

00382



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**

**FACULTAD DE CIENCIAS  
DIVISION DE ESTUDIOS DE POSGRADO**

**PROPIEDADES DE LAS EXCITACIONES  
ELEMENTALES EN REDES NO-PERIODICAS**

**FALTA PAGINA No.**

**T E S I S**

**QUE PARA OBTENER EL GRADO  
ACADEMICO DE  
DOCTOR EN CIENCIAS (FISICA)**

**P R E S E N T A  
GERARDO GARCIA NAUMIS**

**DIRECTOR DE TESIS:  
DR. RAFAEL ANGEL BARRIO PAREDES**



Universidad Nacional  
Autónoma de México



## **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.

**A mis padres**

**Al Dr. Rafael A. Barrio**

Deseo agradecer a todas aquellas personas que me han apoyado para poder realizar la presente tesis.

En primer lugar agradezco a mi asesor de tesis, el Dr. Rafael A. Barrio Paredes por haberme permitido la experiencia de haber trabajado junto a él. Esta experiencia, sin duda alguna, ha sido muy fructífera para mí; de ella he aprendido el oficio de ser físico (además de muchas otras cosas, que podrían ir desde la teoría del lenguaje hasta como encontrar un buen lugar para comer). Además, el Dr. Rafael A. Barrio no sólo dirigió esta tesis sino que me preparó para los exámenes generales de conocimientos, mediante los cuales obtuve el título de maestría. Su apoyo ha sido un gran estímulo en mi vida profesional y personal.

En este trabajo también conté con la invaluable ayuda de dos jóvenes investigadores: los doctores Chumin Wang y José Luis Aragón Vera, los cuales han sido casi como un par de ángeles guardianes.

Con ellos realicé parte del trabajo de investigación. Para ello utilicé varios de sus resultados previos así como sus programas de computadora y algunos de sus dibujos. Sin esta gran ayuda el presente trabajo hubiera sido imposible de realizar. En especial agradezco al Dr. Chumin Wang por las facilidades brindadas en el Instituto de Investigaciones en Materiales (UNAM) durante mi estadía en dicha institución.

Agradezco también a los profesores que integran el jurado: Dr. Eleuterio Castaño T., Dr. David Romeu C., Dr. Fray de Landa Castillo A. y Dra. Carmen Varea G., por la revisión que realizaron del presente trabajo. Sus valiosos comentarios han mejorado notablemente la versión final de la tesis. Además, este proceso de revisión ha sido una gran ocasión para seguir aprendiendo de personas excepcionales.

La presente tesis no hubiera podido realizarse de no haberse contado con la ayuda de una institución generosa tal y como lo es el Instituto de Física de la UNAM. En especial agradezco el apoyo prestado para poder disfrutar de una beca de la DGAPA durante el período de realización de la tesis.

Asimismo agradezco la ayuda en todos los aspectos del secretario académico del Instituto, Dr. Angel Dacal y del director del mismo: Dr. Octavio Novaro.

Existe mucha otra gente que ha contribuido de una forma u otra al presente trabajo. Su apoyo ha sido básico para la terminación de la tesis durante un período

de mi vida verdaderamente difícil.

Aunque hacer una lista es injusto porque puede ser que olvide a alguien, también es cierto que hay pocas oportunidades como esta para dar gracias a los amigos. Así que: Oliverio J., Tonathiu S., Paco B., Maru P., Mireya, Diana O., Victor O., Miguel C., Raul O., Luis, Margarita, Marcela B., Jarris M., Jorge O., Susanne I., Juan Carlos L.: muchas gracias.

Un lugar muy especial lo ocupan Adalberto Garcia Orduño y Francisco Bastida. Ellos saben mejor que nadie lo difícil que fué terminar esta tesis. Pero saben que esta tesis también es un triunfo de ellos. Por eso y muchas otras cosas les doy las gracias.

Por último, quiero agradecer a mi familia por todo el apoyo y cariño que siempre me han dado. En especial a mis padres quienes tanto se esforzaron para darnos lo mejor a pesar de tantas dificultades por las cuales hemos tenido que atravesar. Desafortunadamente, mi padre no llegó a ver concluido este trabajo. Sin embargo, esta tesis es una conclusión natural de todas las cosas que nos dejó.

Las redes quasiperiódicas han mostrado una gran utilidad para comprender la estructura de los materiales quasicristalinos descubiertos en 1985. Dichos materiales son sólidos que presentan orden de largo alcance con simetrías prohibidas por la cristalografía tradicional.

A una década del descubrimiento de los quasicristales, ha quedado claro que estos representan una nueva forma de agregación de la materia. Por esta razón, resulta importante estudiar sus propiedades físicas. En particular, el estudio de las excitaciones elementales permite entender la forma en la cual el sistema interactúa con el exterior. De este modo, las excitaciones elementales determinan muchas de las propiedades físicas de un sistema (tales como propiedades eléctricas, ópticas, térmicas, etc.).

En la presente tesis se aborda el estudio de las excitaciones elementales en redes quasiperiódicas, aunque muchas de las ideas presentadas son aplicables a redes no-periódicas.

Para realizar este estudio se utilizaron redes quasiperiódicas en una y dos dimensiones; el hamiltoniano utilizado fue uno de enlace fuerte en la banda  $s$  para aislar fácilmente los efectos de la quasiperiodicidad.

La tesis se divide en cinco capítulos y dos apéndices. En los capítulos uno y dos se da una introducción general sobre quasicristales y redes quasiperiódicas.

En el capítulo tres se estudian el espectro electrónico y las propiedades de localización en cadenas unidimensionales quasiperiódicas perfectas. También se estudia el caso en que se introducen defectos en dichas cadenas.

El capítulo cuatro contiene un estudio detallado del espectro electrónico y propiedades de localización en una red quasiperiódica bidimensional.

Finalmente, en el capítulo cinco se presentan las conclusiones del trabajo realizado.

# Indice

<b>1</b>	<b>Introducción</b>	<b>2</b>
1.1	Los quasicristales: un nuevo tipo de orden de la materia. . . . .	2
1.2	Propiedades electrónicas y excitaciones elementales. . . . .	8
<b>2</b>	<b>Mosaicos quasiperiódicos.</b>	<b>13</b>
2.1	Métodos de construcción y propiedades . . . . .	13
2.2	Mosaicos quasiperiódicos aleatorios . . . . .	25
<b>3</b>	<b>Cadenas unidimensionales</b>	<b>29</b>
<b>4</b>	<b>Propiedades de sistemas quasiperiódicos bidimensionales.</b>	<b>43</b>
4.1	Generalidades. . . . .	43
4.2	Propiedades del espectro . . . . .	47
4.3	Frustración en la red H <sub>2</sub> . . . . .	55
<b>5</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>66</b>
	<b>Bibliografía</b>	<b>70</b>
<b>A</b>	<b>Forma del espectro para estados localizados</b>	<b>75</b>
<b>B</b>	<b>Espectro electrónico de cadenas de Fibonacci aleatorias</b>	<b>77</b>
<b>C</b>	<b>Efectos de la frustración y localización de estados en la red de Penrose</b>	

# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1 Los quasicristales: un nuevo tipo de orden de la materia.

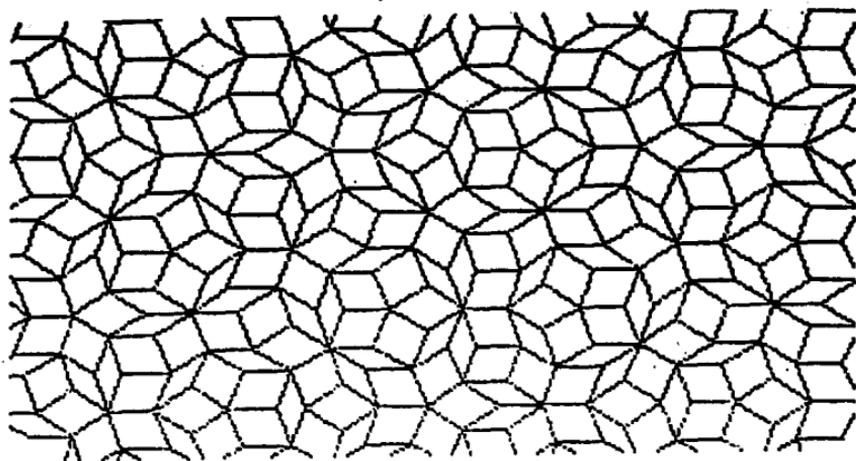
Es conocido que el arreglo geométrico de los átomos que forman un sólido juega un papel determinante en sus propiedades físicas. Por ejemplo, el grafito y el diamante (formados ambos por átomos de carbono) tienen propiedades radicalmente diferentes debido a que sus átomos se ordenan de distinta manera. De este modo, resulta natural clasificar a los sólidos de acuerdo a su estructura geométrica interna. Atendiendo a esta clasificación se ha considerado tradicionalmente que existen dos casos extremos de sólidos: cristalinos y amorfos. En los primeros el orden es mayor; su estructura está formada por una repetición periódica de una unidad atómica básica llamada celda unitaria. En cambio, los amorfos son materiales sin orden geométrico de largo alcance. Entre estos extremos se encuentran por ejemplo las aleaciones cristalinas desordenadas que, reteniendo un arreglo periódico de las posiciones presentan desorden en el tipo de átomos que ocupan cada sitio.

El orden periódico de los cristales restringe el número de estructuras posibles a sólo catorce redes básicas llamadas *de Bravais* [1]. Dicho orden transla-

cional periódico sólo es compatible con ciertas simetrías rotacionales. Puede demostrarse [2] que las rotaciones posibles son aquellas cuyos ángulos de giro son  $2\pi/2, 2\pi/3, 2\pi/4, 2\pi/6$ . En 2D esto se traduce en la imposibilidad de cubrir sin dejar huecos un piso con baldosas, pentagonales, heptagonales, etc..

Al difractar rayos X, electrones o neutrones, con una muestra cristalina se obtiene un patrón de puntos discretos, a diferencia de un amorfo para el cual el patrón consiste de anillos difusos. El patrón de puntos discretos es una consecuencia del orden translacional de largo alcance que genera planos atómicos igualmente espaciados los cuales actúan como una rejilla de difracción, de acuerdo a la conocida *ley de Bragg* [2]. Aunque teóricamente la diferencia entre el patrón de difracción de un cristal y un amorfo es muy clara, lo cierto es que experimentalmente se requieren diversas pruebas para concluir si una muestra es cristalina o amorfa, ya que existe la posibilidad de que el material sea un policristal, es decir, que esté formado por la unión de varios microcristales con orientaciones al azar.

Los patrones de difracción tienen una simetría rotacional heredada de la estructura del cristal prohibiéndose simetrías como la cinco, siete, ocho, nueve, diez, etc.. Sin embargo, en 1984 D. Shechtman [3] descubrió que al enfriar de manera ultrarrápida ( un millón de grados Kelvin por segundo) la aleación  $Al_4Mn$  se obtenía un material cuyo patrón de difracción electrónico consistía de puntos bien definidos pero con simetría decagonal (el ángulo de giro es  $2\pi/10$ ) . Aún mas, el patrón de difracción mostraba las mismas simetrías de un icosaedro (grupo puntual  $m\bar{3}5$ ). A esta fase se le llamó icosaedral o fase I [3] . Desde 1984 han sido encontradas otras aleaciones que presentan esta propiedad, como los sistemas Al-Cu-R (R=Li,Mn, Fe, Ru, Cr, Os, V) [4],[5],[6], Al-Mn-R (R=Si, Zn,Ge, Fe, Zr) [7],[8],[9]. También se han descubierto otras fases con simetrías exóticas, la decagonal ( $Al_4Fe$  [10]) , dodecagonal ( $Ni - (70.6 \text{ at. } \% Cr)$ ) [11] y octagonal (sistemas Mn-Al-Si, Mn-Fe-Si, Cr-Ni-Si, V-Ni-Si y Mo-Ni-Si [12]. Al principio se pensó en utilizar la cristalografía tradicional para entender estos resultados [13]. Los modelos que utilizaron esta idea consideraban a



(Figura 1.1: Mosaico de Penrose.)

la aleación de Shechtman como policristales con celdas muy grandes. Sin embargo, mediante múltiples experimentos se ha reconocido que la aleación es una nueva forma de ordenamiento de los sólidos [3] (en la referencia [14] se presenta una revisión mas completa del tema). A esta nueva clase de materiales se les ha dado el nombre de *quasicristales*. Aunque el descubrimiento de los quasicristales causó gran conmoción, su existencia había sido sugerida en 1982 por A.L. Mackay [15]. El punto de partida de A.L. Mackay fué el descubrimiento de R. Penrose sobre como tapizar un plano sin dejar huecos utilizando dos rombos de tamaños distintos: uno llamado gordo y el otro flaco [18]. Los rombos gordos y flacos forman el mosaico de Penrose si se unen siguiendo reglas de acoplamiento bien definidas. El mosaico que resulta aunque no es periódico, a simple vista tiene una cierta clase de orden que resulta difícil de definir (Fig. 1.1).

Mackay obtuvo el patrón de difracción del mosaico de Penrose utilizando un difractor óptico. El patrón resultó estar formado de puntos discretos aunque

con simetría diez, tal como sucede en los quasicristales reales. Si se observa con detenimiento el mosaico resultan evidentes hileras de planos en cinco direcciones, las cuales son las responsables de las propiedades de difracción. El orden translacional subyacente en el mosaico de Penrose (MP) puede analizarse a partir de la observación hecha por Mackay de que los puntos en el patrón de difracción sobre una dirección dada se obtienen utilizando dos vectores cuyas magnitudes son un número irracional [16] ( en el Penrose resulta ser la sección dorada  $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$ ). De aquí se sigue que en la dirección escogida, la estructura se puede describir como:

$$f(x) = \sum_{m,n} f(m, n) e^{2\pi i(mx+nrx)}$$

Esta función es un caso particular de lo que se conoce en matemáticas como *funciones quasiperiódicas* [9], las cuales son funciones que se pueden expresar como una serie de Fourier donde el número de vectores recíprocos, la dimensionalidad del espacio recíproco, es mayor que la dimensión del espacio real. Así el espacio recíproco de un mosaico bidimensional es de cinco dimensiones porque éste es el número de vectores requeridos para describir el patrón de difracción. Como se verá posteriormente, las estructuras quasiperiódicas se pueden obtener proyectando redes periódicas situadas en un espacio de mayor dimensión ( Por esta razón, el mosaico de Penrose parece formado por cubos vistos en diferentes perspectivas). Estas ideas se pueden generalizar para obtener diversos patrones con simetrías cristalográficas prohibidas [9],[14]. Los mosaicos de Penrose han servido para despojar a los quasicristales de su carácter paradójico y han permitido comprender que existe otra clase de orden intermedio entre los cristales y los amorfos. Además, se han utilizado estos mosaicos para proponer la estructura atómica de los quasicristales reales, aunque todavía existen varios problemas por sortear [14],[17]. Uno de los principales es que para crecer una estructura quasiperiódica se requiere tener un conocimiento global del mosaico en cada momento de la construcción para evitar huecos, esto es, es necesario examinar todo el mosaico para asegurarse de no cometer errores al agregar nuevas piezas.

En los materiales reales este mecanismo parecería no ser posible porque las velocidades de enfriamiento de las aleaciones son muy rápidas, aunque R. Penrose ha propuesto que tal vez estemos ante un ejemplo de lo que podría ser un modo nuevo de crecimiento atómico no-local basado en una superposición cuántica de estados [18]. Así, el quasicristal se formaría por una superposición lineal de diferentes configuraciones atómicas. Estas configuraciones coexistirían hasta que una de ellas, la que minimice la energía, creciera lo suficiente de modo que se convirtiera en la configuración final observada. Según Penrose, para atacar este problema se requiere de una nueva teoría cuántica[18].

En la actualidad existen otros modelos basados en los mosaicos de Penrose. Uno de ellos es el llamado de *quasicristal aleatorio* [19],[20]. Sus elementos básicos son similares a los del Penrose excepto que las celdas pueden unirse aleatoriamente rompiendo las estrictas reglas de los mosaicos quasiperiódicos. El patrón de difracción de un quasicristal aleatorio es similar al de un quasicristal perfecto. La ventaja principal de dicho modelo radica en que al no tener reglas tan estrictas para su crecimiento resuelve el problema del crecimiento no-local [19] y al parecer resulta favorable porque maximiza la entropía del quasicristal [21].

Otro modelo, llamado decaedral recursivo [22], desarrollado en el Instituto de Física de la UNAM, permite englobar los modelos de quasicristal aleatorio y quasicristal perfecto. El método consiste en crecer un agregado básico siguiendo la regla de completar decaedros irregulares en cada capa de crecimiento. El proceso de frustración se reduce introduciendo átomos mas pequeños, tal como se observa experimentalmente. Después se relaja la estructura utilizando un potencial de interacción atómico tal como el de Lennard-Jones [23]. Los agregados resultantes se interpenetran de manera que las coincidencias entre agregados sea máxima, lo que hace mínima la energía mecánica en la frontera. Las semillas de los agregados básicos son aquellas que se observan experimentalmente en la condensación de gases raros y tienen la propiedad de ser muy estables. A estas semillas se les conoce como números mágicos;

cada número mágico genera una fase quasicristalina diferente.

El determinar donde están los átomos en un quasicristal ha resultado ser una tarea difícil [9] dado que la estructura es la proyección de una red en una dimensión mayor por lo cual existen ambigüedades en la información disponible. Por ejemplo, los puntos del patrón de difracción de una estructura quasiperiódica llenan densamente todo el espacio recíproco porque el número de vectores incommensurables es mayor que la dimensión del patrón y dado que en la práctica sólo podemos manejar un número finito de vectores recíprocos, la información que podemos obtener es incompleta. El ignorar puntos del patrón de difracción de un quasicristal puede alterar considerablemente la estructura reconstruida mediante las técnicas de Patterson [9]. Además subsiste el problema de reconstruir las fases del patrón de difracción debido a que sólo se conocen las amplitudes y no las fases. La solución completa de este problema, conocido como problema inverso, es aún desconocida. Tampoco se ha logrado un consenso acerca de cual modelo resulta mas apropiado para describir los quasicristales; sin embargo por primera vez se cree que la estructura de la fase decagonal del sistema Al-Cu-Co corresponde a un MP con bastante precisión [24],[25]. La estructura propuesta para el Al-Cu-Co es un mosaico quasiperiódico aleatorio donde se coloca un agregado atómico en cada vértice del mosaico. Esto ha sido posible porque la fase decagonal presenta quasiperiodicidad en dos direcciones siendo periódica en la dimensión restante, pudiéndose estudiar el sistema como el apilamiento de mosaicos, a diferencia de la fase I en la cual la quasiperiodicidad se presenta en las tres dimensiones.

También se han podido construir *superredes quasiperiódicas unidimensionales*, formando una *cadena de Fibonacci* (su construcción será explicada en el capítulo II), con los compuestos: GaAs y AlAs [26], AlNiSi, AlCuMn y AlCuCo [27]. Aunque se han desarrollado diversas técnicas para determinar la estructura de los quasicristales (ensayo y error, Patterson, variación de contraste en difracción de neutrones, reconstrucción de fases por el método de máxima entropía y recuperación de fases

por la relación con una fase cristalina cercana [28]), lo cierto es que el problema sigue abierto.

## 1.2 Propiedades electrónicas y excitaciones elementales.

Si los quasicristales representan un nuevo tipo de orden de la materia, entonces resulta importante investigar sus propiedades físicas, tales como propiedades electrónicas, ópticas, mecánicas, vibracionales, etc. . El estudio de dichas propiedades eventualmente determinará las posibles aplicaciones tecnológicas de estos nuevos materiales. Además, dado que los quasicristales no son sistemas periódicos pero tampoco desordenados, podrían esperarse nuevos efectos en las propiedades físicas.

El problema se ha atacado desde dos frentes, el experimental y el teórico. En el experimental se ha llevado a cabo la tarea de caracterizar las propiedades físicas como son elasticidad, conductividad, magnetoresistencia, efecto Hall, capacidad calorífica y termopotencia. En el frente teórico se ha estudiado el efecto de la quasiperiodicidad usando hamiltonianos simples, así como cálculos de estructura electrónica para algunas aleaciones. A continuación se presenta un resumen de lo hecho hasta el momento sobre propiedades físicas de quasicristales.

Los primeros estudios de las propiedades de transporte electrónico [29] revelaron un comportamiento similar al de aleaciones desordenadas con resistividades de 100 a 500  $\mu\Omega cm$  aunque los quasicristales utilizados para los estudios (tales como AlMn, AlCuFe) eran inestables termodinámicamente y con defectos. Estudios posteriores de quasicristales estables termodinámicamente y sin gran cantidad de defectos [30],[31],[32], como las aleaciones AlCuCo y AlCuRu, muestran un comportamiento semi-metálico con una alta resistividad (de 1000 a 4000  $\mu\Omega cm$ ).

La conductividad presenta un comportamiento anómalo; esta aumenta cuando se presentan defectos estructurales o cuando se sube la temperatura arriba de los

1000K [30],[32]. Usando la fórmula de Einstein:  $\dot{\sigma} = e^2 N_{E_f} D$  (donde  $e$  es la carga del electrón,  $N_{E_f}$  es la densidad de estados (DOS) al nivel de Fermi y  $D$  es la difusividad) se concluye que la difusividad aumenta cuando aumentan la frecuencia de los procesos de dispersión debido a defectos estructurales, a diferencia de los metales en los cuales sucede lo contrario.

También se ha medido una fuerte dependencia del coeficiente de Hall respecto de la temperatura y termopotencias con signo opuesto al normal [33]. Se ha especulado que estas propiedades anómalas de transporte se deben a la naturaleza peculiar del espectro electrónico, el cual como se verá posteriormente contiene una infinidad de brechas energéticas de manera análoga a un polvo de Cantor, y a la forma autosimilar de los eigenestados en las redes quasiperiódicas [34]. Una característica general de los quasicristales es que la densidad de estados (DOS) es similar al caso de electrones libres pero con la aparición de un pseudo-brecha de energía al nivel de Fermi [33],[45]. Las simulaciones numéricas también indican la existencia de esta pseudo-brecha [35]. Al parecer estos resultados experimentales pueden explicarse en términos de la llamada interacción *superficie de Fermi-zona de Jones* (SF-ZJ) [33].

La zona de Jones se construye de manera análoga a la zona de De Brioullin, es decir, a partir de planos perpendiculares que bisectan los vectores recíprocos, pero con la diferencia de que sólo se toman en cuenta aquellos vectores para los cuales el factor de estructura es diferente de cero [36] (en los quasicristales no existe una zona de Jones en el sentido estricto, sino que se define utilizando los vectores recíprocos asociados a los puntos de difracción con mayor intensidad; algunos autores prefieren llamarla pseudo-zona de Jones). Mediante consideraciones energéticas puede demostrarse que la fase icosaedra se estabiliza cuando la superficie de Fermi intersecta la zona de Jones [37]. Si  $G$  es el vector asociado a los puntos de difracción con mayor intensidad y  $k_F$  es el vector de onda de Fermi, estimado utilizando la densidad electrónica, la condición se reduce a:  $\|G\| \approx 2k_F$ . Este criterio de estabilidad de fase se conoce como la regla de *Hume-Rothery* [33]. Dicha regla ha sido aplicada para aleaciones metálicas

y relaciona el intervalo de composición atómica con la concentración de electrones y los datos de difracción de rayos X [38]. Los datos que se disponen hasta el momento indican que los quasicristales pueden ser vistos como una aleación de Hume-Rothery [33].

Este esquema explica la aparición de la pseudo-brecha de energía al nivel de Fermi por la fuerte difracción de los electrones libres por planos de Bragg cercanos a la superficie de Fermi. Puede pensarse que esta pseudo-brecha se debe a la transferencia de estados electrónicos que estaban previamente cerca del nivel de Fermi y de la banda de conducción hacia energías menores situadas dentro de la banda de valencia.

Los estudios teóricos de propiedades electrónicas se han dividido en dos clases: cálculos realistas basados en *funcionales de la densidad en cristales aproximantes* [33] (cristales con celdas-unidad cada vez mas grandes, que se van aproximando a un quasicristal, del mismo modo en que un número irracional se aproxima mediante una sucesión de números racionales) y estudios de hamiltonianos del tipo de *enlace fuerte* en redes quasiperiódicas simples ( para una revisión completa del tema consultar la ref. [33]).

Esta última clase de estudios es fundamental porque el efecto de la quasiperiodicidad en el espectro de energías y la localización de estados aún no se ha comprendido. Para las estructuras periódicas existe el teorema de Bloch que predice bandas de estados extendidos mientras que los amorfos pueden presentar estados localizados. Dado que el orden existente en un quasicristal no es periódico, el teorema de Bloch no es aplicable. Tampoco pueden utilizarse muchos de los métodos desarrollados para materiales amorfos por existir orden de largo alcance dentro de los quasicristales. Estas cuestiones son fundamentales porque el cálculo de magnitudes termodinámicas para un cuerpo macroscópico, formado por partículas interactivas, exige el conocimiento de su espectro de energías [39].

En general, en un sistema de partículas interactivas es de particular importancia el estudio de los estados colectivos del sistema dado que en muchos casos

dichos estados determinan las propiedades físicas de este. A temperaturas bajas, sólo es necesario conocer el estado base y tener en cuenta los primeros estados excitados, es decir, los próximos al estado base. En la mecánica cuántica, cualquier estado débilmente excitado de un sólido puede verse como un conjunto de *excitaciones elementales* separadas [39]. Estas se comportan como *quasipartículas* que se mueven dentro del sólido con una energía  $E$  e impulso  $p$  definido. Una característica importante del espectro energético del sólido es la función  $E(p)$  conocida como *relación de dispersión*.

En el estado sólido hay varios ejemplos de excitaciones elementales: fonones (asociados a vibraciones de una red atómica), magnones (excitaciones colectivas del espín atómico en una red), plasmones (asociados a oscilaciones de cargas en el interior de un metal), excitones, electrones en sólidos, etc. El estudio de las excitaciones elementales en quasicristales es aún un problema lejos de entenderse; mas aún, en los llamados quasicristales aleatorios no existe ningún trabajo relacionado con este tema.

Por este motivo, la presente tesis aborda el problema de las excitaciones elementales en redes quasiperiódicas simples en una y dos dimensiones usando hamiltonianos de enlace fuerte para un electrón en la banda  $s$ . Esta elección del hamiltoniano se debe a que su sencillez nos permite aislar los efectos de la quasiperiodicidad y avanzar en el tratamiento analítico del problema. Además, este hamiltoniano puede dar información sobre el comportamiento de los fonones en la red [43].

En la presente tesis se estudiarán con detalle la naturaleza de los espectros electrónicos de redes quasiperiódicas en una y dos dimensiones. Se verá que el espectro de una red quasiperiódica unidimensional es fractal. En el caso de la red unidimensional se estudiarán las diferencias entre un quasicristal aleatorio y uno perfecto. Los resultados indican que al usar el modelo de quasicristal aleatorio se pierde la autosimilaridad del espectro, porque éste se suaviza, es decir, aparecen estados que rellenan la infinidad de brechas energéticas. Aunque el estudio de sistemas unidimensionales pueda parecer poco realista, existen experimentos hechos en superredes

unidimensionales de Fibonacci que proporcionan un banco de prueba para los resultados obtenidos [26]. Entender el caso de una red quasiperiódica bidimensional también es importante porque la llamada fase decagonal, para la cual se cuenta con el modelo estructural más realista, resulta estar formada por el apilamiento en una dirección de redes quasiperiódicas bidimensionales. En el capítulo IV se mostrará que al considerar un quasicristal en dos dimensiones aparece un fenómeno, llamado *frustración*, que no está presente en las redes unidimensionales. La frustración de la red destruye la fractalidad global del espectro. Por esto la naturaleza del espectro de un quasicristal unidimensional y uno bidimensional es diferente. También se estudiará la aparición de un nuevo tipo de eigenestados llamados *críticos* o *fractales*. Recientemente se han encontrado evidencias experimentales a favor de las propuestas teóricas de un espectro fractal aunque el espectro aparece suavizado [45]. Esto puede deberse a la falta de resolución experimental o, de acuerdo a lo que sugieren algunos resultados de la presente tesis, a la posible estructura del mosaico aleatorio de la red.

Finalmente se resumirán brevemente las aportaciones más importantes del presente estudio al entendimiento del comportamiento de las excitaciones elementales al orden quasiperiódico.

## Capítulo 2

# Mosaicos quasiperiódicos.

### 2.1 Métodos de construcción y propiedades

Para poder realizar un estudio numérico de los efectos de la quasiperiodicidad en las propiedades electrónicas, lo primero que se necesita es poder construir redes quasiperiódicas. El objetivo de este capítulo es justamente mostrar un método novedoso con el que se contruyen las redes que se usarán posteriormente para estudiar las propiedades electrónicas. También se incluye una breve revisión de otros métodos existentes para generar mosaicos quasiperiódicos, ya que es necesario familiarizarse con ellos para poder realizar un estudio sistemático de los quasicristales. Resulta de especial importancia el método de *corte y proyección*, por su utilidad en la caracterización de los patrones de difracción de quasicristales.

Como se dijo en el capítulo anterior, la red quasiperiódica mas representativa es la llamada cadena de Fibonacci. Esta cadena es una estructura quasiperiódica unidimensional (1D). Consiste en una secuencia irrepitible a cualquier escala de dos intervalos de longitudes diferentes, cuya proporción entre ambos debe ser la sección dorada  $\tau$  (ver la Fig. 2.1). La secuencia de los intervalos es obtenida mediante un procedimiento recursivo; de manera que la secuencia resulta quasiperiódica, es decir, que su transformada de Fourier es discreta.

Si denotamos por S la longitud del intervalo mas corto y L la del mas largo, la secuencia se obtiene mediante la siguiente regla de sustitución:

$$S \Rightarrow L$$

$$L \Rightarrow LS.$$

Si empezamos la secuencia con un intervalo dado, por ejemplo con la L, e iteramos las secuencias mediante la regla de sustitución se obtiene:

- 1) L
- 2) LS
- 3) LSL
- 4) LSLLS
- 5) LSLLSLSL

Si se continua iterando hasta el infinito, la razón entre el número de intervalos L y S se aproximará a la razón dorada,  $\tau$ . El efecto de esta regla de sustitución en una secuencia dada de dos elementos fué estudiada por primera vez por Leonardo de Pisano (cuyo apodo era Fibonacci) durante el Renacimiento italiano.

Al contar el número de intervalos totales en cada generación se tiene la siguiente sucesión: 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, ..., la cual se obtiene mediante la regla:  $x_n = x_{n-1} + x_{n-2}$ , donde  $x_i$  es el número de intervalos en la  $i$ -ésima generación. Estos son los números de Fibonacci. La sucesión de racionales definida por la razón de dos números de Fibonacci consecutivos se aproxima a  $\tau$  para generaciones grandes:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{x_n}{x_{n-1}} = \tau.$$

Otra manera equivalente de generar la cadena, inspirada en la regla para obtener los números de Fibonacci, consiste en unir la generación  $i - 1$  con la  $i - 2$  para obtener la cadena de generación  $i$ , según se muestra a continuación:

- 1) S
- 2) L
- 3) = 2) + 1)  $\Rightarrow$  LS
- 4) = 3) + 2)  $\Rightarrow$  LSL
- 5) = 4) + 3)  $\Rightarrow$  LSLLS

Este método será el utilizado para generar las redes en que se estudiarán las propiedades electrónicas. Su ventaja radica en poder renormalizar en cada paso las interacciones entre sitios [40].

Estas reglas pueden ser convertidas en una transformación de autosimilaridad llamada de *inflación* (cuya inversa es la regla de *deflación*). Esta regla originó entre los griegos el conocimiento de la razón dorada, después usada hasta el abuso en el arte renacentista como el prototipo que origina la belleza. Dado que la razón del intervalo L respecto del que se sustituye, L+S, es igual a la razón entre S y L, i.e.,

$$\frac{L}{L+S} = \frac{S}{L}$$

ó

$$\left[ \frac{L}{S} \right]^2 = \left[ \frac{L}{S} \right] + 1$$

se observa que la regla de sustitución es equivalente a una transformación de autosimilaridad. La ecuación de autosimilaridad anterior es la ecuación algebraica (i.e., una ecuación polinomial con coeficientes enteros) que justamente define a  $\tau$  (de ahí el nombre de sección dorada, ya que es la razón en la cual debe partirse un intervalo de manera que la proporción entre las longitudes de las dos partes resultantes sea igual a la proporción entre todo el intervalo y uno de los pedazos).

Esta transformación puede escribirse en forma matricial:

$$\begin{bmatrix} L \\ S \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L \\ S \end{bmatrix}$$

generalizable para  $k$  diferentes intervalos incommensurables ( $L_i$ ),

$$L_i = M_{ij}L_j$$

siendo  $M_{ij}$  una matriz de  $k \times k$  cuyos eigenvalores satisfacen una ecuación algebraica [46].

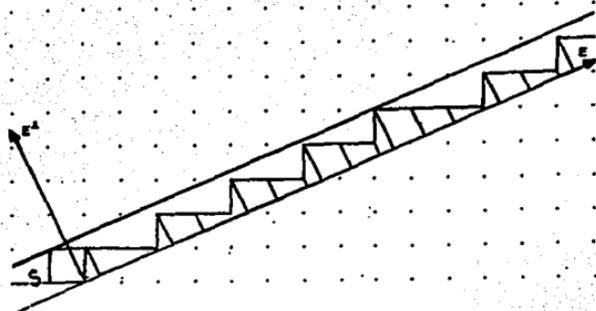
La transformada de Fourier ( $F(k)$ ) de la cadena de Fibonacci consiste en picos discretos que llenan densamente el espacio recíproco. Aún más, la transformada se construye mediante la combinación lineal de dos vectores recíprocos cuyas magnitudes son incommensurables entre sí. Esta propiedad permite clasificar a la cadena como una estructura quasiperiódica [9]. Por lo tanto, el espacio recíproco de la cadena tiene dos dimensiones y resulta mayor que el espacio de la cadena. En general, este hecho es cierto para todas las estructuras quasiperiódicas.

Dado que el espacio recíproco es de mayor dimensión surge la cuestión de si es posible obtener las estructuras quasiperiódicas mediante una proyección de un espacio cuya dimensión sea igual a la dimensión del espacio recíproco.

Esta idea conduce directamente al *método de corte y proyección* [9]. Este consiste en proyectar una red periódica situada en un espacio de dimensión igual a la del espacio recíproco, a cierto subespacio de dimensión menor. No todos los puntos son proyectados sino sólo aquellos que caen dentro de un región definida alrededor de un subespacio; a dicha región se la llama *banda* porque su función es definir un ancho alrededor del subespacio.

El método se ilustra muy fácilmente para el caso de la cadena de Fibonacci y se generaliza inmediatamente para cualquier estructura quasiperiódica. En este caso la red periódica es una red cuadrada en dos dimensiones (Fig. 2.1). El subespacio al cual se debe proyectar es una línea recta ( $E$ ) y la banda ( $W$ ) se forma desplazando la celda unitaria sobre la línea  $E$ . El trazo del desplazamiento es una línea recta paralela a  $E$ .

Proyectando los puntos de red que caen dentro de la banda se obtiene una



( Figura 2.1: Obtención de una estructura quasiperiódica en 1D proyectando una red periódica en 2D sobre una recta con pendiente irracional.)

sucesión de puntos sobre  $E$ . Si la pendiente de la recta  $E$  es  $\tau$  que se obtiene la sucesión de Fibonacci [14].

Lo expuesto anteriormente puede generalizarse para estructuras quasiperiódicas de dimensiones mayores. Para ello considérese una red hipercúbica en un espacio de  $N$  dimensiones (denotado por  $E$ ); en donde cada vector  $r \in E$  se describe por:

$$r = \sum_{i=1}^N n_i e_i$$

siendo los vectores  $e_i$  la base de la red hipercúbica.

En el espacio  $E$  se considera un subespacio de dimensión  $n$  (llamado espacio paralelo  $E^{\parallel}$ ), el cual define otro subespacio de dimensión  $N-n$ , llamado perpendicular ( $E^{\perp}$ ). El espacio  $E$  es la suma directa de los dos subespacios:  $E = E^{\parallel} \oplus E^{\perp}$ . Cada punto  $r$  en  $E$  se descompone como:

$$r = r^{\parallel} + r^{\perp}$$

En este lenguaje, la banda es el conjunto:

$$S = \left\{ r \in E \mid r^{\parallel} + \sum_{i=1}^N \alpha_i e_i^{\perp}, \alpha_i \in (0, 1), \text{ para todo } i \right\}$$

donde  $e^\perp$  denota la componente del vector  $e$  en el subespacio perpendicular. A esta componente se la llama *ventana*.

La estructura quasiperiódica de dimensión  $n$  es la proyección ortogonal de puntos de la red que caen dentro de  $S$ :

$$d = \Pi(r)W(r)$$

donde  $W(r)$  es una función característica que vale uno si  $r$  cae dentro de la banda y cero en caso contrario. La matriz  $\Pi$  es la que proyecta al subespacio  $E$ . Sustituyendo  $r$  tenemos:

$$d = \Pi \left\{ \sum_{i=1}^N n_i e_i \right\} W(r) = \left\{ \sum_{i=1}^N n_i \Pi(e_i) \right\} W(r)$$

pero  $\Pi(e_i)$  es la proyección de los vectores base sobre  $E$ , por lo que si se define:  $q_i = \Pi(e_i)$  se tiene,

$$d = \left\{ \sum_{i=1}^N n_i q_i \right\} W(n_i).$$

Así la red  $d$ , de la estructura quasiperiódica es una combinación lineal con coeficientes enteros de  $N$  vectores, los cuales son la proyección de los vectores base de la red hipercúbica en el subespacio  $E$ . No todas las combinaciones de  $n_i$  son permitidas sino sólo aquellas que hacen uno a la función  $W(r)$ . Los elementos de la matriz  $\Pi$  son el producto interior de los vectores  $q_i$  [14]:

$$\Pi_{ij} = \langle q_i, q_j \rangle \tag{2.1}$$

Siguiendo este esquema, la cadena de Fibonacci se puede escribir como:

$$d = \{nL + mS\} W(m, n)$$

siendo  $m$  y  $n$  dos enteros, con:  $L = \Pi(e_1)$  y  $S = \Pi(e_2)$ .

El mosaico de Penrose (MP), el cual se mencionó en el Capítulo 1, se obtiene de manera directa utilizando este método. Para ello se construye una red cuadrada

en cinco dimensiones desde la cual se proyecta a un subespacio bidimensional. El subespacio se escoge de tal manera que los vectores base de la red cúbica en 5D se proyecten en los cinco vectores que apuntan a los vértices de un pentágono. Entonces, los vértices del MP son una combinación lineal con coeficientes enteros de cinco vectores. La estructura queda caracterizada por:

$$\mathbf{d} = \left\{ \sum_{i=0}^4 n_i \mathbf{q}_i \right\} W(n_0, n_1, n_2, n_3, n_4)$$

donde:  $\mathbf{q}_i = (\cos(2\pi i/5), \text{sen}(2\pi i/5))$ .

El análogo del MP en tres dimensiones se construye considerando una red hipercúbica en  $N=6$ , y un subespacio de tres dimensiones. La elección del subespacio debe ser tal que la base de la red hipercúbica se proyecte sobre los seis vectores que apuntan a los vértices de un icosaedro. Resulta claro que mediante este método podemos generar estructuras quasiperiódicas con otros ordenes orientacionales como 8 o 12 [14]. Existe todavía otro método más potente llamado *dual generalizado* que permite generar estructuras quasiperiódicas con cualquier orden orientacional; aún más, dicho método produce estructuras que no son obtenibles por el método de corte y proyección[14]. Sin embargo, aunque el método dual generalizado contiene al de corte y proyección, en la práctica se utiliza más al último por ser más simple.

Muchas de las propiedades de la cadena de Fibonacci son compartidas por el MP. Una de las más notables es la relación de autosimilaridad. Mediante el procedimiento geométrico mostrado en la figura 2.2., conocido como *inflación*, se construye un MP de tamaño menor (escalado por un factor  $1/\tau$ ) partiendo de un MP dado. El procedimiento es un medio muy útil para construir un MP; se empieza con un rombo y se aplica sucesivamente la regla hasta llegar al mosaico del tamaño deseado.

La regla de inflación indica que un rombo gordo se convierte en un rombo delgado y uno gordo de la siguiente generación. Análogamente, un rombo gordo se subdivide en dos gordos y uno delgado. Siguiendo esta regla, resulta fácil ver que el número de rombos gordos y flacos está dado por dos números sucesivos de Fibonacci;



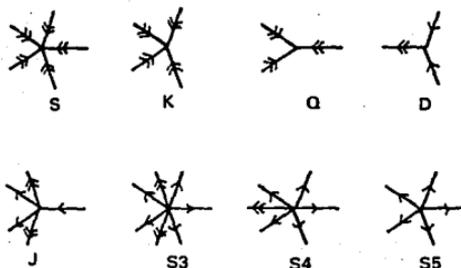
(Figura 2.2: Procedimiento de inflación mediante el cual se construye un Penrose de tamaño menor partiendo de un MP dado.)

de donde se obtiene que la fracción del número de rombos gordos respecto del de rombos flacos se aproxima a  $\tau$  para mosaicos grandes.

Una manifestación de esta autosimilaridad es el *teorema de Conway* [9], el cual asegura que si se considera una configuración local contenida en un círculo de radio  $R$ , existe una configuración similar a una distancia máxima de  $4R$  (en el MP la distancia promedio es cercana a  $2R$ ). Del teorema de Conway se deduce que la frecuencia de aparición de una configuración local de radio  $R$  debe ser proporcional al inverso de su área:

$$\rho(R) \approx \frac{1}{2\pi R^2} \quad (2.2)$$

El teorema de Conway permite dar un criterio para decidir si dos redes quasiperiódicas son similares. Esta cuestión no es tan sencilla porque dada la falta de simetría translacional resulta difícil comparar dos redes quasiperiódicas. Por esta razón es útil el concepto de *isomorfismo local*. Se dice que dos redes son isomorfas localmente si cualquier configuración de radio  $R$  aparece en ambas. Si dos redes son isomorfas, de la ec.(2.2) concluimos que las probabilidades de una configuración local



( Figura 2.3: Tipos de vértices que aparecen en el MP.)

dada deben ser iguales en ambas redes. Este criterio permite decidir si dos redes son similares.

Las configuraciones de menor tamaño que aparecen en una red son los distintos tipos de vértices; en el MP hay ocho tipos diferentes de ellos, nombrados Q, D, K, S, S<sub>5</sub>, S<sub>4</sub> y S<sub>3</sub> (Fig. 2.3) (estos nombres se deben al matemático holandés De Buijn quien gusta de jugar cartas: Q-queen, J- jack, etc.).

La frecuencia de aparición de cada vértice es [42]:

$$P(Q) = \frac{1}{7^4} = 14.59\%,$$

$$P(D) = \frac{1}{7^3} = 38.20\%,$$

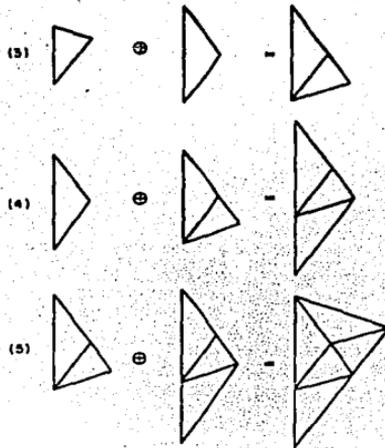
$$P(K) = \frac{1}{7^2} = 9.02\%,$$

$$P(S) = \frac{2+7}{57^6} = 4.03\%,$$

$$P(S_5) = \frac{3-7}{57^4} = 1.54\%,$$

$$P(S_4) = \frac{1}{7^7} = 3.44\%,$$

$$P(S_3) = \frac{1}{7^5} = 5.57\%.$$



( Figura 2.4: Construcción de un MP mediante un método análogo al utilizado para calcular los números de Fibonacci.)

También se puede construir el MP mediante un procedimiento análogo al de los números de Fibonacci [41]; es decir, el MP de generación  $m$  se obtiene pegando los MP de generación  $m-1$  y  $m-2$ .

Las piezas básicas de este procedimiento son los dos triángulos de generación 1 y 2 que se muestran en la figura 2.4; los cuales se obtienen dividiendo por sus diagonales a un rombo gordo y otro flaco.

El triángulo de generación 3 se obtiene pegando los de generación 2 y 1; teniéndose que reflejar por un plano espejo horizontal a este último. Hecho esto se observa que el triángulo resultante es similar al de generación 1; por ello, la generación 4 se obtiene pegando el triángulo de generación 3 con el reflejo especular del triángulo de generación 2. Al pegar dos generaciones siempre aparecen uno de los dos triángulos

básicos, por lo que siempre es posible pegarlos. En general, si  $T(m)$  es el triángulo de generación  $m$ , la regla es :

$$T(m) = T(m-1) \oplus T^*(m-2).$$

La estrella indica la reflexión especular. Para pegar los triángulos es necesario saber que lado se junta con cual. La regla para pegar los lados se deduce con la sola observación de las primeras cuatro generaciones dado que éste es el período de la secuencia de construcción [42].

El procedimiento de construcción es especialmente apropiado para calcular propiedades electrónicas en redes de Penrose de gran tamaño (15 000 sitios) [42] porque se puede aprovechar la recursividad para implementar un procedimiento de renormalización, el cual será explicado posteriormente. El interés en redes de gran tamaño se debe a la imposibilidad de eliminar la frontera en las estructuras quasiperiódicas.

En una red finita periódica se imponen condiciones cíclicas de contorno que permiten conservar la invariancia translacional de la red simulando de este modo el comportamiento de la red infinita.

En un quasicristal perfecto esto no se puede hacer porque no hay invariancia translacional. Además se cree que el efecto de la superficie es mucho mayor en quasicristales que en otras clases de sólidos.

Actualmente hay dos maneras de tratar el problema. La primera es creciendo la red, lo cual representa un esfuerzo considerable de cómputo. La otra es el llamado método de *aproximantes racionales*. La idea es muy simple; como se sabe, un número irracional puede aproximarse tanto como se quiera por una sucesión de racionales (  $\tau$  por ejemplo se aproxima por  $x_n/x_{n-1}$  donde  $x_n$  es un número de Fibonacci de generación  $n$ ). Entonces, un quasicristal podrá aproximarse mediante una sucesión de cristales de período cada vez mayor. La manera de realizar estas aproximaciones se desprende de manera inmediata del método de corte y proyección.

Como ejemplo se construirán los aproximantes racionales de una red de Fibonacci. Para ello notamos que la pendiente de la recta E de la figura 2.1 es  $\tau$ . En vez de utilizar esta pendiente, se pueden usar los aproximantes racionales de  $\tau$ . El primer aproximante se obtiene con una recta de pendiente 1 (1/1). Al proyectar la red cúbica sobre E se observa que la estructura obtenida es una cadena con celda unidad AA (A y B serán las unidades de longitudes posibles entre de dos puntos contiguos) y período  $L = \sqrt{1^2 + 1^2}$ ; este aproximante no es más que una cadena lineal. El segundo aproximante es una recta de pendiente 2 (2/1). El resultado es una cadena con celda unitaria AAB y período  $L = \sqrt{2^2 + 1^2}$ . La tercera generación (pendiente 3/2) tiene celda unidad AABAB y período  $L = \sqrt{3^2 + 2^2}$ . Siguiendo esta secuencia, el aproximante de generación m-ésima tendrá un período  $L_n = \sqrt{x_n^2 + x_{n-1}^2}$ . La cadena de Fibonacci se obtiene al hacer tender a m al infinito. Como las cadenas son periódicas, se pueden aplicar condiciones cíclicas de contorno.

La idea se generaliza inmediatamente a dos y tres dimensiones. Para ello no hay más que sustituir los vectores  $q_i$  de la ec. (2.1) por los aproximantes racionales del seno y coseno del ángulo dado (para el MP es útil la relación  $\cos(2\pi/10) = \tau/2$ ). Mediante esta sustitución la matriz de proyección se convierte en un aproximante racional, lo cual equivale a escoger el subespacio E con una inclinación cuyo ángulo es un aproximante racional del ángulo irracional de corte. Este formalismo es útil para estudiar las transiciones de fase cristal-quasicristal [48]. Para ello se aplica la teoría de Landau [49] de transiciones de fase siendo el parámetro de orden la pendiente del ángulo del subespacio  $E^{\parallel}$  respecto de la red hipercúbica [48]. El método de los aproximantes racionales también es útil para realizar cálculos electrónicos de quasicristales a primeros principios [34].

## 2.2 Mosaicos quasiperiódicos aleatorios

Los mosaicos quasiperiódicos aleatorios, tal como se dijo en el capítulo I, explican satisfactoriamente varios problemas del modelo de quasicristal perfecto. A diferencia del mosaico quasiperiódico perfecto, el cual queda especificado mediante una regla de construcción (o de empaquetamiento), el aleatorio requiere de una regla adicional: la especificación de pesos probabilísticos para cada configuración del mosaico. La especificación de los pesos de cada configuración puede estar dada por reglas de crecimiento estocástico [50]. Si el mosaico está en equilibrio, los pesos están dados por el factor de Boltzmann ( $w = \exp(-H/kT)$ ), donde  $H$  es el hamiltoniano definido en términos de la interacción entre celdas del sistema [21]. Al hacer tender la temperatura a infinito, los pesos estadísticos se vuelven iguales para cada configuración. En este caso se dice que el mosaico es máximamente aleatorio. En la mayoría de los estudios [51], se ha identificado a los mosaicos máximamente aleatorios con el modelo de quasicristal aleatorio.

La conjetura básica del modelo aleatorio es que los quasicristales máximamente aleatorios *maximizan* la entropía [21], a diferencia de los cristales, los cuales *minimizan* la energía. Puede verse en la afirmación anterior una generalización de los principios según los cuales se ordena la materia.

Una vez más, el mosaico aleatorio mas sencillo se construye en una dimensión partiendo de la cadena de Fibonacci. Según lo dicho en la sección anterior, la cadena perfecta se construye uniendo la cadena de generación  $n-1$  con la de  $n-2$ :

- 0) S
- 1) L
- 2) LS
- 3) LSL

n)  $F(n-1)+F(n-2)$  .

En la cadena aleatoria se introducen intercambios entre dos elementos contiguos de la cadena. Por ejemplo, en el paso 2) se obtiene una variante de la cadena perfecta intercambiando la L con la S,  $2')=SL(=0)+1)$ . Análogamente, en el paso 3) se pueden construir las cadenas:  $3')=LLS$  y  $3'')=SLL$ , observese que  $3')=(1)+2)$  y  $3'')=(2')+1)$ . Siguiendo esta regla, en cada paso se puede unir la cadena n-1) con la n-2) de dos maneras:  $F(n)=F(n-1)+F(n-2)$ , ó,  $F(n)=F(n-2)+F(n-1)$ . Los pesos estadísticos de cada configuración pueden incluirse de manera natural en esta construcción asignando a cada manera de pegado una probabilidad (p) determinada:

$$F(n) = \begin{cases} F(n-1) + F(n-2) & \text{con probabilidad } p \\ F(n-2) + F(n-1) & \text{con probabilidad } 1-p \end{cases} \quad (2.3)$$

Si  $p=1$  la cadena es de Fibonacci; en cambio, para  $p=1/2$ , la cadena se vuelve máximamente aleatoria. El número de configuraciones posibles en el paso N es  $2^N$ .

El intercambiar dos intervalos en un sitio equivale, en el método de corte y proyección, a desplazar la banda W a lo largo del espacio  $E^1$  en el sitio de intercambio. Estos desplazamientos pueden representarse por un campo llamado *fasónico*, denotado por  $h^1(\mathbf{r})$ . El origen de este nombre es el siguiente. Tanto para un cristal como para un quasicristal, la densidad o el potencial del sistema quedan descritos por:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} \rho(\mathbf{q}) e^{i(\mathbf{q}, \mathbf{r})}, \text{ con } \mathbf{q} = \sum_{n=1}^N m_n \mathbf{q}_n$$

siendo  $N \geq d$ . La fase de cada componente de Fourier ( $\phi_n = \langle \mathbf{q}, \mathbf{r} \rangle$ ) es invariante ante la transformación:  $\phi'_n = \phi_n + 2\pi M$ , (M es algún entero). Para un cristal cuyos sitios de red se denotan por  $\mathbf{u}$ ,  $N=d$ . La transformación de fases corresponde al grupo de la transformaciones de Bravais [47]:

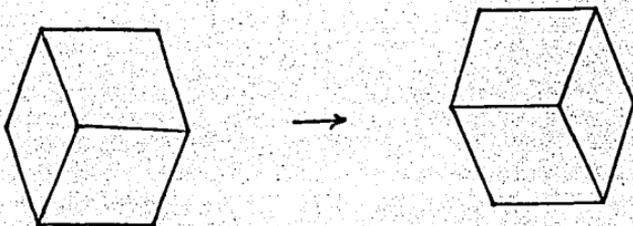
$$\Delta_n = \langle \mathbf{q}_n, \mathbf{u} \rangle.$$

Para un quasicristal hay otros ( $N-d$ ) grados de libertad que corresponden a translaciones de fase a lo largo del espacio  $E^\perp$ , dadas por:  $\Delta\phi_n = \langle \mathbf{q}_{\perp n}, \mathbf{w} \rangle$  siendo  $w$  las componentes perpendiculares del vector  $\mathbf{u}$ . Entonces, el corrimiento total de fase es:

$$\Delta\phi_n = \langle \mathbf{q}_{\parallel n}, \mathbf{u} \rangle + \langle \mathbf{q}_{\perp n}, \mathbf{w} \rangle.$$

El primer término de la ecuación anterior induce una translación completa del quasicristal mientras que el segundo lleva al quasicristal a un isomorfismo local equivalente [47]. Estas translaciones muestran que el hamiltoniano del sistema presenta una simetría continua. Sin embargo, el estado base no comparte la misma simetría ya que el sistema debe escoger uno sólo de los posibles estados base. Este hecho se conoce como *rompimiento de simetría*. Según el *teorema de Goldstone* [52], cuando el estado base de un hamiltoniano rompe una simetría continua, aparecen modos de excitación arbitrariamente cercanos al estado base cuya longitud de onda es muy grande. La longitud de estos modos ( $\lambda$ ), llamados de *Goldstone o modos hidrodinámicos*, debe tender a infinito si la energía del sistema tiende a cero, i.e.,  $E(\lambda) \rightarrow 0$ , si  $\lambda \rightarrow \infty$ . Por ejemplo, en un cristal, los modos de Goldstone asociados al rompimiento de la simetría en la variable  $\mathbf{u}$  son los fonones, los cuales siguen la relación de dispersión:  $\omega = v_s k$ . Los modos asociados al rompimiento de simetría en la variable  $\mathbf{w}$  del quasicristal, son los llamados *fasones*. Mientras que los fonones se propagan como ondas, los fasones lo hacen en una forma difusiva [47], con tiempos de relajamiento muy grandes. Por esta razón, los fasones son vistos como defectos de un quasicristal perfecto.

El resultado de introducir un fasón infinitesimal en la red de Penrose, consiste en cambiar la decoración de las celdas hexagonales que aparecen en la red, tal como se muestra en la figura 2.5. En tres dimensiones, el equivalente del hexágono es el dodecaedro rómbico [52].



( Figura 2.5: Efecto de introducir un fasón infinitesimal en una red de Penrose.)

## Capítulo 3

### Cadenas unidimensionales

La cadena de Fibonacci es el sistema cuasiperiódico más conocido. Por esta razón, resulta la más conveniente para examinar los efectos de la quasiperiodicidad en las propiedades electrónicas.

El hamiltoniano más simple para dichos fines es el de amarre fuerte para un sólo electrón en una banda s:

$$H = \sum_i^N \left\{ \epsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_j t_{ij} |i\rangle\langle j| \right\} \quad (3.1)$$

siendo  $|i\rangle$  un estado de Wannier del sitio  $i$ . Esta elección se justifica por retener los aspectos físicos más importantes [36] y se elige la banda s para poder aislar más fácilmente los efectos de la quasiperiodicidad. De aquí en adelante se supondrá que sólo hay interacción entre primeros vecinos, es decir en una dimensión,  $t_{ij}$  es diferente de cero sólo para  $j = i + 1$ .

Además, el hamiltoniano de amarre fuerte es equivalente a un hamiltoniano de fonones escalares donde  $-t_{ij}$  se identifica con la constante elástica del potencial armónico entre los sitios  $i$  y  $j$  ( $k_{ij}$ ).  $\epsilon_i$  corresponde a  $m_i \omega^2 + \sum_j k_{ij}$  si  $m_i$  es la masa del sitio  $i$ .

Aún más, en una dimensión el hamiltoniano de Heisenberg anisotrópico, que describe sistemas magnéticos está dado por:

$$H = J \sum_i^N \{S_x(i)S_y(i+1) + \gamma S_z(i)S_z(i+1)\} \quad (3.2)$$

$(S(i))$  es la matriz de espín en el sitio  $i$  y  $\gamma$  es una constante que determina el grado de anisotropía) puede llevarse a un hamiltoniano del tipo (3.1) mediante la transformación de Jordan-Wigner [53]:

$$|i\rangle = U(i)S(i), \quad (3.3)$$

$$|i\rangle = S^{\dagger}(i)U^{\dagger}(i) \quad (3.4)$$

$U(n)$  es el operador definido del siguiente modo:

$$U(n) = e^{i\pi \sum_{j=1}^{n-1} c^{\dagger}(j)c(j)}$$

A este operador se le llama *de caddado* porque su efecto es rotar  $180^\circ$  todos los espines situados a la izquierda del sitio  $n$ . El operador  $U(n)$  se introduce para pasar de las relaciones de conmutación de los espines, a las reglas de conmutación propias de los fermiones. La transformación inducida por  $U(n)$  es unitaria y por lo tanto es canónica.

Sustituyendo (3.3) y (3.4) en (3.2) se obtiene un hamiltoniano de amarre fuerte:

$$H = J \sum_{i=1}^N \{ |i\rangle \langle i| + \gamma |i\rangle \langle i+1| \}$$

La aparente facilidad de este mapeo se debe a la unidimensionalidad del sistema que permite definir la fase y suponer que sólo existe interacción entre primeros vecinos.

La quasiperiodicidad se introduce en (3.1) si  $\epsilon_i$  o  $t_{i,i+1}$  están dados por una sucesión cuasiperiódica. Si  $\epsilon_i$  es una sucesión quasiperiódica se habla del problema diagonal (PD); si  $t_{i,i+1}$  lo es, entonces el problema se llama fuera de diagonal (PFD).

El problema diagonal de Fibonacci consiste en sustituir  $\epsilon_i$  por dos valores:  $\epsilon_A$  y  $\epsilon_B$  cuya alternancia está dada por la sucesión de Fibonacci. Análogamente, en

el problema fuera de la diagonal se intercalan dos valores de  $t$ :  $t_L$  y  $t_S$ , alternados según la sucesión de Fibonacci.

Antes de entrar a resolver estos problemas, conviene resaltar algunas propiedades de las cadenas periódicas y aleatorias (i.e., cadenas donde  $\epsilon_i$  o  $t_{i,i+1}$  tienen una distribución periódica o aleatoria).

El caso periódico se resuelve inmediatamente. Para ello basta pasar al espacio recíproco haciendo en el hamiltoniano original la siguiente sustitución:

$$|i\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikr_i} |k\rangle$$

obteniéndose que:

$$H = \sum_k t(k) |k\rangle \langle k| + \epsilon.$$

Si  $a$  es la separación entre dos sitios de la cadena, el valor de  $t(k)$  es:

$$t(k) = 2t \cos(ka)$$

y  $\epsilon$  es la autoenergía constante que fija al cero.

Esta es la conocida relación de dispersión para fonones, cuyos modos de Goldstone se obtienen para  $ka \ll 1$ ; en cuyo caso  $t(k) = (ka)^2$ . Los eigenestados de este sistema son extendidos por tratarse de combinaciones lineales de ondas planas, tal y como indica el teorema de Bloch para sistemas periódicos. De la forma de  $t(k) = m\omega^2$  se deduce que la densidad de estados ( $\rho(k)$ ) es continua.

Si  $\epsilon_A$  y  $\epsilon_B$  siguen una distribución aleatoria, se tiene el caso más elemental de una aleación binaria aleatoria (ABA). En estos sistemas se acostumbra llamar sitios de impureza a aquellos sitios cuyo número es menor dentro del sistema y se denota con  $c_A$  y  $c_B$  la concentración de sitios del tipo A y B respectivamente.

El resultado más sorprendente de la ABA es que todos sus eigenestados son localizados [54], [55]. Esto se debe a la unidimensionalidad del sistema, ya que el propagador entre dos sitios necesariamente es dispersado por las impurezas. Aquí

conviene señalar que las cadenas unidimensionales, por más desorden que tengan en sus parámetros, siempre son topológicamente ordenadas (es decir, la conectividad entre los sitios de la red es idéntica alrededor de cualquier sitio). Este es un punto importante según se verá al estudiar sistemas quasiperiódicos en dos dimensiones.

En los sistemas con este tipo de desorden, se define el *parámetro de desorden*,  $\delta$ , como:

$$\delta = \frac{(\epsilon_A - \epsilon_B)}{B}$$

siendo B el ancho de banda en la densidad de estados (como la coordinación  $Z=2$  es constante, el teorema de Frobenius permite deducir que:  $B=2Zt=4t$ ).

Si  $\delta > 2$  es sencillo ver que se abre una brecha de energía de tamaño  $\Delta = (\epsilon_A + \epsilon_B)/2$  [54].

Para los sistemas unidimensionales existe un teorema muy útil, llamado de Saxon-Hunter [54], el cual indica que cualquier región del espectro con una brecha de energía para una cadena pura de tipo A o B, también será una brecha para la cadena mezclada de A con B. Podría parecer que este teorema sólo dice que no existen estados más allá de la energía dada por la cadena periódica con la autoenergía más baja. Sin embargo, según Matsuda [56], si  $c_A \gg c_B$  aparecerán una infinidad de brechas muy delgadas a ciertas energías, como consecuencia del mencionado teorema.

En efecto, si la concentración de sitios B ( $c_B$ ) es baja, entonces la probabilidad de encontrar cadenas largas de puros sitios B es baja ( $\sim (c_B)^N$ ). Entonces se pueden excluir cadenas puras de sitios B de un tamaño mayor a cierto tamaño característico ( $p-1$ ). La cadena aleatoria es la unión de estas cadenas regulares de tamaño  $s=0,1,\dots,p-1$ , que siempre terminan en un sitio A, con cadenas regulares del tipo puro A. Las cadenas regulares de tamaño  $s$  tienen brechas energéticas (denotadas por  $E(s)$ ), ya que contienen un sitio A. Usando el teorema de Saxon-Hunter se concluye que la aleación binaria también contiene estas brechas.

Dichas brechas son de tamaño infinitesimal [56], sin embargo, existe la posibilidad de que alrededor de  $E(s)$  se forme una banda de *modos de impureza acoplados*

[57]. Estos modos corresponden a excitaciones en las islas de impurezas de tamaño  $p$  en la matriz de sitios  $\epsilon_A$ . El número aproximado de modos de la isla es  $p$ , pero dado que la probabilidad de encontrar una isla decae como  $c_B^N$ , sólo pueden observarse muy pocos de estos modos [54]. Este decaimiento de la probabilidad se traduce en un decrecimiento exponencial en los bordes de banda, fenómeno conocido como *colas de Lifshitz*. En el apéndice A de la presente tesis se demuestra que el decrecimiento exponencial de la densidad de estados es una consecuencia general de la localización de estados (en el caso de la aleación binaria estos estados corresponden a los modos de impureza). Debe decirse que este comportamiento no puede predecirse por teorías de campo medio o potencial coherente.

De todo lo dicho anteriormente se deduce que existen diferencias fundamentales entre el caso periódico y aleatorio, aunque en 1D ambos son topológicamente ordenados.

Para estudiar el caso quasiperiódico con el hamiltoniano del tipo (3.1) existen varios métodos. El más directo es diagonalizar el hamiltoniano de una cadena de tamaño dado. Sin embargo este método es ineficiente porque se necesitan estudiar cadenas muy grandes para minimizar los efectos de superficie o porque se requiere de periodicidad artificial.

Otra manera más ingeniosa es aprovechar las relaciones de recurrencia y autosimilaridad existentes en los sistemas quasiperiódicos. Para ello hay dos caminos: uno consiste en utilizar la llamada *matriz de transferencia* [58] y el otro en utilizar la *función de Green* [40], ambos son equivalentes en este caso.

Si  $\Psi_i$  es la función de onda en el sitio  $i$ , entonces se define la matriz de transferencia como:

$$\begin{pmatrix} \Psi_{i+1} \\ \Psi_i \end{pmatrix} = M(i) \begin{pmatrix} \Psi_i \\ \Psi_{i-1} \end{pmatrix}.$$

La matriz de dimensión dos  $M(i)$  se obtiene despejando en el hamiltoniano a  $\Psi_i$  en términos de  $\Psi_{i+1}$  y  $\Psi_{i-1}$ . Mediante la aplicación sucesiva de la matriz se obtiene

la función de onda en un sitio cualquiera dada una perturbación en el principio de la cadena:

$$\begin{pmatrix} \Psi_{i+1} \\ \Psi_i \end{pmatrix} = M(i)M(i-1)M(i-2)\dots M(1) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_0 \end{pmatrix}$$

En una cadena de Fibonacci de generación  $n$ , la matriz de transferencia puede considerarse como el producto de las matrices de transferencia de generaciones sucesivas, aprovechando las reglas de recurrencia de la cadena:

$$M_n \equiv M(F_n) = M(F_{n-1})M(F_{n-2})\dots M(2)M(1)$$

Así, la matriz de transferencia satisface la siguiente relación de recurrencia [58]:

$$M_n = M_{n-1}M_{n-2}$$

Esta es la ecuación básica del método. Puede pensarse que define un mapeo dinámico no-lineal de orden dos [58]. El mapeo transforma a las matrices  $(M(n-1), M(n-2))$  en  $(M(n+1), M(n))$ . El espectro de energías se calcula obteniendo aquellos eigenvalores de  $M(n)$  que son imaginarios (atractores); si el eigenvalor es real la función de onda diverge exponencialmente. Esta condición se reduce a:

$$x_n \equiv \text{tr}(M(n))/2 \leq 1$$

donde  $x_n$  satisface [58]:

$$x_n = 2x_n x_{n-1} - x_{n-2}$$

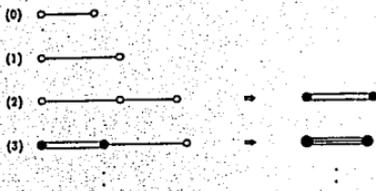
El otro método consiste en calcular la función de Green, definida por:

$$(Z - \epsilon_i)G_{ij} = \delta_{ij} + \sum_k t_{ik}G_{kj}$$

siendo  $Z$  un número complejo [59]:  $Z = E + i\eta$ ,  $\eta \rightarrow 0$ , donde  $\eta$  tiende a cero desde el eje imaginario positivo para la función de Green retardada.

La densidad local de estados se calcula a partir de la función de Green:

$$\rho_i = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0} \text{Im} \sum_i G_{ii}(Z)$$



( Figura 3.1: Procedimiento de renormalización para calcular las funciones de Green.)

Siguiendo a Barrio y Wang [40], la solución se encuentra a partir de un procedimiento de renormalización, que consiste en eliminar las coordenadas de los sitios centrales de la función de Green en cada etapa de construcción de la cadena. Esto permite considerar sólo sitios situados en los extremos de la cadena para construir la siguiente generación. El procedimiento se muestra esquemáticamente en la figura 3.1.

Por ejemplo, en la segunda generación se tienen tres sitios con autoenergía:  $\epsilon_L^{(1)}, \epsilon_C^{(2)} = \epsilon_R^{(1)} + \epsilon_L^{(0)}$  y  $\epsilon_R^{(0)}$  ( $L, R$  y  $C$  denotan los sitios a la izquierda, derecha y central; los superíndices denotan el número de la iteración). Las coordenadas del sitio central pueden eliminarse de la función de Green, de modo que se obtiene una cadena con un enlace efectivo que une a dos sitios cuyas energías están renormalizadas.

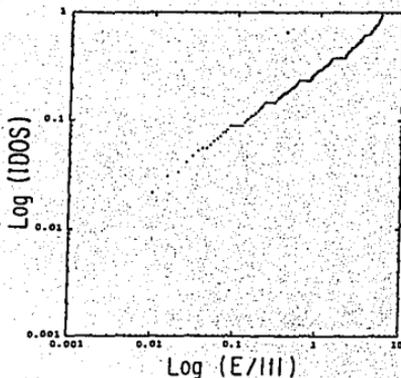
En cada paso se procede a eliminar las coordenadas del sitio central, de modo que siempre se unen cadenas con dos sitios. Las expresiones para las autoenergías y los enlaces renormalizados aparecen en el apéndice B, y corresponden a las ecuaciones número (4) y (5) para el PD y (11), (12) para el PFD. La densidad local de estados se obtiene calculando la función de Green para el sitio central ( $G_{CC}$ ) antes de realizar la renormalización de éste en el último paso. La expresión para  $G_{CC}$  viene dada por

B-(10) para el PD, y B-(12) para el PFD. Los resultados aparecen en la figura 3 a) y 6 del apéndice B.

La característica más importante del espectro es su fractalidad. Se ha podido demostrar que el espectro de la cadena de Fibonacci es un *conjunto de Cantor*, cuya medida de Lebesgue es cero [60]. A este tipo de espectro se le llama *singularmente continuo*. Este comportamiento es una consecuencia directa de las propiedades del patrón de difracción de una cadena quasiperiódica unidimensional. En efecto, en una dimensión, cada punto del patrón de difracción abre una brecha de energía de tamaño  $2V_k$  donde  $V_k$  es la  $k$ -ésima componente en el espacio de Fourier del potencial dispersor. Esto se debe a que las superficies isoenergéticas son unidimensionales por lo cual, la integral de superficie que sirve para calcular la densidad de estados se anula si se intersecta un punto de difracción (ya que la velocidad de grupo es cero en dichos puntos). El patrón de difracción de una cadena unidimensional quasiperiódica llena densamente el espacio de Fourier, por lo cual se concluye que la densidad de estados tendrá una infinidad de brechas, además de ser fractal. Una manera interesante de visualizar la fractalidad consiste en graficar logarítmicamente la integral de la densidad de estados. La ventaja de utilizar la densidad integrada radica en que cada discontinuidad de la densidad de estados aparece como un escalón lo cual simplifica la interpretación gráfica. El resultado de hacer esto aparece en la figura 3.2; se observa que la gráfica es similar en todas las escalas de energía. A pesar de lo complicado del espectro, se deduce (de la figura) que la densidad integrada sigue la ley  $I(E) \sim E^{1/2}$ , tal y como se esperaría de un sistema unidimensional [59].

Los eigen-estados del sistema en estudio no son extendidos pero tampoco localizados, constituyen por sí mismos un nuevo tipo de estados llamados *críticos* [58]. Estos últimos son autosimilares y al igual que los estados extendidos no son normalizables. Una función de onda es autosimilar si para dos regiones de tamaño  $L$  que sean localmente similares y con una separación  $R$  se cumple:

$$\Psi_L(r) = C(E)\Psi_L(r + R)$$



(Figura 3.2: Densidad integrada de estados para la cadena de Fibonacci en escala log-log.

donde  $r$  pertenece a la zona  $L$ .  $C(E)$  es la constante que reescala la función de onda. Para ciertos eigen-estados se ha podido determinar sus propiedades de escalamiento [58], sin embargo, existen otros estados para los cuales esto no se ha podido hacer. Estos corresponden a trayectorias caóticas del mapeo dinámico [58].

Un parámetro útil que permite investigar las propiedades de localización es el llamado *exponente de Lyapunov* ( $\gamma$ ) [40]. Supóngase que se tiene una eigenfunción que decae exponencialmente con un coeficiente  $\lambda$ :

$$\Psi_N = e^{-\frac{\gamma N}{\lambda}} \Psi_0$$

Por otro lado:  $\Psi_N = \prod_1^{j=N} \|M(j)\| \Psi_0$ , de donde:

$$\gamma \equiv \frac{1}{\lambda} = \lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{1}{N} \log \left( \prod_1^{j=N} \|M(j)\| \right). \quad (3.5)$$

El exponente de Lyapunov es el inverso de la longitud de localización. Para estados extendidos, dicho coeficiente variará como una función del tamaño de la red, mientras que para estados localizados su valor converge. Mediante el método de renormalización su cálculo es directo, ya que después de renormalizar en el paso  $N$

queda la siguiente ecuación:

$$(E - E_R^{(N)})\Psi_R = t^{(N)}\Psi_L.$$

con lo cual  $\lambda$  o  $\gamma$  valen:

$$\gamma = \frac{1}{\lambda} = -\frac{1}{N} \log \frac{t^{(N)}}{(E - E_R)}.$$

En la figura 3.3,a) y 3.4,a) se muestra el comportamiento de  $\lambda$  para la cadena perfecta. Puede observarse claramente la autosimilaridad en la distribución de  $\lambda$ .

Las ideas expuestas anteriormente pueden extenderse para estudiar cadenas quasiperiodicas aleatorias (CAP). Según lo expuesto en el capítulo 2, la CAP se construye intercambiando el orden de pegado entre las generaciones  $n-2$  y  $n-1$ . En cada paso se puede pegar correctamente la secuencia con una probabilidad  $p$  o incorrectamente con probabilidad  $1-p$ .

En este caso es necesario tomar en cuenta que la función de Green de un sistema desordenado se calcula sobre el promedio de todas las configuraciones posibles del sistema. Entonces, la densidad local de estados (LDOS) se escribe como:

$$\rho_i = -\frac{1}{\pi} \text{tr} \langle G_{ii} \rangle$$

donde los paréntesis angulados denotan el promedio sobre configuraciones.

En el paso (2) de la figura 3.1 van a existir dos posibles cadenas, cada una con diferentes probabilidades. Ambas cadenas deben renormalizarse de modo que al construir la generación (3) sólo quede un sitio central. Además, las cadenas deben promediarse de modo que se obtenga una sola cadena por cada generación. En este punto surge la pregunta de si primero se debe renormalizar las cadenas y después promediar o si se debe proceder exactamente al revés ( ver la figura 2 del apéndice B para ver una representación gráfica del problema). A la primera posibilidad se le llamará desorden de tipo I mientras que a la otra desorden tipo II. En el desorden de tipo II existe una probabilidad finita de tener grandes regiones periódicas lo cual

haría que la cadena perdiera sus propiedades frente a una transformada de Fourier. Por tal razón, el desorden tipo I es el apropiado para implementar el método de renormalización.

De este modo, en cada paso se construyen dos cadenas uniendo las de generación  $n-1$  con la de  $n-2$ , se procede a renormalizar y después se promedian ambas posibilidades de acuerdo a su peso estadístico. Las fórmulas que se obtienen para los enlaces y las autoenergías corresponden a las ecuaciones (6) y (11) del apéndice B. Mediante su utilización, se calcula la LDOS que aparece graficada para el PD en la figura 3 y 4 del apéndice B; en la figura 6 del mismo se graficó la estructura de bandas para el PFD. Los parámetros utilizados en dichos cálculos fueron:  $\epsilon = 0$ ,  $t_l = -1$ ,  $t_s = -1.5$  para el PD y  $\epsilon_A = 1$ ,  $\epsilon_B = -1$ ,  $t = -1$  para el PFD. En ambos se observó el mismo efecto; el espectro se suaviza, es decir, desaparece la estructura de polvo de Cantor para convertirse en bandas de energía continua. Este efecto se observa aún para valores de  $p$  cercanos a 1 ( $p=1$  corresponde al caso de Fibonacci). En el caso de PD aparece una brecha en la energía en el centro del espectro. Otro punto interesante es que en los extremos del espectro de las cadenas con desorden aparece una singularidad de raíz cuadrada característica de los sistemas unidimensionales[59]. Nótese que los extremos de la banda son los menos afectados por el desorden, a diferencia de otras regiones, en las cuales la densidad de estados cambia notablemente al agregar desorden (por ejemplo, la región alrededor de  $E=1.0$ ). En el caso de máximo desorden se pueden ver claramente seis bandas separadas por brechas de energía; en los extremos de cada banda aparecen singularidades.

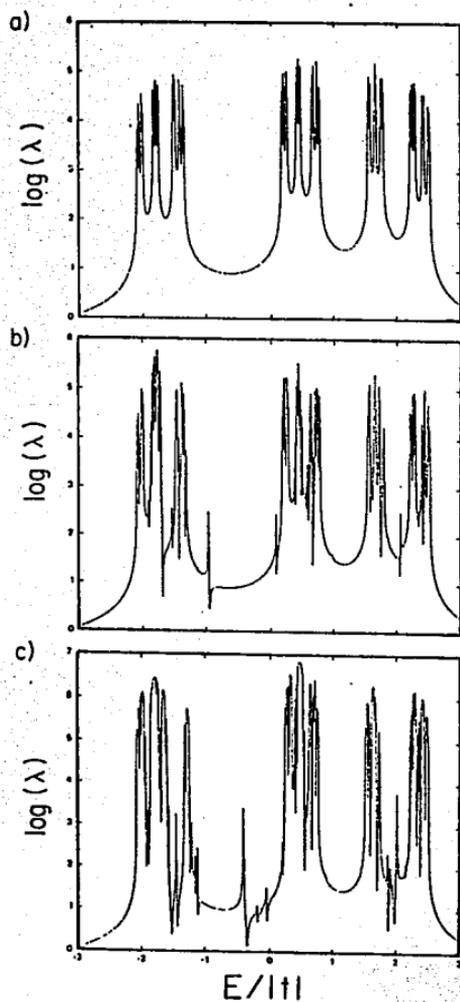
Muchas de estas características de los espectros de las cadenas con desorden son muy similares a los obtenidos para aproximantes racionales de la cadena de Fibonacci [61].

La suavización puede deberse a que la probabilidad de tener una región quasicristalina decae en la generación  $n$  como:  $p^n$ ; lo cual indica una probabilidad baja de encontrar cadenas quasiperiódicas largas. El espectro de estas islas quasiperiódicas

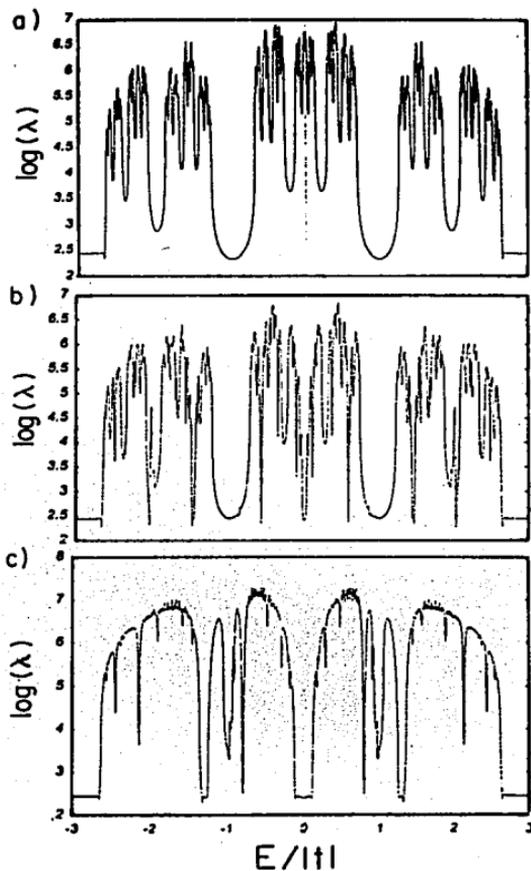
es autosimilar pero sólo en un rango de escalas determinado por su tamaño; en general las brechas más pequeñas corresponden a cadenas de longitud muy larga [58]. De esta manera, desaparecerían las brechas infinitesimales que se observan en la cadena quasiperiódica perfecta. Sin embargo, este punto merece un análisis más detallado, ya que el efecto de suavización del espectro aún con un grado pequeño de desorden puede tener relevancia en los sistemas quasicristalinos reales. Debe recordarse que aún no se ha podido detectar la estructura fractal de la densidad de estados en experimentos con quasicristales reales.

La longitud de localización aparece graficada en las figuras 3.3 y 3.4 para el PD y PFD respectivamente. Para cada problema se han incluido tres probabilidades diferentes:  $p=1$ , 0.95 y 0.5.

En las regiones donde existe una brecha de energía,  $\lambda$  es muy pequeña, mientras que para los eigenestados se observa que coexisten longitudes que difieren hasta en dos ordenes de magnitud. En general las longitudes decaen en los bordes de banda, de acuerdo a lo esperado para sistemas desordenados [54]. Sin embargo, en el caso de máximo desorden ( $p=0.5$ ) se encuentra que existen algunos estados más extendidos que en el caso quasiperiódico. Esto significa que la conductividad de dichos estados aumenta al agregar desorden, lo cual podría tener relevancia para explicar algunos resultados experimentales [33]. Al parecer este efecto es más notable si se utiliza una ecuación continua de Schroedinger en lugar de un hamiltoniano de enlace fuerte [62].



( Figura 3.3: Logaritmo de  $\lambda$  para el PD con:  $p=1.0$  a),  $p=0.95$  b) y  $p=0.5$  c).



( Figura 3.4: Logaritmo de  $\lambda$  para el PFD con:  $p=1.0$  a),  $p=0.95$  b) y  $p=0.5$  c).

## Capítulo 4

# Propiedades de sistemas quasiperiódicos bidimensionales.

### 4.1 Generalidades.

El sistema quasiperiódico bidimensional más típico es la red de Penrose (ver el capítulo 1). Por esta razón se le ha escogido para estudiar sus propiedades electrónicas.

El hamiltoniano a utilizar será el de amarre fuerte para un sólo electrón en la banda  $s$  (ec 3.1). Una vez más, este hamiltoniano es análogo al de fonones escalares. A diferencia del caso unidimensional, la resolución del hamiltoniano de amarre fuerte no conduce de un modo fácil a la solución completa del problema de espines. Esto se debe a que al mapear el hamiltoniano de espines a uno de fermiones, el hamiltoniano resultante es más complicado que el de amarre fuerte, ya que aparecen interacciones de dos cuerpos así como un campo de norma.

Una vez elegido el hamiltoniano, existen dos maneras simples de definir los sitios en la red de Penrose. La primera consiste en colocar las funciones  $|i\rangle$  en los centros de los rombos; a este problema se le conoce como *central (PC)*. La otra manera es colocar a las funciones en las esquinas de los rombos, en tal caso se habla

del problema de *vértices* (PV).

De manera similar al caso unidimensional, se pueden encontrar los eigenvalores del hamiltoniano mediante diagonalización directa o generalizando el método de renormalización expuesto en el capítulo 3.

El método de renormalización para 2D es una generalización directa del método desarrollado para la cadena de Fibonacci. Este consiste en ir pegando dos unidades básicas llamadas *triángulos de Robinson* (figura 1 del apéndice C). Al pegar dos triángulos de generaciones sucesivas se obtiene otro triángulo de forma similar pero  $\tau$  veces más grande que la penúltima generación. Este proceso de adición puede representarse mediante la siguiente fórmula:

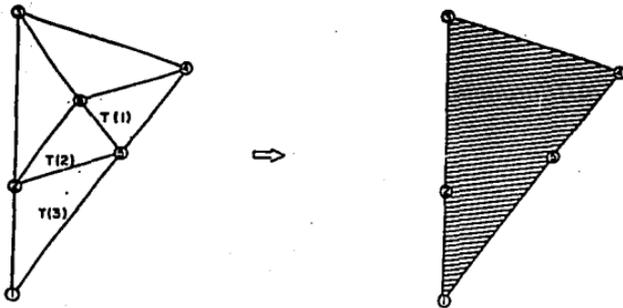
$$T(n) = T(n-1) \oplus T^*(n-2)$$

donde el asterisco se utiliza para denotar que el triángulo de generación  $n-2$  debe reflejarse por un plano espejo antes de pegarse [40].

El proceso de crecimiento de la red tiene un ciclo de cuatro generaciones, al cabo del cual se repite la misma secuencia de pegado. Nótese que en cada generación existe la posibilidad de pegar incorrectamente los triángulos, lo cual llevaría a obtener un mosaico quasiperiódico aleatorio.

El proceso de renormalización consiste en ir eliminando de las ecuaciones para la función de Green, los sitios centrales de cada generación, de modo que sólo queden sitios en la frontera. En términos de la función de Green  $G=(EI-H)^{-1}$ , esto es equivalente a eliminar los elementos de matriz que contienen índices que se refieren a sitios interiores, sustituyéndolos por ecuaciones que involucren solamente sitios de frontera. El proceso puede ejemplificarse para la primera generación en la que aparece un sitio central (generación cinco, Fig. 4.1).

Obsérvese que aparecen tres tipos diferentes de enlaces, denotados por  $T(1)$ ,  $T(2)$  y  $T(3)$ . El mosaico de Penrose de rombos se obtiene para  $T(1)=T(3)=0$ . Las



(Figura 4.1: Mosaico de generación cinco. El sitio seis es el único sitio central. A la derecha aparece la red renormalizada.)

ecuaciones de movimiento del sistema son:

$$\begin{aligned}
 [E - E(1)]G(1,1) &= 1 + T(2)G(2,1) + T(3)G(5,1) \\
 [E - E(2)]G(2,1) &= T(2)G(1,1) + T(3)G(3,1) + T(2)G(5,1) + \\
 &\quad + T(2)G(6,1) \\
 [E - E(3)]G(3,1) &= T(3)G(2,1) + T(3)G(4,1) + T(2)G(6,1) \\
 [E - E(4)]G(4,1) &= T(3)G(3,1) + T(2)G(5,1) + T(2)G(6,1) \\
 [E - E(5)]G(5,1) &= T(3)G(1,1) + T(2)G(2,1) + T(2)G(4,1) + \\
 &\quad + T(1)G(6,1) \\
 [E - E(6)]G(6,1) &= T(2)G(2,1) + T(2)G(3,1) + T(2)G(4,1) + \\
 &\quad + T(1)G(5,1)
 \end{aligned}$$

Después de renormalizar el sitio 6 sólo quedan cinco ecuaciones

$$\begin{aligned}
 [E - E(1)]G(1,1) &= 1 + T(2)G(2,1) + T(3)G(5,1) \\
 [E - E(2) - W22]G(2,1) &= T(2)G(1,1) + [T(3) + W22]G(3,1) +
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + W22G(4, 1) + [T(2) + W12]G(5, 1) \\
 [E - E(3) - W22]G(3, 1) & = [T(3) + W22]G(2, 1) + [T(3) + W22]G(4, 1) + \\
 & + W12G(5, 1) \\
 [E - E(4) - W22]G(4, 1) & = W22G(2, 1) + [T(3) + W22]G(3, 1) + \\
 & + [T(2) + W12]G(5, 1) \\
 [E - E(5) - W11]G(5, 1) & = T(3)G(1, 1) + [T(2) + W12]G(2, 1) + \\
 & + W12G(3, 1) + [T(2) + W12]G(4, 1)
 \end{aligned}$$

donde la interacción efectiva contiene toda la información del sitio renormalizado:

$$W_{ij} = \frac{T(i)T(j)}{E - E(6)}, \quad i, j = 1, 2.$$

El procedimiento de construcción del mosaico se va combinando con la renormalización en cada paso. Así los sitios interiores de cada generación corresponden a los sitios de una de las fronteras de la generación anterior. Eliminando dichos sitios centrales, se obtiene nuevamente un triángulo con sitios en la frontera el cual se pegará con la generación anterior y así sucesivamente. La figura 3 del apéndice C ejemplifica el procedimiento para obtener la generación nueve; esta se obtiene pegando los triángulos renormalizados de generación siete y ocho. La generación nueve renormalizada se obtiene al eliminar los sitios centrales que resultaron de pegar las generaciones siete y ocho.

La ventaja del método radica en que el número de sitios renormalizados crece como la raíz cuadrada del número total de sitios, el cual crece exponencialmente. Por esta razón, se pueden realizar cálculos de redes muy grandes (14 550 sitios).

Para realizar la presente tesis, también se utilizó el método de diagonalización directa. La razón de esto fué la necesidad de estudiar el efecto de la frontera sobre las propiedades de la red. Para generar estas redes se utilizó un método diferente, que consiste en construir el Penrose mediante seis pedazos básicos, los cuales se van uniendo de manera fractal [63]. Los resultados que se obtuvieron mediante

este método son completamente análogos a los obtenidos por el método de renormalización, por lo cual no se abundará más sobre el tema.

## 4.2 Propiedades del espectro

En la figura 4 del apéndice C se muestra la densidad local de estados de dos sitios (de coordinación tres y cuatro) del Penrose de generación 23. Aunque el espectro muestra una estructura complicada de bandas y brechas energéticas, existen cuatro características básicas. En primer lugar el espectro es simétrico respecto a la energía  $E=0$ . Esto es una consecuencia de que la red es bipartita, es decir, puede subdividirse en dos subredes alternadas, A y B, de modo tal que un electrón sólo puede saltar de un sitio A a uno B. Si la ecuación de Schroedinger es:  $E |j\rangle = -\sum_i |i\rangle$ , donde  $j$  pertenece a A e  $i$  a B, entonces, si  $E_n$  es un eigenvalor,  $-E_n$  también lo será ya que basta cambiar el signo de la función de onda en una de las subredes para que siga cumpliendo la ecuación. Las otras tres características son:

1. El máximo eigenvalor es mayor que  $2\langle Z \rangle$  donde la coordinación promedio en la red de Penrose es:  $\langle Z \rangle = 4$ . Según los cálculos numéricos  $E=4.23$ .
2. La energía  $E=0$  es altamente degenerada, contiene aproximadamente un 10% de los estados.
3. Existe una brecha de energía que separa los estados a  $E=0$  del resto de la banda.

Para el ancho de banda es posible realizar un cálculo tipo campo medio, el cual predice el ancho de banda acertadamente [41]. En dicho campo medio, se utiliza el hecho de que cada tipo de vértice del Penrose está rodeado de ciertas configuraciones de vértices, cada una con una probabilidad dada. Si se supone que todos los vértices del mismo tipo tienen la misma amplitud de la función de onda, se puede resolver la ecuación de Schroedinger obteniéndose el valor  $E=4.23$ . La suposición de que

cada vértice del mismo tipo tiene la misma amplitud es válida para longitudes de onda muy larga, las cuales corresponden justamente al extremo de la banda. Así el ensanchamiento de la banda se debe a las diferentes configuraciones alrededor de cada vértice. Posteriormente se demostrará que el ancho de banda puede aproximarse mediante el segundo momento estadístico de la coordinación:

$$E = \sqrt{\sum_{\mu} P(\mu) Z_{\mu}^2} = 4.18$$

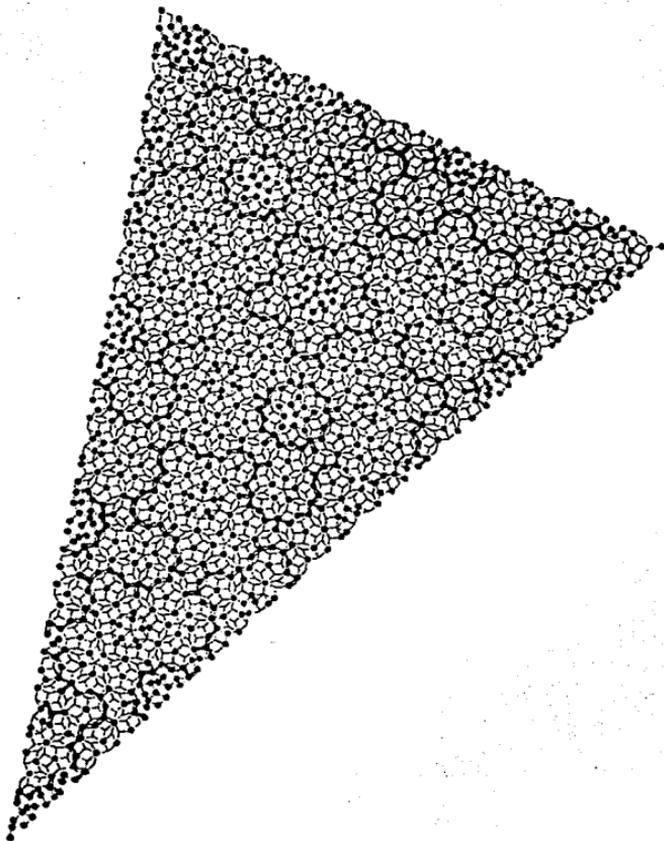
donde  $\mu$  denota cada tipo de vértice (K,S, etc.) y  $Z_{\mu}$  su coordinación.

Esta fórmula indica que el ensanchamiento de la banda se debe a las fluctuaciones de la coordinación.

Respecto a los estados en  $E=0$  se ha encontrado que estos están estrictamente localizados [42],[65]. La amplitud de la función de onda de estos estados es cero en una de las subredes. Estos sitios de amplitud cero forman cadenas que encierran en su interior a los estados (ver la figura 4.2). Por esta razón, se les ha llamado *estados confinados*. La quasiperiodicidad no es una condición necesaria para la existencia de dichos estados; se ha encontrado que estos existen en sistemas desordenados como aleaciones binarias [64] en el límite cuando la diferencia entre las autoenergías de las impurezas y los sitios de red es muy grande.

Nótese de la figura que los sitios de coordinación cuatro, seis y siete siempre están en las cadenas por lo cual su amplitud es cero. Los sitios de coordinación tres generalmente tienen amplitud aunque existen excepciones. Los sitios de coordinación cinco generalmente no tienen amplitud.

Utilizando el procedimiento de deflación, puede encontrarse [65] que cada cadena no es más que la inflación de otra cadena de tamaño menor. Así una cadena de radio  $R$  en una generación  $n$ , se convierte en una cadena de radio  $\tau R$  al aplicarse el procedimiento de inflación para obtener una red de generación  $n+1$ . El radio mínimo de una cadena es  $\tau$ . Utilizando este hecho, es relativamente fácil calcular el número de estados confinados [65]. Dado que el número de cadenas es igual al número de



*( Figura 4.2: Estados confinados del MP. Los sitios con los círculos negros indican que su amplitud es cero. Los sitios en negro forman cadenas que encierran a los estados. En el límite de un mosaico infinito todas las cadenas son cerradas.)*

estados (esto se debe a que al estar confinado cada estado, la amplitud fuera de la cadena puede hacerse cero; este argumento es válido para cualquier cadena), basta contar el número de cadenas que existen. Pero en el Penrose, la frecuencia de una configuración es inversamente proporcional a su área:

$$f = \frac{1}{2\pi R^2}$$

Por otra parte,  $R(n) = \tau^{n+1}$  debido a las propiedades de inflación de la cadena. Entonces, el número total de estados a  $E=0$  ( $N_0$ ) consiste en sumar todas las frecuencias de las cadenas:

$$\frac{N_0}{N} = \frac{1}{2\pi\tau^2} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{\tau}\right)^{2n} = \frac{1}{2\pi\tau^2} \left(\frac{\tau+1}{\tau}\right) = \frac{1}{2\pi\tau}$$

De donde resulta:

$$\frac{N_0}{N} = .098 = 9.8\%$$

lo cual se aproxima bastante al resultado numérico. Cálculos más refinados [66] muestran que el número correcto es 9.83%.

Finalmente, la existencia de la brecha energética ( $\Delta = 0.107t$ ) en la red infinita aún es motivo de controversia. Para el presente trabajo se verificó numéricamente que su tamaño no varía aún para las redes más grandes ( $\approx 10^4$  sitios). Sólo se pudo encontrar una ligera variación cada cuatro generaciones lo cual se debe a que justamente este es el período de construcción de las redes. En la siguiente sección se estudiará esta brecha con mayor detalle.

Debe decirse que a diferencia de las redes unidimensionales, cada punto de difracción del espacio recíproco no abre necesariamente una brecha en las energías permitidas. La razón de ello es que la dependencia de la energía respecto del momento lineal  $p$  es isotrópica a diferencia del potencial dispersor. De este modo existe una contribución finita a la densidad de estados aunque las superficies isoenergéticas intersecten una infinidad de puntos del patrón de difracción. El resultado de ello es

que el espectro es relativamente suave si se le compara con el de una cadena de Fibonacci, el cual es singularmente continuo porque cada punto de difracción abre una brecha, y dado que el patrón de difracción llena densamente el espacio, el espectro contiene una infinidad de brechas.

Para el problema diagonal del Penrose en una red de  $N$  sitios se ha encontrado numéricamente que el espaciamiento entre estados viene dado por [69]:

$$\Delta E = \frac{1}{N\beta}$$

donde  $\beta$  varía entre  $3/8$  y  $5/8$ . En un sistema periódico el espaciamiento corresponde a  $\beta = 1$ .

Si se considera la distribución estadística de estos espacios entre niveles, se llega a una distribución de Wigner [67]. Esta distribución es característica de sistemas en los cuales se presenta caos cuántico. El efecto del caos cuántico en un espectro es la repulsión entre niveles, a diferencia de los sistemas simples, en los cuales los niveles tienden a mezclarse. La explicación de porqué sucede esto en los mosaicos quasiperiódicos todavía es un problema abierto.

Otro punto de crucial importancia para las propiedades de transporte es la forma de las funciones de onda. En los sistemas periódicos, el teorema de Bloch asegura la existencia de estados extendidos (o estados que no decaen) mientras que los sistemas desordenados muestran la existencia de estados localizados [59] a partir de cierta energía crítica. En los cálculos numéricos que se han realizado [68], [69], se ha encontrado la coexistencia de tres tipos de estados en los mosaicos quasiperiódicos: extendidos, localizados y críticos. Los estados críticos tienen propiedades de autosimilaridad, es decir, son fractales. Al igual que los estados extendidos no son normalizables.

La razón de la existencia de estos estados es la competencia entre la falta de periodicidad que tiende a localizar los estados y la autosimilaridad que tiende a extenderlos [69]. Lo último puede entenderse del siguiente modo; supóngase que

existe una función de onda localizada en una región de radio  $R$  donde  $\xi$  es la longitud de localización de la función de onda, dado el teorema de Conway existe una región similar a una distancia  $4R$  en la cual también la misma función de onda puede existir. El traslape entre funciones vale aproximadamente  $I = \exp(-4/\xi)$ . Así el problema puede considerarse como un hamiltoniano de dos niveles. Las eigenfunciones de este sistema consisten en la combinación lineal de las funciones originales, una simétrica y la otra antisimétrica. La combinación simétrica da lugar a una función cuya longitud de localización es mayor que la supuesta. Aplicando el procedimiento a cualquier radio se concluye que no existen funciones localizadas. Este argumento llevó a H. Tsunetsugu et. al. [69] a concluir que no hay estados localizados en el Penrose, y que además no existe una energía crítica que separe los diferentes tipos de estados. En este trabajo se demostrará que un análisis más detallado (así como los resultados numéricos) indica la existencia de una energía crítica que separa a estados con diferentes propiedades de localización.

Para examinar las propiedades de localización electrónica en el MP, se calculó la razón de participación inversa de la función de onda (IPR); definido para el eigenestado  $E_i$  cuya eigenfunción  $\psi_i = \sum_j c_i(j) |j\rangle$ , como:

$$IPR(j) = \sum_i c_i^4(j).$$

El IPR es una medida de la localización de la función de onda y es inversamente proporcional al número de sitios ocupados por la función de onda. En un sistema periódico con estados extendidos, cada amplitud  $c_i(j)$  vale  $1/\sqrt{N}$ . Entonces, el IPR es proporcional a  $1/N$ . Para un estado localizado cuya longitud de localización sea  $\xi$ , el IPR vale  $1/\pi\xi^2$ . Variando el tamaño de la red resulta fácil detectar los estados extendidos y localizados. Los localizados son aquellos cuyo IPR no varía con el tamaño de la red. En la figura 5 del apéndice C aparece el IPR de una red de Penrose de generación 19. En ella se pueden observar varias cosas. La primera es una línea vertical de puntos en  $E=0$ . Esta línea corresponde a los estados confinados de los

cuales ya se había hablado. Los estados con  $E \approx 0.107$  son localizados ya que su IPR no varía con la generación y se les ha señalado con una flecha.

La observación directa de estos estados muestra que son de superficie por presentar amplitud sólo en los bordes de la red.

El IPR muestra un cambio drástico de comportamiento en  $E=0.37$ . Arriba de esta energía, los estados tienen un IPR cercano a  $1/N$ , sobre todo los estados cercanos a  $E=4.23$ . Abajo de  $0.37$ , los estados tienen un IPR mayor que el mínimo IPR de los estados en  $E=0$ . Esto se ha indicado por una línea punteada. Los estados abajo de  $0.37$  están localizados.

La naturaleza de esta transición puede verse en la fig. 4.3. En ella se muestra la función de onda del estado en  $E=0.37$  y el estado siguiente con la energía más baja. Se observa que la distribución de la amplitud es radicalmente diferente.

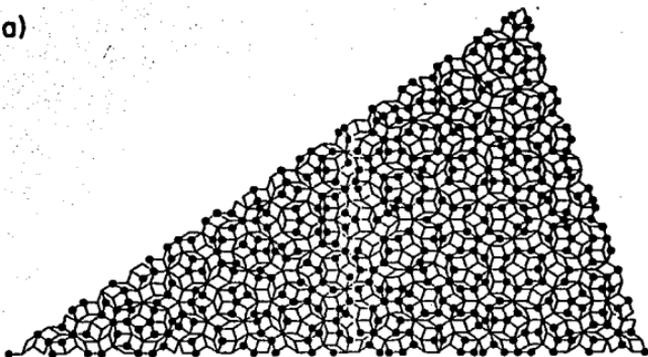
Todavía puede obtenerse más información si se considera la participación en la función de onda de cada tipo de vértice. A esta cantidad se le ha llamado contribución de la amplitud de sitio (SAC) y se le ha definido como:

$$SAC(\nu, j) = \frac{1}{N_\nu} \sum_{i\nu} c_i(j)$$

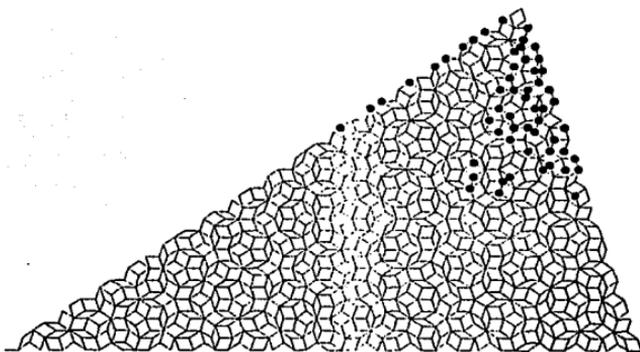
siendo  $\nu$  la coordinación del sitio, excluyendo los de superficie.

Las figura 6 y 7 del apéndice C muestran el SAC para las diferentes coordinaciones. El SAC de los sitios con coordinación 3 muestran que a la energía 0.92 hay un cambio de comportamiento, la función de onda se empieza a localizar en estos sitios. También se observa claramente el súbito incremento del SAC en  $E=0.37$ . Las otras gráficas muestran que la participación de los sitios con mayor coordinación es mayor en los extremos de la banda. Esto está de acuerdo con la imagen de repulsión de niveles en sistemas quasiperiódicos.

a)



b)



( Figura 4.3: a) Función de onda en  $E=0.37$  b) en  $E=0.365$ .)

### 4.3 Frustración en la red H2.

Dado que la red es simétrica respecto a  $E=0$  por ser bipartita conviene remover esta simetría para quedarse con la topología fundamental de la red. Esto puede hacerse renormalizando una de las subredes, y definiendo el correspondiente hamiltoniano ( $H^2\Psi = E^2\Psi$ ). Para realizar la renormalización se requiere despejar los índices de los sitios que pertenecen a una subred. Por ejemplo, supóngase que se tiene un sitio  $i$  perteneciente a A, su ecuación de Scroedinger es:

$$E | i \rangle = t \sum_{j \in B}^{Z_i} | j \rangle.$$

Pero los sitios  $j$ , pertenecientes a B y vecinos de  $j$ , satisfacen una ecuación de la forma:

$$| j \rangle = \frac{1}{E} \left\{ t | i \rangle + t \sum_{l \in A} | l \rangle + t \sum_{k \in A} | k \rangle \right\},$$

donde  $l$  son los vecinos de  $j$  que cierran un rombo con el sitio  $i$  y  $k$  son los sitios vecinos de  $j$  que no cierran un rombo con  $i$ . Sustituyendo la ecuación anterior para cada vecino de  $i$  en la ecuación para el sitio  $i$  se llega a:

$$E | i \rangle = \frac{t}{E} \left\{ t Z_i | i \rangle + 2t \sum_{l \in A}^{Z_i} | l \rangle + t \sum_{k \in A}^{M_i} | k \rangle \right\},$$

de donde el hamiltoniano de la red renormalizada ( la cual se denotará por H2) es:

$$H^2 = t^2 \left\{ Z_i | i \rangle + 2 \sum_{l \in A}^{Z_i} | l \rangle + \sum_{k \in A}^{M_i} | k \rangle \right\}.$$

$M_i$  es el número de segundos vecinos del sitio  $i$  que no cierran un rombo con  $i$ , su valor es  $M_i = \sum_j (Z_j - 3)$ .

El aspecto de la nueva red puede verse en la figura 8 del apéndice C. Se observan dos clases de regiones, una con celdas triangulares (región I) centradas en sitios de coordinación tres renormalizados, y la otra región está formada por seis tipos de celdas que presentan interacción a segundos vecinos (debido a los enlaces de tipo

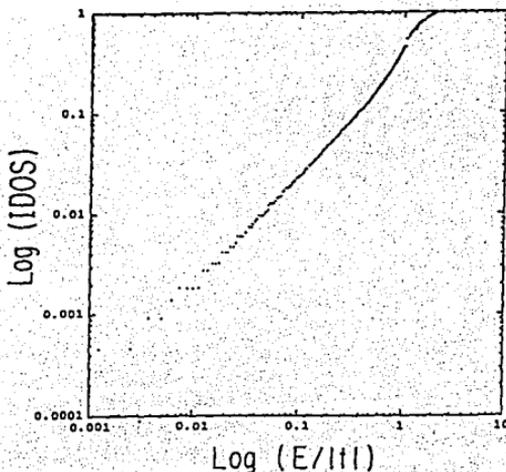
k). Dichas celdas representan el dual de los sitios renormalizados de coordinación diferente de tres. Esta regiones se les llamará de tipo II.

La división en dos clases de regiones se debe a que en el Penrose, todos los sitios de coordinación diferente de tres están conectados en líneas (o cadenas) [70]. Las cadenas separan a la red en partes finitas independientes. Entre estas cadenas sólo existen sitios de coordinación tres. Lo sorprendente es que estas cadenas son las mismas que confinan a los estados en  $E=0$  ya que la amplitud de la función de onda es cero en ellas. Como se había mencionado, los estados confinados presentan amplitud en sitios de coordinación tres lo cual significa que en  $H_2$  sólo existe amplitud en las regiones del tipo II, mientras que las regiones de tipo I representan una barrera en la cual la amplitud es cero.

De lo anterior, puede afirmarse que en  $E=0$  los estados se confinan a las regiones no-trianguulares.

Este comportamiento se debe a dos causas. En la forma del hamiltoniano  $H_2$  se observa que la coordinación de los sitios aparece como una autoenergía. Los sitios de mayor coordinación tienen una autoenergía más alta, por lo cual la tendencia del sistema es hacer cero las amplitudes en los sitios de mayor autoenergía. Este fenómeno también ha sido encontrado en simulaciones de aleaciones binarias desordenadas [64], en las cuales la diferencia en autoenergías es muy grande, por lo cual los estados se localizan en regiones de menor autoenergía. La otra razón para el confinamiento de los estados es la frustración, la cual será explicada a continuación.

El efecto principal de la renormalización es que dobla la banda; el centro del hamiltoniano se convierte en el mínimo eigenvalor, mientras que los extremos en  $E=\pm 4.23$  se mapean al máximo eigenvalor en  $H^2$ . Además, como el parámetro de salto aparece cuadrático (y por ende positivo), entonces el máximo valor de  $E^2$  corresponde a un estado de enlace (*bonding*), es decir, a un estado en que el cambio de fase entre sitios es cero. El mínimo eigenvalor corresponde a un estado de anti-enlace (*antibonding*). En dicho estado el cambio de fase debe ser  $\pi$ , lo cual equivale

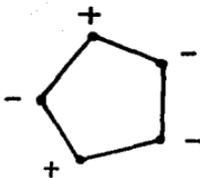


(Figura 4.4: Densidad integrada de estados de la red de Penrose graficada en escala log-log.)

a cambiar el signo de la función de onda entre sitios vecinos.

El límite de enlace se puede alcanzar para cualquier estructura, por desordenada que sea. Este límite corresponde a longitudes de onda larga, las cuales son afectadas de manera muy débil por la topología local de la red. En este límite la función de onda es muy parecida a los estados extendidos de una red periódica. Aún más, la densidad de estados en esta región es similar a la de un sistema periódico bidimensional según se puede apreciar en la figura 4.4. Utilizando una escala log-log se deduce que en los bordes de banda la densidad integrada sigue la ley:  $I(E) \approx E$ , lo cual es característico de sistemas bidimensionales.

La situación es totalmente diferente para el estado de anti-enlace. En una



( Figura 4.5: Frustración de la función de onda en un anillo pentagonal.)

estructura que contenga anillos cuyo número de lados sea impar, siempre existirá un enlace en el cual el cambio de fase sea cero (fig. 4.5), a este fenómeno se le llama *frustración*.

De este modo, no es posible alcanzar un estado perfecto de antienlace. Además, según se demuestra en el apéndice C (ecuaciones A7 y A9), cada enlace frustrado le cuesta energía al sistema. Lo mejor que puede hacer éste es minimizar el número de enlaces frustrados para disminuir el costo en energía. Aún más, las zonas donde existen enlaces frustrados tienen un costo energético mayor, de modo que la función de onda tiende a confinarse en regiones de menor frustración. Así cerca del límite de frustración, las propiedades de localización cambian de manera radical.

Siguiendo esta línea de ideas es posible determinar aproximadamente el valor de la energía donde se presenta el borde de frustración. Para ello es necesario utilizar un estado de prueba con un número mínimo de enlaces frustrados (denotado por  $|M\rangle$ ). Este estado no es necesariamente un eigenestado del sistema, sin embargo el valor esperado de la energía  $\langle M | H^2 | M \rangle$ , sirve como una estimación del borde de frustración. Como primera aproximación, se supondrá que todas las amplitudes de los sitios son iguales ( $\varphi_i = \pm 1/\sqrt{N}$ ). Además, se supondrá que cada celda de  $H^2$  tiene el mínimo número posible de enlaces frustrados, sin importar los alrededores del sitio. Esta suposición dará un mínimo para la energía crítica.

En la tabla I del apéndice C se indican los tipos de anillos que existen en la red H2. Existen ocho clases diferentes, correspondientes al dual de cada vértice renormalizado. Considerando sitios con la misma coordinación como celdas del mismo tipo, el número de estas se reduce a cinco.

Para encontrar el corrimiento de la energía por frustración ( $E_f$ ) basta reescribir la fórmula A7 del apéndice C, cambiando la suma sobre sitios a una suma sobre celdas, indicándose por  $P(\mu)$  la frecuencia de aparición de un tipo dado de celda del tipo  $\mu$ . El resultado obtenido es:

$$E_f^2 = t^2 \sum_{\mu} P(\mu) [Z_{\mu} - 2N_t(\mu) + 4N_f(\mu)].$$

La suma se realiza sobre los tipos diferentes de celdas. El primer término es la coordinación promedio en la red, la cual vale cuatro.

El segundo término es el número total de enlaces en cada tipo de celda. Los enlaces del tipo  $k$  pertenecen a una sola celda por estar en su interior, mientras que los de tipo  $l$  son compartidos por dos celdas. Por ello estos últimos deben tener un factor de  $1/2$  al realizar el conteo de enlaces. Sin embargo, en el hamiltoniano  $H^2$  los enlaces de tipo  $l$  aparecen con un factor 2, por lo cual se cancela el factor  $1/2$ . De este modo, al contar sobre celdas los enlaces tipo  $l$  y  $k$  tienen el mismo peso.

El último término es el número mínimo de enlaces frustrados en cada celda si la fase entre dos sitios unidos por un enlace frustrado es cero.

Mediante una inspección de la tabla I del apéndice C, puede encontrarse que:  $N_t(\mu) = Z_{\mu}(Z_{\mu} - 1)/2$  y además:

$$N_f(\mu) = \begin{cases} Z_{\mu}(Z_{\mu} - 2)/4 & \text{si } Z_{\mu} \text{ es par} \\ (Z_{\mu} - 1)^2/4 & \text{si } Z_{\mu} \text{ es impar} \end{cases}$$

Sustituyendo estos valores en la fórmula para  $E_f^2$ :

$$E_f^2 = \sum_{\mu} P(\mu) [Z_{\mu} - 2\{N_t(\mu) - 2N_f(\mu)\}] = \sum_{\mu \text{ impar}} P(\mu).$$



( Figura 4.6: Configuraciones de anillos impares que se forman al hacer cero la amplitud en sitios de coordinación diferente de tres.)

De la fórmula anterior se deduce que sólo contribuyen los anillos con un número impar de vértices. El resultado numérico se obtiene fácilmente sustituyendo los valores de  $P(\mu)$ :

$$E_f^2 = P(Q) + P(D) + P(S) + P(S_5) + P(J) + P(S_3) = \frac{6}{\tau^3} = 0.8754$$

o, sacando la raíz cuadrada se obtiene el valor correspondiente en la red de Penrose:  $E_f = 0.936$ .

Esta energía corresponde al valor en el cual la amplitud se empieza a concentrar en los sitios con  $Z=3$ . Por esta razón, para calcular el borde de banda de estos estados, se necesita suponer que, en el límite, la amplitud es cero en todos los sitios de coordinación diferente de tres, lo cual equivale a decir que no existe contribución de las celdas triangulares.

En este caso, todas las celdas se vuelven pares, excepto las de tipo S, dos J por cada  $S_4$  y todas las  $S_4$  que se vuelven triangulares (Fig. 4.6)

Nuevamente, el borde de banda para estos estados es:

$$E_f^2 = P(S) + 2P(S_4) = \frac{184\tau + 297}{5} = 0.1436$$

o bien,  $E_l = 0.3790$ . Este valor es muy cercano a la energía crítica obtenida numéricamente y al valor de  $0.37 \leq E_l \leq 0.55$  obtenido por el método de fracciones continuas [71].

Los estados entre  $E_l$  y  $E_f$  se localizan en las regiones tipo II. Los estados abajo de  $E_l$  son fractales en el sentido de que se concentran en los centros de simetría cinco del máximo Penrose obtenido mediante la inflación. Una estimación para el límite inferior de estos estados se puede obtener suponiendo que la amplitud se concentra totalmente en estos centros de simetría cinco, de donde:

$$\Delta^2 = P(S) + P(S_5) = \frac{1}{7^6} = 0.0557$$

o,  $\Delta = 0.236$ . Este valor resulta cercano al valor de la brecha  $\Delta = 0.107$ .

Las fórmulas utilizadas en esta sección pueden utilizarse también para calcular el borde de banda superior. En dicho borde, todos los enlaces son frustrados porque la longitud de onda es larga y no existe cambio de fase entre sitios contiguos. Esto indica que:  $N_f(\mu) = N_l(\mu)$  de donde:

$$E_b^2 = \sum_{\mu} P(\mu) Z_{\mu}^2 = 3Z_{\mu} + 2N_k(\mu) = 66 - 30\tau = 17.4589$$

o, en la red de Penrose:  $E_b = 4.1784$ . La diferencia con el valor observado se debe a la suposición de que las amplitudes son iguales en cada sitio. En una red cuadrada,  $E_b = 4.00$ . La diferencia estriba en la fluctuaciones de la coordinación.

El método presentado puede aplicarse al problema central de la red de Penrose, en el cual existe una contracción de la banda cuyo valor es  $1.32t$ [68]. Esta contracción se debe a la existencia de anillos impares. Suponiendo otra vez que las fluctuaciones de la amplitud son despreciables, la contracción puede obtenerse directamente de la fórmula (A11) deducida en el apéndice C:

$$E_c = \frac{4N_f}{N}$$

donde  $N_f$  es el número total de enlaces frustrados. En esta red, sólo existen dos clases de anillos pares, los K y  $S_4$ . De esto se deduce que la contracción vale:

$$E_c = 2t [1 - P(K) - P(S_4)] = 1.75t.$$

Este valor es mayor que el encontrado numéricamente, sin embargo es muy cercano al valor donde el IPR tiene un cambio de comportamiento [68].

Los métodos anteriores dan una descripción de los mecanismos que conducen a la localización progresiva de los estados al acercarse la energía a cero. Además predicen correctamente dos energías críticas que separan los diferentes tipos de estados. Sin embargo, aún quedan dos preguntas por contestar: la primera es porqué existe un límite mínimo para la energía, lo cual a su vez indica que existe una longitud mínima de localización. La otra pregunta es: como se comporta la densidad de estados en la región cercana a la brecha energética.

La respuesta a la primera pregunta es que al ir localizando progresivamente los estados se baja la energía porque se reduce el número de enlaces frustrados; sin embargo, al confinar un estado éste aumenta su energía de acuerdo al principio de incertidumbre de Heisenberg. Entonces existe una competencia entre confinamiento y frustración. El valor en el cual el sistema ya no gane energía al localizarse será el de la brecha energética.

Para evaluar numéricamente este escenario se requiere básicamente una relación entre la energía y la longitud de localización ( $\lambda$ ).

El costo energético de confinar una función de onda puede obtenerse suponiendo al electrón en una caja cuyas paredes tienen una altura infinita:

$$E_{conf.} = \frac{C}{\lambda^2}$$

donde C es una constante cercana a uno y que depende de la geometría de la caja. En la presente tesis se supondrá que  $C=1$  dado que su cálculo exacto resultaría muy difícil de obtener para una red quasiperiódica.

La otra contribución a la energía proviene del número de enlaces frustrados. Teóricamente, lo más que se puede decir es que la relación debería tener una forma del tipo:

$$E_{frus.} = \frac{4N_f}{N} = D\lambda^2,$$

ya que el número de enlaces frustrados es proporcional al área ocupada por la función si se supone una densidad constante de enlaces frustrados en la región donde se localiza la función de onda.  $D$  es una constante por determinar que depende justamente de la densidad de enlaces frustrados y del escalamiento de la energía. Sin embargo, el cálculo de dicha constante resulta complicado para una red quasiperiódica. Por esta razón, en el presente trabajo se optó por obtener la relación partiendo de los cálculos numéricos. Para ello basta observar que el IPR es proporcional al inverso del área de localización:  $\pi\lambda^2$  si los estados son localizados. De aquí que dada la relación entre el IPR y la energía sea posible determinar la dependencia de  $E$  con  $\lambda$ .

Ajustando un polinomio en potencias de  $1/E$  con los datos obtenidos (figura 5 del apéndice C) se obtiene:

$$IPR(E) = \frac{A}{E} + B,$$

donde:  $A=0.0022$  y  $B=0.0021$ . El error es: 0.0655. Si se considera el siguiente término en el desarrollo ( $1/E^2$ ) el error es 0.0651 lo cual indica que basta con el primer término. Se obtiene que:

$$E_{frus.} = \frac{B}{((1/\pi\lambda^2) - A)}$$

Para comparar con la predicción teórica se observa que  $A \ll 1$ , de donde:

$$E_{frus.} = B\pi\lambda^2,$$

lo cual indica que la relación funcional predicha es aproximadamente correcta.

La contribución total a la energía es:

$$E = E_{conf.} + E_{frus.} = \frac{1}{\lambda^2} + B\pi\lambda^2,$$

derivando e igualando a cero se obtiene la longitud mínima de localización:

$$\lambda_{min.} = \frac{1}{(B\pi)^{1/4}} = 3.24$$

que corresponde a la energía mínima:

$$E = 2(B\pi)^{1/2}t = 0.093t.$$

Este valor es muy cercano al encontrado numéricamente para la brecha energética ( $\Delta = 0.107t$ ).

Finalmente, para la forma de la densidad de estados cerca de  $E = 0$  cabría esperar un decaimiento exponencial ya que los estados en esta región son localizados. En general no se comprende si este comportamiento exponencial de la densidad de estados para estados localizados siempre es válido [72], aunque existen diversos modelos que conducen a esta conclusión.

Durante el desarrollo de esta tesis, se ha deducido en forma general que dada una banda de estados localizados la forma de la densidad de estados es del tipo:

$$\rho \sim e^{f(E)}$$

donde  $f(E)$  depende del escalamiento entre la energía y la longitud de localización de los estados (la demostración se ha incluido en el apéndice A. La demostración se basa fundamentalmente en la relación existente entre el cuadrado de la función de Green y su derivada respecto a la energía). La forma de  $f(E)$  depende del sistema en estudio aunque en la mayoría de los casos tiene una forma potencial.

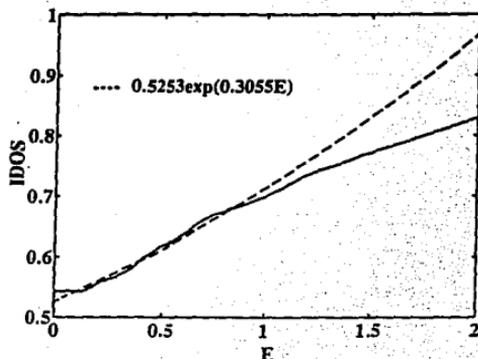
En el apéndice A se predice para la red de Penrose un comportamiento del tipo:

$$\rho = \rho_0 e^{CE}$$

donde  $\rho, C$  son constantes a determinar. Mediante un ajuste de mínimos cuadrados se obtuvo que la densidad integrada de estados varía según:

$$I = I_0 e^{CE}.$$

En la figura 4.7 se compara el ajuste con la densidad integrada obtenida numéricamente. Nótese que existen fluctuaciones respecto al decaimiento exponencial.



( Figura 4.7: Densidad integrada de estados cerca de  $E=0$  para el Penrose. La línea continua muestra los resultados numéricos. La línea punteada corresponde al ajuste exponencial.)

Esto se debe a que la forma funcional entre la energía y la longitud de localización es una aproximación.

Por último, la existencia de energías críticas, estados localizados y una densidad de estados que decae exponencialmente tiene consecuencias relevantes en las propiedades ópticas, eléctricas y de transporte de los materiales (muchas de las propiedades encontradas para la red de Penrose son características de los semiconductores amorfos). Debe resaltarse que los más recientes experimentos con quasicristales casi sin defectos [73] indican la existencia de una energía crítica que separa estados localizados y extendidos en una región donde la densidad de estados decae sustancialmente. Una de las conclusiones de dichos experimentos ha sido que la geometría quasicristalina favorece la localización de estados.

## Capítulo 5

### Conclusiones

En este capítulo se presenta un resumen general de las propiedades electrónicas de redes quasiperiódicas en una y dos dimensiones para hamiltonianos de amarre fuerte. Aunque en el curso del trabajo desarrollado se estudiaron con detalle solamente las redes de Fibonacci y Penrose, las ideas desarrolladas pueden ser aplicadas a otros sistemas quasiperiódicos tales como la red octagonal o dodecagonal.

En general, puede decirse que los sistemas quasiperiódicos unidimensionales presentan un espectro electrónico cuya estructura es similar a un polvo de Cantor, es decir, contienen una infinidad de brechas energéticas, las cuales se escalan de manera autosimilar. Esta propiedad es una consecuencia directa de la unidimensionalidad del sistema y de que la transformada de Fourier de un sistema quasiperiódico llene densamente el espacio de Fourier (Capítulo III). Al introducir defectos en la quasiperiodicidad, de acuerdo a las reglas del modelo quasiperiódico aleatorio, se observa que desaparece la estructura autosimilar de las brechas de energía y el espectro se suaviza. Este efecto se observa aún para cadenas con muy pocos defectos, lo cual indica que la estructura autosimilar del espectro es inestable ante perturbaciones muy pequeñas. En la presente tesis se propone que esto se debe a que la probabilidad de tener cadenas quasiperiódicas largas decae como  $p^L$  donde  $p$  mide el grado de desorden de la cadena y  $L$  la longitud. Las brechas de energía más pequeñas corresponden justamente a

la existencia de cadenas quasiperiódicas largas, por lo cual su baja probabilidad de aparición indicaría la suavización del espectro.

La introducción de defectos destruye a los estados críticos o fractales de acuerdo a lo esperado en una dimensión. El caso más espectacular lo constituye el estado  $E=0$  para la cadena de Fibonacci. En la cadena perfecta este estado es autosimilar, sin embargo, al introducir un desorden muy pequeño ( $p=0.95$ ) la longitud de localización, definida en el capítulo II, decrece tres órdenes de magnitud.

Sin embargo, existen otras regiones del espectro que donde la longitud de localización se conserva del mismo orden de magnitud.

La naturaleza del espectro de sistemas quasiperiódicos bidimensionales es muy diferente al de los unidimensionales. Existen dos razones para ello; en primer lugar el hecho de que la transformada de Fourier del sistema llene densamente el espacio no implica la existencia de un espectro con una infinidad de brechas, y por último, la *frustración* de la función de onda.

En la presente tesis se estudió de manera detallada las propiedades del espectro electrónico de la red de Penrose. Para ello se realizaron cálculos en redes de diferentes tamaños, formas y condiciones a la frontera. Se encontró numéricamente que la red presenta una brecha de energía de tamaño  $\Delta = 0.1t$  que separa a la banda de los estados confinados a  $E=0$ . Además, se encontraron dos energías críticas:  $E=0.37t$  y  $E=0.93t$  las cuales separan a estados con diferentes grados de localización. Para explicar estas características se propuso un hamiltoniano renormalizado, definido en una nueva red llamada  $H_2$ . El efecto de la renormalización consiste en doblar la banda de energía, de manera que los estados en la energía  $E$  se mapean a  $E^2$ . Los estados cercanos a  $E=0$  en  $H_2$  son de tipo antienlace, por lo cual la existencia de anillos con un número impar de lados en  $H_2$  los frustra aumentando su energía. El sistema se localiza entonces en regiones de baja frustración. Utilizando estas ideas se mostró que los bordes de localización corresponden justamente a  $E=0.37$  y  $E=0.93$ . Los estados se van localizando gradualmente de manera que bajen la energía de frus-

tración (la cual es proporcional al área ocupada por la función de onda). En principio este proceso podría continuarse indefinidamente, sin embargo, al localizar los estados cuánticos estos aumentan su energía de acuerdo al principio de incertidumbre de Heisenberg. Llega un punto donde el sistema ya no disminuye la energía al seguir localizando. Esta energía se estimó como:  $\Delta = 0.098t$ , el cual es muy cercano al de la brecha energética encontrada numéricamente.

Otra de las ventajas de la red H2, es que pone de manifiesto la separación existente entre dos clases de regiones, una con sitios de mayor autoenergía que la otra. Por esta razón, el problema es muy similar al de una aleación binaria en el límite de bandas separadas. En dichas aleaciones aparecen justamente estados confinados a  $E=0$  y una brecha energética.

También se encontró que la densidad de estados decae aproximadamente de manera exponencial en la zona del espectro donde los estados son localizados. Para demostrar esto, se desarrolló una expresión que predice la existencia de un decaimiento exponencial en la densidad de estados en una región de estados localizados (excepto para el caso en el cual la dependencia entre la energía y la longitud de localización es lineal). Dicha expresión tiene la ventaja de que relaciona la longitud de localización de los estados el decaimiento exponencial.

Las ideas anteriores son aplicables a cualquier sistema quasiperiódico bidimensional. En particular permiten entender el comportamiento de la densidad de estados del problema central de la red de Penrose [68], en el cual se observa una energía crítica que separa a estados con diferentes clases de localización cerca del borde de antienlace. Este fenómeno también se observa en cálculos realizados para un hamiltoniano de fonones en la red de Penrose.

Debe resaltarse que las conclusiones de este estudio se derivan básicamente de propiedades geométricas de las redes. Para realizar cálculos más realistas se requiere introducir en el hamiltoniano las bandas  $p$  y  $d$ . Sin embargo, aún en tal caso el efecto de la frustración es fundamental. Existen experimentos muy recientes [73] con

quasicristales esencialmente sin defectos que confirman de manera cualitativa estas ideas. Dichos experimentos muestran la existencia de una energía crítica que separa a estados localizados de extendidos en la región donde la densidad de estados decae considerablemente. Aún mas, Basov *et. al.* [73] concluyen de su experimento que la geometría quasicristalina es compatible con la localización.

Aunque el presente estudio permite entender las características globales del espectro electrónico de las redes quasiperiódicas, todavía quedan por explicar los detalles finos del espectro, tales como la repulsión entre niveles, las propiedades de escalamiento y el papel de los fasones en experimentos de dispersión. Estos estudios se encuentran actualmente en curso.

## Bibliografía

- [1] W. Bruhns , P. Ramdohr, *Cristalografía*; UTHEA, México, p.4 (1965).
- [2] J. Rodriguez, *Fundamentos de cristalografía física*, UNESCO, Washington, p. 20 (1986).
- [3] D. Shechtman, D. Blech, D. Gratias, J.W. Cahn, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1951 (1984).
- [4] K. Kimura, T. Hashimoto, K. Suzuki, K. Nagayama, *J. Phys. Soc. Jpn.* **54**, 3217 (1985).
- [5] P. Bancel, P.A. Heiney, *J. Phys. Colloque* **47**, C3-341 (1986).
- [6] N.K. Mukhopadhyay, G.N. Subbana, S. Ranganathan, K. Chattopadhyay, *Scr. Metall.* **20**, 525 (1985).
- [7] M.D. Ball, D.J. Lloyd, *Scr. Metall.* **19**, 1065 (1985).
- [8] P. Sainfort, B. Dubost, A. Dubois, *C.R. Acad. Sci. Paris* **301**, 69 (1985).
- [9] T. Janssen, *Phys. Reports* **168**, 55 (1988).
- [10] L. Bendersky, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 1461 (1985).
- [11] T. Ishimasa, H.J. Nissen, Y. Fukano, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 511 (1985).
- [12] W. Cao, H.Q. Ye, K.H. Kuo, *Phys. Rev. Lett. A* **107**, 511 (1988).

- [13] L. Pauling, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **84**, 3951 (1987).
- [14] G. García Naumis, *Generación de estructuras cuasicristalinas por el método dual generalizado (tesis de licenciatura)*, UNAM, México, p. 8 (1990).
- [15] A. L. Mackay, *Physica A* **114**, 609 (1982).
- [16] A. L. Mackay, *Sov. Phys. Cryst.* **26**, 517 (1981).
- [17] D. Levine, P. Steindhardt, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2477 (1984).
- [18] R. Penrose, *The emperor's new mind*, Penguin Books, New York, p. 436 (1991).
- [19] P. W. Stephens, A.I. Goldman, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 1168 (1986).
- [20] P. Horn., W. Malzfelt, D. Divicenzo, J. Toner, R. Gambino, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1444 (1986).
- [21] C. Henley, en *Quasicrystals and incommensurate structures in condensed matter*, ed. por M.J. Yacamán, D. Romeu, V. Castaño y A. Gómez, World Scientific, Singapur, (1990).
- [22] D. Romeu, *Int. J. Mod. Phys.* **B2**, 77 (1988).
- [23] D. Romeu, *Acta Metall. Mater* **38**, 113 (1990).
- [24] S.E. Burkov, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 614 (1991).
- [25] J.L. Aragón, D. Romeu, M. Torres, J. Fayos, *J. Non-Cryst. Solids* **153&154**, 525 (1993).
- [26] J. Tood, R. Mirlin, R. Clarke, K.M. Mohanty, J.D. Axe, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1157 (1986).
- [27] L.X. He, X.Z. Li, Z. Zhang, K.H. Kuo, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 1116 (1988).

- [28] J.L. Aragón, *Rev. Méx. Fís.* **40**, 339 (1994).
- [29] C. Berger, D. Pavuna, F. Cyrot-Lackmann, *J. Physique Coll.* **7 C3**, 489 (1986).
- [30] T. Klein, C. Berger, D. Mayou, F. Cyrot-Lackmann, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2907 (1991).
- [31] B. D. Biggs, S.J. Poon, N.R. Munirathnam, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2700 (1990).
- [32] U. Mizuntani, Y. Sakabe, T.J. Matsuda, *J. Phys. Cond. Mat.* **2**, 6153 (1990).
- [33] S.J. Poon, *Adv. Phys.* **4**, 303 (1992).
- [34] E. Belin, D. Mayou, *Physica Scripta* T49, 356 (1993).
- [35] M. Krajčí J. Hafner, *Europhys. Lett.* **27**, 147 (1994).
- [36] N.W. Ashcroft, N.D. Mermin, *Solid State Physics.*, Holt, Rinehart and Winston, New York,(1976).
- [37] G. Trambly De Laissardiere, D. Mayou, D. Nguyen Manh, *Europhys. Lett.* **26**, 25 (1993).
- [38] W. Hume-Rothery, B.R. Coles, *Adv. Phys.* **3**, 149 (1954).
- [39] E.M. Lifshitz, L.P. Pitaevskii, *Física Estadística (Parte II)*, 2a. ed., Ed. Reverté, Barcelona, p.1 (1986).
- [40] R.A. Barrio, C. Wang, en *Quasicrystals and incommensurate structures in condensed matter*, ed. por M.J. Yacamán, D. Romeu, V. Castaño y A. Gómez, World Scientific, Singapur,(1990).
- [41] R.A. Barrio, C. Wang, en *Modern topics of condensed matter* , ed. por J.L. Heiras, T. Akachi, IMM-UNAM, México,(1990).
- [42] R.A. Barrio, C. Wang, *J. of Non-Cryst. Solids*, **152&154**, 375-379 (1993).

- [43] J. Hafner, M. Krajčí *Europhys. Lett.* **21**, 31 (1993).
- [44] C. Wang, R. Barrio *Phys. Rev. Lett.* **61**, 191 (1988).
- [45] E. Belin, Z. Dankhazi, A. Sadoc, J.M. Dubois, J.M. Calvayrac, *Europhys. Lett.* **26**, 677 (1994).
- [46] D. Levine, P. Steindhardt, *Phys. Rev.* , **B34**, 596 (1986).
- [47] P. Steindhardt, S. Ostlund, *The Physics Of Quasicrystals*, Ed. World Scientific Publishing Co., Singapur, p. 643 (1987).
- [48] J.L. Aragón, M. Torres, *Europhys. Lett.*, **15** (2), 203 (1991).
- [49] L.D. Landau, E. Lifshitz, *Física Estadística (Parte I)*, 2a. ed., Ed. Reverté, Barcelona, p.532 (1989).
- [50] B. Minchau, K.Y. Szeto, J. Villain, *Phys. Rev.* **B58**, 1960 (1987).
- [51] C.L. Henley, *J. Phys.* **A21**, 1649 (1988).
- [52] K. Huang, *Statistical Mechanics*, 2a. ed., Ed. John Wiley&Sons, p. 406 (1987).
- [53] P. Jordan, E.P. Wigner, *Z. Phys.* **47**,631 (1928).
- [54] J.M. Ziman, *Models of disorder*, 1a. ed., Cambridge Univ. Press, 1979.
- [55] P.W. Anderson, *Phys. Rev.* **109**, (1952).
- [56] H. Matsuda, *Prog. Theor. Phys.* **31**, 161 (1964).
- [57] I.M. Lifshitz, *Adv. in Phys.* **13**, 483 (1964).
- [58] M. Kohmoto, *Int. Jou. of Mod. Phys.*, **B1**, 31 (1987).
- [59] E.N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics*, 2a. ed., Ed. Springer-Verlag, p. 45, (1990).

- [60] J.P. Lu, T. Odagaki, J.L. Birdman, *Phys. Rev.* **B33**, 4809 (1986).
- [61] P. Villaseñor-González, F. Mejía-Lira, J.L. Morán López, *Solid State Commun.*, **66**, 1127 (1988).
- [62] K. Mouloupos, S. Roche, por publicarse en *Phys. Rev.* **B52** (1995).
- [63] R. Barrio, sin publicarse.
- [64] S. Kirkpatrick, T. P. Eggarter, *Phys. Rev.* **B6**, 3598 (1972).
- [65] M. Khomoto, B. Sutherland, *Phys. Rev. Lett.*
- [66] M. Arai, T. Tokihiro, T. Fujiwara, M. Khomoto, *Phys. Rev.* **B44**, 1621 (1988).
- [67] V.G. Senza, C. Sire, *Phys. Rev.* **B44**, 10343 (1991).
- [68] P. Ma, Y. Liu, *Phys. Rev.* **B39**, 9904 (1989).
- [69] H. Tsunetsugu, T. Fujiwara, K. Ueda, T. Tokihiro, *Phys. Rev.* **B43**, 8879 (1991).
- [70] M. Khomoto, B. Sutherland, *Phys. Rev.* **B34**, 3849 (1986).
- [71] V. Kumar, D. Sahoo, G. Athithan, *Phys. Rev.* **B34**, 6924 (1986).
- [72] C.M. Soukalis, M.H. Cohen, E.N. Economou, *Phys. Rev. Lett.* **6**, 616 (1984).
- [73] D.N. Basov, F.S. Pierce, P. Volkov, S.J. Poon, T. Timusk, *Phys. Rev. Lett.* **73** 1865 (1994).
- [74] J. Zittartz, J.S. Langer, *Phys. Rev.* **148** 741 (1966).

## Apéndice A

# Forma del espectro para estados localizados

En el presente apéndice se deduce la forma de la densidad de estados si se considera que existe una región del espectro en la cual los estados son localizados.

El punto de partida es la siguiente relación entre la derivada de la parte imaginaria de la función de Green ( $G=1/(E-H)$ ) y el cuadrado de la misma:

$$-Im \left( \frac{d \langle m | G | m \rangle}{dE} \right) = Im(\langle m | G^2 | m \rangle)$$

ó:

$$-Im \left( \frac{d \langle m | G | m \rangle}{dE} \right) = 2 \sum_n \langle m | Re(G) | n \rangle \langle n | Im(G) | m \rangle \quad (A.1)$$

Si la función de onda es localizada en el sentido de que sea normalizable, la suma sobre  $n$  puede calcularse mediante una integral. El caso más típico corresponde a un decaimiento exponencial,  $\langle m | G | n \rangle \sim e^{i r_n - r_m / \lambda(E)} \langle m | G | m \rangle$ . Sustituyendo esta expresión en la ecuación (A.1) e integrando respecto a  $n$ , se obtiene:

$$-Im \left( \frac{d \langle m | G | m \rangle}{dE} \right) \sim 2\Omega(d)\lambda^d \langle m | Re(G) | m \rangle \langle m | Im(G) | m \rangle \quad (A.2)$$

siendo  $\Omega(d)$  el ángulo sólido en un espacio de  $d$  dimensiones. Sumando la ec. (A.2) sobre  $m$ :

$$\frac{d\rho(E)}{dE} \sim \frac{2\Omega(d)\lambda^d}{\pi} \sum_m \langle m | \text{Re}(G) | m \rangle \langle m | \text{Im}(G) | m \rangle \quad (\text{A.3})$$

donde se ha utilizado la expresión siguiente para la densidad de estados:

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(G)$$

Cerca del borde de la banda electrónica, la parte real de  $G$  es de la forma:  $F/(E - E_0)$  donde  $E_0$  es el promedio del potencial [74]. Sustituyendo en (A.3):

$$\frac{d\rho(E)}{dE} = \frac{2\Omega(d)\lambda^d F}{\pi(E - E_0)} \sum_m \langle m | \text{Im}(G) | m \rangle = -\frac{2\Omega(d)\lambda^d F}{E - E_0} \rho(E)$$

La solución de la ecuación diferencial anterior es:

$$\rho(E) = \rho_0 \exp\left(\int_{E_0}^E -\frac{\lambda^d(E)}{E - E_0} dE\right) \quad (\text{A.4})$$

Para precisar la forma exacta del decaimiento, es necesario especificar la relación existente entre  $\lambda$  y la energía. Si la relación es:  $\lambda(E) = A/\sqrt{E}$  se obtiene el decaimiento exponencial de Lifshitz,  $e^{A/(E-E_0)^{1/2}}$ . En el caso de la red de Penrose, la relación es complicada, sin embargo, en el capítulo cuatro se encontró que:  $\lambda(E) \approx \sqrt{E/2b}$  en la región donde  $E^2 < 0.9$ . Debe recordarse que esta dependencia fue deducida del radio de participación inversa del mosaico de Penrose. Esta relación da lugar a una densidad del tipo  $\rho \sim e^{CE}$  al sustituirse en la ec. (A.4).

## **Apéndice B**

# **Espectro electrónico de cadenas de Fibonacci aleatorias**

## Renormalization group of random Fibonacci chains

J. C. López

*Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 70-543, 01000 México, Distrito Federal, México*

G. Naumis and J. L. Aragón\*

*Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 20-364, 01000 México, Distrito Federal, México*  
(Received 10 March 1993)

A renormalization method is proposed to analyze the electronic band structure of disordered Fibonacci chains. The perfect (quasiperiodic) chain is contemplated as a particular case. Both bond and on-site problems are considered. The method is computationally efficient and suitable to deal with large chains in real space. It can be useful for the study of electronic properties of random tilings.

## 1. INTRODUCTION

The electronic properties of Fibonacci and generalized Fibonacci chains have been exhaustively studied. One effective method is the renormalization-group technique, which was developed to study the physical properties of periodic and quasiperiodic systems<sup>1,2</sup> even before the discovery of the first quasicrystalline alloy in 1984.<sup>3</sup> It has been proven that the spectrum of a Fibonacci chain is a Cantor set of zero Lebesgue measure,<sup>4,5</sup> and it is believed that all the eigenstates are neither localized nor extended, but critical.<sup>4-6</sup> A similar situation holds for a class of generalized Fibonacci chains, but here there is the possibility of the spectrum being locally smooth and that extended states exist.<sup>7</sup> The renormalization-group method has also been applied to two-dimensional quasiperiodic lattices<sup>8,9</sup> where singular continuous spectra and critical eigenstates are also found (for a review see Ref. 10).

Fibonacci chains provide a simplified tool for examining the effects of quasiperiodicity,<sup>4,11</sup> and their study has been strongly motivated by molecular-beam epitaxy experiments yielding the first experimental realization of a Fibonacci system.<sup>12</sup> Less attention, however, has been paid to random systems in the sense of a random tiling. The one-dimensional realization of a perfect quasicrystal is the Fibonacci chain whose Fourier-transform consists of a dense set of delta peaks, although it must be borne in mind that there is still controversy about the true nature of quasicrystallinity. In addition to the perfect quasicrystal model, there exists the random tiling model which has successfully explained most features of quasicrystalline alloys (for a review see Ref. 13). The Fourier transform of a random tiling structure consists of delta peaks plus diffuse scattering and their one-dimensional realization is a disordered Fibonacci chain preserving the same reciprocal space properties.

The main purpose of this paper is to provide a renormalization-group procedure which is useful to study the local electronic properties of large random Fibonacci chains in a simple and efficient computational way. This method was previously implemented to tackle the local-

ization problem in Fibonacci chains,<sup>14</sup> and was also applied to two-dimensional Penrose tilings.<sup>15</sup> Here, we present a generalization where the Fibonacci chain is only a particular case, and has the advantage of being extendible to treat the case of random Penrose tilings. Since no experiment has yet been devised to tell which of the major competing quasicrystal models (quasiperiodic vs random tiling) is correct to describe real quasicrystals, the method proposed here can shine some light onto this matter by describing the effect of phason disorder on electronic spectra of quasiperiodic structures.

The outline of the paper is as follows. In Sec. II we describe the construction of random Fibonacci chains and derive their renormalization-group equations. In Secs. III A and III B we apply the derived transformations to calculate the local density of states (LDOS) at a central site in random Fibonacci chains with varying degrees of disorder. Section III is devoted to results and discussion.

## II. RENORMALIZATION GROUP

The Fibonacci sequence describes the alternation of "words"  $L$  and  $S$ , with lengths  $l_L$  and  $l_S$ . Let us call  $F_n$  the sequence obtained according to the following concatenation rule:

$$F_n = F_{n-1} * F_{n-2}, \quad F_0 = S, \quad F_1 = L. \quad (1)$$

where the asterisk denotes string concatenation. The words  $F_n$  converge to an infinite word  $F_\infty$  called the Fibonacci sequence which is related to the golden mean  $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$  by  $F_{n+1}/F_n \rightarrow \tau$  when  $n \rightarrow \infty$ .  $F_{n+1}$  can also be obtained from  $F_n$  by applying the following substitution rule:

$$L \rightarrow LS, \quad S \rightarrow L$$

The Fibonacci chain is built by putting atoms on positions  $x_n$  in such a way that the bond lengths,  $x_n - x_{n-1}$ , take two values, namely,  $l_L$  and  $l_S$ . It is well known that the deterministic chain constructed in this way is neither periodic nor random, but quasiperiodic, and constitutes the one-dimensional realization of a perfect quasicrystal.

The one-dimensional case of a random tiling is a ran-

dom Fibonacci chain, which can be constructed as follows. Let us consider the same words  $L$  and  $S$  with the following random concatenation rule:

$$R_n = \begin{cases} R_{n-1} \circ R_{n-2} & \text{with probability } p \\ R_{n-2} \circ R_{n-1} & \text{with probability } q = 1-p. \end{cases} \quad (2)$$

$R_0 = S$ ,  $R_1 = L$ , and  $0 \leq p \leq 1$  is a fixed probability. So, for instance,

$$R_2 = \begin{cases} LS & \text{with probability } p \\ SL & \text{with probability } q \end{cases}$$

and

$$R_3 = \begin{cases} LSL & \text{with probability } p^2 + q^2 \\ SLL & \text{with probability } pq \\ LLS & \text{with probability } pq. \end{cases}$$

In this way, the infinite  $R_n$  can be viewed as a random reshuffling of words  $L$  and  $S$  in  $F_n$ . We shall consider the linear random Fibonacci chain built by associating a bond of length  $l_L$  to  $L$  and  $l_S$  to  $S$  in  $R_n$ .

The so constructed random Fibonacci chain can be described by the one-electron tight-binding Hamiltonian:

$$H = \sum_i |i\rangle \epsilon_i \left( |i+1\rangle + \sum_{j \neq i} |j\rangle \right) t_{ij} \langle j|,$$

where  $|i\rangle$  is the Wannier state associated with the  $i$ th vertex of the chain and  $t_{ij}$  is the nearest-neighbor hopping integral. In the bond problem (nondiagonal disorder) the hopping integrals take two values  $t_L$  and  $t_S$ . For the case of on-site problem (diagonal disorder) the site energies consist of  $\epsilon_L$  and  $\epsilon_S$  arranged in Fibonacci sequence. The matrix elements of the Green's function  $G_{ij} = \langle i|G(Z)|j\rangle$  satisfy the following set of equations:

$$(Z - \epsilon_i)G_{ij} = \delta_{ij} + \sum_k t_{ik} G_{kj}, \quad i=0, 1, 2, \dots \quad (3)$$

where  $Z = E + i\eta$ ,  $\eta \rightarrow 0$ .

#### A. Bond problem

Following Barrio and Wang,<sup>14</sup> the renormalization procedure consists of eliminating the coordinates of the central site from the equations of motion for the Green's function (3) in each iteration. This allows us to handle only the atoms at the boundaries of the bonds in order to construct the next generation. The first three iterations are shown schematically in Fig. 1.

The chain in the second iteration consists of three atoms with self-energies  $\epsilon_L^{(2)}$ ,  $\epsilon_C^{(2)} = \epsilon_L^{(1)} + \epsilon_C^{(0)}$ , and  $\epsilon_R^{(2)}$ , respectively (subscripts  $L$ ,  $C$ , and  $R$  stand for left, center, and right sites and the number in parenthesis labels the iteration), and hopping integrals  $t^{(1)}$  and  $t^{(0)}$ . The coordinates of the central site can be eliminated from equation (3), and one gets a single effective bond with two effective atoms. The renormalization-group equations for this iteration are

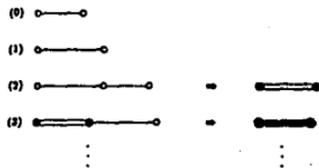


FIG. 1. Scheme showing the renormalization procedure for eliminating the coordinates of the central site in the second and third iteration of the concatenation process for growing the Fibonacci chain. The three atoms and the two bonds of the chain are replaced by two effective atoms with a single effective bond.

$$\begin{aligned} E_L^{(2)} &= \epsilon_L^{(1)} + \frac{t^{(1)2} \epsilon_C^{(1)}}{Z - (\epsilon_L^{(1)} + \epsilon_C^{(0)})}, \\ E_R^{(2)} &= \epsilon_R^{(0)} + \frac{t^{(0)2} \epsilon_C^{(0)}}{Z - (\epsilon_R^{(1)} + \epsilon_C^{(0)})}, \\ t^{(2)} &= \frac{t^{(1)2} t^{(0)}}{Z - (\epsilon_R^{(1)} + \epsilon_C^{(0)})}, \end{aligned} \quad (4)$$

where  $E$  and  $t$  are used for renormalized  $\epsilon$  and  $\tau$  parameters. In the third iteration we have  $\epsilon_L^{(3)} = E_L^{(2)}$ , and the equations for the  $n$ th step can be written in terms only of renormalized variables as

$$\begin{aligned} E_L^{(n)} &= E_L^{(n-1)} + \frac{t^{(n-1)2} \epsilon_C^{(n-1)}}{Z - (E_R^{(n-1)} + E_L^{(n-2)})}, \\ E_R^{(n)} &= E_R^{(n-1)} + \frac{t^{(n-2)2} \epsilon_C^{(n-2)}}{Z - (E_R^{(n-1)} + E_L^{(n-2)})}, \\ t^{(n)} &= \frac{t^{(n-1)2} t^{(n-2)}}{Z - (E_R^{(n-1)} + E_L^{(n-2)})}, \end{aligned}$$

with the initial values

$$E_L^{(0)} = E_L^{(1)} = E_C^{(0)} = E_R^{(1)} = 0$$

and

$$t^{(0)} = t_L, \quad t^{(1)} = t_S.$$

This renormalization procedure in a deterministic Fibonacci chain can be extended to the random concatenation rule given in (2). Figure 2(a) shows how the second iteration of Fig. 1 looks in the random case. By renormalizing the two possible configurations of the chain and averaging self-energies and hopping integrals; these configurations can also be replaced by a single effective bond with two effective atoms. The renormalized (and averaged) self-energies and hopping integrals of the single chain are now

FALLA DE ORIGEN

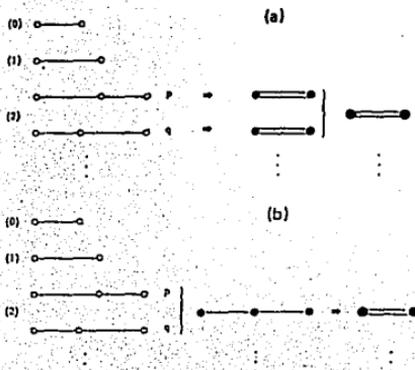


FIG. 2. Scheme of the renormalization procedure of the random Fibonacci chain according to the concatenation rule (2). Two kinds of defects are introduced. (a) For type I disorder the renormalization of the two possible configurations is carried out prior to average. (b) Type II disorder arises when the two possible configurations are averaged prior to renormalization.

$$\begin{aligned}
 E_L^{[2]} &= p e_L^{[1]} + q e_L^{[0]} + p \frac{e_L^{[1]e_L^{[1]}}}{Z - (e_L^{[1]} + e_L^{[0]})} \\
 &\quad + q \frac{e_L^{[0]e_L^{[0]}}}{Z - (e_L^{[1]} + e_L^{[0]})} \\
 E_R^{[2]} &= p e_R^{[1]} + q e_R^{[0]} + p \frac{e_R^{[0]e_L^{[0]}}}{Z - (e_R^{[1]} + e_L^{[0]})} \\
 &\quad + q \frac{e_R^{[1]e_L^{[1]}}}{Z - (e_R^{[0]} + e_L^{[1]})} \\
 f^{[2]} &= f^{[1]e_L^{[0]}} \left[ \frac{p}{Z - (e_R^{[1]} + e_L^{[0]})} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{q}{Z - (e_R^{[0]} + e_L^{[1]})} \right]
 \end{aligned}$$

In terms of the renormalized parameters, the general formulas for the  $n$ th iteration read

$$\begin{aligned}
 E_L^{[n]} &= p E_L^{[n-1]} + q E_L^{[n-2]} + p \frac{f^{[n-1]e_L^{[n-1]}}}{Z - (E_R^{[n-1]} + E_L^{[n-2]})} \\
 &\quad + q \frac{f^{[n-2]e_L^{[n-2]}}}{Z - (E_R^{[n-2]} + E_L^{[n-1]})} \\
 E_R^{[n]} &= p E_R^{[n-2]} + q E_R^{[n-1]} + p \frac{f^{[n-2]e_L^{[n-2]}}}{Z - (E_R^{[n-1]} + E_L^{[n-2]})} \\
 &\quad + q \frac{f^{[n-1]e_L^{[n-1]}}}{Z - (E_R^{[n-2]} + E_L^{[n-1]})} \\
 f^{[n]} &= f^{[n-1]e_L^{[n-2]}} \left[ \frac{p}{Z - (E_R^{[n-1]} + E_L^{[n-2]})} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{q}{Z - (E_R^{[n-2]} + E_L^{[n-1]})} \right]
 \end{aligned} \quad (6)$$

with the initial condition (5).

The above procedure yields the self-energies and hopping integrals of disordered chains constructed according to the concatenation rule given in (2), whose properties in reciprocal space are those of a random tiling.<sup>16,17</sup> Observe, however, that a different kind of disorder can be introduced if the two possible configurations are averaged prior to renormalization, as depicted in Fig. 2(b). Note that in this iteration there is a finite probability of getting  $LL$  and  $SS$  configurations. Consequently, in larger chains, one is actually averaging arbitrarily large crystalline regions, yielding random chains that have lost the random tiling reciprocal space properties. These two kinds of disorder will be alluded to as type I [Fig. 2(a)] and type II [Fig. 2(b)]. We shall consider type II disorder for comparison purposes only.

The corresponding recurrence formulas for type II disorder are

$$\begin{aligned}
 E_L^{[n]} &= p E_L^{[n-1]} + q E_L^{[n-2]} + \frac{(p f^{[n-1]} + q f^{[n-2]})^2}{Z - E_C^{[n]}} \\
 E_R^{[n]} &= p E_R^{[n-2]} + q E_R^{[n-1]} + \frac{(p f^{[n-2]} + q f^{[n-1]})^2}{Z - E_C^{[n]}} \\
 f^{[n]} &= \frac{(p f^{[n-1]} + q f^{[n-2]}) (p f^{[n-1]} + q f^{[n-2]})}{Z - E_C^{[n]}}
 \end{aligned} \quad (7)$$

where

$$E_C^{[n]} = p (E_R^{[n-1]} + E_L^{[n-2]}) + q (E_R^{[n-2]} + E_L^{[n-1]}) \quad (8)$$

Since each diagonal matrix element of the Green's function gives the LDOS at the corresponding site, the LDOS at the central site of the Fibonacci chain is given by<sup>18</sup>

$$\rho_s(E) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0} \text{Im} G_s(Z) \quad (9)$$

where  $\text{Im}$  stands for the imaginary part. It is straightforward to obtain the renormalized equation for the Green's function at the central site, which reads

$$G_{CC} = \left[ Z - E_C^{(n)} - \frac{t^{(n-1)}t^{(n-2)}}{Z - E_L^{(n-1)}} - \frac{t^{(n-2)}t^{(n-3)}}{Z - E_R^{(n-2)}} \right]^{-1}, \quad (10)$$

where the self-energies and hopping integrals at step  $n$  are given by (6) and (7) for disorder types I and II, respectively, and  $E_C^{(n)}$  is given by (8) for both types of disorder.

#### B. On-site problem

The above renormalization procedure can be implemented to solve the on-site problem in an analogous way. In this case, we have two different site energies,  $\epsilon_A$  and  $\epsilon_B$ , and a real bond  $T$  which must link chains  $n-1$  and  $n-2$ . This makes a difference to the renormalization procedure of the precedent section since now, for disorder type I, the two renormalized chains are joined by a bond  $T$  in the proper (with probability  $p$ ) or reverse (with probability  $q$ ) way. These two possible configurations are renormalized separately by eliminating the coordinates of the two central sites to get a single effective bond with two effective atoms. Finally, the two resulting possibilities are averaged.

The general  $n$ th step formulas for the on-site problem with the type I disorder are

$$\begin{aligned} E_L^{(n)} &= pE_L^{(n-1)} + qE_L^{(n-2)} \\ &+ p \frac{t^{(n-1)}t^{(n-2)}(Z - E_L^{(n-2)})}{(Z - E_R^{(n-1)})(Z - E_L^{(n-2)}) - T^2} \\ &+ q \frac{t^{(n-2)}t^{(n-3)}(Z - E_L^{(n-1)})}{(Z - E_R^{(n-2)})(Z - E_L^{(n-1)}) - T^2}, \\ E_R^{(n)} &= pE_R^{(n-1)} + qE_R^{(n-2)} \\ &+ p \frac{t^{(n-2)}t^{(n-3)}(Z - E_R^{(n-1)})}{(Z - E_L^{(n-2)})(Z - E_R^{(n-1)}) - T^2} \\ &+ q \frac{t^{(n-1)}t^{(n-2)}(Z - E_R^{(n-2)})}{(Z - E_L^{(n-1)})(Z - E_R^{(n-2)}) - T^2}, \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} t^{(n)} &= T t^{(n-1)} t^{(n-2)} \\ &\times \left[ \frac{p}{(Z - E_R^{(n-1)})(Z - E_L^{(n-2)}) - T^2} \right. \\ &\left. + \frac{q}{(Z - E_L^{(n-2)})(Z - E_R^{(n-1)}) - T^2} \right], \end{aligned}$$

with the initial conditions

$$E_L^{(2)} = \epsilon_A, \quad E_R^{(2)} = \epsilon_B, \quad t^{(2)} = T,$$

$$E_L^{(3)} = E_R^{(3)} = \epsilon_A + \frac{T^2}{Z - \epsilon_B}, \quad t^{(3)} = \frac{T^2}{Z - \epsilon_B}.$$

The corresponding recurrence formulas for the type II disorder are

$$\begin{aligned} E_L^{(n)} &= pE_L^{(n-1)} + qE_L^{(n-2)} + \frac{(pt^{(n-1)} + qt^{(n-2)})^2 [Z - (pE_L^{(n-2)} + qE_L^{(n-1)})]}{S^{(n)}}, \\ E_R^{(n)} &= pE_R^{(n-1)} + qE_R^{(n-2)} + \frac{(pt^{(n-2)} + qt^{(n-1)})^2 [Z - (pE_R^{(n-1)} + qE_R^{(n-2)})]}{S^{(n)}}, \\ t^{(n)} &= \frac{(pt^{(n-2)} + qt^{(n-1)})(pt^{(n-1)} + qt^{(n-2)})T}{S^{(n)}}, \end{aligned} \quad (12)$$

where

$$S^{(n)} = [Z - (pE_L^{(n-2)} + qE_L^{(n-1)})][Z - (pE_R^{(n-1)} + qE_R^{(n-2)})] - T^2.$$

Given that now one has to retain two central sites in the last renormalization step, the LDOS must be evaluated in one of the two central sites. The Green's function at the central site nearest to the left atom is given by

$$G_{cc} = \left[ Z - E_R^{(n-1)} - \frac{t^{(n-1)}t^{(n-2)}}{Z - E_L^{(n-2)}} - \frac{T^2}{Z - E_L^{(n-2)} - t^{(n-2)}t^{(n-3)}} / (Z - E_R^{(n-1)}) \right]^{-1}.$$

The self-energies and hopping integrals at step  $n$  are given by (11) and (12) for disorder types I and II, respectively.

### III. RESULTS AND DISCUSSION

As discussed above, the local Green's functions of random Fibonacci chains can be calculated, in a given step  $n$ , in terms of the renormalization-group equations (6) or

(7) for the bond, and (11) or (12) for the on-site problems. The site energy  $\epsilon$  in the bond problem was initially set to zero for all sites with  $t_i = -1.0$  and  $t_i = -1.3$ . Regarding the on-site problem we selected  $\epsilon_A = 1$ ,  $\epsilon_B = -1$  and  $T = -1$ . The following calculations were made for 100

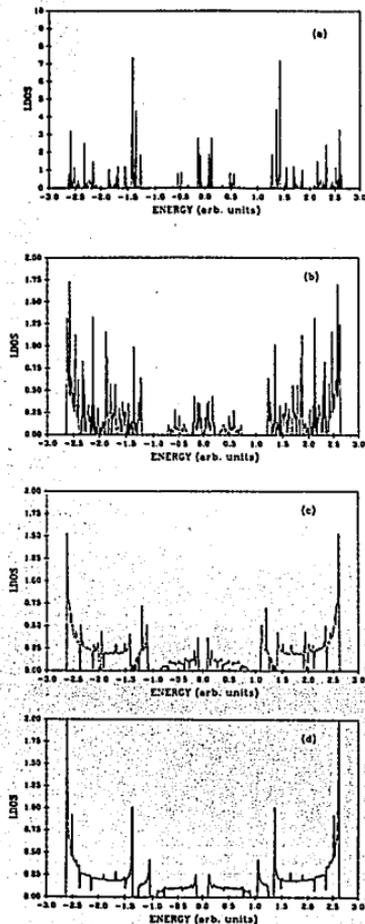


FIG. 3. LDOS, in arbitrary units, for different values of  $p$ , for the bond problem with type I disorder. (a)  $p=1$  (Fibonacci chain), (b)  $p=0.95$ , (c)  $p=0.75$ , and (d)  $p=0.5$ . Note that the gross features of the Fibonacci chain of the spectrum are preserved, and the spectrum is smoothed.

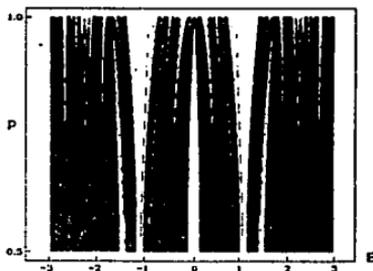


FIG. 4. Band structure as function of  $p$  for the bond problem with type I disorder.

iteration chains ( $\sim 10^{20}$  sites).

Figure 3 shows typical examples of LDOS for the bond problem at the central site of a chain with the type I disorder for  $p=1$  (perfect Fibonacci chain), 0.95, 0.75, and 0.5, respectively. The spectrum at  $p=1$  is the same obtained using other approaches and found to be a Cantor set.<sup>1,4-6</sup> As  $p$  decreases, the gross features of the spectrum are preserved and the spectrum is smoothed. Many of the characteristics of the underlying Fibonacci chain survive even for  $p=0.5$ . The features of the smoothed spectrum have a close resemblance with the spectrum of rational approximants of the Fibonacci chains,<sup>19</sup> it is also interesting to observe that the phonon spectrum of a 3D Penrose tiling is also smoothed when randomized.<sup>20</sup> The band structure of the spectra at different values of  $p$  can be better appreciated in Fig. 4, where energy is plotted vs  $p$ . Observe that the gap at  $E=0$  (absent in a Fibonacci chain) opens up as  $p$  decreases. In contrast with type I, when the type II disorder is introduced, slight deviations from  $p=1$  change the main features of the spectrum.

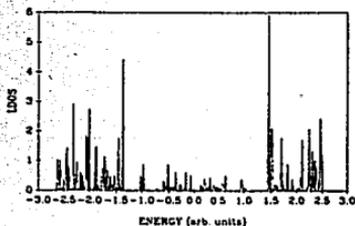


FIG. 5. LDOS, in arbitrary units, at  $p=0.95$  for the bond problem with type II disorder. The features of the spectrum are changed severely with respect to the Fibonacci one.

FALLA DE ORIGEN



FIG. 6. Band structure as function of  $p$  for the on-site problem with type I disorder.

Figure 5 shows the case at  $p = 0.95$ .

For the on-site problem, the LDOS obtained when  $p = 1$  with formulas (11) or (12) coincides with previous calculations.<sup>21,22</sup> Figure 6 shows the bands of the spectra as a function of  $p$  for type I disorder. As in the band problem, in this case the gross structure of the spectrum preserves the characteristics of the underlying Fibonacci chain. Also, for the type II disorder, small variations of  $p$  change the structure of the spectrum, in a similar fashion to that reported in Ref. [21], where the authors consider

random site energy fluctuations in Fibonacci chains.

Summarizing, we have introduced a renormalization-group scheme to calculate the electronic spectrum of random Fibonacci chains, with the following characteristics.

(1) The method is computationally simple and efficient, enabling it to treat long chains with minimum effort.

(2) The Fibonacci chain is treated as a particular case; disorder is introduced dynamically during chain growth, and consists of phason defects which preserve the random tilting properties of the chain.

(3) Although the LDOS was calculated at the central site, it is not difficult to obtain equations for any other chain site. In fact, one can, in principle, obtain the total trace of the Green's function as in the case of a perfect chain,<sup>14</sup> but in this case the accuracy and computation time is heavily dependent of the number of sites.

(4) The method can be extended to two dimensions and can be useful to study still unknown random tiling effects on the localization problem.

#### ACKNOWLEDGMENTS

We would like to thank C. Wang and R. Barrio for many illuminating discussions on the electronic properties of the Fibonacci chain. We are grateful to David Romeu for assistance in the preparation of the manuscript. One of us (J.L.A.) wishes to thank DGAPA-UNAM and CONACYT of México for its financial support through Grant Nos. IN-104989 and 1759-E9210.

\*Author to whom correspondence should be addressed.

<sup>1</sup>M. Kohmoto, L. P. Kadanoff, and C. Tang, Phys. Rev. Lett. 50, 1870 (1983).

<sup>2</sup>S. Ostlund, R. Pandit, D. Rand, H. J. Schellnhuber, and E. D. Siggia, Phys. Rev. Lett. 50, 1873 (1983).

<sup>3</sup>D. Schechtman, I. Blech, D. Gratias, and J. W. Cahn, Phys. Rev. Lett. 53, 1951 (1984).

<sup>4</sup>J. P. Lu, T. Odagaki, and J. L. Birman, Phys. Rev. B 33, 4809 (1986).

<sup>5</sup>A. Süto, J. Stat. Phys. 56, 525 (1989).

<sup>6</sup>M. Kohmoto, B. Sutherland, and C. Tang, Phys. Rev. B 35, 1020 (1987).

<sup>7</sup>G. Y. Oh, C. S. Ryu, and M. H. Lee, J. Phys. Condens. Matter 4, 8187 (1992).

<sup>8</sup>J. A. Ashraff, J. M. Luck, and R. B. Stinchcombe, Phys. Rev. B 41, 4314 (1990).

<sup>9</sup>J. Q. You, J. R. Yan, J. X. Zhong, and X. H. Yan, Eutophys. Lett. 17, 231 (1992).

<sup>10</sup>T. Fujiwara and H. Tanietsugu, in *Quasicrystals: The State of the Art*, edited by D. P. Divicenzo and P. J. Steinhardt (World Scientific, Singapore, 1991), p. 743.

<sup>11</sup>J. M. Luck and Th. M. Nieuwenhuizen, Europhys. Lett. 2, 257 (1986).

<sup>12</sup>R. Merlin, K. Bajema, R. Clarke, F. Y. Juang, and P. K. Bhattacharya, Phys. Rev. Lett. 5, 1768 (1985).

<sup>13</sup>C. L. Henley, in *Quasicrystals: The State of the Art* (Ref. 10), p. 429.

<sup>14</sup>R. A. Barrio and C. Wang, in *Quasicrystals and Incommensurate Structures in Condensed Matter*, edited by M. José-Yacamán, D. Romeu, V. Castaño, and A. Gómez (World Scientific, Singapore, 1990), p. 448.

<sup>15</sup>C. Wang and R. A. Barrio, *Surface Science*, Vol. 62 of *Springer Proceedings in Physics* (Springer, Berlin, 1992), p. 67.

<sup>16</sup>J. P. Lu and J. L. Birman, Phys. Rev. Lett. 57, 2706 (1986).

<sup>17</sup>C. Godrèche and J. M. Luck, J. Stat. Phys. 55, 1 (1989).

<sup>18</sup>E. N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics*, Vol. 7 of *Springer Series in Solid-State Sciences*, 2nd ed. (Springer, Berlin, 1983).

<sup>19</sup>P. Villaseñor-González, F. Mejía-Lira, and J. L. Morán-López, *Solid State Commun.* 66, 1127 (1988).

<sup>20</sup>Los, T. Janssen, and F. Göbner, *J. Non-Cryst. Solids* (to be published).

<sup>21</sup>Y. Liu and R. Riklund, Phys. Rev. B 35, 6034 (1987).

<sup>22</sup>J. X. Zhong, T. Xie, J. Q. You, and J. R. Yan, Z. Phys. B 87, 223 (1992).

FALLA DE ORIGEN

## **Apéndice C**

# **Efectos de la frustración y localización de estados en la red de Penrose**

**FALLA DE ORIGEN**

## Effects of frustration and localization of states in the Penrose lattice

Gerardo G. Naumis and Rafael A. Barrio

*Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México,  
Apartado Postal 20-364, 01000 México, Distrito Federal, México*

Chumin Wang

*Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México,  
Apartado Postal 70-360, 04510, México, Distrito Federal, México*

(Received 19 April 1994)

The central gap in the density of states and the localization of states on a Penrose lattice are investigated within a tight-binding model for the vertex problem. The results show that the gap is a consequence of frustration. There are surface states within the gap in a finite lattice. The correlation between the appearance of the gap and the localization of states is also studied.

## I. INTRODUCTION

It is well known that the atomic arrangement of solids is essential to determine their physical properties. In fact, the translational symmetry of crystals provides the existence of extended electronic states (Bloch waves) and disorder induces localization of states.<sup>1</sup>

Since 1954, a new type of structure called quasiperiodic,<sup>2</sup> which is intermediate between periodic and disordered solids, has aroused much interest because new physical properties are expected. Quasicrystals (QC's) are generally metallic alloys with a quasiperiodic structure in three dimensions (3D) [e.g., the  $I$  phase in  $\text{NiTi}_2$  (Ref. 3)] and 2D [e.g., the  $T$  phase in  $\text{Al}_x\text{Mn}_{1-x}$  (Ref. 4)]. There are also quasiperiodic systems in 1D, like Fibonacci superlattices which are built with two alternating semiconductors.<sup>5,6</sup> Particularly, the Fibonacci chains provide a simple way to analyze the effects of quasiperiodicity, like the incommensurate folding of the Brillouin zone detected in the Raman spectra of Fibonacci superlattices.<sup>7</sup>

Quasicrystals exhibit an intermediate character between crystals and amorphous; for instance, there is no translational symmetry, like in amorphous materials, but they present sharp diffraction spots like crystals. As for the electronic properties of a QC, we expect intermediate behavior between a crystal and an amorphous solid, for example, in the electronic density of states (DOS) and the localization of states.

In 1D or 2D quasiperiodic systems, three kinds of wave functions coexist: extended, localized, and critical.<sup>8</sup> The critical states are neither localized nor extended; they have self-similar wave functions in real space. For the Fibonacci chain, it has been proved that the spectrum is a Cantor set.<sup>9</sup> However, this chain can only be defined with diagonal (site) or nondiagonal (bond) quasiperiodic sequences, and it does not present another type of topological disorder, like variations in coordination or bond angles, which is an important characteristic in real QC's

in more dimensions. One important effect of these topological variations on the electronic properties is the frustration of the wave function, as we shall show later.

The natural extension of the Fibonacci chain in 2D is the Penrose lattice (PL), which is a quasiperiodic way of filling up a 2D planar space with two kinds of tiles. The PL is the lowest-dimensional model with topological quasiperiodicity, and has the advantage of low-dimensional systems which exhibit the effects of disorder more clearly.<sup>10</sup> It would be useful to understand which properties observed in a Fibonacci chain are also valid for a system in higher dimensions.

There are numerous models to study excitations in the PL (Ref. 11) using first principles Hamiltonians. The obvious choices for the atomic positions in these models are the centers (center model<sup>10,11</sup>) and the vertices of the tiles (vertex model<sup>9</sup>). This latter choice is convenient if one is interested in the connectivity properties of the PL and gives insight into the effects of the topology on the excitation spectra. In this paper we shall study the vertex model.

As pointed out by Tsunetsugu *et al.*,<sup>10</sup> the PL would be most sensitive to topological quasiperiodicity, one effect being the frustration induced in the phases of the wave functions. We show here that this frustration and the nonperiodicity are responsible for the central gap in the DOS of the PL.<sup>11</sup> We do this by separating the PL into two alternating sublattices and by renormalizing one of them. This renormalization maps central states into antibonding states. Then, the frustration of the new lattice inhibits antibonding states which means that there is a gap in the DOS of the PL. Also, the nonperiodicity of the lattice produces different amplitudes on each of the sites, which results in a contraction of the band and localization near the lowest band edge.

This paper is organized as follows. In Sec. II we explain the model Hamiltonian and the construction of the tiles for numerical calculations of the DOS. Section III is devoted to the study of the origin of the central gap. Finally, in Sec. IV we give the conclusions of the work.

## II. ELECTRONIC PROPERTIES OF THE PENROSE LATTICE

Consider a simple tight-binding Hamiltonian for  $s$  electrons, with nearest neighbor interactions

$$H = \sum_{ij} t_{ij} |i\rangle \langle j|, \quad (1)$$

where sites  $i$  and  $j$  are vertices of the PL, and the hopping parameter  $t_{ij}$  is  $-1$  for connected neighbors and 0 otherwise. In this situation one avoids site or bond disorder. Furthermore, all rings of bonds are fourfold and there is no ring statistics. Therefore only the different coordination of each vertex introduces all the effects of quasiperiodicity.

In order to calculate the DOS one needs to diagonalize a matrix of the order of the number of sites and this represents a severe limitation on the size of the lattice, which is undesirable in a quasicrystal, because the finite size effects cannot be easily identified. We have devised a renormalization method to calculate local DOS in an extremely large Fibonacci chain.<sup>12</sup> Since the PL can be regarded as a straightforward extension of the Fibonacci sequence to 2D, the same method can be extended here.

As the Fibonacci chain is defined by two types of sites, or two types of bonds, the PL can be constructed from two basic tiles. It is convenient to consider the Robinson triangles,<sup>13</sup> obtained when one divides a pentagon. In Fig. 1 these two basic units are shown and can be considered as the tiles of generation 1 and 2, respectively. To obtain the tile of generation 3 one joins the two former tiles  $2 \oplus 1$ , as shown in the figure. Observe that the second tile to be joined at each step has to be the mirror image of the original one, which is equivalent to follow the matching rules.<sup>14</sup> The shape of a tile of a given generation is always that of one of the two Robinson triangles, and a given shape is repeated every four generations. The ratio of the areas of two tiles of subsequent generations is the golden ratio  $\tau = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$ .

The extension of the renormalization procedure followed for the Fibonacci chain<sup>12</sup> is carried out by renormalizing all the interior sites in a given generation, leaving all the sites in the border intact. In terms of the equation of motion for the Green's function  $G = (E\mathbf{I} - H)^{-1}$

$$\begin{aligned} [E - E(1)]G(1, 1) &= 1 + T(2)G(2, 1) + T(3)G(5, 1), \\ [E - E(2)]G(2, 1) &= T(2)G(1, 1) + T(3)G(3, 1) + T(2)G(5, 1) + T(2)G(6, 1), \\ [E - E(3)]G(3, 1) &= T(3)G(2, 1) + T(3)G(4, 1) + T(2)G(6, 1), \\ [E - E(4)]G(4, 1) &= T(3)G(3, 1) + T(2)G(5, 1) + T(2)G(6, 1), \\ [E - E(5)]G(5, 1) &= T(3)G(1, 1) + T(2)G(2, 1) + T(2)G(4, 1) + T(1)G(6, 1), \\ [E - E(6)]G(6, 1) &= T(2)G(2, 1) + T(2)G(3, 1) + T(2)G(4, 1) + T(1)G(5, 1). \end{aligned}$$

After renormalizing site 6, one is left with only five equations

$$\begin{aligned} [E - E(1)]G(1, 1) &= 1 + T(2)G(2, 1) + T(3)G(5, 1), \\ [E - E(2) - W22]G(2, 1) &= T(2)G(1, 1) + [T(3) + W22]G(3, 1) + W22G(4, 1) + [T(2) + W12]G(5, 1), \\ [E - E(3) - W22]G(3, 1) &= [T(3) + W22]G(2, 1) + [T(3) + W22]G(4, 1) + W12G(5, 1), \\ [E - E(4) - W22]G(4, 1) &= W22G(2, 1) + [T(3) + W22]G(3, 1) + [T(2) + W12]G(5, 1), \\ [E - E(5) - W11]G(5, 1) &= T(3)G(1, 1) + [T(2) + W12]G(2, 1) + W12G(3, 1) + [T(2) + W12]G(4, 1), \end{aligned}$$

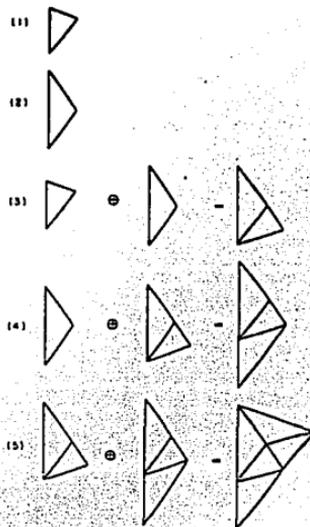


FIG. 1. The two Robinson triangles as Penrose lattices of generations 1 and 2, respectively. Further generations are obtained by joining the previous two.

this is equivalent to eliminating elements with indexes referring to the interior sites by substituting them into the equations involving only the border sites. As an example consider Fig. 2, in which the tile of generation 5 is shown. Observe that there are only three lengths of bonds  $T(1)$ ,  $T(2)$ , and  $T(3)$ , and there is only one interior site labeled 6. The equations of motion are explicitly

FALLA DE ORIGEN

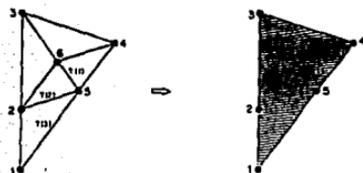


FIG. 2. Penrose lattice of generation 5. There is only one central site labeled 6 and there are three different lengths of bonds. The right-hand side shows the renormalized lattice.

where the effective interactions carry all the information concerning the renormalized site

$$Wij = \frac{T(i)T(j)}{E - E(6)}, \quad i, j = 1, 2. \quad (2)$$

The process of tile growing has to be combined with the renormalization at each step. Figure 3 exemplifies this procedure: One renormalizes the interior sites of lattices of generations 7 and 8 leaving only the border sites. Then one joints the two tiles together, and this results in having two new interior atoms for generation 9, which have to be further renormalized. Care has to be taken to include all the renormalized self-energies properly since in further renormalizations the sites include effective bonds and self-energies. Observe that the number of sites to be renormalized in each step grows as the square root of the total number of sites, which grow exponentially with the generation number. This allows to perform calculations in much larger lattices than by direct diagonalization. Notice that the final PL of fat and skinny rhombuses is obtained by setting all the longest  $T(3)$  and shortest  $T(1)$  bonds to zero.

Figure 4 shows the local DOS at two nearest neighbor sites of a PL of generation 23, containing 14 550 vertices.

It can be observed that apart of a complicated structure of bands and gaps, some peculiarities appear. First, the spectra are symmetrical respect to  $E = 0$ , due to the fact that the lattice is bipartite;<sup>18</sup> i.e., it can be subdivided in two alternating sublattices (say,  $A$  and  $B$ ), and an electron can only hop from an  $A$  site onto a  $B$  site or back. Then, the Schrödinger equation reduces to  $E|j\rangle = -\sum_i |i\rangle$ , where if  $i$  belongs to  $A$ , then  $j$  belongs to  $B$  or vice versa. Therefore, if  $E_n$  is an eigenvalue,  $-E_n$  is always an eigenvalue too, because their eigenfunctions differ only on the sign of the wave function of one sublattice.

Likewise, one observes in Fig. 4 three main features:

- (1) The bandwidth is larger than  $2\langle Z \rangle$ , where the mean coordination number is  $\langle Z \rangle = 4$  in the PL.
- (2) A highly degenerate state at  $E = 0$ .
- (3) A gap separating the states at  $E = 0$  from the rest.

The two first features have been carefully studied. For the bandwidth there are estimations based on a finite size scaling<sup>15</sup> and a mean field approach.<sup>18</sup> In the latter it is supposed that all the amplitudes for each local configuration that appears in the PL are the same. In both cases the maximum eigenvalue is  $E = 4.23$ , which is very close to the numerical result. Concerning the central peak  $E = 0$ , it consists of fractally confined states,<sup>18</sup> which are strictly confined in fractally distributed regions.

Finally, the persistence of the gap around  $E = 0$  in an infinite PL is not clear yet. We have verified that the gap width ( $\Delta$ ) does not diminish beyond  $\approx 0.15$  even for the largest lattices ( $\approx 10^4$  atoms). We noticed a cycle of  $\Delta$  with a four-generation period, which is certainly due to the construction period of the lattice.<sup>16</sup> It is worth mentioning that the method of renormalization allows one to calculate the local DOS in any chosen site, and that the features shown in Fig. 4 are present no matter which site is chosen. We also calculated the integrated DOS and the total DOS and we checked that the gap is also present there.

To examine the localization of electronic states in the PL we calculate the inverse participation ratio (IPR). If the eigenfunction of state  $E_j$  is  $\psi_j = \sum_i C_i(j)|i\rangle$ , then the IPR for the eigenstate  $j$  is defined as

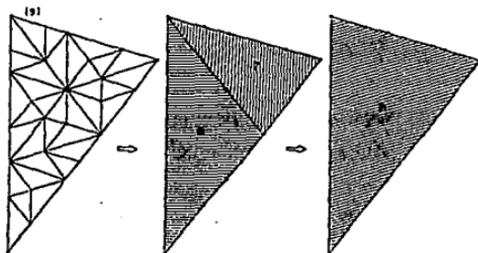


FIG. 3. A sketch representing the renormalization of the central sites of lattices 7 and 8. The final lattice of generation 9 is obtained by renormalizing the border sites between the former two in the equations for the Green's functions.

FALLA DE ORIGEN

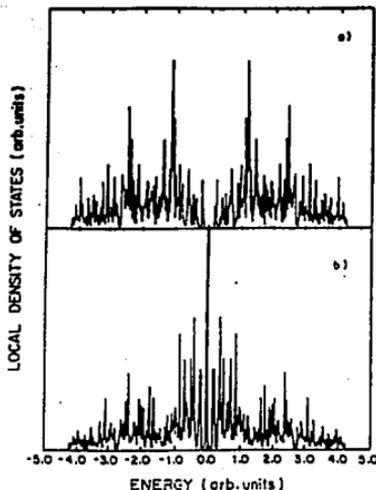


FIG. 4. Local density of states from a Penrose lattice of generation 23. (a) is taken from a three-coordinated site and (b) from a contiguous four-coordinated site.

$$\text{IPR}(j) = \sum_{(i)}^N C_i(j)^4. \quad (3)$$

The IPR is a measure of the reciprocal of the number of sites occupied by the wave function.<sup>8</sup> In Fig. 3 the IPR as a function of the energy for a lattice of  $N = 2176$  sites is shown. Surface states are detected in the IPR by performing several calculations in clusters of different sizes and different boundary conditions.

The IPR values are between 0.06 and  $1/N$  for all the studied Penrose lattices. We can see in Fig. 5 that states near the edges of the band are delocalized with an IPR closer to  $1/N$ . The vertical line of dots at  $E = 0$  corresponds to confined states, since their IPR presents a minimum value (dashed line in Fig. 5), which corresponds to the maximum extension of the fractal regions.

States at  $|E| \leq 0.15$  (with arrows in Fig. 5) are exponentially localized because their IPR does not vary with  $N$ . They also have the highest IPR. These states only present amplitude different from zero near the surface, since Conway's theorem<sup>13</sup> would imply that if there is a configuration of sites with a given amplitude, there should be a similar configuration at a distance not exceeding twice the radius of the configuration. Therefore, they are certainly surface states, not present in the infi-

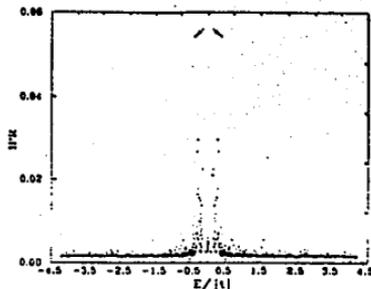


FIG. 5. Inverse participation ratio (IPR) for a Penrose lattice of generation 19 obtained by exact diagonalization. The lowest level corresponds to states with  $C_i(j)$  close to  $1/\sqrt{N}$ . The dashed line indicates the lowest IPR of the degenerate central states, and some surface states with constant IPR are indicated by arrows.

nite lattice.

Figure 5 shows that for energies below  $\approx 0.37$ , the behavior of the IPR changes. All states with an absolute energy below this value have an IPR bigger than the lower IPR value of the central state (dashed line in the figure). This figure shows that states below 0.37 are not extended. We shall discuss their nature in the next section.

More information can be extracted if one plots the quantity "site amplitude contribution" (SAC), defined as

$$\text{SAC}(\nu, j) = \frac{1}{N_\nu} \sum_{i \in \nu} C_i(j)^4, \quad (4)$$

for all sites with coordination  $\nu$  excluding those in the surface. In Fig. 6 this quantity is shown for sites of co-

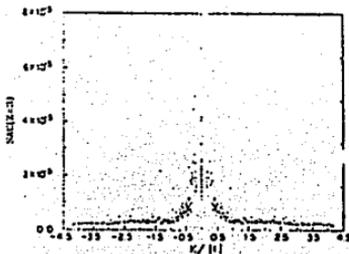


FIG. 6. Site amplitude contribution (SAC) for all sites of coordination 3 in a Penrose lattice of generation 17. Notice the abrupt change of behavior around  $E = 0.37$  and the sudden increase at  $E = 0.37$ .

FALLA DE ORIGEN

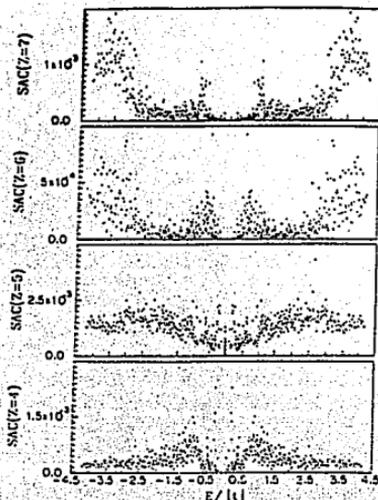


FIG. 7. The same as in Fig. 6 for sites of other coordinations, indicated in each plot. The value of the gap at  $E = 0.2$ , and the other peculiar values  $E = 0.37$  and  $E = 0.92$  are also noticeable here.

ordination 3. Notice that a higher value of this quantity means a larger amplitude in three-coordinated sites of the corresponding eigenfunction. It is seen that the behavior of this plot changes at  $E \approx 0.92$  and at  $E \approx 0.37$ . This latter value corresponds to the localization edge detected in Fig. 5, and the value 0.92 is peculiar because here the

eigenstates with  $|E| \geq 0.92$  have constant amplitude in three-coordinated sites.

In Fig. 7 the corresponding plots for all the other coordinations are shown. Notice that the states near the center of the spectrum present more amplitude in sites of lower coordination, while the higher coordination sites have amplitude near the band edges. This is in agreement with the fact that there is not crossing of the bands when one varies the ratio between the hopping parameter and the site energy.<sup>17</sup> It also supports the statement of level repulsion (quantum chaos) in other quasiperiodic 2D systems.<sup>18</sup>

### III. FRUSTRATION IN $H^2$

Since the PL is bipartite, in this section we renormalize one of the original sublattices and define the corresponding Hamiltonian ( $H^2\psi = E^2\psi$ ). Then we study the consequences of frustration and nonperiodicity in the renormalized lattice.

After renormalizing one of the sublattices the corresponding Hamiltonian is

$$H^2 = t^2 \sum_{i \in A} \left[ Z_i |i\rangle \langle i| + 2 \sum_l |i\rangle \langle l| + \sum_k |i\rangle \langle k| \right]. \quad (5)$$

Sites  $l$  and  $k$  are the second nearest neighbors of  $i$  in the original lattice. If  $i$  is situated in a corner of a rhombus,  $l$  is one of the  $Z_i$  sites on the opposite corner of that rhombus,  $k$  is one of the  $M_i = \sum_j (Z_j - 3)$  second neighbors of  $i$  that belongs to a rhombus that does not have  $i$  as a corner. Here  $j$  is a first neighbor of both  $i$  and  $k$ .

After renormalization, the new lattice (which we shall call  $H^2$ ) is composed by two kinds of regions. One with only triangular cells (regions I) centered in renormalized three-coordinated sites, which do not present crossed (second neighbor like) interactions. The other type presents crossed interactions ( $k$  bonds) and is composed by cells, of six different shapes, defined by  $l$  bonds (regions II in Fig. 8). These cells represent the dual of renormalized vertices with coordination other than 3.

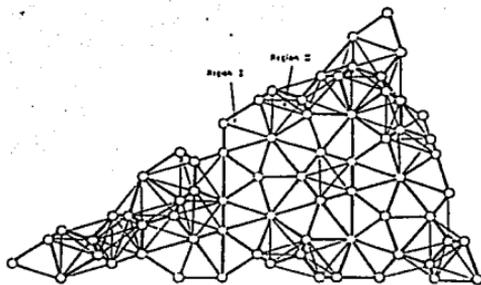


FIG. 8. Sketch of a portion of a  $H^2$  lattice obtained after renormalizing one of the alternating sublattices of the PL. Region I only contains triangular cells and region II presents second-neighbor-like interactions due to  $k$  bonds (in light lines) and first neighbor interactions due to  $l$  bonds (in bold lines).

FALLA DE ORIGEN

This division is due to the fact that in the PL all non-three vertices are connected in lines (called strings) which divide the whole lattice in finite independent parts.<sup>18</sup> These parts contain only three-edge vertices. The same strings confine inside them all eigenstates at  $E = 0$  (the amplitude of the wave function is always zero in the strings).<sup>18,19</sup> As was found by Khomoto and Sutherland<sup>18</sup> almost all non-three-edge vertices are sites with zero amplitude at  $E = 0$ , which means that almost all sites in a region I have zero amplitude too.

The effect of the renormalization is immediately seen when one realizes that the center of the band in the original Hamiltonian is mapped to the minimum eigenvalue of  $H^2$ . Since in  $H^2$  the hopping parameter ( $t^2$ ) is positive, then its highest eigenvalue corresponds to the bonding state while the minimum eigenvalue ( $E^2 = 0$ ) corresponds to an antibonding state in which the amplitude of neighbor sites changes sign (maximum number of nodes).

The bonding limit is always realizable for all structures.<sup>20</sup> The situation is quite different for the totally coherent antibonding state. In a structure with odd-membered rings this is not possible because there are frustrated bonds, i.e., bonds which connect sites with the same phase. Thus, a completely antibonding state is not realizable. The closest one can get to the antibonding state is to arrange the coefficients  $C_i(j)$  of the wave function as to minimize the number of frustrated bonds.<sup>21</sup> Moreover, states near this antibonding state can be expected to be profoundly affected by topological disorder.<sup>21</sup> In the renormalized PL one expects a gap, due to frustration, between the lowest eigenvalue ( $E^2 = 0$ , which is confined) and the first band state. It is also expected a change in the localization properties of states near the antibonding edge.

The edge due to frustration corresponds to a state with the minimum number of frustrated bonds (see the Appendix). As a first approximation let us calculate this edge by assuming that all cells in  $H^2$  have the minimum number of frustrated bonds, and that there are no variations of the amplitudes  $C_i$ . Locally, there are eight types of cells  $\mu$  in the  $H^2$  lattice (using the usual notation<sup>14</sup> for  $\mu$ ; see Table I), or if one considers cells with the same number  $Z_\mu$  of sites as equivalent, there are only five types. Note that the number of sites is exactly the coordination of the renormalized site in the PL at the center of the cell. Adapting the expressions derived in the Appendix, the frustration edge, given by Eq. (A7), can be written as

$$E_f^2 = t^2 \left[ \sum_{\mu} Z_{\mu} P_{\mu} - 2 \sum_{\mu} P(\mu) N_f(\mu) + \sum_{\mu} P(\mu) N_f(\mu) \right]. \quad (6)$$

Here the summations are over cells; therefore  $P(\mu)$  is the proportion of type  $\mu$  vertices in the PL, which is also the relative number of the corresponding dual cells in  $H^2$ . Observe that  $C_i = \sqrt{3/N}$  in  $H^2$  and

TABLE I. Types of cells in  $H^2$ .

Phase $\circ = +1$ $\bullet = -1$	Cell Name ( $\mu$ )	$Z_{\mu}$	$P(\mu)$
	$Q, D$	3	7-8r
	$K$	4	5r-6
	$S_1, S_1, J$	5	10-6r
	$S_4$	6	13r-21
	$S_5$	7	13-8r

$$\sum_{\mu \in A} Z_{\mu} C_i^2 = \sum_{\mu \in PL} P(\mu) Z_{\mu} = \langle Z \rangle = 4.$$

The second term in the right-hand side of Eq. (6) is obtained by counting the total number of bonds  $N_f(\mu)$  in each type of cell. Bonds of type  $k$  in Eq. (5) belong to only one cell, while bonds of type  $l$  share two cells; see Fig. 8. Therefore, the latter should have a weight of  $1/2$ , which cancels the factor of 2 in the hopping parameter of bonds  $l$ . Thus, when counting bonds in a cell all bonds have the same weight. In the third term only the number of frustrated bonds per cell  $N_f(\mu)$  contribute with  $f(m, n) = 4$ , if one does not allow the relative phase between sites  $m$  and  $n$ , connected by a frustrated bond, to deviate from zero.

Inspection of Table I shows that  $N_f(\mu) = Z_{\mu}(Z_{\mu} - 1)/2$  and that

$$N_f(\mu) = \begin{cases} Z_{\mu}(Z_{\mu} - 2)/4 & \text{if } Z_{\mu} \text{ is even,} \\ (Z_{\mu} - 1)^2/4 & \text{if } Z_{\mu} \text{ is odd.} \end{cases}$$

Notice that these numbers are not altered if one makes another choice of the phases, provided that one conserves the number of positive and negative signs. By putting those values in (6) we get

FALLA DE ORIGEN

$$E_J^2 = \sum_{\mu} P(\mu) [Z_{\mu} - 2\{N_i(\mu) - 2N_f(\mu)\}] = \sum_{\mu \text{ odd}} P(\mu). \quad (7)$$

In our case the numerical result, obtained from Table I is

$$E_J^2 = P(Q) + P(D) + P(S) + P(S_1) + P(J) + P(S_2) \\ = \frac{6}{7^4} = 0.8754$$

or  $E_J = 0.9356$ . This number corresponds to the value in Fig. 6 where the wave functions start having amplitude preferentially in sites with  $Z = 3$ . Therefore, based on the ideas in the Appendix let us assume that states below  $E_J^2$  in  $H_2$  present amplitude concentrated at the vertices of cells other than  $Z_{\mu} = 3$  (regions II) in order to reduce frustration.

Let us calculate a minimum bound to these states by assuming that the amplitude at all vertices other than 3 is zero. That is, there is no contribution to the wave function from any triangular cell in this minimal state. All cells become even except cells of type  $S$ , two  $J$  for each  $S_1$  site, and all the  $S_2$ , which become triangles. Therefore, the new lower limit for states with varying amplitude is

$$E_J^2 = P(S) + 3P(S_1) = \frac{154r - 297}{5} = 0.1436$$

or  $E_J = 0.3790$ , which is very close to the calculated value in Fig. 6 and the value  $0.37 < E_1 < 0.53$  obtained by the method of continued fractions.<sup>22</sup>

States between  $E_1$  and  $E_J$  are mainly localized in regions II and they are not fully extended. Examination of the wave functions of states below  $E_1$  suggests that they are fractally localized, in the sense that states close to  $E_1$  concentrate the amplitude inside the surroundings of the fivefold symmetry center ( $S$  or  $S_1$ ) of the largest inflated PL. As the energy is lower, the amplitude peaks around the fivefold centers of PL with smaller rhombuses. Therefore, it is reasonable to say that the lower energy limit for this kind of state is when the amplitude concentrates around all the fivefold sites. An estimate for this limit will give the gap

$$\Delta^2 = P(S) + P(S_1) = \frac{1}{7^4} = 0.0557 \quad (8)$$

or  $\Delta = 0.236$ , in close agreement with the narrow band found by Kumar *et al.*<sup>22</sup> and in our numerical calculation. One should notice that an inflated PL with all the vertices in  $S$  or  $S_1$  has rhombuses with sides of length  $r^3$ , which means that one has a characteristic minimum distance to fractally define the states around the fivefold symmetry centers. This fractality has been observed in PL built with piezoelectrics with a vibrating oil membrane.<sup>23</sup> In these experiments, when the wavelength was comparable to the distance between vertices, or smaller, features at typical distances showing the definition rules of the PL were observed; that is, the amplitude of oscillation is greater where there should be a

fivefold symmetry center inside the rhombuses. As the smallest strings are formed around a  $S_2$  site ( $S_2$  string in Ref. 19) one is tempted to say that the value of the gap should be  $\Delta = \sqrt{(3-\tau)/5}/r^3 = 0.1241$  according to Eq. (8). However, more numerical calculations are required to verify this speculation.

As a token, Eq. (6) can be used to estimate the bonding edge  $E_b$ , noticing that in the bonding limit all bonds are frustrated. Then  $N_f(\mu) = N_i(\mu)$ , which gives

$$E_b^2 = \sum_{\mu} P(\mu) Z_{\mu}^2 = 3Z_{\mu} + 2N_b(\mu) = 66 - 30r \\ = 17.45898$$

or, in the PL,  $E_b = 4.1784$ . The difference with respect to the observed value ( $E_b = 4.23$ ) is due to variations of the amplitudes in each kind of vertex, not taken into account here. If one allows changes in the amplitude, one reproduces the mean field result,<sup>12</sup> which is correct. Note that in a square lattice (SQL)  $E_b = 4.00$ . This difference arises from the fact that in the renormalized SQL the numbers of bonds  $l$  and  $k$  are  $2N$ , but in the renormalized PL the number of bonds  $l$  is  $2N$  while the number of  $k$  bonds is  $N_b = (27 - 15r)/N = 2.729N$ . Another way of saying it is that the widening of the band is a consequence of the coordination fluctuations or the second moment of  $Z$ .

The method presented here can be applied to the center model,<sup>10</sup> in which there is contraction of the upper limit of the band of about 1.32. This is due to frustration in the PL formed with sites of coordination 4, but rings of different shapes, as in  $H_2$ . Assuming again that there are no amplitude variations, this contraction should be given by Eq. (A11)  $E_b = 4N_f/N = 2|1 - P(K) - P(S_1)| = 1.75$ , which is larger than the observed value in the DOS, but very close to the place in which the IPR changes from being constant.<sup>8</sup>

#### IV. CONCLUSIONS

In this paper a detailed examination of the tight-binding spectrum of the vertex model in a PL was presented. Numerical calculations, made in large PL's built with a renormalization procedure, suggest the persistence of the central gap in an infinite PL. A theory based on frustration ideas in a renormalized lattice ( $H_2$ ) was presented, and some peculiar values of the energy were singled out by the theory. At  $E = 0.9356$  the theory predicts a change of the nature of states, progressively delocalized above it and localized in specific regions to reduce frustration below it due to amplitude variations. At  $E = 0.3790$  a lower limit for these localized states in regions of low frustration is found, and as one lowers the energy the states are fractally localized around points of fivefold symmetry. We also found that  $E = 0.236$  represents an estimation for the lower limit for these fractally localized states, and therefore an estimation of the gap. The numerical calculations in finite PL agree extremely well with these values of the energy, except that some states below 0.2 are found in the calculations. Some of

these states are evidently due to finite size effects, and are confined to the surface of the lattice. However, some states between  $E = 0.154$  and  $0.23$  conserve some of the fractal properties around fivefold centers. More theoretical investigation is required to fully understand the states between  $0.15$  and  $0.37$ . This work is currently in progress. The theory can be applied to other quasiperiodic lattices as the PL central model or octagonal quasicrystals.

#### ACKNOWLEDGMENTS

We are thankful to R. B. Stinchcombe, D. Sherrington, and D. Weaire for useful comments. We acknowledge M.F. Thorpe for pointing out to us the properties of  $H_2$ . This work was supported in part by DGAPA-UNAM under Grant No. IN-103493, and by the Commission of the European Communities through Contract No. CII-CT90-0564 (DSCN).

$$E_0 = \langle M | H | M \rangle = \sum_i \left( Z_i \langle M | i \rangle \langle i | M \rangle + \sum_j V_{ij} \langle M | i \rangle \langle j | M \rangle \right) \quad (A3)$$

The term  $\langle M | i \rangle \langle i | M \rangle$  always gives  $C_i^2$ . If the bond between  $i$  and  $j$  is not frustrated, then  $\langle M | i \rangle \langle j | M \rangle = -C_i C_j$ . Otherwise, we label sites connected by the frustrated bond by  $m$  and  $n$ , and

$$\langle M | i \rangle \langle j | M \rangle = C_m C_n e^{i(\theta_m - \theta_n)}. \quad (A4)$$

Then,

$$E_0 = \sum_i \left[ Z_i C_i^2 - \sum_j V_{ij} C_i C_j \right] + \sum_{m,n} V_{mn} e^{i(\theta_m - \theta_n)} C_m C_n \quad (A5)$$

The primed summation is carried out over nonfrustrated vertices. We rewrite this expression as

$$E_0 = \sum_i \left[ Z_i C_i^2 - \sum_j V_{ij} C_i C_j \right] + \sum_{m,n} V_{mn} [\exp i(\theta_m - \theta_n) + 1] C_m C_n \quad (A6)$$

In this equation, the sum over  $j$  is now over all the neighbors of site  $i$ . If the last sum is made over frustrated bonds, instead of sites, we get

$$E_0 = \sum_i \left[ Z_i C_i^2 - \sum_j V_{ij} C_i C_j \right] + \sum_{j, \text{bonds}} 2V_{mn} [\cos(\theta_m - \theta_n) + 1] C_m C_n \quad (A7)$$

We can see that there are two contributions to the displacement of the band edge,

$$\Delta_A = \sum_i \left[ Z_i C_i^2 - \sum_j V_{ij} C_i C_j \right] \quad (A8)$$

and

$$\Delta_F = \sum_{j, \text{bonds}} V_{mn} f(m, n) C_m C_n \quad (A9)$$

with

$$f(m, n) = 2[\cos(\theta_m - \theta_n) + 1]. \quad (A10)$$

#### APPENDIX: ESTIMATION OF THE BAND EDGE

Our aim is to find an expression for the band edge of an antibonding state. Suppose that we have the following tight-binding Hamiltonian:

$$H = \sum_i \left( Z_i |i\rangle \langle i| + \sum_j V_{ij} |i\rangle \langle j| \right); \quad (A1)$$

then we construct a wave function with minimal frustration,

$$|M\rangle = \sum_i C_i e^{i\theta_i} |i\rangle. \quad (A2)$$

This wave function is not necessarily an eigenstate of Eq. (A1) but the expectation value of the energy calculated using this function can serve as an approximation of the band edge. Using Eq. (A1) we obtain the expression

One is due to the different amplitudes in each site ( $\Delta_A$ ). For a crystal this term is zero since  $Z_i$  is a constant and all the amplitudes are the same, but for nonperiodic lattices this term may not be zero. The other contribution ( $\Delta_F$ ), is produced by the frustration of the lattice and can be reached either by changing the phase or the amplitudes on sites connected by frustrated bonds. Note that in a periodic lattice this term could be different from zero. For perfectly frustrated bonds in a lattice with constant  $Z$  and  $V_{ij} = V$  for nearest neighbors we have that  $f(m, n) = 4$ , and

$$E_B = 4VN_f/N, \quad (A11)$$

where  $N_f$  is the minimum number of frustrated bonds

As an example, the compression of the DOS due to frustration in a triangular lattice can be calculated. In this case the coordination is 6, and we expect that the DOS limits are 0 and 12 for the Hamiltonian (A1). However, the basic cell of this lattice is a triangle, and we cannot construct an antibonding state. Then, we need to use a trial function with minimal frustration to calculate the lower band edge. The symmetry of the lattice suggest that the greatest difference of phases between sites is  $\pi/3$  with constant amplitude. Then, using Eq. (A10) it is found that  $f(m, n) = 1$  and  $\Delta_A = 0$ . Note that all sites are joined by frustrated bonds. By applying

Eq. (A9), we find that the lower limit of the band is

$$E_0 = \sum_{\text{bonds}} C_m C_n = 3. \quad (A12)$$

The last step follows from the fact that the number of frustrated bonds is equal to the total number of bonds, in this case  $3N$ . All the amplitudes are  $1/\sqrt{N}$ . The example of triangular cells is the only one in which frustration is reduced by distributing the phase uniformly among the sites in the ring. In cells with a larger odd number of sites a variation of the phases does not lead to a smaller frustration with respect to the state in which the phases differences are  $\pi$  in most consecutive sites.

- <sup>1</sup>E.N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics*, 2nd ed., Springer Series in Solid State Sciences, Vol. 17 (Springer, New York, 1983).
- <sup>2</sup>D. Schechtman, I. Blech, D. Gratias, and J.W. Cahn, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1951 (1984).
- <sup>3</sup>T. Janssen, *Phys. Rep.* **168**, 55 (1988).
- <sup>4</sup>J. Reyes, J.G. Pérez-Ramírez, and R. Pérez, *J. Mater. Res.* **3**, 29 (1988).
- <sup>5</sup>R. Merlin, K. Bajema, R. Clarke, F.Y. Juang, and P.K. Bhattacharga, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 1756 (1985).
- <sup>6</sup>M.W.C. Dharma-Wardana, A.H. MacDonald, D.J. Lockwood, J.M. Baribeau, and D.C. Houghton, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1761 (1987).
- <sup>7</sup>C. Wang and R. Barrio, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 151 (1988).
- <sup>8</sup>P. Ma and Y. Liu, *Phys. Rev. B* **39**, 9904 (1989).
- <sup>9</sup>M. Kohmoto, B. Sutherland, and C. Tang, *Phys. Rev. B* **35**, 1020 (1987).
- <sup>10</sup>H. Taunetsugu, T. Fujiwara, K. Ueda, and T. Tokihiro, *Phys. Rev. B* **43**, 8579 (1991).
- <sup>11</sup>J.M. Cabrera-Trujillo, F. Mejía-Lira, and J.L. Moran-Lopez, in *Proceedings of the 2nd. Latin American Workshop on Non-Linear Phenomena*, edited by P. Cordero and R. Benguria (Elsevier, New York, 1991).
- <sup>12</sup>R.A. Barrio and Chumin Wang, in *Quasiperiodic and Incommensurate Structures in Condensed Matter*, edited by M. José Yacamán, D. Romeu, V. Castaño, and A. Gómez (World Scientific, Singapore, 1990), p. 448.
- <sup>13</sup>R. Robinson, *Invent. Math.* **12**, 177 (1971).
- <sup>14</sup>N.G. de Bruijn, *Proc. K. Ned. Akad. Wet. A* **64**, 53 (1961).
- <sup>15</sup>M. Kohmoto and B. Sutherland, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 2740 (1986).
- <sup>16</sup>R.A. Barrio and C. Wang, *J. Non-Cryst. Solids* **153&154**, 375 (1993).
- <sup>17</sup>M. Kohmoto and B. Sutherland, *Phys. Rev. B* **34**, 3849 (1986).
- <sup>18</sup>V.G. Benza and C. Sire, *Phys. Rev. B* **44**, 10343 (1991).
- <sup>19</sup>M. Arai, T. Tokihiro, T. Fujiwara, and M. Kohmoto, *Phys. Rev. B* **38**, 1621 (1988).
- <sup>20</sup>M.H. Cohen, in *Topological Disorder in Condensed Matter*, edited by F. Yonezawa and T. Ninomiya, Springer Series in Solid State Sciences, Vol. 46 (Springer, New York, 1983), p. 122.
- <sup>21</sup>M.H. Cohen, in *Fundamental Physics of Amorphous Semiconductors*, edited by F. Yonezawa, Springer Series in Solid State Sciences, Vol. 25 (Springer, New York, 1981), p. 119.
- <sup>22</sup>V. Kumar, D. Sahoo, and G. Athithan, *Phys. Rev. B* **34**, 6924 (1986).
- <sup>23</sup>R. Montero de Espinosa and M. Torres, *Appl. Phys. Lett.* (to be published).