



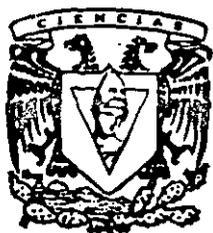
UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

PROPIEDADES FISICAS DE LA CADENA THUE-MORSE

265882

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:
F I S I C O
P R E S E N T A :
MARCO ANTONIO NOGUEZ CORDOBA



DIRECTOR DE ESTUDIOS PROFESIONALES
DR. RAFAEL ANGELO BARRIO PARRALES



FACULTAD DE CIENCIAS
SECCION ESCOLAR



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 esta 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.



UNIVERSIDAD NACIONAL
AVENIDA DE
MEXICO

MAT. MARGARITA ELVIRA CHÁVEZ CANO
Jefa de la División de Estudios Profesionales de la
Facultad de Ciencias
Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo de Tesis: Propiedades físicas de la cadena de Thue-Morse.

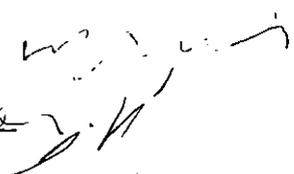
realizado por MARCO ANTONIO NOGUEZ CORDOBA

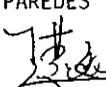
con número de cuenta 93550631 , pasante de la carrera de FISICA

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

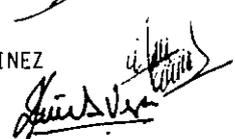
Atentamente

Director de Tesis

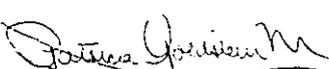
Propietario DR. RAFAEL ANGEL BARRIO PAREDES 

Propietario DR. CHUMIN WANG CHEN 

Propietario DR. WOLF LUIS MOCHAN BACKAL

Suplente DR. ALIPIO GUSTAVO CALLES MARTINEZ 

Suplente DR. JOSE LUIS ARAGON VERA


Consejo Departamental de FISICA
DRA. PATRICIA GOLDSTEIN MENACHE



FACULTAD DE CIENCIAS
DEPARTAMENTO DE FISICA

Al Dr. Rafael Barrio

A mi abuela Cata

Deseo agradecer al Dr. Rafael A. Barrio la oportunidad de trabajar y aprender con él. Así mismo, este trabajo ha sido enriquecido gracias a la revisión y comentarios del Dr. Gerardo Garcia Naumis.

Agradezco también a los profesores que integran el jurado: Dr. José Luis Aragón Vera, Dr. Chumin Wang Chen, Dr. Luis Mochán y al Dr. Alipio Calles por la lectura y comentarios que han hecho de esta tesis.

Todos mis estudios y la necesidad de estudiar física se lo agradezco al apoyo de mis padres Antonio y Marcela; al de mi hermana Marcela, a Josué, al pequeño Matías y a mi tío Xavier.

Este trabajo esta dedicado especialmente a mi abuela Catalina Ortiz Silva que ha brindado su apoyo y cariño en todo momento. No tengo palabras para agradecerle.

A la gente del cubículo: Rosario, Miguel y Fernando el permitirme integrarme a este caótico espacio que me encanta (así como a los agregados culturales: Benjas, Cócoro, Fede) así como la ayuda brindada por Jesús Lara. A los cuates del instituto sobre todo a Ivan, Vanex. Así como a los amigos de la facultad, empezando con Likin y Alambrito (compañeros de departamento y aventuras siderales), Tech, Igor, Jeros, Mitos, Pablo, Alberto, Edgar, Huitzilín, Matías, Aída, Nacho, Adolfo y al Mestre Iván.

A mis amigos lyceanos: From, Danielo (Saluton!), Yves, Tazzer, Clerge, Alex, Chivis y Chela.

A la banda de Capoeira, maromera y jaranera por hacer más soportable este periodo, en especial a Adriana.

Finalmente, este trabajo no se habría podido haber realizado sin el gran amor y cariño de dos personas muy especiales en mi vida: A Yair que me ha acompañado, no solo en este sino en varios viajes, por ya 24 años y a Foquimbora, personaje realmente especial y de los que quedan muy pocos.

Índice General

1	Introducción	2
1.1	Estructura de la materia	2
1.2	Quasicristales y sistemas no periódicos	4
2	Cadena Thue-Morse	9
2.1	Construcción y propiedades de la cadena Thue-Morse	9
2.1.1	Espacio recíproco	11
3	Propiedades de las excitaciones elementales	15
3.1	El Hamiltoniano modelo	15
3.1.1	Caso periódico	17
3.2	Densidad local de estados (LDOS)	18
3.2.1	Diagonalización exacta	19
3.2.2	Matriz de Transferencia	20
3.2.3	Funciones de Green	22
3.3	Método de renormalización	24
3.3.1	Problema de enlaces	25
3.3.2	Problema de sitios	27
3.4	Localización de estados	38
3.4.1	Propiedades de transporte	38
3.4.2	Funciones de onda	44
3.5	Solución exacta para el problema de sitios	46
3.5.1	Cálculo de los extremos de las bandas	46
4	Conclusiones	50
	Bibliografía	53

Capítulo 1

Introducción

*allá adentro es afuera,
es todas partes y ninguna parte,
las cosas son las mismas y son otras,
encarcelado en un icosaedro
hay un insecto tejedor de música
y hay otro insecto que desteje
los silogismos que la araña teje
colgada de los hilos de la luna;*

Octavio Paz

1.1 Estructura de la materia

A través del tiempo, el hombre se ha sentido atraído por la belleza de los cristales. Para los griegos, la transparencia que presentaba el cuarzo era debida a que este cristal se formaba del agua en las bajas temperaturas de los Alpes. De ahí, que el origen del nombre provenga de *crystallos*, que quiere decir “hielo claro”.

El arreglo geométrico de la materia sólida juega un papel fundamental en la definición de las diferentes propiedades mecánicas, térmicas, eléctricas, ópticas y magnéticas de los materiales. A finales del siglo XIX, el descubrimiento de la difracción de los rayos X,

permitió el inicio del estudio de la estructura microscópica de los materiales. Sin embargo, fueron los griegos quienes prefiguraron el papel de las propiedades geométricas e intuyeron que existía una relación entre los sólidos platónicos y los elementos básicos de la materia: así, el tetraedro estaba asociado al fuego, el octaedro al aire, el dodecaedro al agua y el cubo a la tierra.

Un cristal ideal se encuentra constituido por la repetición periódica en el espacio de una celda unidad y puede describirse como una red, que es un conjunto infinito de puntos a los que se les puede asociar átomos, moléculas, iones, etcétera. Las redes de Bravais describen los diferentes arreglos tales que cualquier punto de la red tenga el mismo entorno.

Una estructura periódica, al difractar rayos X, electrones o neutrones, presenta un espectro formado por puntos bien definidos con simetrías características, lo que fue estudiado por W.L. Bragg en 1913. Para explicar este patrón, Bragg describió al cristal como si estuviera constituido por planos paralelos de iones, separados por una distancia d , los cuales funcionan como una rejilla de difracción siguiendo la "Ley de Bragg". Cada uno de los puntos está asociado con una familia de planos, y su intensidad depende del factor de estructura, es decir, del tipo de arreglo de átomos en la celda unidad y su eficacia para difractar. Sin embargo, existen ciertas simetrías rotacionales prohibidas para los patrones de difracción, ya que puede demostrarse [1] que sólo las rotaciones con ángulos iguales a $2\pi/2$, $2\pi/3$, $2\pi/4$ y $2\pi/6$ son compatibles con la traslación.

Si el material que se analiza es un policristal, que se encuentra compuesto por microcristales con direcciones aleatorias, el espectro estará formado por anillos difusos. Por otro lado, el espectro de la materia amorfa, también presenta ciertos patrones anulares que

reflejan las simetrías de corto alcance de los sistemas.

La diferencia fundamental entre cristales y amorfos radica en que los primeros poseen simetría translacional de largo alcance, mientras que los segundos carecen de ésta, aunque pueden presentar simetrías de corto alcance o locales.

Los amorfos no tienen asociada una red recíproca ya que \vec{k} , el número de onda, no es buen número cuántico, es decir la celda unidad tiene que ser considerada como infinita y el espacio recíproco como denso.

1.2 Quasicristales y sistemas no periódicos

En 1984, D. Shechtman [2], observó estructuras que presentaban patrones de difracción con picos de intensidad pero con orden icosaédrico, evidenciada por la simetría rotacional decagonal (ángulo de giro de $2\pi/10$). La muestra se obtuvo al enfriar rápidamente la aleación Al_4Mn . A este tipo de materiales se les empezó a llamar quasicristales.

Diversas explicaciones surgieron para explicar el patrón de difracción con una simetría aparentemente prohibida. El problema en dos dimensiones está relacionado con la imposibilidad de rellenar el plano con polígonos regulares con ángulos internos diferentes a $2\pi/2$, $2\pi/3$, $2\pi/4$ y $2\pi/6$. Sin embargo, si tomamos dos rombos, uno obtuso y otro agudo, podemos rellenar (o teselar) todo el plano. Un posible resultado es la teselación de Penrose [3] (fig.1.1). Este arreglo, a pesar de no ser periódico, si presenta simetría de largo alcance. Si trazamos líneas especiales en los rombos, de acuerdo con la idea de Ammann [4], los segmentos de las líneas se juntan para formar conjuntos de rectas paralelas que se intersectan con ángulos de 72° , evidenciando una simetría pentagonal.

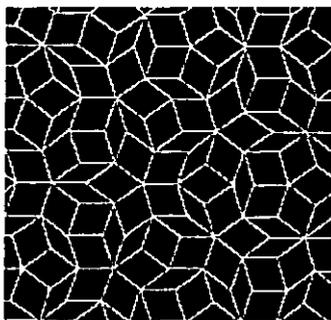


Figura 1.1: Teselación de Penrose

Además, si consideramos la separación de los planos, encontramos que existen dos tipos de distancias, una corta y otra larga cuya razón es $\sigma = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$ (la sección dorada de Pitágoras). En cualquier dirección, estas dos diferentes distancias siguen la secuencia de Fibonacci [5].

La secuencia de Fibonacci no se repite nunca y se puede construir por inflación, utilizando dos diferentes elementos, por ejemplo (a,b), con las siguientes reglas de inflación:

$$a \rightarrow ab$$

$$b \rightarrow a$$

y donde el escalamiento está dado por la “razón dorada”.

La simetría pentagonal aparece muy frecuentemente en el mundo orgánico y el hombre ha tratado de reflejar esta relación en sus obras, por ejemplo en algunos templos griegos cuyas dimensiones se basan en las proporciones de la sección dorada.

El estudio de los sistemas unidimensionales es importante debido a que son buenos

modelos para sistemas reales y al mismo tiempo se pueden resolver matemáticamente con más facilidad. Por otro lado, es interesante señalar que las secuencias generadas por inflación han aparecido en diversas áreas de estudio que van desde las matemáticas, la ciencia de la computación, la criptografía y la física.

En la actualidad, la tecnología permite trabajar con sistemas unidimensionales que se comportan de manera muy similar a los quasicristales unidimensionales. Algunos ejemplos son los cables cuánticos, las superredes construidas con capas de átomos con separaciones secuenciadas y sólidos con orden quasicristalino en 1D y 2D (fase T) como Al-Pd, $\text{Al}_{80}\text{-Cu}_{20}\text{-Mn}_{15}$, por citar algunos.

La secuencia de Thue-Morse es otra que no se repite nunca y fue encontrada por E. Pruhet [6] utilizándola para construir palabras infinitas con un alfabeto de dos letras, que no repitieran tres letras iguales consecutivamente. Sus resultados han sido “redescubiertos” varias veces en diversas ramas del conocimiento: Teoría ergódica, la teoría de autómatas, la teoría de lenguaje y la teoría combinatoria. El nombre de la secuencia se debe a Thue, que la redescubrió estudiando secuencias periódicas en 1906 [7], y por Morse, quien estudió la secuencia en el contexto de la dinámica topológica [8]. Esto ha tenido como consecuencia que la secuencia de Thue-Morse tenga diversas maneras de definirse.

El estudio de la cadena de Thue-Morse, aunque menos conocida que la cadena de Fibonacci, abarca trabajos numéricos, experimentales y analíticos. Experimentalmente se han estudiado desde propiedades termodinámicas, tomando consideraciones sobre la entropía hasta las propiedades electrónicas y fonónicas donde se ha estudiado el factor de estructura estático (difracción), el problema de la localización de electrones y de la estruc-

tura electrónica [9]. En 1987 fue realizada la primera superred Thue-Morse e investigada por medio de dispersión Raman. También ha sido estudiado el patrón de difracción de rayos X de una heteroestructura de GaAs-AlAs realizada a partir de la técnica de epitaxia de haces moleculares (MBE, del inglés Molecular Beam Epitaxy) que permite crear estructuras formadas por láminas muy finas cuya separación sigue la secuencia de Thue-Morse [10], [11]. Por otro lado, los trabajos analíticos se han concentrado en el problema de la naturaleza de los estados de una quasipartícula del sistema en cadenas infinitas usando un modelo Hamiltoniano sencillo [12].

En la presente tesis, se estudiará las propiedades físicas de una cadena de Thue-Morse unidimensional, haciendo un especial énfasis en las propiedades electrónicas.

En la primera parte de este trabajo, se presentan las características de construcción y propiedades geométricas de la secuencia de Thue-Morse. Se analizará de manera especial el factor de estructura estático, que es la cantidad fundamental en difracción.

En la segunda parte, se hará un estudio teórico del comportamiento del espectro de excitaciones de una quasipartícula en este sistema. Para estudiar las características físicas de la cadena de Thue-Morse se empleará un Hamiltoniano modelo simple, de amarre fuerte a primeros vecinos. Para resolver el sistema haremos uso de diferentes métodos:

- 1) Diagonalización del Hamiltoniano de manera exacta en una red finita con diversas condiciones a la frontera.

- 2) Usando funciones de Green para definir un método de renormalización o decimación. Esto permitirá encontrar sus eigenestados locales en un punto de la red en forma recursiva.

3) Por un método analítico, ya que las simetrías existentes en la red así lo permiten.

Se explorarán las ventajas y desventajas de cada método. También se hará una comparación con el caso de la cadena de Fibonacci. El tratamiento del problema completo permite el estudio detallado de las eigenfunciones, y por lo tanto, se pueden inferir propiedades de localización de las excitaciones y su comportamiento ante defectos.

Finalmente, concluiremos con un compendio de las propiedades encontradas de esta red.

Capítulo 2

Cadena Thue-Morse

2.1 Construcción y propiedades de la cadena Thue-Morse

Existen varios métodos para la construcción de la secuencia de Thue-Morse. En cada uno de ellos, la secuencia va creciendo por “generaciones”. Se definen dos diferentes tipos de objetos, $\{a, b\}$ ¹. Usando una regla de inflación se construye la cadena de orden n , de 2^n elementos. Por ejemplo, la secuencia de orden $n + 1$, se construye a partir de la cadena n substituyendo:

$$(a) \quad \text{por} \quad (ab) \tag{2.1}$$

$$(b) \quad \text{por} \quad (ba)$$

¹que en la resolución de problemas se puede asociar a autoenergías, integrales de traslape, alturas de barreras de potencial o a constantes dieléctricas.

Otro método de recursividad, consiste en construir una cadena de generación n , a partir de la cadena de la generación anterior $n - 1$, con la siguiente regla de construcción:

$$C_n = C_{n-1} \oplus C_{n-1}^c \quad (2.2)$$

donde \oplus es la suma directa y las C_{n-1}^c son las imágenes complementarias de las C^n , obtenidas intercambiando a por b y b por a , por ejemplo:

$$C_1 = ab \quad C_1^c = ba \quad C_2 = abba \quad C_2^c = baab$$

Este tipo de construcción pone en evidencia la simetría de espejo alrededor del centro que se genera para todas las secuencias de generación par, y simetría antiespejo para las generaciones impares.

Al escoger como condición inicial $C_0 = a$, tendremos:

$$C_1 = ab$$

$$C_2 = abba$$

$$C_3 = abbabaab$$

$$C_4 = abbabaabbaababba$$

Otra manera de definir la secuencia de Thue-Morse es a partir de los alfabetos $\{1, -1\}$ ó $\{0, 1\}$. Cada sitio de la secuencia esta determinado por una condición inicial y una relación entre los sitios. Para el alfabeto $\{0, 1\}$, partiendo de la condición $\lambda_0 = 0$, las reglas son:

$$\lambda_{2p} = \lambda_p \quad \lambda_{2p+1} = 1 - \lambda_p$$

donde el subíndice p corre sobre los números naturales, de tal manera que se obtiene la secuencia de Thue-Morse:

$$\lambda_0 = 0, \lambda_1 = 1, \lambda_2 = 1, \lambda_3 = 0, \text{ etcétera}$$

Y para $\{-1, 1\}$:

$$\lambda_{2p} = \lambda_p \quad \lambda_{2p+1} = -\lambda_p$$

para todo $p > 0$. Tomando como condiciones iniciales a $\lambda_0 = 1$ y $\lambda_1 = -1$, obtenemos la secuencia: $1, -1, -1, 1, -1, 1, 1, -1, \dots$

De las anteriores definiciones se deducen las siguientes propiedades para la secuencia de Thue-Morse:

i) Se trata de una secuencia determinista no periódica, es decir, no existe una escala que se repita en la secuencia.

ii) La cadena está formada por la misma cantidad de elementos a y b .

iii) La secuencia no contiene subsecuencias de la forma WWW , donde W es cualquier palabra. Es decir no contiene las palabras aaa , $ababab$ ó $abaabaaba$.

iv) El factor de escalamiento entre una generación y otra es dos, por lo que si en una generación dada, tomamos un elemento sí y otro no, obtenemos la generación anterior. Dicho de otra manera, la secuencia infinita es invariante ante la transformación inversa $ab \rightarrow a$ y $ba \rightarrow b$.

2.1.1 Espacio recíproco

La utilización de la difracción en el estudio del estado sólido es fundamental ya que representa una medida directa de la intensidad de dispersión, que es la transformada de

Fourier de la función de la densidad de masa y que está relacionada con el orden de largo alcance que pueda presentar un sistema. De hecho, se puede definir un quasicristal como un sistema cuyo espacio recíproco tiene una dimensión mayor que la del espacio real.

El espectro de Fourier se define como:

$$\varepsilon_n(q) = \sum_{j=0}^{2^n-1} \varepsilon_j \exp(-2i\pi j q) \quad (2.3)$$

donde $\{\varepsilon_j\}$ es la secuencia de Thue-Morse (estamos considerando un sistema con distancias iguales y átomos diferentes). Usando el alfabeto $\{1, -1\}$ y tomando como condiciones iniciales $\varepsilon_0 = 1$ y $\varepsilon_1 = -1$, obtenemos:

$$\varepsilon_n(q) = 1 - \exp(-2i\pi q) - [\exp(-2i\pi q)]^2 + [\exp(-2i\pi q)]^3 - [\exp(-2i\pi q)]^4 + [\exp(-2i\pi q)]^5 \dots \quad (2.4)$$

reagrupando términos tenemos que:

$$\varepsilon_n(q) = 1 - \exp(-2i\pi q) - [\exp(-2i\pi q)]^2 [1 - [\exp(-2i\pi q)]] - [\exp(-2i\pi q)]^4 [1 - [\exp(-2i\pi q)]] + \dots$$

y factorizando:

$$\varepsilon_n(q) = (1 - \exp(-2i\pi q)) \left[1 - [\exp(-2i\pi q)]^2 - [\exp(-2i\pi q)]^4 + [\exp(-2i\pi q)]^6 \dots \right] \quad (2.5)$$

En el segundo paréntesis de la parte derecha de la ecuación, obtenemos un desarrollo muy parecido a (2.4), excepto que las potencias sobre las exponenciales aumentan en múltiplos de dos, lo que nos permite reagrupar y factorizar:

$$\varepsilon_n(q) = (1 - \exp(-2i\pi q)) (1 - [\exp(-2i\pi q)]^2) \left[1 - [\exp(-2i\pi q)]^4 + \dots \right]$$

Haciendo esto recursivamente obtenemos:

$$\varepsilon_n(q) = \prod_{0 \leq j < n} (1 - \exp(-2i\pi q 2^j))$$

Por lo tanto, el factor de estructura estático es:

$$|\varepsilon_n(q)|^2 = 2^n \prod_{0 \leq j < n} (1 - \cos 2\pi q 2^j) \quad (2.6)$$

El factor de estructura está compuesto por funciones que se escalan en potencias de dos. Por otro lado, se observa que existe un período de 2π y el espectro es simétrico alrededor de $(2n + 1)\pi$ y además es denso, ya que la amplitud entre los picos y los *gaps* se hace cada vez más pequeña.

Es interesante comparar este resultado con el espectro de la cadena de Fibonacci, el cual es un conjunto de Cantor. El patrón de difracción de esta cadena unidimensional quasiperiódica llena densamente el espacio de Fourier con lo que se concluye que la densidad de estados tendrá una infinidad de brechas, además de ser fractal, lo cual no ocurre con la cadena de Thue-Morse.

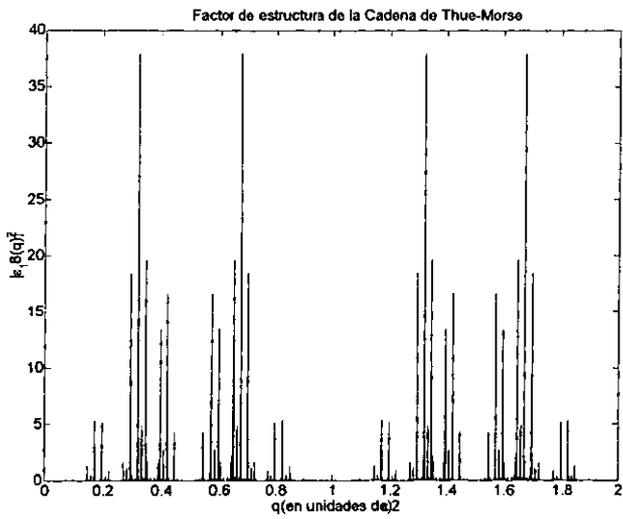


Figura 2.1: Factor de estructura estático de la cadena Thue-Morse

Capítulo 3

Propiedades de las excitaciones elementales

3.1 El Hamiltoniano modelo

Las excitaciones elementales como los electrones, fonones, magnones y plasmones juegan un papel fundamental en la resolución de problemas de estado sólido. El Hamiltoniano de estos diferentes sistemas se puede reducir a una estructura básica modelo, donde las interacciones se parametrizan y sólo se consideran interacciones a primeros vecinos. El Hamiltoniano de “amarre fuerte” se puede escribir como:

$$H = \sum_i (\epsilon_i - 2\alpha t_i) |i\rangle \langle i| + \sum_i t_i (|i\rangle \langle i+1| + cc)$$

donde $|i\rangle$ crea una excitación en el sitio i y $\langle i|$ la destruye. ϵ_i es la energía del sitio y t_i es la integral de salto entre primeros vecinos.

Un Hamiltoniano clásico de fonones isotrópico se obtiene al poner $\alpha = 1$ y se puede tratar el caso de desorden en las masas o en las constantes de los resortes. El problema de los magnones también se puede estudiar con los operadores quasibosónicos pertinentes. Para estudiar las propiedades electrónicas del sistema, suponemos que en cada sitio hay un electron tipo s , por lo que α tiene que ser cero. Entonces:

$$\begin{aligned} H &= \sum_i |i\rangle \epsilon_i \langle i| + \sum_i t_i (|i\rangle \langle i+1| + c.c.) \\ &\equiv D + W \end{aligned} \quad (3.1)$$

El conjunto $\{|i\rangle\}$ normalmente representa las funciones de Wannier asociadas al sitio i , que forman una base ortonormal y completa, pero en la presente aproximación representa cualquier base ortonormal en el espacio real.

Podemos dividir el Hamiltoniano en dos partes; la primera (D) corresponde a la autoenergía e involucra a elementos de matriz diagonales, mientras que la segunda (W) corresponde a las energías de transferencia o de enlace. Definimos dos tipos de desorden, el primero que depende de los términos de la diagonal o “problema de sitios”, y el que involucra a los términos fuera de la diagonal, o “problema de enlaces”. Para los dos casos, utilizamos como elementos básicos dos tipos diferentes de autoenergía $\{\epsilon_A, \epsilon_B\}$ o de valores de las integrales de salto $\{t_A, t_B\}$. Construimos cadenas de Thue Morse utilizando las reglas previamente descritas y escogiendo un primer elemento como condición inicial.

3.1.1 Caso periódico

Antes de entrar de lleno en la secuencia de Thue-Morse, es importante describir la solución del problema periódico, donde el tratamiento matemático es muy simple. Las funciones de onda se pueden escribir como “ondas de Bloch” que se extienden a lo largo de todo el cristal:

$$\Psi(\vec{k}, \vec{r}) = u(\vec{k}, \vec{r}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$$

donde la función $u(\vec{k}, \vec{r})$ tiene la periodicidad de la red y modula el término que representa a las ondas planas. La importancia del número de onda de los electrones es fundamental ya que nos caracteriza el sistema, debido a que se puede establecer una red recíproca en el espacio k . Las energías permitidas del sistema forman una estructura de bandas en el espacio recíproco.

Podemos representar el estado de cada sitio, en función de las k 's.

$$|j\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikr} |k\rangle$$

El Hamiltoniano es diagonal en esta representación:

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

donde ξ es un valor constante que fija el cero de la energía. Si a es la separación entre dos sitios de la cadena, el valor de $t(k)$ es:

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

que es la relación de dispersión. Los eigenestados del sistema son funciones de onda extendidas (ondas de Bloch), y cualquier estado es la suma de ondas planas.

El método más directo para conocer los eigenvalores del sistema es diagonalizar directamente el Hamiltoniano. Sin embargo, esto resulta ineficiente, ya que para poder minimizar los efectos de la superficie se necesitaría estudiar cadenas muy grandes, lo cual significaría una matriz de dimensiones grandes. Otra manera de abordar el problema sería utilizar las propiedades de simetría inflacionaria de la cadena y de las consecuentes relaciones de recurrencia, utilizando la *matriz de transferencia* [13]. Un tercer método resolvería el problema a través de las *funciones de Green*, con el que indirectamente obtenemos cualquier cantidad medible del sistema a partir de la densidad local de estados (LDOS por *local density of states*).

3.2 Densidad local de estados (LDOS)

Al número de estados en un intervalo de energía entre E y $E + dE$, se le llama densidad de estados. Si bien, se trata de un concepto asociado a los sistemas de cristales ideales, su definición más formal abarca a los sistemas no periódicos:

$$D(E) = \sum_n \delta(E - E_n)$$

en donde se tiene que cumplir que n sea un buen número cuántico para el sistema, es decir que etiqüete a cada uno de los estados propios. Para los cristales, el número cuántico que se utiliza es k , el número de onda, que etiqueta a los estados extendidos. En un sistema no periódico las variaciones locales determinarán en cada sitio condiciones especiales que se reflejarán en la densidad local de estados (LDOS), definida [14] como:

$$\rho_i(E) = \sum_n |\langle i | \phi_n \rangle|^2 \delta(E - E_n) \quad (3.2)$$

donde

$$H |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle \quad (3.3)$$

Sólo los eigenestados con sus eigenvalores E_n contribuyen a la densidad de estados $\rho(E)$ en el sitio i , ya que $\langle i | \phi_n \rangle$ es la proyección del eigenestado del sistema sobre cada sitio i .

3.2.1 Diagonalización exacta

El Hamiltoniano del sistema, para el problema diagonal, se representa en la base de sitios de la siguiente manera (en este caso para $n = 4$):

$$H = \begin{pmatrix} \varepsilon_A & -1 & 0 & 0 \\ -1 & \varepsilon_B & -1 & 0 \\ 0 & -1 & \varepsilon_B & -1 \\ 0 & 0 & -1 & \varepsilon_A \end{pmatrix}$$

donde los términos de las autonegías en la diagonal siguen la secuencia de Thuc-Morse y donde el valor de la integral de salto se ha escogido como $t = -1$. Conforme la cadena va creciendo, la dimensión de la matriz hace que el cálculo ocupe mucho tiempo, lo cual lo hace muy impráctico. Con este método, se logró obtener los eigenvalores para la generación $n = 11$, es decir, de 2048 átomos.

La diagonalización exacta nos provee de todos los eigenvalores del sistema, lo que nos permite graficar la densidad de estados total, agrupando los diferentes valores de

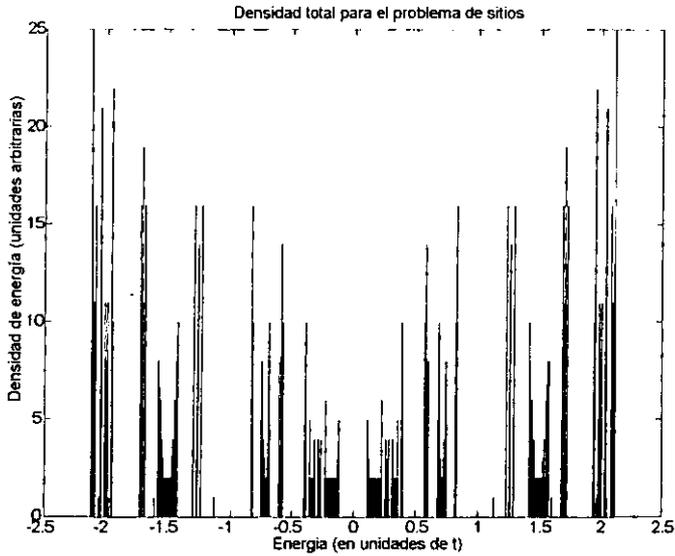


Figura 3.1: Densidad total obtenida diagonalizando el Hamiltoniano para el problema de sitios

las energías de tal manera que podemos representar el número de estados por unidad de energía. Para el caso $n = 11$, obtenemos la siguiente densidad total del sistema (fig.3.1). Es interesante observar que existe una simetría axial alrededor de $x = 0$. Volveremos a encontrar esta simetría para el espectro de energías del sistema con desorden en los enlaces.

3.2.2 Matriz de Transferencia

Siguiendo el ejemplo de la mecánica estadística en una dimensión, introducimos la matriz de transferencia $M(i)$ del sistema, que se define a partir de la ecuación de Schrödinger como:

$$\begin{pmatrix} \Psi_{i+1} \\ \Psi_i \end{pmatrix} = M(i) \begin{pmatrix} \Psi_i \\ \Psi_{i-1} \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

En donde Ψ_i es la función de onda, correspondiente a un eigenestado, asociado a un valor de la energía del sistema en el sitio i .

Para el problema de sitios utilizamos la ecuación de Schrödinger:

$$\Psi_{i+1} + \Psi_{i-1} + V_i \Psi_i = E \Psi_i$$

en donde V_i es la autoenergía de los átomos que toman los valores ε_A ó ε_B y $t = 1$, según la secuencia de Thue-Morse. En esta caso, la matriz de transferencia, de dimensión 2×2 es:

$$M(i) = \begin{bmatrix} E - V_i & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Para el caso del problema de desorden en los enlaces, tomamos la ecuación de "amarre fuerte":

$$t_{i+1} \Psi_{i+1} + t_i \Psi_{i-1} = E \Psi_i$$

en donde t_{i+1} y t_i denotan los valores que pueden tomar las integrales de salto. La matriz de transferencia es entonces:

$$M(i) = \begin{bmatrix} \frac{E}{t_{i+1}} & -\frac{t_i}{t_{i+1}} \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

En ambos casos las aplicaciones sucesivas de la matriz de transferencia dan los valores de la función de onda para cualquier sitio de la red:

$$\begin{pmatrix} \Psi_{N+1} \\ \Psi_N \end{pmatrix} = M(N)M(N-1)M(i-2)\dots M(2)M(1) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_0 \end{pmatrix} = \prod_N M_N \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_0 \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

A partir de (3.6), podemos obtener el espectro de energías, buscando los valores para los cuales Ψ_N no crezca exponencialmente, lo cual nos lleva a la condición de que el módulo del eigenvalor de $\prod M_N$ tiene que ser la unidad. La condición más general para que una autoenergía se encuentre en el espectro es [15]:

$$\left| \text{Tr} \left(\prod M_i \right) \right| \leq 2 \quad (3.7)$$

La utilidad del método de la matriz de transferencia es muy grande, ya que nos permite calcular los diferentes valores de la función de onda para graficarla, así como la posibilidad de abordar el problema de manera analítica, utilizando las relaciones de recurrencia entre las trazas.

3.2.3 Funciones de Green

El otro método consiste en utilizar las funciones de Green que se definen como la solución de la ecuación diferencial inhomogénea de tipo:

$$(z - L(\vec{r}))G(\vec{r}, \vec{r}'; z) = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

sujeta a determinadas condiciones a la frontera para r y r' , y donde z es un número complejo.

Sea $\{\phi_n(\vec{r})\}$ el conjunto ortonormal de las eigenfunciones de $L(\vec{r})$, operador que es diferencial, lineal, hermitiano e independiente del tiempo. Se cumple entonces que:

$$(z - L)G = I$$

$$L|\phi_n\rangle = \lambda_n |\phi_n\rangle$$

Si todos los valores de $z - L$ son no nulos; es decir si $z \neq \{\lambda_n\}$ entonces G se puede expresar como:

$$G(z) = \frac{I}{z - L} = \sum_n \frac{|\phi_n\rangle \langle \phi_n|}{z - \lambda_n}$$

Ahora bien, si $z = \lambda_n$, G tiene polos en los eigenvalores de H por lo tanto, las ecuaciones de movimiento para los estados electrónicos $|i\rangle$, son:

$$(E - \varepsilon_i) g_{ii} = t_{i-1} g_{i,i-1} + t_i g_{i,i+1} + 1 \quad (3.8)$$

Este sistema consiste en un conjunto de ecuaciones simultáneas cuyo orden es el número de sitios m en una cadena de generación n , donde $m=2^n$.

La función de Green $G(z)$ tiene polos en los eigenvalores de H . Podemos definir entonces por medio de un límite:

$$\langle i|G^\pm(E)|j\rangle = \lim_{s \rightarrow 0^+} \langle i|G(E \pm is)|j\rangle$$

Usando el hecho de que G es diagonal en la misma representación en que H es diagonal obtenemos:

$$\langle i|G(E \pm is)|j\rangle = \sum_n \frac{\langle i|\phi_n\rangle \langle \phi_n|j\rangle}{E \pm is - E_n}$$

Y usando la identidad:

$$\lim_{y \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm iy} = p \left(\frac{1}{x} \right) \mp i\pi\delta(x)$$

donde p es la parte principal, obtenemos para los elementos diagonales de la matriz:

$$\langle i | G^\pm(E) | i \rangle = p \sum_n \frac{\langle i | \phi_n \rangle \langle \phi_n | i \rangle}{E - E_n} - i\pi \sum_n |\langle i | \phi_n \rangle|^2 \delta(E - E_n)$$

De ahí, recordando la definición de la densidad local 3.2, tenemos una nueva forma de definirla:

$$\rho_i(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle i | G^\pm(E) | i \rangle$$

3.3 Método de renormalización

Para resolver el problema de cadenas muy grandes, se utiliza un método de renormalización, que nos permite simplificar el número de ecuaciones y usar menos recursos computacionales.

Existen diversos métodos de renormalización utilizados para simplificar las ecuaciones. El método propuesto por Barrio y Wang [16] para la cadena de Fibonacci va eliminando en cada generación las coordenadas de los sitios centrales de la cadena y es el que se pondrá en práctica para el problema de Thue-Morse, ya que el esfuerzo computacional crece sólo linealmente con n .

Las propiedades espectrales del sistema se obtienen resolviendo el conjunto de ecuaciones para las funciones de Green de la red unidimensional, donde los elementos de matriz de la función de Green retardada son $G_{ij} = \langle i | G(Z) | j \rangle$ donde $Z = E + i\eta, \eta \rightarrow 0$.

La ecuación de Green asociada al sistema se encuentra dada por:

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

Introduciendo el Hamiltoniano de enlace fuerte y desarrollando, obtenemos:

$$(E - \epsilon_m)G_{lm} = \delta_{lm} + t_m G_{l,m+1} + t_{m-1} G_{l,m-1}$$

Las ecuaciones de movimiento para las funciones de Green son análogas a (3.8), excepto por un término inhomogéneo.

3.3.1 Problema de enlaces

Para describir el problema "fuera de la diagonal" para un sólo enlace, se necesitan cuatro ecuaciones de movimiento:

$$EG_{ii}(E) = 1 + t_l G_{id}(E) \quad (3.9)$$

$$EG_{dd}(E) = 1 + t_l G_{di}(E)$$

$$EG_{id}(E) = t_l G_{ii}(E)$$

$$EG_{di}(E) = t_l G_{dd}(E)$$

donde i y d etiquetan el sitio izquierdo y el derecho respectivamente. t_l es la integral de salto para sitios enlazados por un enlace a .

La idea es resolver estas ecuaciones para $n > 0$, eliminando las coordenadas de los sitios centrales y así reescribir las ecuaciones resultantes de la misma manera que en el conjunto (3.9) pero con cantidades renormalizadas. Este procedimiento puede repetirse

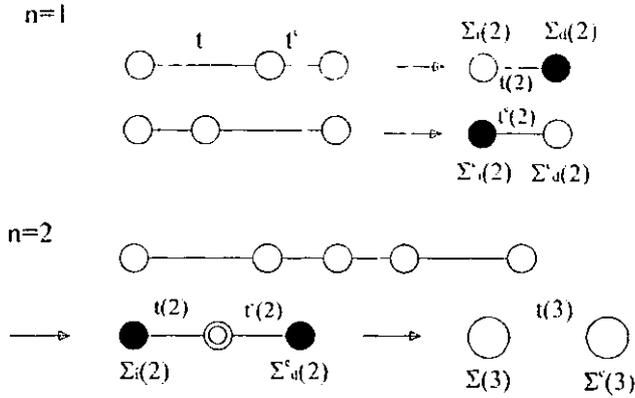


Figura 3.2: Esquema de renormalización para el problema de enlaces, a partir de la cadena con 3 átomos.

iterando la transformación hasta obtener un sólo grado de libertad. Esta transformación exhibe puntos fijos, donde los parámetros no cambian sus valores bajo la transformación.

Para $n = 1$, se tendrían 9 ecuaciones que describen el sistema, ya que tenemos tres átomos que constituyen la cadena.

$$\begin{aligned}
 EG_{ii} &= 1 + t_l G_{oi} & EG_{io} &= t_l G_{oo} & EG_{id} &= t_l G_{od} \\
 EG_{oi} &= t_s G_{di} + t_l G_{ii} & EG_{oo} &= 1 + t_s G_{do} + t_l G_{id} & EG_{od} &= t_s G_{dd} + t_l G_{id} \\
 EG_{di} &= t_s G_{oi} & EG_{do} &= t_s G_{oo} & EG_{dd} &= 1 + t_s G_{od}
 \end{aligned}$$

Al renormalizar, obtenemos dos átomos virtuales y una sola integral de salto dependiente de la energía, por lo que el caso se simplifica formalmente al de $n = 0$ (ver figura 3.2).

Los elementos de G relacionados con el sitio central se sustituyen en las ecuaciones de los extremos de la cadena, restando las siguientes ecuaciones de movimiento:

$$(E - \Sigma_i(1))G_{ii} = 1 + t(1)G_{id}$$

$$(E - \Sigma_d(1))G_{dd} = 1 + t(1)G_{di}$$

$$(E - \Sigma_d(1))G_{id} = t(1)G_{ii}$$

$$(E - \Sigma_i(1))G_{di} = t(1)G_{dd}$$

Para la cadena $n = 2$, la renormalización implica la conexión de la cadena para $n = 1$ con su complemento. La energía del sitio central es entonces la suma de las energías del extremo derecho de la cadena de la generación anterior, con el extremo izquierda de su complemento.

Repitiendo este proceso, las relaciones de recurrencia para las energías y para el valor de las integrales de traslape son:

$$\begin{aligned}\Sigma_o(n) &= \Sigma_d(n-1) + \Sigma_i^c(n-1) \\ \Sigma_i(n) &= \Sigma_i(n-1) + \frac{[t(n-1)]^2}{E - \Sigma_o(n)} \\ \Sigma_d(n) &= \Sigma_d(n-1) + \frac{[t^c(n-1)]^2}{E - \Sigma_o(n)} \\ t(n) &= \frac{t(n-1)t^c(n-1)}{E - \Sigma_o(n)}\end{aligned}$$

3.3.2 Problema de sitios

Para obtener las relaciones de recurrencia del problema de sitios, observamos cómo se genera la secuencia de Thue-Morse utilizando el método de renormalización con dos diferentes autoenergías $\{\varepsilon_A, \varepsilon_B\}$ y un valor constante t . De aquí en adelante, utilizaremos

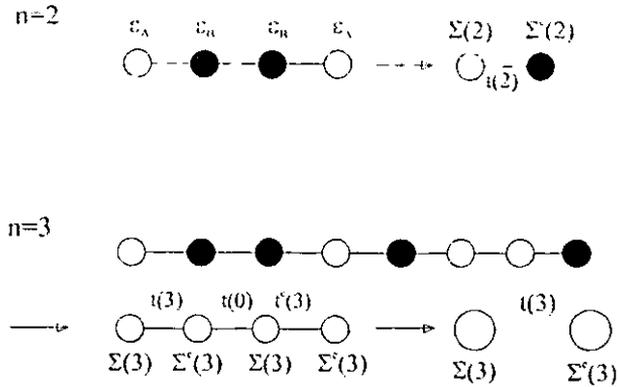


Figura 3.3: Esquema de renormalización para el problema de sitios.

para los cálculos numéricos $\varepsilon_A = 0.5$, $\varepsilon_B = -0.5$ y $t = -1$.

En esta caso, a diferencia del problema de enlaces, hay que empezar a renormalizar los dos sitios centrales de la cadena de cuatro átomos ($n = 2$). Las generaciones subsecuentes serán formadas por la generación anterior, su complemento y un enlace t que las une a las dos anteriores (ver figura 3.3). Las ecuaciones de renormalización son:

$$\begin{aligned}\Sigma_1(2) &= \varepsilon_A + \frac{t^2(E - \varepsilon_B)}{(E - \varepsilon_B)^2 - t^2} \\ \Sigma_2(2) &= \varepsilon_A + \frac{t^2(E - \varepsilon_B)}{(E - \varepsilon_B)^2 - t^2} \\ t(2) &= \frac{t^3}{(E - \varepsilon_B)^2 - t^2}\end{aligned}$$

Para $n = 3$, tenemos que obtener la renormalización del complemento de la cadena

de generación $n = 2$, de lo que obtenemos:

$$\begin{aligned}\Sigma_3(2) &= \varepsilon_B + \frac{t^2 (E - \varepsilon_A)}{(E - \varepsilon_A)^2 - t^2} \\ \Sigma_4(2) &= \varepsilon_B + \frac{t^2 (E - \varepsilon_A)}{(E - \varepsilon_A)^2 - t^2} \\ t(2) &= \frac{t^3}{(E - \varepsilon_A)^2 - t^2}\end{aligned}$$

Podemos reescribir estas energías como: $\Sigma_1(2) = \Sigma_2(2) = \Sigma(2)$ y $\Sigma_3(2) = \Sigma_4(2) = \Sigma^c(2)$.

Con lo que obtenemos una forma general, para describir la renormalización para la simetría antiespejo (n impar) con cuatré átomos virtuales. Para la simetría par, volvemos a proceder de la misma manera, lo que nos arroja los siguientes resultados:

$$\begin{aligned}\Sigma_1(3) &= \Sigma(2) + \frac{[t(2)]^2 (E - \Sigma^c(2))}{(E - \Sigma(2)) (E - \Sigma^c(2)) - t^2} = \Sigma(3) \\ \Sigma_2(3) &= \Sigma^c(2) + \frac{[t^c(2)]^2 (E - \Sigma(2))}{(E - \Sigma(2)) (E - \Sigma^c(2)) - t^2} = \Sigma^c(3) \\ \Sigma_3(3) &= \Sigma^c(2) + \frac{[t^c(2)]^2 (E - \Sigma(2))}{(E - \Sigma(2)) (E - \Sigma^c(2)) - t^2} = \Sigma^c(3) \\ \Sigma_4(3) &= \Sigma(2) + \frac{[t(2)]^2 (E - \Sigma^c(2))}{(E - \Sigma(2)) (E - \Sigma^c(2)) - t^2} = \Sigma(3) \\ t(3) &= \frac{t \cdot t(2) \cdot t^c(2)}{(E - \Sigma(2)) (E - \Sigma^c(2)) - t^2} = t^c(3)\end{aligned}$$

Tenemos entonces, una alternancia en las ecuaciones de renormalización, según sea la simetría del sistema.

Siguiendo con el mismo método de la renormalización podemos calcular la autocorrelación en el sitio central de la cadena de cualquier generación:

$$G_{oo} = \left\{ E - \Sigma_o(n) - \frac{[t(n-1)]^2}{E - \Sigma_i(n-1)} - \frac{[t^c(n-1)]^2}{E - \Sigma_o^c(n-1)} \right\}^{-1}$$

En el caso del problema de sitios, tenemos que tomar en cuenta que en el proceso de renormalización no se presenta un único sitio central, ya que en cada generación vamos renormalizando sobre cuatro átomos virtuales, por lo que la densidad de estados se puede calcular en cualquiera de los dos sitios centrales. Por otro lado, también es preciso considerar la simetría de la generación. Por ejemplo, para el caso par con simetría espejo, las funciones de Green de los sitios centrales son:

$$G_{c1c1}(par) = \frac{1}{E - \Sigma^c(n-1) - \frac{t^2(n-1)}{E - \Sigma(n-1)} - \frac{t^2(E - \Sigma(n-1))}{(E - \Sigma^c(n-1))(E - \Sigma(n-1)) - [t^c(n-1)]^2}}$$

$$G_{c2c2}(par) = \frac{1}{E - \Sigma^c(n-1) - \frac{[t^c(n-1)]^2}{(E - \Sigma^c(n-1))} - \frac{t^2(0)(E - \Sigma^c(n-1))}{(E - \Sigma^c(n-1))(E - \Sigma(n-1)) - [t^c(n-1)]^2}}$$

Para el caso de las generaciones impares, la densidad local para uno de los sitios centrales es:

$$G_{c1c1}(impar) = \frac{1}{E - \Sigma^c(n-1) - \frac{t^2(n-1)}{E - \Sigma(n-1)} - \frac{t^2(E - \Sigma^c(n-1))}{(E - \Sigma^c(n-1))^2 - [t^c(n-1)]^2}}$$

La densidad local de estados en el sitio central de la cadena está relacionada directamente con la función G_0 por la siguiente relación:

$$\rho_o(E) = \left(-\frac{1}{\pi}\right) ImG_{\infty}$$

ya que la densidad es tal que:

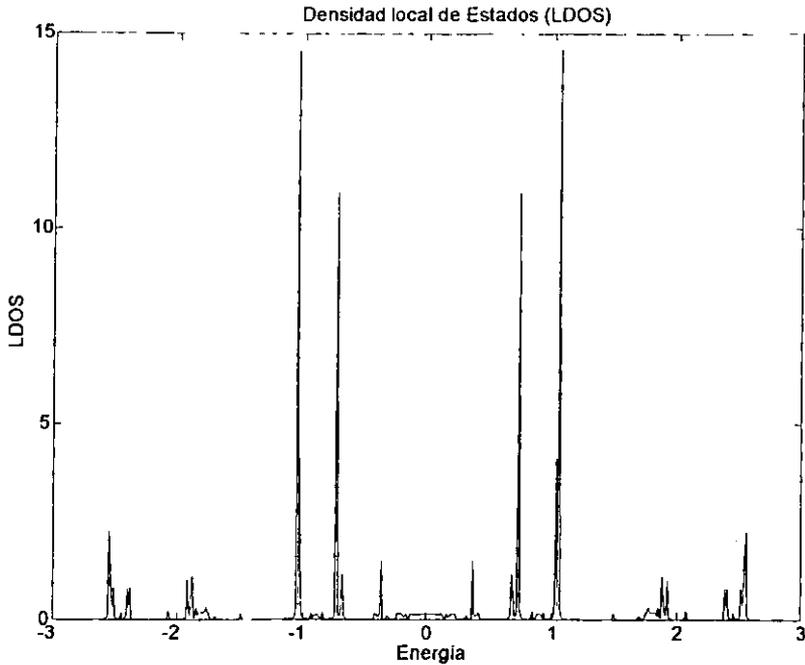


Figura 3.4: LDOS para $n=21$

$$\rho(E) = \sum_i \rho_i(E)$$

Finalmente tenemos que agregar a la energía una parte imaginaria: $E = e + 0.001i$.

Para el problema fuera de la diagonal calculamos la densidad de estados local en el sitio central de la cadena para la generación $n = 21$, con $t_A = -1$ y $t_B = -1.5$, ver figura (3.4), así como para la generación siguiente que se presenta en la fig.(3.5).

Al calcular la densidad local en función de la energía, obtenemos las contribuciones de los diferentes eigenestados del sistema a la densidad en el sitio central, pero esto nos

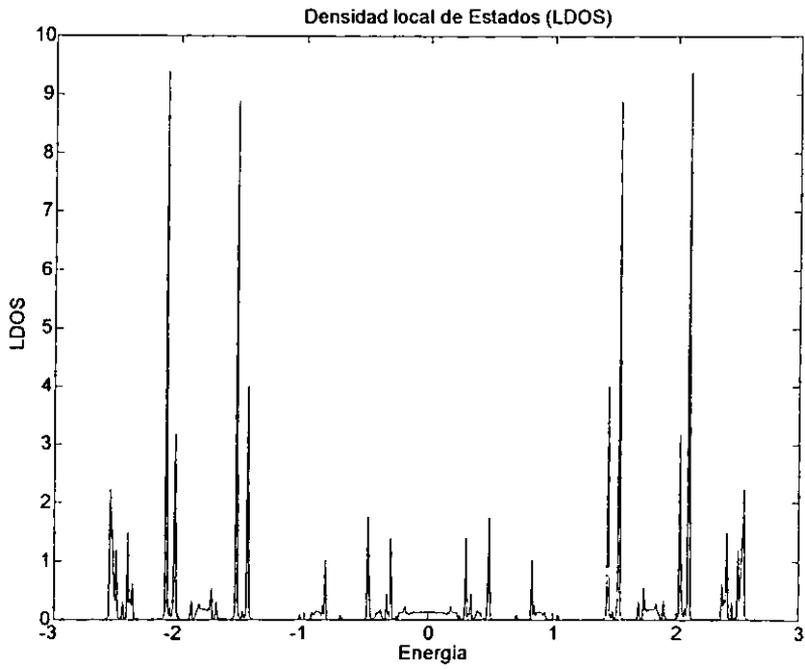


Figura 3.5: LDOS para $n=22$

proporciona indirectamente el valor de los diferentes eigenestados del sistema, con lo cual obtenemos un espectro de energías. La densidad local está compuesta por picos, valles y zonas donde la densidad es cero. Podemos reconocer en estas últimas a los “gaps” o brechas en donde no existen eigenestados permitidos. En la parte central de la gráfica observamos una zona que se aproxima a una función continua, la cual corresponde presumiblemente a eigenestados extendidos, similares a los de una red periódica. La gráfica para generaciones pares presenta las mismas características, aunque se perciben ciertas diferencias entre el caso de generación impar. Esto es debido al reflejo de las diferentes simetrías a las que están asociados ambos espectros.

Para verificar que nuestros resultados estén correctos graficamos la densidad local integrada, que al final del espectro está normalizada a uno, fig. (3.6).

Es interesante señalar también que conforme vamos aumentando el tamaño de la cadena se va formando una estructura con funciones delta cada vez más complicada, y en la parte central, se comienza a formar la banda que corresponde a los estados extendidos, fig (3.7).

A partir de $n = 14$, las funciones delta del centro se aproximan tanto unas a otras que la envolvente se suaviza. Una vez que la cadena alcanza un cierto tamaño ($n = 19$), la estructura de LDOS ya no se altera. Es en este momento, donde el método de renormalización alcanza su límite porque aunque tenemos cadenas muy grandes, estamos imposibilitados para inferir de estos resultados lo que sucede en el caso de una red infinita.

La gráfica de la LDOS es simétrica con respecto al cero de la energía. Esto es debido a que la cadena de Thue-Morse es bipartita, es decir está compuesta de dos subredes

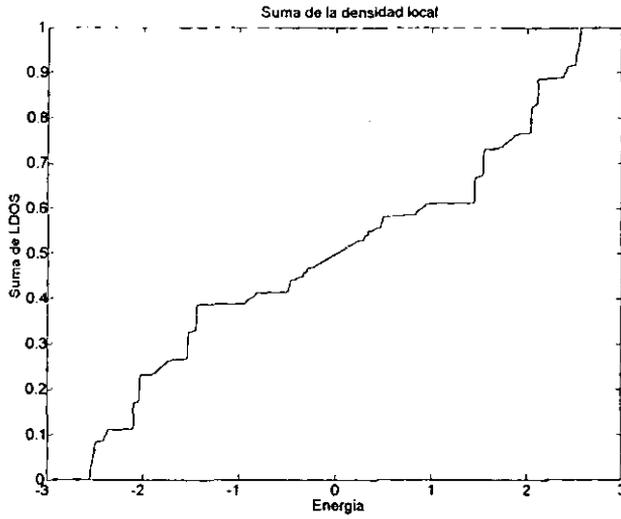


Figura 3.6: Suma de las LDOS

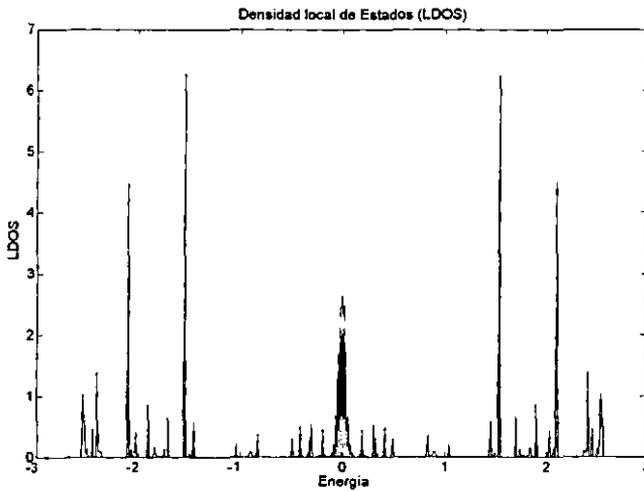


Figura 3.7: Formación de la banda central para $n=14$

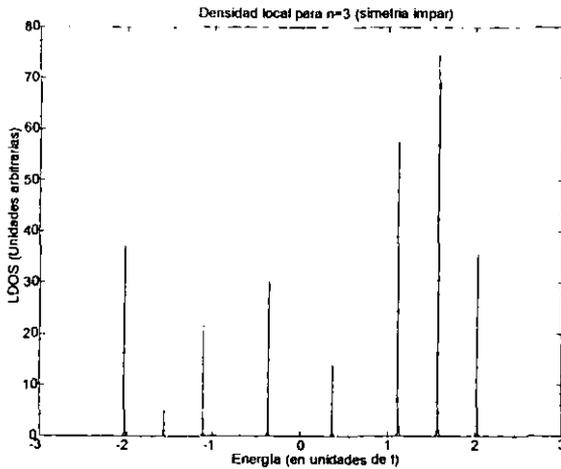


Figura 3.8: Densidad local para 8 átomos.

interpenetradas.

Para el caso del desorden diagonal, verificamos que efectivamente, la densidad local nos proporciona los valores de las diferentes autoenergías del sistema. Por ejemplo, para $n = 3$ (8 átomos), la diagonalización exacta nos proporciona los siguientes valores: 1.1180, -1.1180, 1.5824, 2.0275, 0.3675, -0.3675, -1.5824, -2.0275. La gráfica de la densidad local para esta generación verifica estos resultados, fig (3.8). Para generaciones más grandes, el espectro se encuentra formado por funciones delta, que no llegan a formar bandas como en el caso del desorden de enlaces. En las figuras (3.9) y (3.10) se presentan las densidades locales para las generaciones con $n = 12$ y $n = 13$. El espectro se encuentra formado por picos, bandas y brechas. Se observa que los eigenvalores para las energías positivas son los mismos que para las negativas. Sin embargo, no se logra obtener la simetría axial observada

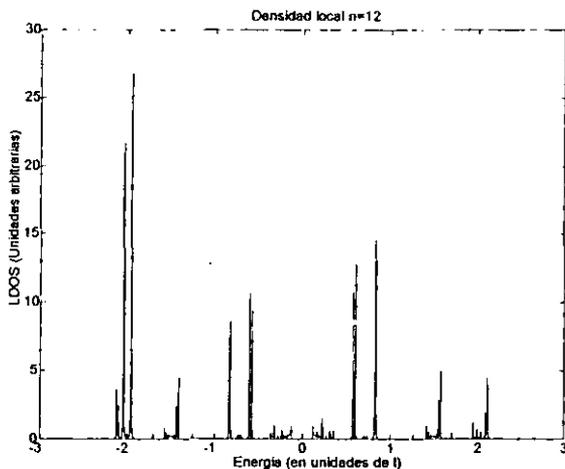


Figura 3.9: Densidad local para 4096 átomos

en el problema de enlaces, debido a que en ese problema la densidad local se calcula sobre un único sitio central renormalizado, mientras que en el problema de sitios la densidad local se encuentra centrada en uno de los dos sitios centrales de la cadena renormalizada. Finalmente, podemos presentar una aproximación a la densidad total, sumando las dos densidades locales anteriores, más sus complementos, lo que nos garantiza la simetría alrededor de $x = 0$ y un espectro compuesto por picos y brechas (figura 3.11).

A diferencia del problema de enlaces, en la parte central del espectro de energía, no existe ningún estado extendido, ya que estos se encuentran en las bandas que están en los alrededores.

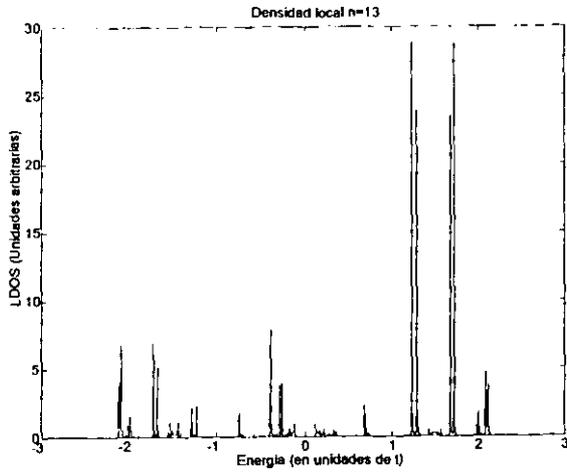
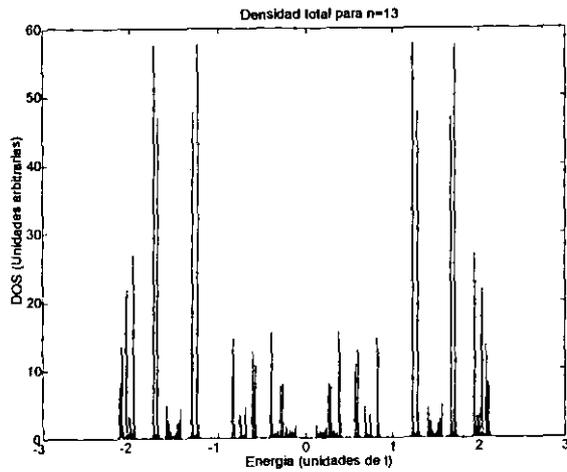


Figura 3.10: Densidad local para 8192 átomos

Figura 3.11: Densidad total aproximada para la generación $n=13$.

3.4 Localización de estados

En 1958, Anderson [17] demostró que si el desorden es suficientemente grande, los estados electrónicos estarán localizados. Poco después de la aparición de este artículo, Mott y Twose [18] publicaron un trabajo en el que conjeturaron que en una dimensión todos los estados electrónicos están localizados, independientemente del tipo y grado de desorden.

El fenómeno de localización de las funciones de onda tiene lugar en los sistemas cuánticos desordenados. En los sistemas físicos, el desorden se manifiesta con la presencia de vacancias, impurezas o defectos en general, que en mayor o menor medida rompen con la periodicidad del cristal ideal. También se pueden distribuir a los átomos o moléculas en posiciones aleatorias. Un conjunto completamente desordenado sería uno en el cual los átomos estén en posiciones colocadas aleatoriamente e independientes una de la otra. En este régimen de gran desorden, los estados electrónicos aparecen localizados exponencialmente.

La cadena de Thue-Morse, posee un desorden "controlado" debido a sus reglas de construcción, por lo que es interesante estudiar el problema de localización de este sistema.

3.4.1 Propiedades de transporte

La manifestación física más inmediata de la localización, se da en los fenómenos de transporte.

Las partículas que ocupan estados localizados están restringidas a regiones finitas del sistema, lo que les impide, a $T = 0$, a participar en las propiedades de transporte, de tal manera que si los estados localizados se encuentran alrededor de la energía de Fermi, el sistema se va a considerar aislante. Si por el contrario, son las funciones extendidas las que

se encuentran cerca del nivel de Fermi, tendremos un material conductor.

Una de las aportaciones del estudio de los quasicristales es la aparición de funciones de onda, que al no ser ni localizadas, ni extendidas, reciben el nombre de críticas. La forma de estas funciones puede variar pero en la cadena de Fibonacci la aparición de los estados críticos está directamente relacionada con la fractalidad del espectro de energía.

Existen diversos criterios de localización en los que se utilizan las propiedades de transporte de los materiales tales como la ausencia de difusión, o la transmitancia a través del material.

Existen tres tipos de posibles funciones de onda: localizadas (normalizables), extendidas (no normalizables) y críticas. Cada una de estas funciones corresponden a espectros puntuales, absolutamente continuos y singularmente continuos respectivamente.

Borland en 1963 mostró que el coeficiente de Lyapunov es el inverso de la longitud de localización asociada al producto de matrices aleatorias de 2×2 [19], por lo que se puede calcular este coeficiente como parámetro de localización de los estados electrónicos.

El coeficiente de Lyapunov se define como:

$$\gamma = \lim_{m \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{m} \ln \|M(m, E)\| \right]$$

donde $\| \cdot \|$ es la norma de una matriz. $M(m, E)$ representa el producto de las matrices de transferencia entre los coeficientes de las funciones de Wannier asociadas a cada sitio:

$$\begin{pmatrix} c_{m+1} \\ c_m \end{pmatrix} = \prod M_i \begin{pmatrix} c_1 \\ c_0 \end{pmatrix} = M(m, E) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_0 \end{pmatrix}$$

Si tenemos una eigenfunción Ψ_N que decae exponencialmente con un coeficiente λ

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

Si los estados son localizados, $\lambda = 1/\gamma$ representa la longitud de localización de la función de onda, y como por otro lado tenemos que $\Psi_N = \prod_1^{j=N} \|M(j)\| \Psi_0$, obtenemos:

$$\gamma = \frac{1}{\lambda} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \left(\prod_1^{j=N} \|M(j)\| \right)$$

Si los estados son localizados, el valor de γ va a converger, mientras que si se trata de estados extendidos el coeficiente será cero, lo que quiere decir que el estado se extiende a lo largo de la cadena. Es importante señalar que vamos a obtener un valor del coeficiente de Lyapunov (ya sea cero o algún valor finito) en todo el intervalo de energía donde realizemos el cálculo. La condición (3.7) sobre la matriz de transferencia es la que se tiene que verificar para que sean eigenestados del sistema.

Para la cadena Thue-Morse, tenemos cuatro diferentes tipos de matrices de transferencia, según las diferentes combinaciones que pueden tener en un sitio, los valores de las integrales de traslape vecinas, por lo que a partir de (3.5) las podemos calcular muy fácilmente:

$$M_{ll} = \begin{bmatrix} \frac{E}{t_c} & -\frac{t_l}{t_l} \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad M_{lc} = \begin{bmatrix} \frac{E}{t_l} & -\frac{t_c}{t_c} \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$M_{cl} = \begin{bmatrix} \frac{E}{t_c} & -\frac{t_l}{t_c} \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad M_{cc} = \begin{bmatrix} \frac{E}{t_c} & -\frac{t_c}{t_c} \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Los subíndices señalan el tipo de enlace a la derecha e izquierda del sitio i .

Tomando como base el método de renormalización para calcular la densidad de estados local, construimos una relación de recurrencia para ver como crece $M(m, E)$ según el orden o generación.

Para calcular el producto de las matrices de transferencia, utilizamos la siguiente multiplicación inicial:

$$A = M_{cl} \times M_{ll} \times M_{lc}$$

que corresponde a las matrices de transferencia de la cadena con cuatro sitios. Paralelamente calculamos el producto del complemento de la cadena:

$$B = M_{lc} \times M_{cc} \times M_{cl}$$

Para la construcción de los productos subsiguientes, utilizamos el hecho de que la cadena se puede construir con la suma directa de la cadena anterior y su complemento, lo que en el caso de las matrices de transferencia va a ser igual a:

$$M = B \times C \times A$$

$$N = A \times D \times B$$

donde las matrices C y D cambian si n es par:

$$C = M_{ll} \quad D = M_{ss}$$

ó impar:

$$C = M_{ts} \quad D = M_{st}$$

Podemos repetir este procedimiento muchas veces, sustituyendo el valor resultante de M por A , y el de N por B .

Uno de los inconvenientes de este enfoque, es que los valores que obtenemos multiplicando las matrices de transferencia para la cadena Thue-Morse resultan ser grandes, por lo que trabajar con logaritmos se vuelve indispensable. La base del método es que al aplicar el logaritmo base 10, sobre un número muy grande, obtenemos el coeficiente de las potencias de 10, el cual lo manejamos por separado, por lo que los valores de la multiplicación de matrices podrán ser manejados con facilidad.

Graficamos el coeficiente de Lyapunov para $n = 20$. Nuevamente encontramos la simetría axial alrededor del eje de las ordenadas. La estructura presenta una brecha en el centro, y una pequeña brecha alrededor de ± 1.8 . La estructura de los estados localizados es clara.

Los estados extendidos se encuentran muy cerca del centro del espectro. Una mejor manera de visualizar este resultado es graficar el logaritmo del coeficiente de Lyapunov, donde observamos los estados localizados extendidos a todo lo largo de la cadena, fig.(3.13).

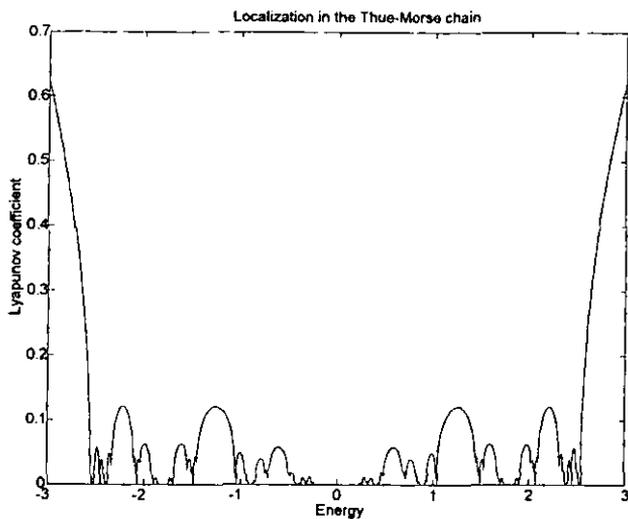


Figura 3.12: Coeficiente de Lyapunov

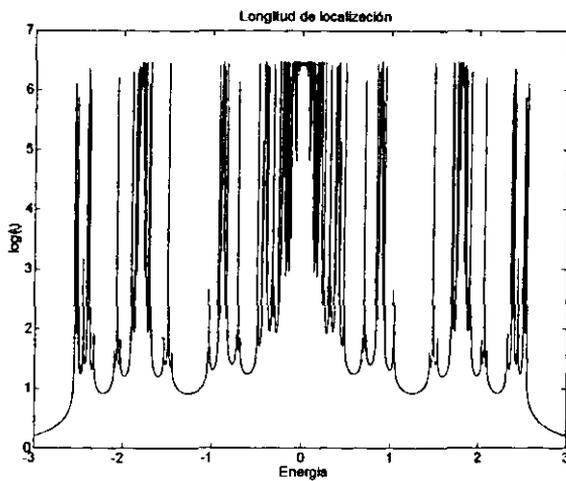


Figura 3.13: Gráfica del inverso del coeficiente de Lyapunov.

3.4.2 Funciones de onda

Hemos visto, que las funciones de onda de una cadena periódica son extendidas y se representan por ondas planas. En el otro extremo de la situación, en un sistema completamente desordenado, las funciones de onda se encuentran exponencialmente localizadas.

Adicionalmente, el estudio de la cadena de Fibonacci, nos proporciona un tercer tipo de función de onda que se puede presentar: las funciones críticas.

De acuerdo con los resultados obtenidos analizando tanto la densidad de estados, como los coeficientes de Lyapunov, las funciones de la cadena de Thue-Morse finita son extendidas y localizadas. Para un estudio más detallado de estas funciones de onda, volvemos a utilizar el método de la matriz de transferencia, usando (3.4), con la matriz de transferencia para el problema de enlaces y utilizando como condición inicial:

$$\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Esta condición nos garantiza que la posición del primer átomo esté fija, con el fin de obtener los estados estacionarios del sistema. Por otro lado, estamos suponiendo que el espectro no se verá significativamente afectado por haber escogido valores precisos siempre y cuando la cadena sea muy grande. Es importante no perder de vista que la matriz de transferencia para los eigenestados del sistema tiene que cumplir (3.7). Para los estados con energías dentro de la banda, esperamos encontrar estados extendidos. Graficamos las funciones de onda, para $E = 0$ y $E = 0.41$, figuras (3.14) y (3.15).

Los valores de la probabilidad sólo toman dos valores diferentes y su distribución

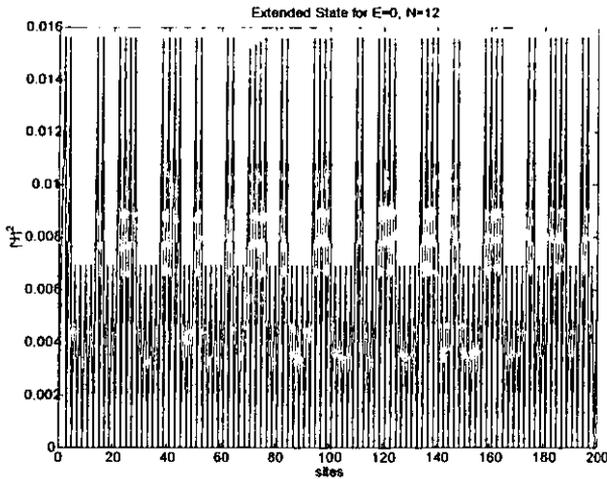


Figura 3.14: Estado extendido

es la misma que la de la secuencia Thue-Morse.

A medida que tomamos otros valores de la energía para los cuales el coeficiente de Lyapunov se anule, las funciones de onda se vuelven más complicadas. Para $E=0.41$, fig.(3.14) aparece nuevamente un estado extendido que parece estar compuesto por una superposición de funciones extendidas con diferentes longitudes de onda.

Hasta el momento, el tratamiento del problema ha involucrado únicamente cadenas finitas, que a pesar de ser muy grandes (2^{20} elementos), pueden dar resultados diferentes a lo de sistemas infinitos. La aparición, de estados extendidos a lo largo del espectro, muestra que el comportamiento de la cadena de Thue-Morse va a diferir mucho de las cadena quasiperiódicas. De hecho, en el infinito, el espectro de energías arroja exclusivamente estados extendidos, para lo cual, se necesita estudiar el problema desde un punto de vista

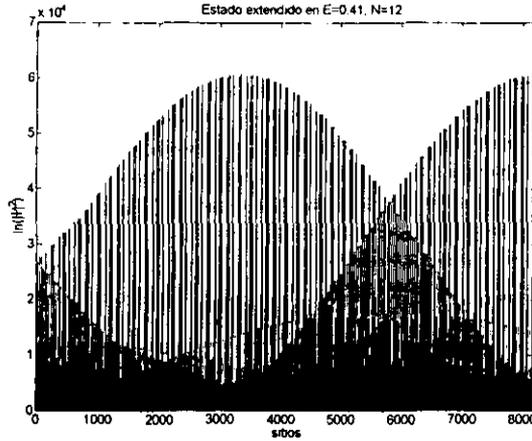


Figura 3.15: Estado extendido

analítico.

3.5 Solución exacta para el problema de sitios

3.5.1 Cálculo de los extremos de las bandas

Para el caso de una cadena diatómica periódica, es decir, con una celda unidad con dos diferentes especies, existen dos bandas cuyos extremos o bordes están situados exactamente en $\pm\epsilon$ y en $\pm\sqrt{\epsilon^2 + 4}$, tomando $\epsilon_0 = -\epsilon_0^* = 0$, y $t = 1$. En la cadena de Thue-Morse estos bordes pueden ser calculados haciendo uso de la simetría espejo, anti-espejo de la secuencia. En el límite cuando $\epsilon \rightarrow \infty$, existen monómeros y dímeros, por lo que la unidad fundamental es una pareja de átomos diferentes a cuyos extremos se les ata todo lo que le resta a la cadena que se representa por un enlace efectivo $K(E)$. Es claro que K es

función de la energía y su forma exacta debe de ser estudiada en detalle. En cualquier caso, el espectro completo se puede reducir a la ecuación secular:

$$\Delta = \begin{vmatrix} E + \epsilon - K & 1 \\ 1 & E - \epsilon - K \end{vmatrix} = 0$$

donde todas las energías se encuentran representadas en unidades de t . La solución para las energías es entonces $E = K \pm \sqrt{\epsilon^2 + 1^2}$. Aún sin conocer la forma exacta de K , sabemos que $|K| \leq 1$, y toma su valor límite en $K = \pm 1$, es decir en los extremos de las bandas, los cuales representan los estados coherentes totalmente simétricos y antisimétricos.

También es posible encontrar de manera exacta *todos* los eigenestados del sistema. Resolvemos la ecuación secular para un sistema de dos átomos en el problema de sitios, tomando $\epsilon_A = \epsilon$ y $\epsilon_B = -\epsilon$ como los valores para las autonenergías:

$$\Delta_1 = \begin{vmatrix} E + \epsilon & 1 \\ 1 & E - \epsilon \end{vmatrix}$$

Para la siguiente generación, con cuatro átomos, obtenemos la siguiente matriz secular:

$$\Delta_2 = \begin{vmatrix} E - \epsilon - \frac{1}{E+\epsilon} & 1 \\ 1 & E - \epsilon - \frac{1}{E+\epsilon} \end{vmatrix} = \Delta_1^2 - (E + \epsilon)^2 = 0$$

Se encuentra que la relación entre los determinantes de las diferentes generaciones es:

$$\Delta_n = \Delta_{n-2} [(\Delta_{n-2})(\Delta_{n-1} + \Delta_{n-1}^c - \Delta_{n-2}(\Delta_{n-2} - 1) + 1)]$$

para $n \geq 3$. Este resultado muestra que se pueden encontrar todas las soluciones para una cadena de generación n , si $\Delta_1 = \Delta_2 = \dots = \Delta_{n-1} = 0$, y $\Delta_n = 1$. La última ecuación nos da los eigenvalores extremos.

Una forma alterna para solucionar este problema fue encontrada por Gosh y Kar-makar [20], pero utilizando las relaciones entre las trazas de las matrices de transferencia.

Las dos diferentes matrices de transferencia en este caso son:

$$M_A = \begin{bmatrix} E - \varepsilon_A & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad M_B = \begin{bmatrix} E - \varepsilon_B & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Conforme vamos construyendo la cadena de Thue-Morse, podemos expresar las relaciones entre las matrices de transferencia:

$$M_{n=1} = M_A$$

$$M_2 = M_B * M_A$$

$$M_3 = M_A * M_B * M_B * M_A$$

Es facil darse cuenta, que la relación de recurrencia entre las matrices de transferencia es:

$$M_{n+1} = M_n^c * M_n \quad M_{n+1}^c = M * M_n^c$$

para $n \geq 0$. Usando la unimodularidad de estas matrices de 2×2 , obtenemos:

$$\alpha_{n+3} = 4\alpha_{n+1}^2(\alpha_{n+2} - 1) + 1$$

con $\alpha = \text{Tr} \frac{M_n}{2}$, la cual también la podemos escribir como:

$$\alpha_n = 4^{n-2} \alpha_{n-2}^2 \alpha_{n-3}^2 \dots \alpha_2^2 \alpha_1^2 (\alpha_2 - 1) + 1$$

con $\alpha_1 = (E^2 - \Sigma^2 - 2)/2$, y $\alpha_2 = 2\alpha_1^2 - 2\Sigma^2 - 1$.

Las soluciones se van encontrando mientras $\alpha_1^2 = \alpha_2^2 = \dots = \alpha_n^2 = 0$ y $\alpha_2 - 1 = 0$.

La última ecuación nos da los bordes de las bandas, y las otras ecuaciones dan los valores doblemente degenerados.

De las propiedades de construcción de la cadena de Thue-Morse, la cadena infinita puede formarse a partir de dos unidades: (C_n, C_n^c) donde C es la generación n -ésima de la cadena de Thue-Morse. Asociamos a cada una de estas unidades su correspondiente matriz de transferencia: (T_n, T_n^c) . Usando la matriz de identidad, así como las matrices de Pauli, podemos expresar las matrices de transferencia de la siguiente manera.

Para la generación par:

$$T_n = \alpha_n I + \beta_n \sigma_x + \gamma_n \sigma_y + \delta_n \sigma_z$$

$$T_n^c = \alpha_n I - \beta_n \sigma_x + \gamma_n \sigma_y + \delta_n \sigma_z$$

Y para la generación impar:

$$T_n = \alpha_n I + \gamma_n \sigma_y + \delta_n \sigma_z$$

$$T_n^c = \alpha_n I + \gamma'_n \sigma_y + \delta'_n \sigma_z$$

Para que la cadena admita estados extendidos, los valores de las matrices de transferencia tienen que coincidir, es decir: $[T_n, T_n^c] = 0$. Esto sucede cuando $\beta_n = 0$, lo que equivale a introducir la condición que satisfacen los eigenvalores del sistema, por lo que todos los estados son extendidos. Es decir, para cada eigenvalor, existe una "celda unidad" que mapea la cadena de Thue-Morse en la cadena periódica. Las funciones de onda no tienen una periodicidad del tipo Bloch, sino que son extendidas en el sentido de que no decaen en el infinito.

**ESTA TESIS NO SALE
DE LA BIBLIOTECA**

Capítulo 4

Conclusiones

Si bien, la utilización de la secuencia de Thue-Morse, fue en un principio un intento de extrapolar los resultados de la secuencia de Fibonacci a otras secuencias no periódicas, los resultados obtenidos son muy interesantes, debido a las características geométricas, en especial al papel que juega la simetría espejo y anti-espejo en las diferentes propiedades del sistema. Las características más importantes de la cadena de Thue-Morse pueden resumirse en:

a) El factor de estructura que está compuesto por funciones que se escalan en potencias de dos.

b) Existe una diferencia entre el problema de sitios y enlaces para las cadenas finitas. En el espectro del primero aparecen estados extendidos y localizados, que pueden ser analizados utilizando diversas herramientas, como el estudio de sus propiedades de localización utilizando el coeficiente de Lyapunov, así como el método de la matriz de transferencia para graficarlos. En los estados extendidos de la cadena se encuentran presentes

las propiedades de la secuencia de Thue-Morse. Por otro lado, el caso diagonal, no presenta estados extendidos.

c) Para el caso diagonal e infinito, la cadena soporta únicamente estados extendidos.

A lo largo de esta tesis, se han presentado diversas maneras de resolución del problema de las excitaciones elementales de la cadena de Thue-Morse. El método de la diagonalización exacta, resultó ser bastante ineficaz, debido al excesivo tiempo de máquina para realizar los cálculos mientras que la utilización de la renormalización de la cadena permitió realizar los cálculos de manera muy eficaz. El factor de estructura es singular continuo como en los quasicristales. En los espectros presentados para cadena finitas, tanto para el desorden de sitios como el de enlaces observamos la existencia de estados extendidos, así como de localizados. Es hasta resolver el problema de forma analítica, en donde se encuentra que todos los estados del sistema son extendidos, lo cual nos lleva a concluir que este tipo de desorden no logra localizar los estados en el infinito. Esta diferencia entre los sistemas quasicristalinos y el estudiado nos muestra que el estudio de las cadenas finitas e infinitas puede ser drásticamente distinto. La resolución analítica del problema de Thue-Morse, es nuevamente un producto de la explotación de la simetría característica del sistema. El método del mapa de trazas resulta ser muy efectivo, ya que se puede encontrar todos los eigenvalores del sistema.

También es interesante recalcar que la utilización de un Hamiltoniano modelo, permite estudiar diferentes excitaciones elementales con muy pocas modificaciones, lo cual enriquece mucho el problema.

Como temas pendientes a resolver se encuentran la resolución del problema infinito para el desorden fuera de la diagonal. Por otro lado, sería interesante producir un desorden con fasones, que cambian las propiedades termodinámicas de la cadena.

Un último problema a considerar es el de la localización de los estados para las cadenas finitas. Sería interesante recurrir a otros métodos para determinar las propiedades de localización de las funciones de onda y compararlos entre sí.

Bibliografía

- [1] J. Rodriguez, Fundamentos de cristalografía física, UNESCO, Washington, p.20, (1986).
- [2] D. Shechtman, D. Blech, D. Gratias, J.W. Cahn, *Phys. Rev. Lett* **53**, 1951 (1984).
- [3] R. Penrose, *Bull. Inst. Math. Appl.* **10**, 226-271 (1974).
- [4] D. Levine, P.J. Steinhardt, *Phys. Rev.* **B34**, 617 (1986).
- [5] C. Wang, R.A. Barrio, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 191 (1988).
- [6] E. Prouhet, *C.R. Acad. Sci. Paris Sér. I* **33** (1851) 31.
- [7] A. Thue, *Norske Vididens. Selsk. Skr. I.* **7**, 1 (1906); **1**, 1 (1912).
- [8] M. Morse, *Trans. Am. Math. Soc.* **22**, 84 (1921); *Am. J. Math.* **43**, 35 (1921).
- [9] Z. Cheng, R. Savit, R. Merlin, *Phys. Rev.* **B37**, 4375 (1988).
- [10] F. Axel, H. Terauchi, *Phys. Rev. Lett.* **66** 2223 (1991).
- [11] F. Axel and J. Perrière, *J. Stat. Phys.* **57**, 1013 (1989).
- [12] A. Ghosh, S.N. Karmakar, *Phys. Rev.* **B58**, 2586 (1988).

- [13] M. Kohmoto, B. Sutherland, *Phys. Rev.* **B35**, 1020 (1987).
- [14] E.N. Economou, Green's Functions in Quantum Physics, Vol 7 of Springer Series in Solid-States Sciences, 2nd ed, (Springer, Berlin, 1983).
- [15] J.M. Ziman, Models of disorder, Cambridge University Press, U.K. (1979)
- [16] 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).
- [17] Anderson, P.W., *Phys. Rev.* 109 (1958).
- [18] N.F. Mott, W.D. Twose, *Adv. Phys* 10, 107 (1961).
- [19] E. Borland, *Proc. Roy. Soc. London, Ser A* **274**, 529 (1963).
- [20] A. Ghosh and S.N. Karmakar, *Physica A* **274**, 555 (1999).
- [21] T. Matsubara, The Structure and Properties of Matter, Vol 28 of Springer Series in Solid-States Sciences, 2nd ed, (Springer, Berlin, 1983).
- [22] G. Garcia, Propiedades de las excitaciones elementales en redes no-periódicas (tesis de Doctorado), UNAM, 1995.
- [23] R. Merlin, K. Bajema, J. Nagle and K. Ploog, *J. Phys (Paris) Colloq.* 48, C5-503 (1987).
- [24] M. Kolar, M.K. Ali and F. Nori, *Phys. Rev.* **B43**, 1034 (1991).
- [25] N. Liu, *Phys. Rev.* **B55**, 3543 (1997).

- [26] A. Sutton, *Electronic Structure of Materials*, Clarendon Press, Oxford, 1993.
- [27] C. Janot, *Quasicrystals, A primer*, Monographs on the physics and chemistry of materials. Clarendon Press. Oxford, 1994.
- [28] G. Burns, A.M. Glazer, *Space Groups for Solid States Scientists*. Academic Press, 1990.
- [29] J. Peyriere, E. Cockayne and F. Axel, *J. Phys. I France* 5, 111 (1995).
- [30] B. Kramer, A. MacKinnon, *Rep. Prog. Phys.* 56, 1469 (1993)
- [31] S. Elliott, *The Physics and Chemistry of Solids*, John Wiley and Sons, 1988.