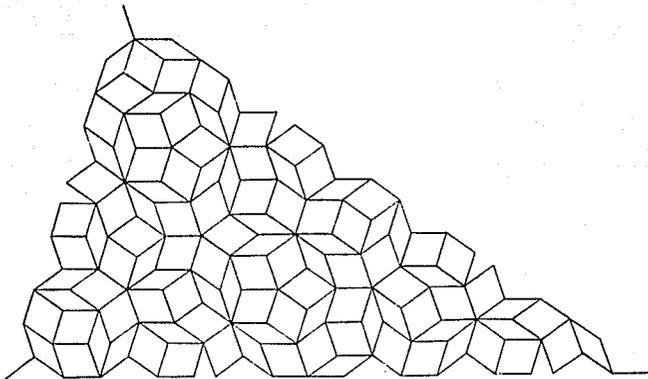


Figura 3.1: Red de Penrose para la generación $n = 13$

3.2 DESCRIPCION DE LA RED

Con el fin de estudiar las excitaciones elementales en cuasicristales, tales como fonones y electrones, se realizó la simulación análogica en una red bidimensional de tipo Penrose finita. Los vértices de dicha red tienen colocados capacitores, los cuales se conectan a través de inductores. La red construida corresponde a la generación 13 (Fig. 3.1) de la red de Penrose, de acuerdo al proceso de inflación (Wang, 1990). En dicho proceso se utilizan los triángulos de Robinson, los cuales son obtenidos partiendo a la mitad los dos rombos de Penrose (Fig. 3.2). Para unir las dos baldosas básicas y generar la red de Penrose la regla es: el proceso de construcción de la cadena de Fibonacci, con el cual, para obtener determinada generación se unen dos generaciones inmediatas anteriores. En este caso, para la red de Penrose, la regla de unión indica que los lados de las generaciones $n - 1$ y $n - 2$ deben tener la misma longitud y, que la suma de las generaciones es en forma alternada, es decir, dos veces se suma por la derecha y dos por la izquierda y así sucesivamente. Las primeras generaciones de la red generadas por dicho proceso se muestran en el apéndice A.2. La fórmula recursiva para el procedimiento de construcción de cada generación puede presentarse como: $T(n) = T(n-1) + T^*(n-2)$, donde (*) indica la imagen espejo de la generación $(n - 2)$. La red generada por este proceso (triángulos de Robinson), contiene enlaces cortos, medianos y largos, pero puede convertirse en la red de Penrose que tiene como base los rombos, eliminando los enlaces cortos y largos, lo cual



Figura 3.2: Triángulos de Robinson.

se efectuó en la figura 3.1.

Para la construcción, la red para la generación $n = 13$ fué dibujada en una placa de fibra de vidrio con una de sus superficies con cobre para tomar tierra, y contiene 137 vértices y 240 enlaces. En cada vértice se colocó un capacitor de $1\mu F \pm 10\%$ con un extremo conectado a tierra. Los capacitores se enlazaron en dicha red con inductores toroidales de $7.8mH \pm 5\%$, los cuales a su vez, se conectan a los extremos libres de los capacitores (Fig. 3.3). Por lo tanto, el arreglo puede visualizarse como una red cuasiperiódica bidimensional de líneas de transmisión (Chua, 1987). La forma toroidal de los inductores obedece a la necesidad de minimizar el problema de inductancia mutua, basándose en el hecho de que una bobina toroidal tiene su campo magnético prácticamente confinado en el espacio interior dentro del toroide. Los núcleos toroidales son de ferrita con una permeabilidad magnética relativa $\mu/\mu_0 \simeq 1500$, un diámetro externo de $30mm$, interno de $18,5mm$ y $8mm$ de espesor, con lo cual se aumenta varios ordenes de magnitud el campo magnético dentro del toroide. Dichos núcleos son embobinados con alambre de cobre de $1.1mm$ de diámetro. El número de vueltas en cada bobina es ajustada con el fin de reducir las diferencias en L entre ellas, lo cual se logra caracterizándolas en función de determinada frecuencia. También se considera los efectos disipativos de los inductores, por lo que, se han tomado en cuenta la dependencia de la magnetoresistencia de ω . Para esto, fueron examinados experimentalmente los inductores, los resultados indicaron que en las inductancias debe considerarse un término imaginario $-R(\omega, \Delta V)/\omega$ que depende tanto de la frecuencia como de la diferencia de potencial a la que estén sometidas. A voltaje constante ($\Delta V = 0.2$ volts de pico a pico), $R(\omega) \simeq 0.006\omega^{0.7}$ y a frecuencia fija ($\omega = 500Hz$), $R(\Delta V) \simeq 5.6\Delta V$. Por otro lado, la parte real de la inductancia es también función del voltaje aplicado, por ejemplo para $500Hz$, $L(\Delta V) \simeq 7.7 + 4.5\Delta V$

Existen muchas maneras de excitar este sistema de osciladores LC , por ejemplo uno podría irradiar ondas electromagnéticas de radiofrecuencias y medir el espectro de absorción, o uno podría también alimentar el sistema mediante una corriente AC en uno o varios puntos de la red. En cualquier caso, las condiciones a la frontera para las ecuaciones

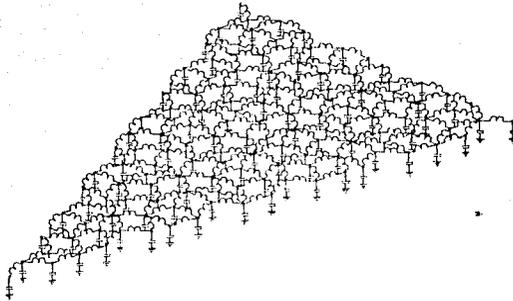


Figura 3.3: Dibujo esquemático de la red de osciladores *LC* interconectados formando una red de Penrose de generación $n = 13$. Los enlaces de la red son reemplazados por inductores y, en cada vértice se coloca un capacitor con uno de sus extremos a tierra y otro conectado a los inductores.

de Kirchhoff de la red bidimensional de Penrose dependen de la forma de alimentar al sistema. En nuestro caso específico, hemos inducido un voltaje fijo en el sitio 1 que se localiza en el extremo agudo del triángulo de la red (Fig 3.1). Por lo tanto, la primera de las ecuaciones del circuito ($n = 1$) tiene un término inhomogéneo desconocido de corriente $I(\omega)$, mientras que V_i tiene una magnitud constante para el caso de alimentación de 0.2 volts de pico a pico.

3.3 RESPUESTA ESPECTRAL DE LA RED

Con el fin de estudiar los modos normales de vibración en una red cuasicristalina bidimensional, se ha alimentado al sistema con corrientes alterna de diferentes frecuencias registrándose las frecuencia de resonancia, las cuales nos indican los *eigen*-valores de la Ec. 3.3. Para ésto, se alimentó corriente alterna monocromática en el extremo agudo de la red con voltaje fijo de 0.2 volts de pico a pico. El espectro de corriente de alimentación obtenido se muestra en la figura 3.4 y se compara con la solución apropiada de las ecuaciones de Kirchhoff, es decir, se ha introducido una inductancia L compleja en la Ec. 3.2. Cabe mencionar que el cálculo teórico no contiene parámetros ajustables, excepto $R(\omega)$, cuyos valores fueron tomados a partir de la caracterización de los inductores reales. Las frecuencias de los modos normales son independientes del valor de $R(\omega)$, a pesar de que intensidades relativas de los picos de alta frecuencia son disminuidas por el efecto disipativo $R(\omega)$. Se puede notar que existe una concordancia excelente entre el espectro experimental y el teórico, lo cual nos brinda confianza en el circuito.

Asimismo, con el fin de aislar los efectos de la cuasiperiodicidad, se realizó también un experimento similar para sistemas periódicos, basado en que la equivalencia entre las ecuaciones de movimiento de los fonones y las leyes de Kirchhoff es independiente de la simetría de la red. Para esta parte del experimento, se construyó una red cuadrada de 11×11 vértices, colocando capacitores en cada vértice, e inductores de enlaces, similar al caso cuasiperiódico. Los componentes de este circuito poseen las mismas características de los utilizados en la construcción de la red cuasiperiódica de osciladores LC . La red cuenta con 121 capacitores y 200 inductores de forma toroidal. El experimento se realizó alimentando el circuito con un voltaje de 0.2 volts de pico a pico en el sitio (1,1) que se encuentra en una esquina de la red cuadrada. El espectro de corriente obtenido en función de la frecuencia se muestra en la figura 3.5, en la cual se puede observar las frecuencias características de los modos normales de vibración de dicha red.

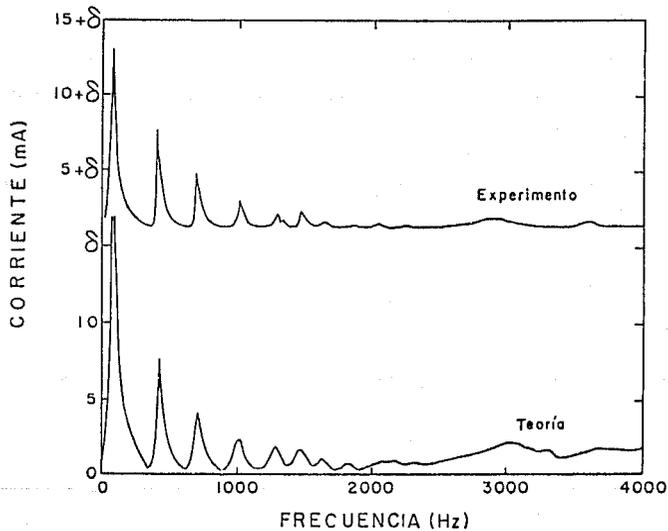


Figura 3.4: Comparación entre los espectros teórico y experimental de la corriente de alimentación a la red de Penrose de osciladores LC , construida con el método desarrollado por Wang y Barrio en 1990, y que fué alimentada con 0.2 volts de pico a pico en el extremo agudo de la red. La escala vertical para los datos experimentales ha sido corrida por δ .

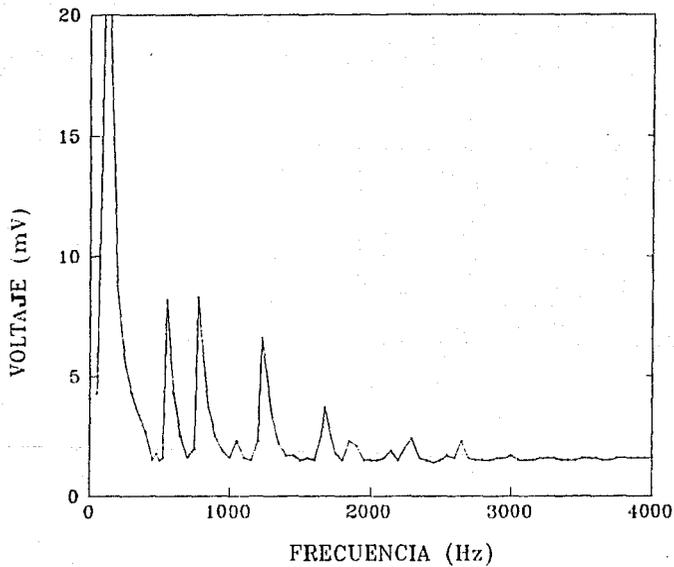


Figura 3.5: Espectro de alimentación de corriente para una red periódica alimentada en un externo con 0.2 volts

3.4 DISTRIBUCIONES ESPACIALES DE AMPLITUD

Al estudiar la naturaleza de los *eigen*-estados de vibración de las redes tanto cuasiperiódica como periódica, se ha analizado la distribución espacial de la amplitud de la función de onda para distintos modos de vibración, observados en la sección anterior. Para nuestro circuito ésto corresponde a medir el voltaje local de todos los sitios y para cualquier estado. Para el caso cuasiperiódico la distribución espacial de amplitud para los seis primeros *eigen*-estados se muestra en la figura 3.6. Se puede observar en la figura 3.6a que el pico a 80 Hz corresponde a un modo acústico de longitud de onda mucho mayor que la dimensión del sistema. Esto es esperado, ya que para estas frecuencias bajas, la onda no ve la discretización de la red. Los modos subsecuentes pueden ser comprendidos por analogía con los estados excitados de una membrana continua, aunque la presencia de la red cuasicristalina discreta es percibida cada vez más. Para los estados de alta frecuencia, la distribución espacial de las amplitudes comienza a localizarse en ciertas regiones de la red, ya que la longitud de onda comienza a ser comparable con la distancia interatómica. Nótese que la razón de la distancia entre los nodos subsecuentes es aproximadamente la razón dorada, característica que va implícita en la naturaleza de la red. Al incrementar la frecuencia del modo, las distribuciones comienzan a ser más complicadas, llegando a localizarse la amplitud en ciertas regiones, como se puede notar en la figura 3.6f. Para los valles encontrados entre 340 y 525 Hz, no hay resonancia dentro de la red, observando un decaimiento exponencial de la amplitud a partir del punto de alimentación, puesto que se trata de frecuencias prohibidas para la red. Resumiendo, puede decirse que a bajas frecuencias se tienen *eigen*-estados cuasicristalinos extendidos, pero, los estados se localizan críticamente cuando la longitud de la onda es comparable con la distancia interatómica.

Existen en la literatura numerosos estudios numéricos acerca de la distribución espacial de la amplitud de las funciones de onda electrónicas en sistemas cuasiperiódicos (Kohmoto, 1987; Ma, 1989; Sutherland, 1986). Dichas distribuciones son muy complicadas, pudiendo compararse con los modos de alta frecuencia, dentro de nuestra simulación. La complejidad en la estructura se debe a la incommensurabilidad entre la onda y la red.

Se realizó también un análisis detallado de la distribución espacial de amplitud en la red cuadrada, descrita en la sección 3.1. Para este caso la alimentación de 0.2 volts de pico a pico fué inyectada en una esquina de dicha red. Para los *eigen*-modos mostrados en la figura 3.5, se midió la distribución espacial de la amplitud para todos los sitios y los resultados de los primeros cinco *eigen*-estados se muestran en la figura 3.7. Nótese que a diferencia de las distribuciones para el caso cuasiperiódico, las amplitudes oscilan periódicamente no existiendo localización de los estados aún para altas frecuencias.

Con el fin de estimar la longitud de onda de dichas oscilaciones se presentan en la figura

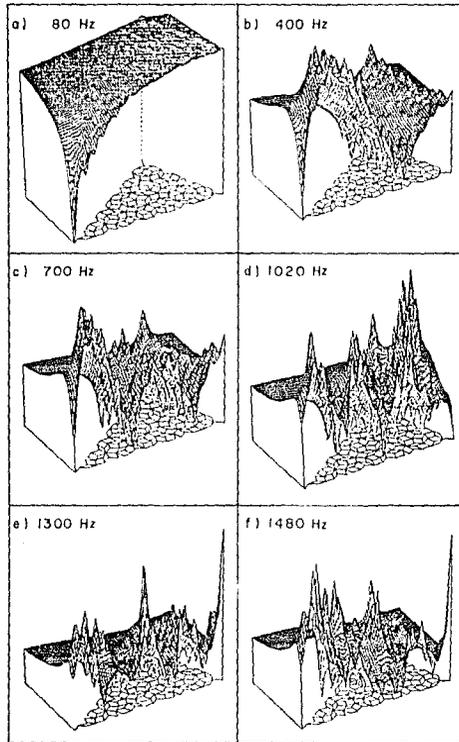


Figura 3.6: Distribución espacial de las amplitudes para los seis primeros *eigen*-estados de menor frecuencia del espectro para una corriente de alimentación de 0.2 volts. Los ejes verticales representan los voltajes medidos en los vértices. Los *eigen*-valores se indican en cada figura.

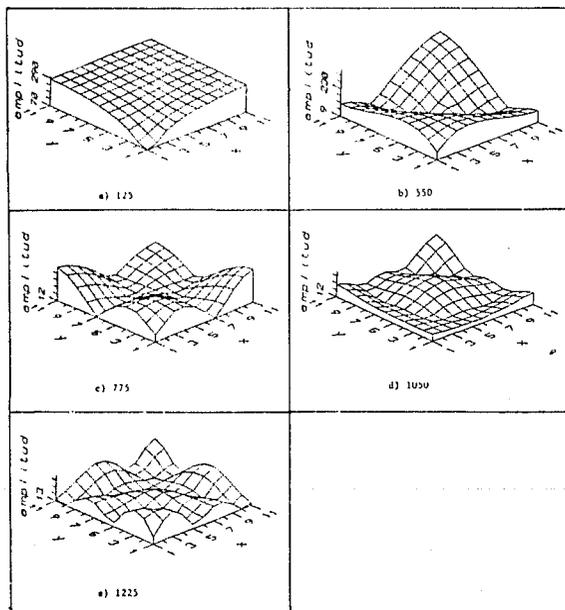


Figura 3.7: Distribución espacial de las amplitud para algunos *eigen*-estados observados en el espectro dado por la red periódica a una alimentación de 0.2 volts. Los ejes verticales representan los voltajes medidos en los vértices. Los *eigen*-valores se indican en cada figura.

3.8 las curvas de nivel de las distribuciones espaciales de amplitud para los *eigen*-estados de la red periódica. Sabemos que la esquina opuesta constituye el punto menos afectado por la condición de frontera impuesta por el modo de alimentar el sistema. Por tal motivo se procedió a medir a partir de ella la longitud de onda para cada distribución, registrando $\lambda_2 = 12a$, $\lambda_3 = 8a$, $\lambda_4 = 6a$ y $\lambda_5 = 5a$, siendo a el parámetro de la red. Para el primero modo es difícil de estimar la longitud de onda, ya que el primer nodo se encuentra casi en el punto de alimentación. Se sabe que la velocidad de fase se define como el producto de frecuencia por la longitud de onda, al realizar dicho producto para distintos estados se encuentra casi la misma velocidad de fase para todos los *eigen*-estados. Este hecho es de esperarse ya que la relación de dispersión de fonones en redes periódicas nos indican que la velocidad de fase para bajas frecuencias se conserva.

Cabe mencionar que los efectos de frontera son importantes para cualquier simulación en cúmulos de redes, sin embargo, a partir de los resultados para la red periódica, podemos inferir que dichos efectos son secundarios y los resultados obtenidos reflejan principalmente la simetría espacial de la red.

3.5 EFECTOS NO LINEALES EN LOS EIGEN-MODOS

Como se había comentado anteriormente, las interacciones anarmónicas son determinantes en ciertos fenómenos físicos, tales como la expansión y conductividad térmica, la variación de los *eigen*-modos fonónicos con la temperatura, entre otros. Sin embargo, las interacciones anarmónicas en los *eigen*-modos de redes cuasicristalinas ha sido poco estudiados, debido a que las ecuaciones no lineales no tienen solución exacta en general. Esto, es precisamente uno de los motivos principales de la presente tesis, puesto que el experimento brinda una alternativa importante para el análisis de dichos efectos.

En base a que los efectos anarmónicos son importantes cuando las amplitudes de vibración son mayores, hemos excitado la red con un mayor voltaje (4 volts de pico a pico), con el fin de simular el comportamiento anarmónico de redes cuasicristalinas. El espectro de corriente de alimentación obtenido se muestra en la figura 3.9. Nótese que existe una variación tanto de las *eigen*-frecuencias como la forma de los picos, comparando con el espectro para el caso armónico.

La figura 3.10 muestra la variación de las *eigen*-frecuencias para los primeros cinco estados, cuando el sistema es excitado con diferentes voltajes de alimentación. Obsérvese que existe una disminución en el valor de la frecuencia para todos los estados, excepto el modo de más baja frecuencia. Para analizar esta variación consideremos las leyes de

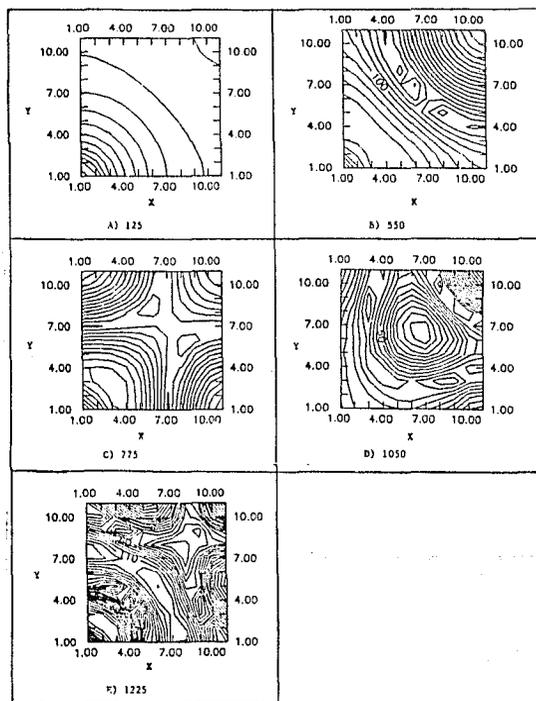


Figura 3.8: Curvas de nivel de distribución espacial de las amplitud para algunos *eigen*-estados observados en el espectro dado por la red periódica a una alimentación de 0.2 volts.

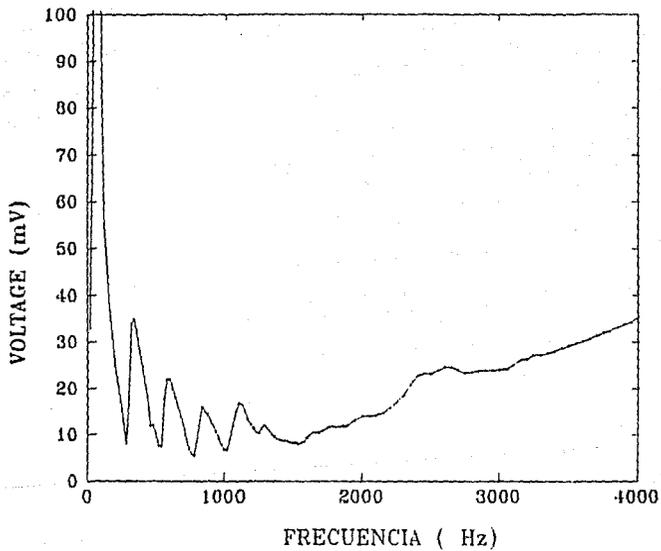


Figura 3.9: Espectro experimental de la corriente de alimentación de la red de Penrose de osciladores LC alimentada en el extremo agudo con 4 volts.

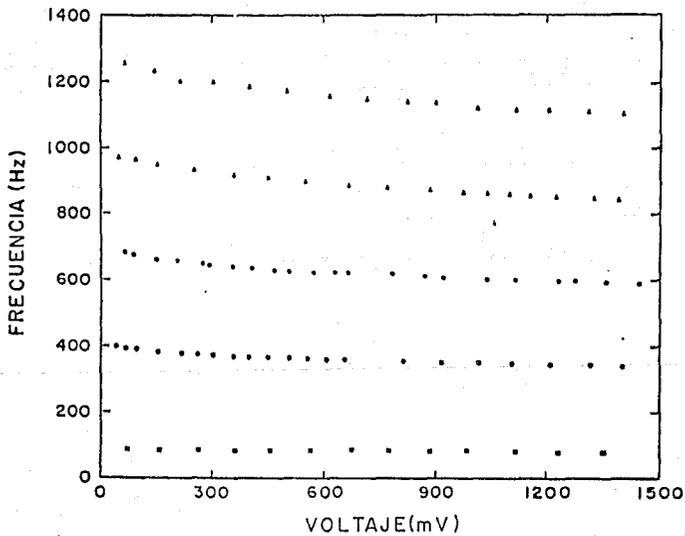


Figura 3.10: Variación de los valores propios para los cinco estados de menor frecuencia como función del voltaje de alimentación.

Kirchhoff en forma de ecuaciones diferenciales

$$C \frac{d^2 V_n}{dt^2} + \sum_m \frac{1}{L} (V_n - V_m) = 0, \quad (3.5)$$

donde la inductancia $L = L_0 + l\Delta V + i \frac{r}{\omega} \Delta V$, siendo $L_0 = 7.7mH$, $l = 4.5mH/volts$ y $r = 5.6\Omega/volts$. Expandiendo la ecuación diferencial en serie de Taylor, se tiene que

$$C \frac{d^2 V_n}{dt^2} + \frac{1}{L_0} \sum_m \left\{ (V_n - V_m) - \left(\frac{l + i \frac{r}{\omega}}{L_0} \right) (V_n - V_m)^2 + \left(\frac{l + i \frac{r}{\omega}}{L_0} \right)^2 (V_n - V_m)^3 - \dots \right\} = 0. \quad (3.6)$$

Esta última ecuación representa un sistema acoplado de 137 ecuaciones diferenciales no lineales que se compara con las ecuaciones de movimiento para fonones con interacciones anarmónicas. Este sistema de ecuaciones no tiene solución analítica. Por lo tanto, nuestro circuito proporciona una alternativa para el estudio de los efectos anarmónicos en cuasicristales y permite un análisis analógico de la solución exacta.

Únicamente con el fin de estimar la importancia de los efectos anarmónicos, reescribimos el sistema de ecuaciones, sin considerar el acoplamiento entre diferentes osciladores, como:

$$\frac{d^2 V}{dt^2} + \omega_0^2 V - \omega_0^2 \epsilon V^2 + \omega_0^2 \epsilon^2 V^3 - \dots = 0, \quad (3.7)$$

donde $\epsilon = (l + i \frac{r}{\omega})/L_0$. La solución puede buscarse en forma de una serie de aproximaciones sucesivas

$$V = V^{(1)} + V^{(2)} + V^{(3)} \quad (3.8)$$

siendo

$$V^{(1)} = a \cos \omega t \quad (3.9)$$

con un valor exacto de ω que puede buscarse en forma de una serie $\omega = \omega_0 + \omega^{(1)} + \omega^{(2)} + \dots$. Por otro lado, la fase inicial en $V^{(1)}$ puede anularse escogiendo convenientemente el origen del tiempo. Ahora bien, en las aproximaciones, donde se incluyen términos de orden más elevado, este método hace que los factores periódicos que figuran en la solución contengan valores exactos de las frecuencias, lo cual se consigue con la condición de no haya términos de resonancia. Con la aproximación de segundo orden se tiene $V^{(2)} = \frac{\omega_0^2}{2} (-1 \mp \frac{\cos 2\omega t}{3})$. Para la aproximación de tercer orden con $V = V^{(1)} + V^{(2)} + V^{(3)}$ y $\omega = \omega_0 + \omega^{(2)}$, tendremos una ecuación diferencial lineal no homogénea para $V^{(3)}$.

$$V^{(3)} + \omega_0^2 V^{(3)} = -2\omega_0^2 \epsilon V^{(1)} V^{(2)} - \omega_0^2 \epsilon^2 V^{(1)3} + 2\omega_0 \omega^{(2)} V^{(1)} \quad (3.10)$$

Sustituyendo en el segundo miembro de la ecuación $V^{(1)}$ y $V^{(2)}$, y aplicando la condición de que no haya término de resonancia. Esto se logra igualando a cero el coeficiente del factor de resonancia $\cos \omega t$ que aparece en el segundo término después de la sustitución. Efectuando lo anterior, obtenemos que existe una corrección de la frecuencia fundamental,

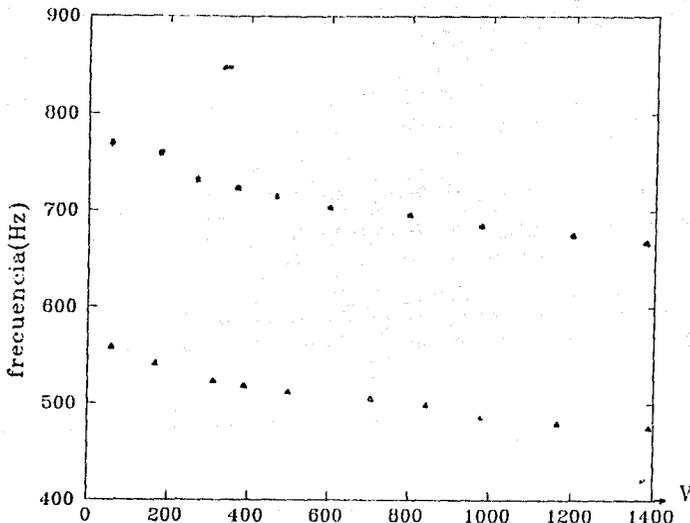


Figura 3.11: Variación de los *eigen*-valores para dos estados de menor frecuencia en función del voltaje de alimentación.

la cual es proporcional al cuadrado de la amplitud de las oscilaciones, dicho de otra manera, el corrimiento de la frecuencia a primer orden estará dado por (Landau y Lifshitz 1985):

$$\omega - \omega_0 \approx -\frac{A^2 \epsilon^2 \omega_0}{24} \quad (3.11)$$

donde A es la amplitud del oscilador no perturbado. De manera similar al análisis perturbativo, la disminución en la frecuencia de los *eigen*-modos puede explicarse también a partir de la ecuación para la frecuencia característica $\omega_0 = \frac{1}{\sqrt{LC}}$, ya que al incrementar el voltaje aumenta la inductancia, y consecuentemente disminuyen las frecuencias. La forma explícita de esta disminución en las frecuencias depende de la topología de la red.

Por otro lado, la variación de las *eigen*-frecuencias en la red periódica también fue estudiada. Al igual que para el caso cuasiperiódico, la red periódica se excitó con diferentes voltajes de alimentación, obteniéndose la variación de los *eigen*-valores, para los dos primeros estados, en función del incremento del voltaje de alimentación se muestra en la en la figura 3.11. Obsérvese que los efectos no lineales están presentes también en la red periódica, esto es, existe un corrimiento de los *eigen*-valores.

Otro aspecto interesante, es cómo cambia la naturaleza de los *eigen*-estados con las interacciones anarmónicas, para ésto, analicemos la distribución espacial de amplitudes para las frecuencias de los *eigen*-modos del espectro obtenido con una alimentación de 4 volts de pico a pico en el ángulo agudo de la red de Penrose utilizada.

En la figura 3.12, se muestra la distribución espacial de las amplitudes de los primeros cuatro *eigen*-modos observados en el espectro experimental de corriente con una alimentación de 4 volts (figura 3.10). Se observa en dichas distribuciones espaciales de amplitud, que se ha perdido la localización de los estado producida por la cuasiperiodicidad cuando se alimenta con voltaje bajo. Esta respuesta es muy similar al caso de la red periódica (ver Fig. 3.7), lo que indica que los efectos de cuasiperiodicidad han dejado de ser importantes cuando la interacción anarmónica comienza a ser significativa.

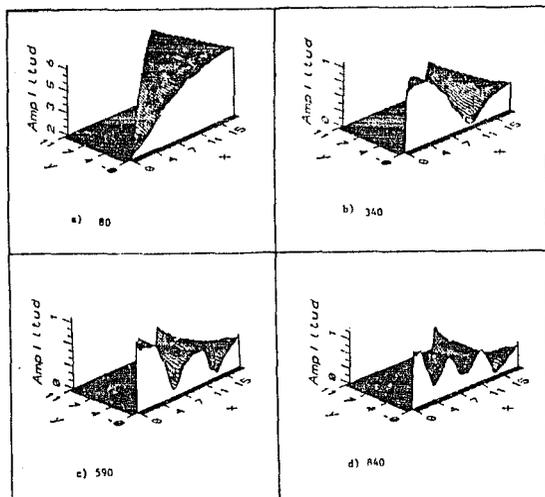


Figura 3.12: Distribución espacial de las amplitudes para algunos *eigen*-estados de menor frecuencia del espectro obtenido a partir de una corriente de alimentación de 4 volts de pico a pico en la red cuasiperiódica de Penrose formada por osciladores *LC*. Los *eigen*-valores se indican en cada figura. Los ejes verticales representan los voltajes medidos en los vértices.

Conclusiones

Esta tesis presentó un nuevo método para poder observar directamente la localización de la función de onda fonónica, como una consecuencia de la interferencia de ondas. Analizó también, el caso de una red cuadrada con objeto de aislar los efectos no lineales. Asimismo, se estudió en detalle el comportamiento anarmónico de la red cuasiperiódica, a través de excitar el sistema mediante una vibración de mayor amplitud. Como conclusión del trabajo podemos mencionar lo siguiente:

- 1) El circuito eléctrico LC , constituye una alternativa para examinar la localización de ondas en redes bidimensionales, tanto cuasiperiódicas como periódicas, ya que permite medir en forma directa y precisa las amplitudes de las *eigen*-funciones en cualquier sitio de la red, sin necesidad de equipos sofisticados. Para el campo de la docencia, esta característica ofrece como ventaja, una visualización directa de ciertas cantidades cuánticas, tales como es el caso de la función de onda.
- 2) La existencia de una buena correspondencia entre la teoría y el experimento, una situación poco usual en los estudios de materiales reales, brinda confianza en el método, con el cual, debido a su gran simplicidad, se han podido aislar las peculiaridades más importantes del sistema.
- 3) En la red cuasiperiódica, se han observado *eigen*-estados realmente extendidos a baja frecuencia y estados críticamente localizados, cuando la longitud de onda es comparable con el parámetro de la red. El origen de dichos estados críticos se debe a una interferencia peculiar de ondas provocada por la cuasiperiodicidad de la red, es decir, se debe a la incommensurabilidad en las fases de las ondas que llegan a un mismo sitio desde sus vecinos más próximos.
- 4) A través de un análisis del caso periódico, se puede deducir que los efectos de frontera tienen poca influencia en los resultados obtenidos, es decir, los espectros observados se deben principalmente a la simetría dentro del cúmulo, no de la frontera. Este hecho nos permite inferir la confiabilidad de los resultados obtenidos a partir de la red cuasiperiódica.
- 5) La reducción de las *eigen*-frecuencias de los modos normales y el ensanchamiento de los picos, son las principales características de la interacción anarmónica en el espectro. Y ya que no existe una solución exacta para estos sistemas en general, desde el punto de vista de la investigación, esta simulación analógica representa una nueva manera de analizar los efectos no lineales.
- 6) En el caso de redes cuasiperiódicas, las interacciones anarmónicas tienen un efecto determinante en la localización de ondas en redes cuasiperiódicas. Y pensamos que la desaparición de la estructura fina en la distribución de amplitudes puede deberse a la

interacción fonón-fonón, dado que el término anarmónico en el hamiltoniano puede interpretarse como dicha interacción dentro del formalismo de segunda cuantización.

Cabe hacer notar que la simulación analógica presentada en esta tesis tiene la virtud de ser simple, ilustrativa y no requiere equipos complejos. El dispositivo empleado es versátil y podría utilizarse para diversos propósitos, tales como estudios de la conductancia selectiva, anisotropía en el flujo de corriente, resonancia en radio frecuencia, entre otros. Además, también a través de un circuito similar podrían analizarse los defectos o fallas en la cuasiperiodicidad de la red, por ejemplo, los fasones. Obviamente, otros sistemas, tales como cuasicristales octagonales, dodecagonales o fractales, pueden ser también estudiados con este método. Finalmente, los resultados obtenidos sugieren que el comportamiento de una red cuasiperiódica a temperaturas elevadas será muy similar al de una red periódica, es decir, por ejemplo, la conductividad térmica y el calor específico de un cuasicristal real deben tener el mismo comportamiento que un cristal, cuando la interacción anarmónica se convierte en una parte importante de las interacciones.

Apéndice A

Apéndice.

A.1 Simetría de quinto orden

Un cuerpo tiene simetría cuando mediante ciertas operaciones (llamadas de simetría) puede coincidir consigo mismo. Las operaciones se dicen de primera especie cuando realizan la coincidencia de dos objetos congruentes, y a su vez, estas de primera especie son de orientación (rotaciones) y de posición (traslaciones). Las operaciones de segunda especie realizan la coincidencia de dos figuras enantiomorfas, las cuales, pueden ser con orientación (inversiones, reflexiones, rotaciones impropias) y de posición (plano de deslizamiento). La rotación es un desplazamiento en el cada punto de la figura que se mueve gira un ángulo, llamado ángulo elemental de giro, y en el mismo sentido en derredor de una recta determinada en posición, llamada eje de rotación o de simetría. En todo conjunto simétrico, el ángulo elemental de giro correspondiente a cada uno de sus ejes de simetría es siempre fracción exacta de 360 grados, esto es $\alpha = 2\pi/n$, donde n es un número entero, llamado orden del eje de rotación (Fabregat, 1971).

Exiten limitaciones del número de ejes de simetría, por ejemplo, un cristal convencional no puede tener simetría rotacional de quinto orden, para entender lo anterior consideremos la prueba de llenar el plano con pentágonos, (Fig. A.1). El pentágono regular es la forma más simple que posee esta simetría prohibida, y no es considerada como celda unitaria de un cristal, debido a que al tratar de embaldosar el plano con esta figura geométrica, entre ellas quedan huecos, esto es, si dos pentágonos son juntados a lo largo de sus correspondientes lados paralelos, un tercero no puede juntárseles como vecino sin mostrar lo que se denomina: frustación.

Puede demostrarse geoméricamente que sólo ciertos ejes de rotación pueden regir la simetría de orientación de los cristales, esto es, Una prueba de la limitación de la multiplicidad de ejes de rotación puede ser dada de la manera siguiente: Teniendo una red

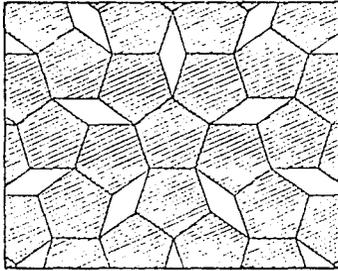


Figura A.1: El embalzado de un plano con pentágonos muestra el fenómeno llamado, frustación.

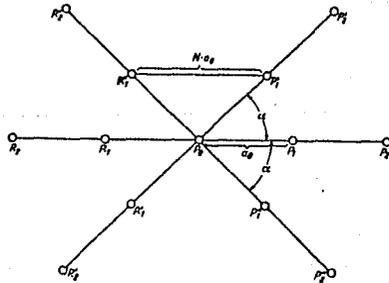


Figura A.2: Figura para probar la ley relativa a la multiplicidad de los ejes de rotación.

consistente de un grupo de n -ejes paralelos de rotación. Permitiéndose que cada uno de estos ejes tenga una secuencia lineal de puntos asociada en ángulo recto con ella. Por ejemplo tomando $P_{-2}, P_{-1}, P_0, P_1, P_2, \dots$. A través de P_0 dejamos pasar un eje de rotación de n orden en ángulo recto al plano de la figura (Fig. A.2). Donde la distancia entre los puntos es constante.

$$P_1 P_0 = P_2 P_1 = \dots = a_0 \quad (\text{A.1})$$

Entonces, si el grupo de puntos es rotado alrededor del eje, perpendicular al plano, en un ángulo α donde $\alpha = 360^\circ/n$ se producen dos líneas nuevas (equivalentes) P'_0, P'_1, P'_2, \dots y P_0, P'_1, P'_2 . Ahora bien, $P'_{-1} P'_1$ es paralelo a $P_0 P_1$. Por lo tanto P'_1 y P_1 , son puntos idénticos en la línea de puntos la cual es idéntica a $P_0 P_1$. Así $P'_{-1} P'_1 = N \cdot a_0$ donde N es un número entero. El triángulo $P'_{-1} P'_1 P_0$ nos da la relación

$$P'_{-1} P'_1 = N \cdot a_0 = 2a_0 \cos \alpha \quad (\text{A.2})$$

Esto sólo puede ser verdad si

$$\cos \alpha = N/2 \quad (\text{A.3})$$

Ya que el $\cos \alpha \leq 1$, N solamente puede tomar valores de 0, +1, +2, -1 y -2. El $\cos = 0, +1/2, -1/2, +1$ y -1 ; o el ángulo α tomar valores de 360, 60, 120, 180, 90. Por lo tanto, las únicas multiplicidades para los ejes de rotación, donde $n = 360^\circ/\alpha$ son los valores 1, 2, 3, 4 y 6.

A.2 Ecuaciones del circuito.

Como resultado de la interconexión de elementos en una red, se establecen ciertas limitaciones a las corrientes y tensiones asociados con estos elementos. Unas de estas restricciones son las llamadas leyes de Kirchhoff. Una ecuación, obtenida como resultado de la aplicación de cualquiera de las dos leyes a una red, es llamada ecuación de equilibrio (estacionaria) de una red. En general, la determinación de la respuesta de una red exige la solución de un sistema de ecuaciones. Siendo la finalidad del cálculo hallar las intensidades de las corrientes en diversas partes de ellos. La representación de un circuito que solo contenga LC (elementos almacenadores de energía), es muy sencillo y valiosamente instructivo y su ecuación es $-\frac{1}{L}(V_a - V_b) + \dot{q} = 0$, y como $C = \frac{q}{V}$ tenemos entonces, $-\frac{1}{L}(V_a - V_b) + C\dot{V} = 0$. Las ecuaciones del circuito en la red de Penrose, se obtienen examinando cada una de las componentes de la red para después ir generando ésta, de acuerdo con el método de construcción, ideado por Wang y Barrio en 1990 (ver figura A.3). Las leyes de Kirchhoff para el circuito de la primera generación de nuestra red de Penrose se puede escribir de la siguiente forma:

$$\frac{1}{i\omega L_2}(V_1 - V_2) + \frac{1}{i\omega L_2}(V_1 - V_3) + i\omega C V_1 = 0$$

$$\frac{1}{i\omega L_2}(V_2 - V_1) + \frac{1}{i\omega L_1}(V_2 - V_3) + i\omega C V_2 = 0$$

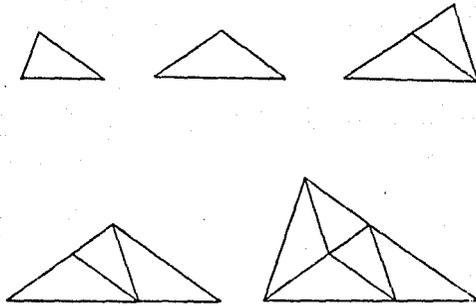


Figura A.3: Formación de las primeras cinco generaciones de la red de Penrose (método de Wang-Barrio, 1990).

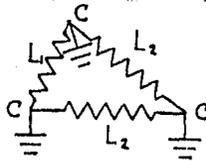


Figura A.4: Circuito para la generación $n = 1$.

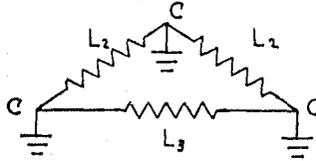


Figura A.5: Circuito para la generación $n = 2$.

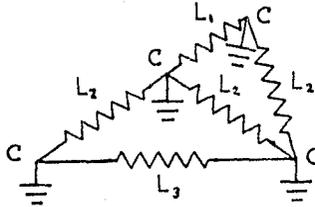


Figura A.6: Circuito para la generación $n = 3$.

$$\frac{1}{i\omega L_2}(V_3 - V_1) + \frac{1}{i\omega L_1}(V_3 - V_2) + i\omega CV_3 = 0$$

El circuito para la segunda generación se puede escribir:

$$\frac{1}{i\omega L_3}(V_1 - V_2) + \frac{1}{i\omega L_2}(V_1 - V_3) + i\omega CV_1 = 0$$

$$\frac{1}{i\omega L_3}(V_2 - V_1) + \frac{1}{i\omega L_2}(V_2 - V_3) + i\omega CV_2 = 0$$

$$\frac{1}{i\omega L_2}(V_3 - V_1) + \frac{1}{i\omega L_2}(V_3 - V_2) + i\omega CV_3 = 0$$

donde L_i ($i = 1, 2, 3$) son las inductancias (en general pueden ser complejas debido a la existencia de efectos disipativos en las bobinas), V_i es el voltaje medido en el sitio i , C la capacitancia y ω la frecuencia característica de oscilación. En el caso de la tercera generación las ecuaciones de nuestro circuito serán:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{i\omega L_3}(V_1 - V_2) + \frac{1}{i\omega L_2}(V_1 - V_3) + \frac{1}{i\omega L_2}(V_1 - V_4) + i\omega CV_1 &= 0 \\
\frac{1}{i\omega L_3}(V_2 - V_1) + \frac{1}{i\omega L_2}(V_2 - V_3) + i\omega CV_2 &= 0 \\
\frac{1}{i\omega L_2}(V_3 - V_1) + \frac{1}{i\omega L_2}(V_3 - V_2) + \frac{1}{i\omega L_1}(V_3 - V_4) + i\omega CV_3 &= 0 \\
\frac{1}{i\omega L_2}(V_4 - V_1) + \frac{1}{i\omega L_1}(V_4 - V_3) + i\omega CV_4 &= 0.
\end{aligned}$$

De esta forma podemos generalizar nuestro estudio para un circuito de cualquier generación. Asimismo, debemos de incluir la restricción con respecto a los enlaces discutida en la sección anterior, es decir, los enlaces que designamos con inductancias L_1 y L_3 no serán tomados en cuenta, solamente consideraremos los enlaces indicados por la inductancia L_2 . Por lo tanto, las leyes de Kirchoff para estados estacionarios pueden escribirse convenientemente de la siguiente forma:

$$i\omega CV_n + \frac{1}{i\omega L} \sum_m (V_n - V_m) = 0, \quad (\text{A.4})$$

donde la inductancia (L) y la capacitancia (C) tienen el mismo valor para todos los elementos, V_n es el voltaje medido en el sitio n , cuando se excita el sistema mediante una onda estacionaria de frecuencia ω . Aquí, la sumatoria se extiende a todos los sitios m directamente conectados al sitio n .

Bibliografía

- Aguilera-Granja F., Mejía-Lira F., Morán-Lopez J. L. y Barrera R. G. 1987, *Phys. Rev.* **B36**, 7342.
- Ashcroft N.W. y D Mermin, *Solid State Physics*, 1970.
- Askeland D.R. 1985, *The Science and Engineering of Materials*, (Alternate Edition por D.R. Askeland).
- Bak P., 1985, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 1517.
- Bardeen J., Cooper L. N., Schrieffer J. R. 1957, *Phys. Rev.* **108**, 1175.
- Barrio R. A. y Wang C. 1992, *XIII Winter Meeting on Low Temperature Physics* (a ser publicado).
- Barrio R. A., Wang C., Tagüña-Martínez J., Rios-Jara D., Akachi T. y Escudero R. 1988, *Mat. Res. Soc. Symp.* **99**, 801.
- Behrooz A., Burns M.J., Levine D., Whitehead B., Chaikin P.M., 1987, *Phys. Rev.* **B35**, 8396.
- Bendersky L., 1985, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 1461.
- Besicovitch A. S. 1932, *Almost Periodic Functions* (Cambridge Press, London).
- Biggs B. D., Poon S. J. y Munirathanm N. R. 1990, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2700.
- Chen C. H. y Chen H. S. 1986, *Phys. Rev.* **B33**, 2814.
- Chua L. O., Desoer C. A. y Kuh E. S. 1987, *Linear and Nonlinear Circuits*, (McGraw-Hill, New York).
- Delyon F., Lévi Y. E. y Souillard B. 1985, *Phys Rev Lett.* **55**, 618.
- Economou E. N. 1983, *Green's Functions in Quantum Physics* (Springer Series in Solid State Sciences, Vol. 7, Segunda Edición).
- Elser V. y C.L. Henley, 1985, *Phys Rev Lett.* **55**, 2883.
- Fabregat F.J., *Cristalografía Geométrica*, Textos Universitarios, UNAM, Instituto de Geología, 1971.
- Fuentes R., Navarro O., Wang C., Barrio R. A. y Barrera R. G. 1992, *Superficies y Vacío*, **3**, No. 1.
- Gardner M. 1977, *Scientific American* **236**(1), 110.
- Goldman A.I. y R.F. Kelson, 1993, *Reviews of Modern Physics*, vol 65, no. 1.
- Guyot P., Kramer P. y M. de Boissieu 1989, *Rep. Prog. Phys.*, 1373-1425.
- Haken H., 1976, *Quantum Field Theory of Solids*, (North-Holland Publishing Company).

- He L.X., Li X.Z., Zhang Z. y K.D. Kuo, 1988, *Phys. Rev. Lett.* 61, 1116.
- He S. y Maynard J. D. 1989, *Phys. Rev. Lett.* 62, 1888.
- Henley C., 1987, *Comments Cond. Mat. Phys.*, Vol 13, No. 2, 59, (Gordon and Breach, Science Publishers, Inc.).
- Ishimasa T., Nissen H.U. y Y. Fukano., 1985, *Phys. Rev. Lett.* 55, 511.
- Kittel C. 1976, *Introduction to Solid State Physics 5th edition* (John Wiley & Sons, Inc.).
- Kohmoto M. y Banaver J. R. 1986, *Phys. Rev. B* 34, 563.
- Kohmoto M., Sutherland B. y Tang C. 1987, *Phys. Rev. B* 35, 1020.
- Kuo K.H. 1990, *Journal of Non-Crystalline Solids* 117/118, 756.
- Landau L. D. y Lifshitz E. M. 1985, *Mecánica*, (Reverté, Barcelona).
- Levine D. y Steinhardt P. J. 1984, *Phys. Rev. Lett.* 53, 2477.
- Levine D. y Steinhardt P. J. 1986, *Phys. Rev. B* 34, 596.
- Levine D., Lubensky T.C., Ostlund S., Ramaswamy S., Steinhardt P. J., y y J. Toner, 1985, *Phys. Rev. Lett.* 54, 1520.
- Liu Y. y Riklund 1987, *Phys. Rev. B* 35, 6034.
- Ma P. y Liu Y. 1989, *Phys. Rev. B* 39, 9904.
- Mejía-Lira 1988, *Rev. Mex. de Fis.* 34(3), 375.
- McKelvey J.P., 1976 *Solids State and Semiconductor Physics*, (HarperRow Publishers, Inc.).
- Merlin R., Bajema K., Clarke R., Juang F. Y. y Bhattacharya P. K. 1985, *Phys. Rev. Lett.* 55, 1768.
- Mott N. F. y Jones W. 1958, *The theory of Properties of Metals and Alloys* (Oxford University Press, Oxford).
- Mott N. F. y Twose W. D. 1961, *Advan. Phys.* 10, 107.
- Nelson D. R. 1986, *Scientific American*, 43.
- Pávlov, *Física del estado sólido*, Ed. Mir, 1985.
- Penrose R. 1974, *Bull. Inst. Math. Appl.* 10, 266.
- Poon S. J. 1992, *Advances in Physics* Vol. 41, No.4, Editor D. Sherrington, 303-363.
- Shechtman D., Blech I., Gratias D. y Cahn J. W. 1984, *Phys. Rev. Lett.* 53, 1951.
- Socolar J.E.S., 1989, *Phys. Rev. B* 39, 10519.
- Socolar J.E.S., Lubensky T.C. y Steinhardt P.J., 1986, *Phys. Rev. B* 34, 3345.
- Springer K. y Harlingen D. V. 1987, *Phys. Rev. B* 36, 7273.
- Stephens P.W. y Goldman A. I., 1991, *Scientific American*, 44.

- Sutherland B. 1986, *Phys. Rev. B* **34**, 3904.
- Tagüeña J. 1983, ver *La Física Contemporanea 2* Editorial UNAM.
- Tsunetsugu H. Fujiwara T., Ueda K. y Tokihiro T. 1991, *Phys. Rev. B* **43**, 8879.
- Ueda K. y Tsunetsugu H. 1987, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1272.
- Wang C. 1988, Tesis Doctoral, Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, México D. F..
- Wang C. y Barrio R. A. 1988, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 191.
- Wang C. y Barrio R. A. 1990, *Quasicrystals and Incommensurate Structures in Condensed Matter*, Eds. M. José Yacamán *et al.* (World Scientific), p. 448.
- Wang C. y Barrio R. A. 1991, en *Surface Science*, editado por F. A. Ponce y M. Cardona (Springer, Berlin, 1991), p. 67.
- Wang C., Fuentes R., Navarro O., Barrio R. A. y Barrera R. G. 1992, *Journal of Non-Crystalline Solids* (Aceptado junio de 1992).
- Wang C., Navarro O., Cruz M., Fuentes R. y Barrio R. A. 1991, *Proc. International Symposium on the Physics and Chemistry of Finite Systems; From Clusters to Crystals*, Eds. P. Jena, S. N. Khanna y B. K. Rao (Kluwer Academic Publishers, Boston/London), a ser publicado.
- Xe L. X., Li X. Z., Zhang Z. y Kuo K. H. 1988, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 1116.
- Ziman J. M. 1979, *Models of Disorder* (Cambridge University Press, London).