



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

Facultad de Ciencias

**Renormalización Aplicada al
Estudio de Fasones en Sistemas
Cuasiperiódicos**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

F Í S I C A

P R E S E N T A:

GABRIELA MONSERRATT LÓPEZ AYÓN



Director de Tesis: Dr. Chumin Wang Chen

2006



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.

*Dedico este trabajo a mis amores.
A mis profesores, en especial al Dr. Chumin Wang por
su gran apoyo, por fortalecer y fertilizar mi inquietud de conocer.
Agradezco a la UNAM, a la Facultad de Ciencias y
al Instituto de Materiales los estímulos brindados.*

Datos del Jurado

1. Datos del alumno
López
Ayón
Gabriela Monserratt
56 72 31 21
Universidad Nacional Autonoma de Mexico
Facultad de Ciencias
Física
402091239
2. Datos del tutor
Dr.
Chumin
Wang
Chen
3. Datos del sinodal 1
Dr.
Marcos
Ley
Koo
4. Datos del sinodal 2
Dr.
Rafaél René
del Río
Castillo
5. Datos del sinodal 3
Dr.
Jorgre Gustavo
Hirsch
Ganievich
6. Datos del sinodal 4
Dr.
Enrique
Camarillo
García
7. Datos del trabajo escrito
Renormalización Aplicada al Estudio de Fasones en Sistemas Cuasiperiódicos
66 p
2006

Contenido

Introducción.	1
Capítulo 1. Cuasicristales	
1.1. Estructuras Cuasicristalinas	4
1.2. Cuasicristales Termodinámicamente Estables	7
1.3. Multicapas Cuasiperiódicas	10
Capítulo 2. Métodos Cuánticos Aplicados a Sólidos	
2.1. Modelos Electrónicos en Sólidos	11
2.2. Función de Green	13
2.3. Método de Renormalización	15
2.3.1. Fenómenos Críticos	15
2.3.2. Renormalización en Espacio Real	16
2.4. Conductancia de Landauer	17
Capítulo 3. Redes de Fibonacci	
3.1. Números de Fibonacci	19
3.2. Secuencia de Fibonacci	20
3.2..1 Método de Adición	
3.2..2 Método de Sustitución	21
3.2..3 Método de Proyección	22
3.3. Ordenamiento Atómico de Fibonacci	23
3.3..1 Problema de Sitios	23
3.3..2 Problema de Enlaces.	23
3.3..3 Problema Mixto	24
Capítulo 4. Electrones en Cadenas de Fibonacci	
4.1. Solución Analítica en Aproximantes	25
4.2. Renormalización Aplicada a Cadenas de Fibonacci	31
4.3. Transmitancia	39

Capítulo 5. Fasones en Sistemas Cuasiperiódicos

5.1. Variedades de Fasones45
5.1.1. Fasón por Proyección45
5.1.2. Fasón por Sustitución47
5.1.3. Fasón por Adición47
5.2. Renormalización Incluyendo Fasón48
5.3. Efectos Fasónicos en las Propiedades Electrónicas50

Conclusiones54
-------------------------------	-----

Apéndices

A Signo de la Integral de Salto para Orbitales Tipo s56
B Solución Analítica de Ecuaciones de Tercer Grado57
C Redes Bipartitas59
D Transmitancia en $E=0$ sin Fasón
E 60 Transmitancia en $E=0$ con Fasón

61

Referencias63
------------------------------	-----

Resumen

Esta tesis se ubica dentro de la Física de Estado Sólido. Específicamente se estudian las propiedades electrónicas de los cuasicristales. En estos materiales el ordenamiento atómico es aperiódico y coherente a largo alcance con una simetría rotacional prohibida en sólidos cristalinos. En particular, se investigan los efectos de imperfecciones estructurales tipo fonónico en la densidad de estados electrónica y en la conductividad eléctrica. Dicha investigación se lleva a cabo dentro del modelo de amarre fuerte basado en la mecánica cuántica no relativista. Los cálculos se realizan por medio del método de renormalización en el espacio real. Este método tiene la virtud de ser exacto, es decir, sin introducir aproximaciones adicionales, y permite abordar sistemas cuasiperiódicos de tamaño macroscópico. En concreto, el método reduce grados de libertad del sistema, conservando la información contenida dentro del formalismo. El análisis de la densidad de estados total en sistemas cuasiperiódicos con presencia de fonones se efectúa a través de la función de Green resolviendo la ecuación de Dyson. Así mismo, la conductividad eléctrica se determina por el formalismo de Landauer usando las matrices de transferencia, con especial énfasis en el transporte balístico. Los resultados obtenidos muestran que existen estados transparentes aún en presencia de defectos fonónicos, es decir, en sistemas cuasiperiódicos con fonones puede haber transporte balístico de electrones, cuya conductividad eléctrica es independiente del tamaño de la muestra.

Introducción

A lo largo del tiempo la utilización y posteriormente el desarrollo de nuevos materiales ha sido el punto de partida que da nombre a las épocas de cada civilización, por ejemplo la piedra para la edad de piedra, la metalurgia para la de bronce, de hierro,... y hoy en día la edad de los semiconductores. La búsqueda de nuevos materiales ha ido más allá de la exploración mineral en la corteza terrestre y se han logrado sintetizar materiales con estructuras permitidas por las leyes del universo, las que no han sido encontradas en forma natural. Estos materiales han cambiado profundamente la vida de la humanidad. Por ejemplo los circuitos integrados se han globalizado entre los pueblos, aumentado la eficiencia industrial y en general, los objetos que nos rodean han sido más: pequeños, rápidos y eficientes.

Detrás de todo este cambio en la convivencia humana se encuentra el empleo de nuevos materiales y se sabe que las propiedades macroscópicas de un material que contiene del orden de 10^{23} átomos dependen sensiblemente de su estructura microscópica, es decir, la forma de acomodar los átomos en el mismo. Por ejemplo el diamante y el grafito están constituidos por el mismo tipo de átomos de Carbono, sin embargo, la estructura microscópica de cada uno es distinta, siendo el primero tetragonal y el segundo hexagonal. Esta diferencia estructural produce un gran contraste en las propiedades físicas de cada uno, por ejemplo el diamante es transparente, aislante eléctrico, el material más duro del mundo y el mejor conductor térmico. En cambio el grafito es un material opaco, es un conductor eléctrico y es mecánicamente suave. Estas propiedades antagónicas son la razón por la que es importante diseñar nuevas simetrías estructurales para ordenar los átomos en un sólido, de tal forma que se puedan obtener nuevas propiedades hacia una nueva era.

A partir de principios del siglo veinte se encontró que vivimos en un mundo cuántico, por ejemplo la energía, la carga eléctrica, el flujo magnético y el momento angular son magnitudes que pueden ser descritas como múltiplos de una cantidad básica. Esta cuantización se manifiesta de una manera mas clara a escalas microscópicas y frecuentemente tiene consecuencias importantes en propiedades macroscópicas. Por ejemplo la superconductividad, el condensado de Bose-Einstein, el efecto Hall cuántico, etc. La física del estado sólido, desde sus inicios, ha sido un laboratorio muy importante en el desarrollo de la mecánica cuántica.

La física de los sólidos cristalinos se desarrolló principalmente en las décadas de los treinta y cuarentas, inmediatamente posterior al establecimiento de la mecánica cuántica. Al considerar que los fenómenos en los cristales pueden

describirse a través de un potencial periódico, se demostró que la función de onda electrónica correspondiente a dicho potencial puede escribirse siempre como un producto de una onda plana por una función periódica, con el mismo periodo del potencial, el cual hoy día se conoce como el teorema de Bloch. Así mismo los números cuánticos asociados a dichas funciones de onda se expresan en el espacio recíproco y particularmente en la primera zona de Brillouin [Kittel, 1996]. Haciendo uso de estos conceptos se desarrolló la teoría de bandas [Ashcroft, 1976], la cual ha podido explicar la diferencia de más de treinta órdenes de magnitud en la conductividad eléctrica observada en los sólidos. Dicha teoría define un conductor como un material en el cual la energía de Fermi [Ziman, 1972] se encuentra en una banda de energía permitida, mientras que en un aislante la energía de Fermi se localiza en una brecha de energía prohibida. En este sentido, un aislante ideal a temperatura cero tiene una conductividad eléctrica nula, debido a la prohibición cuántica, a diferencia de la teoría clásica en la cual la resistividad surge de las colisiones de los electrones con los iones. La baja conductividad eléctrica observada en los aislantes se debe cuánticamente a las imperfecciones dentro del mismo. Dentro de la teoría de bandas, los semiconductores son aislantes con una brecha energética alrededor de la energía de Fermi comparable con la energía térmica correspondiente a la temperatura ambiente.

A partir de la década de los sesentas del siglo pasado se inició el estudio de los sistemas sólidos amorfos, los cuales poseen estados electrónicos cualitativamente diferentes a aquellos de los sólidos cristalinos. Se ha demostrado [Abraham, 1979] que en un potencial con un desorden infinitesimal todos los estados electrónicos son localizados para sistemas de una y dos dimensiones. Para sólidos tridimensionales existe una frontera de movilidad que separa estados localizados y extendidos. Los estados localizados se encuentran en el borde de la banda y al aumentar el grado de desorden dichas fronteras de movilidad se mueven hacia el centro de la banda, provocando la localización de todos los estados [Ziman, 1979]. En general, en sólidos amorfos no existen brechas energéticas en la densidad de estados, sin embargo dicha estructura se observa en el espacio de movilidad. El estudio de los amorfos en las décadas de los setentas y ochentas tiene consecuencias tecnológicas, por ejemplo la aparición de pantallas de cristal líquido de grandes dimensiones, así como celdas solares que cubren techos enteros.

En la década de los ochentas se encontró [Schectman, 1984] una nueva forma de organizar los átomos en un sólido que no es periódica ni aleatoria, sino es una proyección de un hiper-cubo de mayor dimensión hacia el espacio real del sólido. Los detalles de este método de proyección se abordarán en la sección 3.2.3. Esta organización de los átomos –denominada como cuasicristales– posee un patrón de difracción de puntos bien definidos con una simetría prohibida en la cristalografía tradicional, en consecuencia su descubrimiento ha modificado la creencia de que

un patrón de puntos en la difracción se debe a la periodicidad del sólido. En la actualidad se cree que dicho patrón es indicativo únicamente de orden de largo alcance, tal es el caso de los cuasicristales. Así mismo, se ha demostrado que en un potencial cuasiperiódico los estados electrónicos no son extendidos ni localizados sino críticos, es decir, la función de onda asociada a dichos estados es autosimilar en el espacio real. El espectro de energías es singularmente continuo y forma un conjunto de Cantor con medida de Lebesgue cero [Süto, 1987], [Süto, 1989].

La estructura cuasiperiódica más estudiada es la secuencia de Fibonacci, la cual se encuentra contenida tanto en cuasicristales decagonales como icosaédricos ya que la red de Penrose [Janot, 1994] es una extensión directa de la secuencia de Fibonacci mediante los triángulos de Robinson [Naumis, 1994]. Una de las complicaciones adicionales encontradas en cuasicristales reales es la presencia de fasones, los cuales son defectos locales que aparecen al modificar la posición de un átomo de forma que la energía estructural del sistema permanezca casi igual. Para el caso de Fibonacci un fasón se produce al intercambiar dos enlaces consecutivos y diferentes.

En esta tesis se estudian los efectos fasónicos en las propiedades electrónicas de una cadena de Fibonacci de tamaño macroscópico usando el método de renormalización. En particular, se extiende el método de renormalización para la densidad de estados total del sistema con el fin de incluir la presencia de los fasones. Así mismo, se calcula la conductividad electrónica dentro del formalismo de Landauer, encontrando estados transparentes ó conducción balística aún en presencia de fasones.

La presente tesis está organizada en cinco capítulos, el primero de los cuales expone el estado de arte del campo de los cuasicristales; en el segundo se discuten los conceptos y métodos usados en esta tesis; en el tercer capítulo se define la secuencia y las posibles maneras de conformar una cadena de Fibonacci; en el cuarto capítulo se estudia el comportamiento electrónico en dichas cadenas y por último en el capítulo cinco se investigan las variaciones en el comportamiento electrónico al introducir fasones.

Capítulo 1 Cuasicristales

1.1 Estructura Cuasicristalina

En 1982, Dan Shechtman observó en aleaciones de aluminio y manganeso solidificadas por enfriamiento rápido, por primera vez patrones de difracción electrónica que consistían en puntos bien definidos con una simetría icosaédrica tridimensional [Shechtman, 1984]. Este hecho generó una nueva rama de estudio en el mundo de la cristalografía, ya que un icosaedro tiene simetría cinco, la cual no está permitida en estructuras periódicas. Cabe mencionar que los puntos en el patrón de difracción eran asociados únicamente a estructuras periódicas, las cuales se conocen como redes de Bravais [Kittel, 1996]. De hecho, el descubrimiento de la simetría icosaédrica cambió algunos conceptos básicos de la cristalografía, puesto que en la actualidad los patrones de difracción con puntos definidos pueden no pertenecer a estructuras cristalinas y en tal caso es un indicativo de una estructura con orden de largo alcance.

En investigaciones posteriores se encontró que los cuasicristales muestran patrones de comportamiento similares a las funciones cuasiperiódicas. Estas funciones ya habían sido estudiadas con anterioridad por algunos matemáticos [Besicovitch, 1932]. Muestra de dichos estudios se desglosa a continuación.

Sea $f(x)$ una función real ó compleja cuyo dominio son los números reales ($x \in \mathfrak{R}$), ésta es cuasiperiódica si y sólo si para todo $\varepsilon > 0$ existe un $\tau \in \mathfrak{R}$, tal que para todo x ,

$$|f(x + \tau) - f(x)| < \varepsilon. \quad (1.1)$$

En otras palabras, existe un cuasi-periodo τ , para el cual $f(x + \tau)$ se aproxima a $f(x)$ y la diferencia relativa entre estas dos es menor que ε . Esta definición tiene similitud con la definición de funciones uniformemente continuas, sin embargo, para las funciones cuasiperiódicas si ε decrece, el valor de τ se incrementa o tiende al infinito cuando ε es cero.

Un ejemplo de este tipo de funciones se puede observar en el caso de planetas teniendo periodos orbitales inconmensurables entre sí. De tal forma que cualquier configuración particular que suceda una sola vez, puede repetirse con cierto grado de precisión si esperamos un tiempo suficientemente largo, entonces ε es la precisión de la configuración y τ es la variable temporal.

Después de la observación de Shechtman, Levine y Steinhardt demostraron que los patrones de difracción encontrados por Shechtman pueden ser reproducidos al realizar la transformada de Fourier de una estructura icosaédrica [Levine, 1984], la cual constituye una estructura cuasicristalina. Un icosaedro regular como se muestra en la Fig. 1.1 queda determinado por seis vectores del centro a los vértices, consecuentemente, un hiper-cubo

de al menos seis dimensiones se requiere para generar una red periódica en un espacio de seis dimensiones con simetría icosaédrica. Un icosaedro tiene seis ejes con simetría cinco (del centro del icosaedro a los vértices), diez ejes con simetría tres (del centro del icosaedro al centro de cada cara) y quince ejes con simetría dos (del centro del icosaedro a la parte media de las aristas).

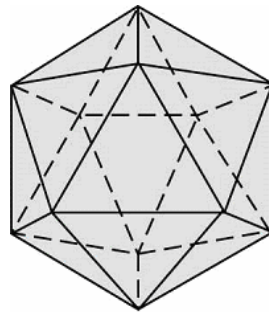


Figura 1.1. Icosaedro regular formado por veinte caras de triángulos equiláteros.

Actualmente el estudio de los cuasicristales se centra principalmente en dos grandes grupos de aleaciones sintetizables: cuasi-cristalinas icosaédricas y decagonales. Una estructura decagonal está formada por un arreglo periódico en una dirección y cuasiperiódico en las dos direcciones restantes. Este arreglo cuasi-periódico bidimensional puede ser descrito por la red de Penrose que se muestra en la Fig. 1.2, la cual está constituida de dos tipos de rombos equiláteros con uno de sus ángulos 36° y 72° respectivamente, los cuales se embonan marcando los lados con flechas negras y blancas, de manera que los lados embonados compartan el mismo símbolo y sentido, como se muestra en la Fig. 1.2.

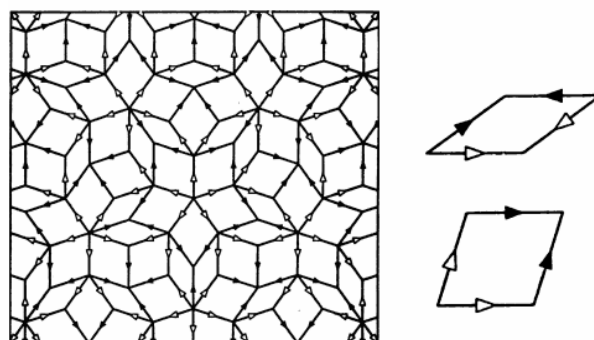


Figura 1.2. Red de Penrose y los dos rombos constituyentes con lados marcados por flechas blancas y negras para generar dicha red.

Roger Penrose descubrió que una superficie bidimensional puede cubrirse completamente de manera aperiódica con sólo estas dos figuras. En este arreglo todos los enlaces se orientan en diez direcciones, por lo que tienen un orden direccional de largo alcance. Además la razón dorada está presente en el cociente de las áreas entre

ambos rombos, así como en el cociente del número total de dichos rombos cuando la red es infinita.

Para redes bidimensionales periódicas, cuando se exige que la simetría rotacional sea compatible con la simetría traslacional, se encuentran sólo tres estructuras posibles que son las simetrías tres, cuatro y seis, como se muestran en la figura 1.3 y su comprobación es similar al caso tridimensional [Ashcroft, 1976]. Por ejemplo, los pentágonos regulares no llenan el espacio bidimensional.

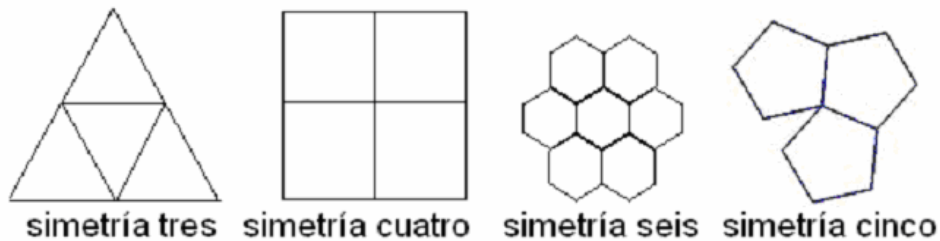


Figura 1.3. Redes triangular, cuadrada, hexagonal y pentagonal

Sin embargo, los rombos de la red de Penrose surgen de la geometría del pentágono como se muestra en la figura 1.4, donde la razón dorada interviene de manera primordial en esta construcción. La simetría de los triángulos que conforman a estos rombos se encuentra como parte de un pentágono regular.

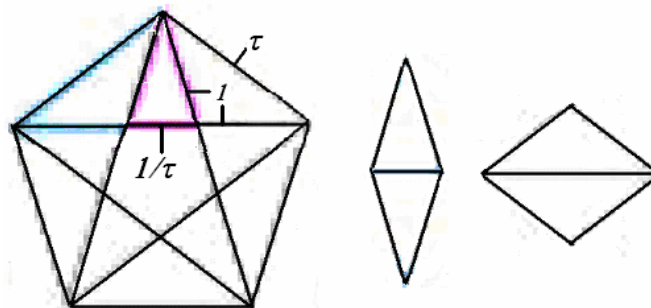


Figura 1.4. Muestra la relación del pentágono regular con los rombos que generan la red de Penrose.

Cabe mencionar que históricamente la razón dorada fue introducida a través de los números de Fibonacci como se verá con detalle en el capítulo 3. Además, la red de Penrose es una extensión bidimensional directa de la secuencia de Fibonacci mediante los triángulos de Robinson [Naumis, 1994], es decir, se puede obtener la red de Penrose uniendo los triángulos constituyentes de los rombos en la figura 1.4 siguiendo la regla de adición que se discute en la sección 3.2.1.

En la siguiente sección se discuten los procedimientos de síntesis y estabilidad de las aleaciones de cuasicristales icosaédricos y decagonales.

1.2 Cuasicristales termodinámicamente estables

Ahora que sabemos que los cuasicristales son un estado posible en la materia, resulta necesario mencionar que dicha cuasiperiodicidad no implica que sean estables con dicho ordenamiento. A continuación se exponen algunos métodos de preparación de dichos materiales con la intención de reconocer algunos de los problemas que se presentan al sintetizar este tipo de estructuras.

Los cuasicristales de “primera generación” a los que nos referimos como aquellos del tipo Al-Mn mostraron que el ordenamiento cuasiperiódico era posible en la naturaleza aunque los cuasicristales de entonces presentaban algunos problemas estructurales, tales como [Janot, 1994]:

- (i) Las muestras cuasicristalinas no son compuestos termodinámicamente estables, debido a que se obtienen por procedimientos de enfriamiento rápido.
- (ii) Los picos de difracción de estas muestras son poco definidos, presentando un ancho finito, lo cual hace pensar que existen defectos estructurales y/o finitud de grano.
- (iii) La ausencia del patrón cuasiperiódico en experimentos de difracción de rayos X, lo cual se cree que es debido a que las muestras no son monofásicas; es decir, la muestra está compuesta por múltiples granos con diferentes orientaciones.

Hasta entonces muchos de los cuasicristales se obtenían por técnicas de solidificación rápida de un líquido. En estos procesos aleaciones metálicas fundidas se arrojan a un disco ó rodillo giratorio. Al derramar el líquido en el disco ver figura 1.5, este se enfría con una rapidez aproximada de 10^6 K/s y se obtiene una muestra en forma de listón de unos cuantos micrómetros de espesor y algunos milímetros de ancho. La rapidez de enfriamiento puede cambiar al variar la velocidad de rotación del disco. En la figura 1.5 se presenta un esquema de una máquina de derretimiento giratorio. Cabe mencionar que históricamente estos equipos se utilizan para generar cintas metálicas amorfas.

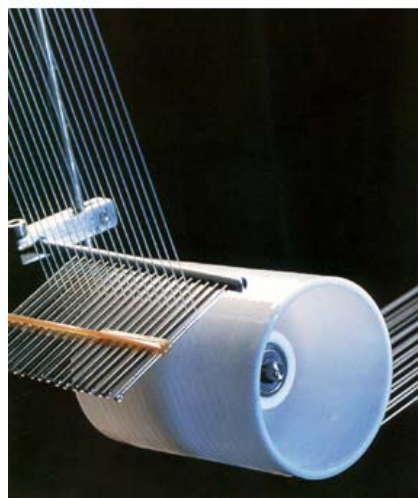


Figura 1.5. Máquina de derretimiento giratorio (melt-spinning).

Los listones producidos generalmente contienen algunos granos individuales de cuasicristal de un tamaño aproximado de un micrómetro, dicho tamaño resulta favorable para estudios con difracción de electrones, pero no así para estudio con rayos X y neutrones, ya que los fotones y neutrones requieren que la estructura tenga coherencia estructural en mayor escala. De esta manera el derretimiento giratorio no es capaz de producir cuasicristales monofásicos, debido a que en este proceso de enfriamiento la cristalización es multipuntual a causa de una compleja distribución de la temperatura en la muestra. El cuasicristal original de $\text{Al}_{80}\text{-Mn}_{20}$ se sintetiza en coexistencia con otra fase cristalina. Al agregar una pequeña cantidad de silicio (cerca del cinco por ciento) se favorece la formación de la fase cuasicristalina y resulta casi monofásico.

Otro método común es la deposición de multicapas en la cual se alternan capas de Al y Mn que se depositan en un sustrato, de un espesor del orden de 1000Å . Una vez obtenida una muestra multicapa con la composición correcta, se bombardea la muestra con iones de gases inertes a altas energías, al hacerlo se obtiene un estado cuasicristalino, amorfo ó cristalino, dependiendo de la energía de los iones y de la temperatura de la muestra, permitiendo con esto el estudio de varias de las transformaciones que llevan del estado cuasi-cristalino al amorfo y a estados cristalinos [Mayer, 1987]. Estados cuasi-cristalinos de Al-Mn también pueden sintetizarse por la implantación directa de Mn en una matriz orientada de Al [Janot, 1994].

La existencia de transiciones de fase de estados cuasiperiódicos a periódicos provee también de buenas evidencias experimentales que permiten distinguir la simetría icosaédrica real de la pseudo-icosaédrica sintetizada.

Además de estas técnicas de preparación de aleaciones anteriormente mencionadas, las cuales se realizan con técnicas que provienen de la física del estado sólido, existe otra que debe tomarse en consideración, la técnica de evaporación. Consiste en producir una niebla de pequeñas gotas de aleación líquida la que posteriormente se enfría al depositarlo sobre un sustrato. Las dimensiones de dichas gotas van desde los 500 a los 3000Å y presentan tanto formas como estructuras interesantes dada la simetría que adoptan. Muestras de estructuras cuasi-cristalinas en fase decagonal han sido preparadas usando esta técnica en aleaciones de Ni-Cr [Ishimasa, 1988].

Actualmente se sintetizan cuasicristales usando el método convencional de enfriamiento lento, el cual parte de la suposición de que el estado cuasi-cristalino es termodinámicamente estable, al menos para algún intervalo de temperatura y una composición específica. Esta técnica permite en principio el crecimiento de cuasicristales grandes y monofásicos cuya estructura puede determinarse por difracción de rayos X ó neutrones. Sin embargo, este método requiere una precisión en la composición química, sobre todo en el porcentaje de átomos de radios iónicos pequeños

ya que se piensa que su participación es fundamental en la estabilidad de la estructura cuasicristalina [Janot, 1994]. La aleación de $\text{Al}_6\text{Li}_3\text{Cu}$ fue la primera fase icosaédrica estable encontrada usando este método y abrió el camino a la determinación precisa de la estructura cuasicristalina. A pesar de esto hasta ahora se pueden producir muy pocos cuasicristales estables, sin embargo se dio un salto hacia delante cuando se lograron sintetizar fases icosaédricas perfectas y estables en aleaciones de Al-Cu-Fe y Al-Pd-Mn [Tsai, 1987].

La tarea de entender el proceso de crecimiento de los cuasicristales está lejos de ser aclarada y requiere un gran conocimiento de las estructuras atómicas que conforman al material. En la siguiente sección se aborda otro tipo de estructuras cuasiperiódicas artificiales.

1.3 Multicapas cuasiperiódicas

En años recientes ha habido un gran avance en estudios relacionados con la ecuación de Schrödinger con respecto a una dimensión con potenciales cuasiperiódicos. El interés en este tema surgió a partir del hecho de que el teorema de Bloch no es capaz de describir potenciales cuasiperiódicos, además dichos potenciales son de una naturaleza diferente a la de estructuras periódicas y desordenadas. Para el estudio de cuasicristales unidimensionales se recurre al ordenamiento atómico de Fibonacci como el prototipo, cuya estructura ha mostrado ser cuasi-periódica, autosimilar y con dos periodos linealmente independientes. Una aplicación directa del estudio de este tipo de estructuras es en las multicapas cuasiperiódicas, la cual consiste en una estructura tridimensional con ordenamiento cuasiperiódico en una dirección y periódico en las dos sobrantes.

El procedimiento para construir una estructura en arreglo de multicapas cuasiperiódicas involucra la definición de dos bloques distintos, ordenados en secuencia de Fibonacci, cada uno de los cuales puede estar compuesto de una o más capas de materiales distintos y tener un espesor variable. La primera incursión en la síntesis de este tipo de semiconductores fue realizada por Merlin usando compuestos de GaAs-AlAs [Merlin, 1985], quien al estudiar este tipo de arreglos observó que en los espectros de difracción y de Raman la mayoría de los picos se encuentran en proporción a la razón dorada [Wang, 1988].

En otras investigaciones de estos sistemas se encontró que algunas propiedades inusuales dependen de la composición y del grosor de las capas, dichas investigaciones se realizaron mediante: conductividad eléctrica, fonónica, excitación ultrasónica, localización de ondas ópticas en redes de SiO_2 y TiO_2 [Gelleerman, 1994] y ondas acústicas.

Una de las aplicaciones más recientes de las multicapas cuasiperiódicas es la posibilidad de generar el segundo y tercer armónico de ondas electromagnéticas en una estructura de LiTaO_3 [Zhu, 1997].

Para comprender la forma en que estas estructuras se describen teóricamente, en el siguiente capítulo se muestran los métodos cuánticos que se aplican para el estudio de los sólidos.

Capítulo 2 Métodos Cuánticos Aplicados a Sólidos

2.1 Modelos Electrónicos en Sólidos

A partir del surgimiento de la teoría cuántica a principios del siglo veinte, ha habido diversos intentos de aplicar dicha teoría a la descripción a las propiedades macroscópicas de los sólidos. Sin embargo, hasta la fecha no se ha encontrado una solución analítica para el siguiente operador hamiltoniano

$$\hat{H} = -\sum_l \frac{\hbar^2}{2M_l} \nabla_{R_l}^2 - \sum_j \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{r_j}^2 + \sum_{i<j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \sum_{j,l} \frac{Z_l e^2}{|\vec{r}_j - \vec{R}_l|} + \sum_{l,k} \frac{Z_l Z_k e^2}{|\vec{R}_l - \vec{R}_k|}, \quad (2.1)$$

donde \vec{r} y \vec{R} representan correspondientemente las coordenadas de los electrones y los iones. Los primeros dos términos de la Ec. (2.1) describen la energía cinética de los núcleos y los electrones; y los tres términos subsecuentes representan las interacciones electrón-electrón, electrón-ión e ión-ión.

Con respecto a las soluciones numéricas de la Ec. (2.1), aún con los últimos avances de la tecnología en el cómputo, no se han abordado de forma directa sistemas mayores a veinte átomos conformados en una estructura [Marder, 2000]. Dado que existen del orden de 10^{23} átomos en un sólido, se requiere una serie de aproximaciones que se describen a continuación.

En 1927, M. Born y R. Oppenheimer propusieron una técnica para desacoplar el movimiento entre los electrones y los núcleos en la Ec. (2.1). Tal técnica en la actualidad se conoce como la aproximación de Born-Oppenheimer ó aproximación adiabática, la cual consiste en el hecho de que el núcleo se mueve con una velocidad mucho menor que los electrones, debido a la gran diferencia de sus masas inerciales. Tal aproximación consiste en proponer que la solución de la Ec. (2.1) es un producto de dos funciones de onda; una de las cuales es generada por los núcleos y la otra por los electrones, esta última depende tanto de las coordenadas de los electrones como las de los núcleos. Este hecho conduce a un término cinético que mezcla ambas funciones de onda; como resultado de la aproximación de Bron-Oppenheimer tal término cinético resulta despreciable [Ziman, 1972] y conduce al siguiente hamiltoniano para los electrones (\hat{H}_e),

$$\hat{H}_e = -\sum_j \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{r_j}^2 + \sum_{i<j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \sum_{j,l} \frac{Z_l e^2}{|\vec{r}_j - \vec{R}_l|}. \quad (2.2)$$

Este hamiltoniano multi-electrónico sigue siendo un desafío para los científicos en lo que ha transcurrido del siglo veintiuno y entre las soluciones se encuentran:

1. La de interacción de configuraciones -quizás la más confiable- consiste en escribir la función de onda como una combinación lineal de determinantes de Slater, es decir, cada determinante de Slater representa una configuración electrónica. Este tipo de solución sólo permite abordar sistemas muy pequeños, de decenas de átomos [Sherrill, 1995].
2. La aproximación más utilizada para resolver el hamiltoniano multi-electrónico [Ec. (2.2)] es la de campo medio, que al contrario de la anterior reduce el problema de muchos electrones a un problema de un solo electrón sujeto a un potencial efectivo determinado por los demás electrones e iones. Dicho potencial se calcula de forma auto-consistente, es decir, se parte de suponer una configuración de los demás electrones para calcular -usando la ecuación de Schrödinger- las eigenfunciones del electrón representativo, las cuales conducen a una nueva configuración para los demás electrones, así como a algún nuevo potencial; este proceso es iterativo hasta obtener un potencial invariante; llamado potencial efectivo [Bruus, 2004]. Un ejemplo de la aproximación de campo medio es el método de Hartree-Fock [Mahan, 1990].

En la actualidad existe una variedad importante de intentos de resolver la Ec. (2.2) entre los cuales los dos anteriores se ubican en una escala de exactitud siendo los mas conocidos. Aunque por orden de complejidad la interacción de configuraciones es la numero uno, la de Bosones Esclavos [Wen, 2004] es la segunda, la de desarrollo de Diagramas de Feynman [Mattuck, 1992] es la tercera y la ultima pero mas empleada es la de campo medio.

En la aproximación de campo medio cuando el potencial efectivo [$V(\vec{r})$] se aplica al hamiltoniano electrónico, el hamiltoniano resultante puede escribirse como

$$\hat{H}_{el} = -\sum_j \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{r_j}^2 + V(\vec{r}). \quad (2.3)$$

Si el sólido es cristalino entonces $V(\vec{r})$ resulta ser un potencial periódico, en consecuencia, la solución a la Ec. (2.3) son las funciones de Bloch. En general, para potenciales no necesariamente periódicos se utiliza el modelo de amarre fuerte, cuyo hamiltoniano está dado por

$$\hat{H} = \sum_j \varepsilon_j |j\rangle\langle j| + \sum_{i,j} t_{i,j} |i\rangle\langle j|, \quad (2.4)$$

donde $\varepsilon_j = \langle j | \hat{H}_{el} | j \rangle$ y $t_{i,j} = \langle i | \hat{H}_{el} | j \rangle$ representan respectivamente la autoenergía del sitio j y la amplitud de probabilidad de salto entre los sitios i y j , siendo $|j\rangle$ la función de Wannier [Marder, 2000] centrada en el sitio j escrita en la notación de Dirac. En caso de utilizar esta notación la ecuación de Schrödinger se transforma en una ecuación de diferencias. En general, las funciones de Wannier [$W_n(\vec{R}, \vec{r})$] podrían considerarse como

orbitales atómicos ortogonalizados y se relacionan con las funciones de Bloch [$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r})$] de la siguiente forma

$$W_n(\vec{R}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2.5)$$

donde \vec{R} y \vec{r} representan respectivamente las coordenadas atómicas y electrónicas, n indica el índice de bandas, \vec{k} es el vector de onda y N es el número total de átomos.

Las funciones de Wannier tienen dos propiedades fundamentales que son

1. Centrada en el sitio \vec{R} . La dependencia de $W_n(\vec{R}, \vec{r})$ en \vec{R} y \vec{r} es sólo a través de su diferencia, es decir, $W_n(\vec{R}, \vec{r}) = W_n(\vec{r} - \vec{R})$. Dado que la función de Bloch es $\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_n(\vec{k}, \vec{r})$, donde $u_n(\vec{k}, \vec{r}) = u_n(\vec{k}, \vec{r} - \vec{R})$ es una función periódica con el mismo periodo del potencial, por lo tanto, de la Ec. (2.5) se tiene que

$$W_n(\vec{R}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{R})} u_n(\vec{k}, \vec{r} - \vec{R}) = W_n(\vec{r} - \vec{R}). \quad (2.6)$$

2. Ortogonalidad. A partir de las Ecs. (2.5) y (2.6) resulta

$$\begin{aligned} \int W_n^*(\vec{r} - \vec{R}_i) W_n(\vec{r} - \vec{R}_j) d^3r &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{R}_i - \vec{k}' \cdot \vec{R}_j)} \int \psi_n^*(\vec{k}, \vec{r}) \psi_n(\vec{k}', \vec{r}) d^3r \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \delta_{n,n'} = \delta_{n,n'} \delta_{i,j}, \end{aligned} \quad (2.7)$$

por lo cual las funciones de Wannier son ortogonales.

El modelo de amarre fuerte dado por la Ec. (2.4) será utilizado para la descripción del comportamiento electrónico en sistemas cuasiperiódicos como se verá en los capítulos 4 y 5.

2.2 Función de Green

La función de Green $G(r, r', z)$ es una herramienta que se emplea en la solución de ecuaciones de la forma

$$[z - \hat{H}] G(\vec{r}, \vec{r}'; z) = \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (2.8)$$

donde \hat{H} es un operador hermitiano con eigenvalores reales E_α y eigenfunciones $|\alpha\rangle$, z es la energía compleja que está dada por $z = E + i\eta$.

Las funciones de Green son muy utilizadas en estudios de mecánica cuántica debido a la ecuación de Schrödinger

$$[E - \hat{H}] \psi(\vec{r}) = 0. \quad (2.9)$$

La ecuación asociada a la Ec. (2.9) que involucra a la función de Green es la Ec. (2.8) y recibe el nombre de ecuación de Dyson, la cual puede escribirse en forma matricial como

$$[z - \hat{H}] G(z) = I, \quad (2.10)$$

donde I es la matriz identidad. En general, la función de Green se escribe como

$$G(z) = \frac{1}{z - \hat{H}} = \frac{1}{z - \hat{H}} \sum_{\alpha} |\alpha\rangle\langle\alpha| = \sum_{\alpha} \frac{|\alpha\rangle\langle\alpha|}{z - E_{\alpha}}. \quad (2.11)$$

En el entendido de que $G(z)$ tiene polos en valores de $E=E_{\alpha}$ y $\eta=0$, se define

$$G^{\pm}(z) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} G(E \pm i\eta) = P \sum_{\alpha} \frac{|\alpha\rangle\langle\alpha|}{E - E_{\alpha}} \mp i\pi \sum_{\alpha} \delta(E - E_{\alpha}) |\alpha\rangle\langle\alpha|, \quad (2.12)$$

donde P es la parte principal de la función y la Ec. (2.12) se deriva de la identidad [Economou, 1983]

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{E \pm i\eta} = P \frac{1}{E} \mp i\pi \delta(\eta). \quad (2.13)$$

Usando la Ec. (2.12), la densidad de estados (DOS) en un punto \vec{r} se escribe

$$DOS(\vec{r}, E) = \sum_{\alpha} \delta(E - E_{\alpha}) \langle \vec{r} | \alpha \rangle \langle \alpha | \vec{r} \rangle = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\langle \vec{r} | G^{\pm}(z) | \vec{r} \rangle \right]. \quad (2.14)$$

Por tanto la DOS total del sistema es

$$DOS(E) = \sum_{\alpha} \delta(E - E_{\alpha}) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\text{Tr} \langle \vec{r} | G^{\pm}(z) | \vec{r} \rangle \right]. \quad (2.15)$$

En resumen, la función de Green dependiente de la energía es la transformada de Fourier de la función de Green dependiente del tiempo, la cual sirve como un propagador de la función de onda, es decir, transporta información en el espacio y en el tiempo. Por lo que muchas propiedades físicas pueden expresarse en términos de la función de Green tales como, propiedades de transporte, propiedades ópticas y térmicas [Elliott, 1974]

Por último, la DOS es una cantidad física que si bien no se mide comúnmente, permite calcular promedios medibles de cantidades físicas a través de la mecánica estadística [Reichl, 1998].

2.3 Método de Renormalización

El término de renormalización en la literatura se refiere a una variedad de conceptos teóricos y técnicas computacionales que se usan para transformaciones de cambio de escala ó al proceso de remover las divergencias de algunas cantidades calculadas, dentro

estos procesos se encuentran dos componentes importantes conocidos como decimación y re-escalamiento.

Mientras el concepto del método de renormalización se originó en el campo de la física de partículas elementales, actualmente se aplica a otros campos, tales como, física estadística y de materia condensada. En este último se desarrolla el método de renormalización en el espacio real que consiste en reducir el número de grados de libertad de un sistema conservando la información física relevante contenida en él (decimación). Esta idea fue introducida originalmente por Leo P. Kadanoff [Kadanoff, 1967] y posteriormente aplicada a fenómenos críticos por Wilson en 1971. A continuación se expone una breve introducción de las ideas básicas del método de renormalización.

2.1.1 Fenómenos Críticos

En esta sección se discute como un ejemplo el método de renormalización aplicado a fenómenos críticos, referidos a la física de los puntos críticos, donde la longitud de correlación diverge.

Uno de los métodos más utilizados en la descripción microscópica de muchos grados de libertad interactuantes es la aproximación de campo medio, la cual no describe correctamente el comportamiento crítico, aunque es válida en puntos lejanos a la transición de fase, debido a que la aproximación de campo medio desprecia la correlación que se vuelve relevante al aproximarse al punto crítico. Sin embargo, muchas propiedades del comportamiento crítico de un sistema pueden ser derivadas en el formalismo de renormalización.

A continuación se describe la aplicación del método de renormalización en el problema de percolación que constituye un fenómeno crítico de conectividad. Supone que en una red sólo una fracción p de los sitios disponibles está ocupada. Si p es pequeño, la mayoría de los sitios ocupados se rodean de sitios vecinos vacantes. De este modo, conforme p crece, muchos de los sitios vecinos se ocupan formando cúmulos. Se puede definir una longitud de correlación $\zeta(p)$ como la extensión característica del cúmulo, de tal forma que si p aumenta, así lo hará $\zeta(p)$ hasta llegar a un punto crítico p_c para el cual $\zeta(p_c)$ diverge.

El punto p_c está relacionado con el umbral de conectividad, debido a que si $p < p_c$ la conectividad no es suficiente para dar origen a un cúmulo infinito. En general, se dice que existe un cúmulo, si todos los sitios del interiores de este están ocupados, por lo que se puede asignar una nueva probabilidad a la existencia de un cúmulo $p' = R(p) = p^b$, donde b es el número de sitios en el cúmulo y R es la transformación del proceso de renormalización.

Por ejemplo, podemos citar el caso unidimensional. Si se consideran cúmulos de dos sitios, la probabilidad de ocupación de un cúmulo es p^2 . A este nuevo sistema formado

por cúmulos de dos sitios se puede aplicar una nueva transformación de renormalización, es decir, $p' = R(R(p))$. Bajo transformaciones sucesivas de renormalización se distinguen dos puntos fijos $p^* = 1$ y $p^* = 0$ para los cuales $p^* = R(p^*)$. De hecho, el umbral de conectividad p_c coincide con uno de los puntos fijos, $p^* = 1$ que es un punto repulsor, mientras $p^* = 0$ es un atractor, es decir, si se parte de una probabilidad menor que uno, al aplicar transformaciones sucesivas de renormalización, la probabilidad resultante siempre converge a cero. Siguiendo un procedimiento similar de renormalización, se puede determinar la potencia (ν) de la variación de la longitud de correlación $\zeta(p) = |p - p_c|^{-\nu}$ alrededor del punto crítico [Stanley, 1999].

Cabe mencionar que el formalismo conceptual de fenómenos críticos está encontrando cada vez mas aplicaciones e impulsando el desarrollo de otros campos, tales como la química, la biología y la economía [Mantegna, 1999].

2.1.2 Renormalización en Espacio Real

El método de renormalización en el espacio real fue desarrollado con el objeto de facilitar la descripción de las propiedades macroscópicas de un sistema de muchos grados de libertad. A lo largo de la tesis se muestra su aplicación a redes periódicas y cuasiperiódicas.

Para sistemas unidimensionales, el método de renormalización consiste en representar una cadena de átomos por un par de sitios extremos efectivos L y R , mediados por una interacción efectiva. Dichos sitios y su interacción contienen la información necesaria para calcular propiedades físicas del sistema original. En otras palabras, en este proceso los sitios interiores desaparecen aportando una contribución al par ($L-R$); el cual permanece. Dentro del modelo de amarre fuerte, una cadena de átomos puede describirse como un conjunto de sitios con autoenergía -que representa la energía necesaria para colocar un electrón en dicho sitio- e integrales de salto entre los sitios. Estas integrales de salto corresponden a la amplitud de probabilidad de que un electrón tunelee de un sitio a otro. Renormalizar esta cadena conduce a la aparición de autoenergías efectivas de los sitios L y R y una integral de salto efectiva entre éstos. Repetición de este proceso permite abordar sistemas de tamaño macroscópico con poco esfuerzo computacional, como se discutirá con mayor detalle en la sección 4.2.

Para sistemas multidimensionales este proceso pierde efectividad al extenderse en forma directa, ya que todos los sitios externos del sistema deben considerarse explícitamente para construir redes de mayor tamaño y se deben conservar todos los caminos de correlación espacial. En consecuencia, una estructura de d dimensiones al ser renormalizada se reduce a una de $d-1$ dimensiones, en la cual el número de grados de libertad diverge cuando el sistema original diverge, excepto para $d=1$. Una alternativa para abordar sistemas multidimensionales es combinar el método de renormalización

con el teorema de convolución si el hamiltoniano del sistema es separable [Sánchez, 2004].

2.2 Conductancia de Landauer

La conductancia (G) se refiere a la facilidad que tiene un material para permitir el movimiento de cuasi-partículas (tales como electrones, fonones y fotones) entre los átomos del sólido y se define como el inverso de la resistencia, $G=1/R$. En esta sección se describe la conductancia como función de la transmitancia, una relación deducida por Rolf Landauer en 1957 [Landauer, 1957].

En un conductor la magnitud de la densidad de corriente eléctrica (J) está dada por

$$J = -evn, \quad (2.16)$$

donde n es el número de electrones que participan en la conducción, $-e$ y v son respectivamente la carga eléctrica y la rapidez promedio de los electrones. Si dicho conductor se localiza entre dos contactos sometidos a una diferencia de potencial ($\mu_1 - \mu_2$) pequeña de forma que en el contacto uno los electrones tienen energía μ_1 y en el contacto dos energía μ_2 , la ecuación (2.16) puede reescribirse como [Imry, 1999]

$$J = -ev (\mu_1 - \mu_2) \frac{dn}{d\mu}, \quad (2.17)$$

donde $\frac{dn}{d\mu}$ representa la densidad de estados (DOS) por unidad de volumen. Para un conductor cristalino unidimensional de N átomos con parámetro de red a ,

$$J = -ev (\mu_1 - \mu_2) \frac{DOS}{Na} = \frac{-ev (\mu_1 - \mu_2)}{Na} \frac{\frac{dS}{dk}}{\frac{dE}{dk}}, \quad (2.18)$$

donde k es el vector de onda y S es el número total de estados con energía E menor o igual a la energía de Fermi. Por otro lado, la densidad de estados en el espacio k es $dS/dk = Na/\pi$ considerando la degeneración de espín electrónico [Kittel, 1996]. Además, $dE/dk = \hbar v$ es proporcional a la velocidad de grupo. Por lo tanto,

$$J = -e \frac{\mu_1 - \mu_2}{\hbar \pi}. \quad (2.19)$$

Dado que la diferencia de potencial aplicada es $V_1 - V_2 = -e(\mu_1 - \mu_2)$, la conductancia eléctrica (G) para un conductor ideal unidimensional a temperatura cero es [Imry, 1999]

$$G = \frac{J}{V_1 - V_2} = \frac{e^2}{\pi\hbar}. \quad (2.20)$$

Si el conductor no es perfecto, existe una probabilidad de que los electrones se transmitan de un extremo al otro del conductor, con una transmitancia T , entonces la conductancia

$$G = \frac{e^2}{\pi\hbar} T. \quad (2.21)$$

Si se observa con detalle la ecuación (2.20) surge la duda del origen de la diferencia finita de voltaje $V_1 - V_2$, al medir la conductancia de un conductor ideal. Se piensa que dicha caída de voltaje se debe a una resistencia de contacto entre los reservorios y el conductor, ya que la corriente viaja en los reservorios por una infinidad de modos transversales y dentro del conductor solo por unos cuantos. Se requiere una redistribución de la corriente entre los modos en la interfase, lo cual genera una reflectancia distinta de cero debido a la interfase entre el reservorio y el conductor. Cuando el conductor tiene muchos modos transversales esta reflectancia es despreciable. A partir de la ecuación (2.21) y restando la resistencia de contacto, que se obtiene de la ecuación (2.20), se puede deducir la conductancia debido únicamente al conductor ocasionada sólo por los posibles centros dispersores de éste, la cual está dada por [Datta, 1995]

$$G = \frac{e^2}{\pi\hbar} \frac{T}{(1-T)}. \quad (2.22)$$

Nótese que la conductancia eléctrica de un conductor ideal dada por la ecuación (2.22) diverge puesto que su transmitancia es uno.

Capítulo 3 Redes de Fibonacci

Leonardo de Pisa, mejor conocido como Fibonacci nació en la ciudad italiana de Pisa y vivió de 1170 a 1250.

Se conoce muy poco sobre su vida; sin embargo, en el prefacio de uno de sus libros más importantes, el “*Liber Abaci*”, comenta que fue su padre quien le enseñó aritmética y lo animó a estudiar matemáticas. Además de su padre, Leonardo recibió este tipo de enseñanza de maestros árabes, lo cual era, sin duda, lo mejor que podía sucederle a un joven medieval italiano que quisiera saber matemáticas. Se convirtió en un especialista en aritmética y en los distintos sistemas de numeración que se usaban entonces.

Reconocemos en él a uno de los primeros hombres que llevó la matemática árabe a Europa, además de poner muy en alto el nombre de la matemática griega y darla a conocer entre los mercaderes y comerciantes, es decir, sacarla de los monasterios y el monopolio de los eruditos.

3.1 Números de Fibonacci

En matemáticas, la sucesión de Fibonacci es un conjunto de números enteros que se relacionan de la siguiente manera

$$a_n = a_{n-1} + a_{n-2}, \quad (3.1)$$

donde n es un número natural y partiendo de $a_1=1$ y $a_2=1$. En consecuencia, la sucesión de Fibonacci está dada como

1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 55, 89, 144, 233, 377, 610, 987,...

Algunas propiedades de los números de Fibonacci son [Conway, 1996]:

1. El cociente de dos números consecutivos se aproxima a la razón áurea, es decir a_{n+1}/a_n tiende a $\tau=(1+\sqrt{5})/2$.
2. La suma de los n primeros términos es: $a_1 + a_2 + \dots + a_n = a_{n+2} - 1$.
3. La suma de los términos impares es: $a_1 + a_3 + \dots + a_{2n-1} = a_{2n}$.
4. La suma de los términos pares es: $a_2 + a_4 + \dots + a_{2n} = a_{2n+1} - 1$.
5. La suma de los cuadrados de los n primeros términos es:
$$a_1^2 + a_2^2 + \dots + a_n^2 = a_n a_{n+1}$$
6. Cualquier [número natural](#) siempre se puede escribir mediante una suma finita de números distintos de Fibonacci. Por ejemplo, $17=13+3+1$, $65=55+8+2$.
7. Uno de cada tres términos es par, uno de cada cuatro es múltiplo de 3, etc.

8. Si a_p es un número primo, p también lo es, con una única excepción $a_4=3$; 3 es primo, pero 4 no lo es.

3.2 Secuencia de Fibonacci

A diferencia de los números de Fibonacci, la secuencia de Fibonacci $[F(n)]$ es una sucesión de un par de elementos distintos (A y B) que se obtiene mediante una suma directa de las dos secuencias anteriores $F(n) = F(n-1) \oplus F(n-2)$, con condición inicial $F(1)=A$ y $F(2)=AB$. En la siguiente tabla se presentan algunas de las secuencias:

Tabla 3.1 Secuencias de Fibonacci

Generación	Secuencia:
1	A
2	AB
3	ABA
4	ABAAB
5	ABAABABA
6	ABAABABAABAAB
7	ABAABABAABAABABAABABA
8	ABAABABAABAABABAABAABABAABAABABAABAABABAABAAB

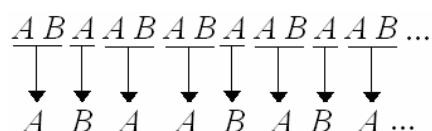
Algunas de las propiedades de esta secuencia son: [Chandra, 1999]

1) Para n suficientemente grande, la razón (el cociente) entre el número de repeticiones del elemento A y las repeticiones de B converge a un número irracional conocido como razón áurea o número áureo, que es la solución positiva de la ecuación

$$\tau^2 - \tau - 1 = 0, \tag{3.2}$$

la cual se puede aproximar como $\tau \approx 1.618033989$.

2) La autosimilaridad de la secuencia puede apreciarse aplicando la siguiente regla de sustitución: Por cada pareja AB sustituimos una A y en lugar de cada A (no seguida de una B) remplazamos por una B , es decir,



En general, esta regla reduce una generación de la secuencia y en consecuencia la cadena infinita es autosimilar.

Existen varios métodos para generar la secuencia de Fibonacci. A continuación

discutiremos algunos de ellos.

3.2.1 Método de Adición

Como habíamos visto, la secuencia de Fibonacci puede generarse al aplicar la siguiente regla: $F(n) = F(n-1) \oplus F(n-2)$. Cabe mencionar que la secuencia resultante depende de las condiciones iniciales; por ejemplo, si se toma $F(1)=A$ y $F(2)=BA$, al generar la secuencia se observa que todas las generaciones se inician con B y terminan con A . Adicionalmente esta secuencia tiene estado transparente cada tres generaciones [Sánchez, 2004], a diferencia de la secuencia convencional dada por la tabla (3.1) que lo tiene cada seis generaciones como veremos más adelante.

3.2.2 Método de Sustitución

Fibonacci demostró que esa secuencia puede manifestarse en la evolución de un fenómeno de la Naturaleza, puesto que la solución a un problema matemático basado en el proceso de reproducción de una pareja de conejos así lo confirmaba. En otras palabras, la secuencia puede ser vista gráficamente como la siguiente figura, donde una pareja joven de conejos (símbolo blanco) se encuentra en el renglón 1, y después de una temporada esta pareja llega a ser una pareja madura (símbolo negro) en el renglón 2. Además, se supone que cada pareja es inmortal y reproduce una pareja joven después de una temporada. Por tanto, en la tercera temporada en el renglón 3 hay una pareja madura y una joven...

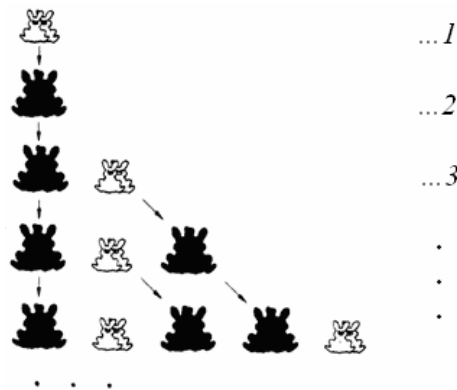


Figura 3.1. Una pareja inmadura de conejos se muestra en blanco y otra, madura, en negro. Resultados que se obtienen en cada temporada.

Siguiendo con este razonamiento, si ahora representamos a las parejas jóvenes con la letra B y las parejas maduras con la letra A , se reproduce la tabla (3.1).

3.2.3 Método de Proyección

Una forma geométrica de construir la secuencia de Fibonacci es considerar una red cuadrada como la que se muestra en la figura 3.2(a). Ahora tracemos una línea LK recta en la figura 3.2(b) que forme un ángulo θ con respecto al eje horizontal, cuya tangente es igual a la razón áurea (τ).

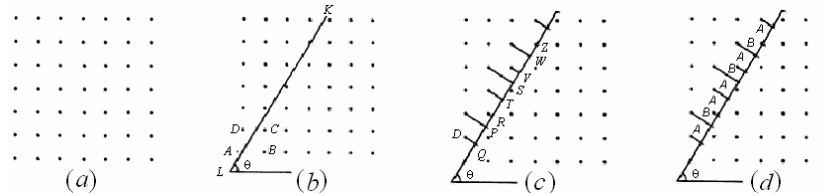


Figura 3.2. Procedimiento de construcción de una red de Fibonacci unidimensional por método de proyección. En el texto se ilustra la importancia de la razón dorada para esta construcción.

La línea recta LK (espacio físico) cruza varios cuadrados de la red, por ejemplo, el $ABCD$ en la figura 3.2(b). Cada vez que LK entre en un cuadrado, desde el vértice superior izquierdo de cada cuadrado se trazará una línea perpendicular a la línea recta LK . Así, en el cuadrado $ABCD$ el vértice superior izquierdo es D . Desde D se traza la línea DQ , perpendicular a LK como en la figura 2.3(c). De esta manera, se forman en LK los puntos Q, P, R, T, S, \dots y resulta que las distancias QP, RT, TS, \dots sólo adquieren dos valores, siendo QP, RT, TS, VW iguales entre sí y las distancias PR, SV, WZ también iguales entre sí. De las dos distancias que se forman, una es más larga que la otra. Por ejemplo, la relación entre las distancias PR y QP es:

$$\frac{QP}{PR} = \tau = \frac{\sqrt{5} + 1}{2}$$

Si se denomina al segmento largo A y al corto B , entonces se obtiene una secuencia de Fibonacci como se muestra en la figura 3.2(d).

Este método se puede utilizar para generar estructuras cuasiperiódicas multidimensionales a partir de redes en el hiper-espacio. Por ejemplo, para una estructura icosaedral se parte de un hiper-cubo de seis dimensiones y al proyectar a un espacio físico de tres dimensiones los seis vectores base del hiper-cubo se alinean con los seis ejes de simetría cinco del icosaedro [Janot, 1994].

3.3 Ordenamiento atómico de Fibonacci

En esta sección se construyen algunos modelos físicos para describir el comportamiento electrónico en cadenas de Fibonacci. En particular, nos interesa realizar un estudio sobre los efectos de la cuasiperiodicidad en las propiedades electrónicas del material, para lo cual partiremos de modelos sencillos con un solo orbital tipo s por átomo despreciando la interacción electrón-electrón, con el fin de facilitar el análisis y aislar los efectos.

El modelo de amarre fuerte basado en las funciones de Wannier es quizás el más simple que puede describir un ordenamiento cuasiperiódico de los átomos. El hamiltoniano de amarre fuerte puede escribirse como

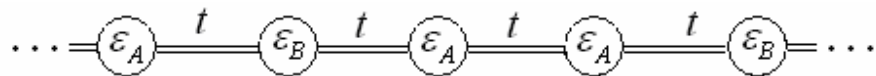
$$\hat{H} = \sum_j \varepsilon_j |j\rangle\langle j| + \sum_{\langle i,j \rangle} t_{i,j} |i\rangle\langle j|, \quad (3.3)$$

donde $t_{i,j}$ es la amplitud de probabilidad de salto entre sitios vecinos más cercanos i y j simbolizados por $\langle i,j \rangle$, ε_j y $|j\rangle$ son respectivamente la autoenergía y la función de Wannier localizadas en el sitio j .

Este modelo plantea dos parámetros; la autoenergía (ε_j) y la energía de salto ($t_{i,j}$). A continuación discutiremos las posibles variaciones de éstos que pueden presentarse en acomodos cuasi-cristalinos siguiendo la secuencia de Fibonacci.

3.3.1 Problema de Sitios

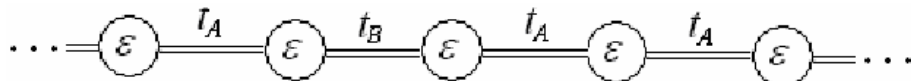
En este caso el arreglo es visto esencialmente como un ordenamiento de átomos con autoenergías distintas, ε_A y ε_B , y la misma energía de salto t entre cualquier par de sitios más próximos en el arreglo. Estas autoenergías se ordenan siguiendo la secuencia de Fibonacci como



donde las autoenergías se localizan en el interior de los círculos y las energías de salto encuentran sobre el enlace entre los átomos.

3.3.2 Problema de Enlaces

Este ordenamiento se entiende como una secuencia de átomos iguales con integrales de salto variables que pueden tomar los valores t_A y t_B , cuyo ordenamiento sigue la secuencia de Fibonacci como

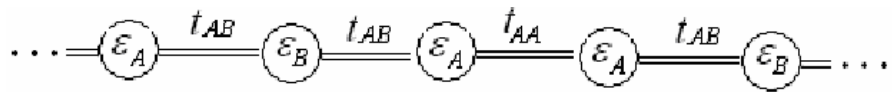


Este modelo se estudiará con más detalle en los siguientes capítulos debido a su sencillez en el proceso de renormalización.

3.3.3 Problema Mixto

Este arreglo podría considerarse como una extensión del problema de sitios con la

variación de que la energía de salto no permanece constante, depende de la naturaleza de los átomos entre los cuales ocurre el salto. Una representación de este problema puede encontrarse en el siguiente esquema



donde t_{AB} corresponde la energía de salto entre sitios A y B , independiente de su orden. Un estudio de este modelo se puede encontrar en la referencia [Sánchez, 2001].

Capítulo 4 Electrones en Cadenas de Fibonacci

Las cadenas de Fibonacci que se estudian en este capítulo constituyen un ejemplo simple e ilustrativo de las estructuras cuasicristalinas, como se vio en el capítulo 1. Por otro lado, los electrones pueden considerarse como el prototipo de las excitaciones elementales en sólidos y su comportamiento es extensible al análisis de otro tipo de excitaciones tales como fonones, magnones, etc.

4.14.1 Solución Analítica en Aproximantes

En vista que la mayoría de las propiedades físicas de los cuasicristales no se ha podido obtener de forma analítica, se construyen sistemas similares que retienen las características más importantes de las estructuras cuasiperiódicas infinitas. Un modelo de super-celdas con orden cuasiperiódico local es conocido como el modelo de aproximantes, en el cual se toma un segmento de la red cuasiperiódica infinita y se impone periodicidad como condición a la frontera para generar estructura de bandas. Cabe enfatizar que dichas bandas se deben a la periodicidad del modelo.

Consideremos el problema de enlaces discutido en la sección 3.3.2. Si se parte de una cadena de Fibonacci de generación tres y se impone la condición a la frontera periódica, se obtiene el siguiente aproximante $\dots \bullet A \bullet B \bullet A \bullet A \bullet B \bullet A \bullet A \bullet B \bullet A \bullet \dots$ donde los puntos sólidos indican la posición de los átomos y aquellos de mayor tamaño representan la frontera de las celdas. Si se parte del hamiltoniano de amarre fuerte dado por la ecuación (2.4), las auto-energías ε_j son iguales para el problema de enlaces. Dado que la física es invariante ante una traslación constante de energía, se toma $\varepsilon_j=0$. Además, el parámetro relevante es el cociente de las integrales de salto, es decir, t_A/t_B y por simplicidad se escoge $t_B=t$ como unidad de energía. Con el fin de aislar los efectos de la cuasi-periodicidad, durante toda la tesis se consideran únicamente orbitales tipo s , para los cuales las integrales de salto resultan siempre negativas como se muestra en el apéndice A.

Partimos de la ecuación de Schrödinger estacionaria dada por [Merzbacher, 1998]

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \quad (4.1)$$

donde \hat{H} es el hamiltoniano del sistema dado por la ecuación (2.4) y E es la energía asociada al estado $|\psi\rangle$. Debido a la simetría traslacional, la solución puede escribirse en el espacio recíproco k como [Sutton, 1994]

$$|\psi\rangle = \sum_m \left(c_1 e^{ik3ma} |m,1\rangle + c_2 e^{ik(3m+1)a} |m,2\rangle + c_3 e^{ik(3m+2)a} |m,3\rangle \right), \quad (4.2)$$

donde $|m,j\rangle$ representa la función de Wannier localizada en el sitio j dentro de la super-celda m que contiene tres átomos. Dentro de la aproximación de salto a primeros vecinos, los elementos de matriz del hamiltoniano distintos de cero en la

representación de estas funciones de Wannier son

$$\begin{aligned}\langle m,1|\hat{H}|m,2\rangle &= \langle m,2|\hat{H}|m,1\rangle = t_B \\ \langle m,2|\hat{H}|m,3\rangle &= \langle m,3|\hat{H}|m,2\rangle = t_A \\ \langle m,1|\hat{H}|m-1,3\rangle &= \langle m-1,3|\hat{H}|m,1\rangle = t_A\end{aligned}\quad . \quad (4.3)$$

Entonces, la ecuación (4.1) puede proyectarse en $\langle n, j|$ como

$$\begin{aligned}\langle n,1|\hat{H}|\psi\rangle &= c_2 e^{ik(3n+1)a} \langle n,1|\hat{H}|n,2\rangle + c_3 e^{ik(3n-1)a} \langle n,1|\hat{H}|n-1,3\rangle = c_2 e^{ik(3n+1)a} t_B + c_3 e^{ik(3n-1)a} t_A \\ \langle n,2|\hat{H}|\psi\rangle &= c_1 e^{ik(3n)a} \langle n,2|\hat{H}|n,1\rangle + c_3 e^{ik(3n+2)a} \langle n,2|\hat{H}|n,3\rangle = c_1 e^{ik(3n)a} t_B + c_3 e^{ik(3n+2)a} t_A \\ \langle n,3|\hat{H}|\psi\rangle &= c_1 e^{ik(3n+3)a} \langle n,3|\hat{H}|n+1,1\rangle + c_2 e^{ik(3n+1)a} \langle n,3|\hat{H}|n,2\rangle = c_1 e^{ik(3n+3)a} t_A + c_2 e^{ik(3n+1)a} t_A\end{aligned}\quad . \quad (4.4)$$

Por otro lado, la proyección del lado derecho de la ecuación (4.1) sobre el estado $\langle n, j|$ conduce a

$$\begin{aligned}\langle n,1|E|\psi\rangle &= E c_1 e^{ik3na} \\ \langle n,2|E|\psi\rangle &= E c_2 e^{ik(3n+1)a} \\ \langle n,3|E|\psi\rangle &= E c_3 e^{ik(3n+2)a}\end{aligned}\quad . \quad (4.5)$$

Al igualar las ecuaciones (4.4) y (4.5), a través de (4.1), se tiene que

$$\begin{cases} c_2 e^{ik(3n+1)a} t_B + c_3 e^{ik(3n-1)a} t_A = E c_1 e^{ik3na} \\ c_1 e^{ik(3n)a} t_B + c_3 e^{ik(3n+2)a} t_A = E c_2 e^{ik(3n+1)a} \\ c_1 e^{ik(3n+3)a} t_A + c_2 e^{ik(3n+1)a} t_A = E c_3 e^{ik(3n+2)a} \end{cases}, \quad (4.6)$$

Estas tres ecuaciones lineales homogéneas con tres incógnitas c_1 , c_2 y c_3 tienen solución distinta de cero si su determinante es cero, es decir,

$$\det \begin{vmatrix} -E & e^{ika} t_B & e^{-ika} t_A \\ e^{-ika} t_B & -E & e^{ika} t_A \\ e^{ika} t_A & e^{-ika} t_A & -E \end{vmatrix} = 0. \quad (4.7)$$

La ecuación (4.7) puede reescribirse como

$$E^3 - (2t_A^2 + t_B^2)E - 2t_A^2 t_B \cos(3ka) = 0, \quad (4.8)$$

cuyas soluciones se discuten con detalle en el apéndice B. Como el discriminante (Δ) de la ecuación (4.8) es

$$\Delta = \frac{[2t_A^2 t_B \cos(3ka)]^2}{4} - \frac{(2t_A^2 + t_B^2)^3}{27} \leq \frac{(2t_A^2 t_B)^2}{4} - \frac{(2t_A^2 + t_B^2)^3}{27} = -\frac{(8t_A^2 + t_B^2)(t_A^2 - t_B^2)^2}{27} \leq 0, \quad (4.9)$$

la ecuación (4.8) tiene tres soluciones reales que son

$$\left\{ \begin{array}{l} E_1 = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}}} + \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}}} \\ E_2 = \omega_+ \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}}} + \omega_+^2 \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}}} \\ E_3 = \omega_- \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}}} + \omega_-^2 \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}}} \end{array} \right. \quad (4.10)$$

donde $p = -(2t_A^2 + t_B^2)$, $q = -2t_A^2 t_B \cos(3ka)$ y $\omega_{\pm} = (-1 \pm \sqrt{-3})/2$.

En la ecuación (4.10) se encuentran las tres eigen-energías como función del vector de onda k para el aproximante de generación tres. En las figuras 4.1 (a-d) se muestran las estructuras de bandas en la primera zona de Brillouin para dicho aproximante con $t_A=0$, $0.4t_B$, $0.7t_B$ y t_B , respectivamente. Observe que cuando $t_A=t_B$, se tiene el caso límite de una cadena periódica cuyo ancho de banda es $4|t|$, ya que su relación de dispersión está dada por $E(k)=2t\cos(ka)$. La figura 4.1(d) es una representación reducida de dicha relación de dispersión. Por otro lado, cuando $t_A=0$ la cadena se reduce a un problema de átomos aislados y moléculas diatómicas aisladas, donde la integral de salto entre los átomos de la molécula es $t_B=t<0$. Por lo cual las eigen-energías moleculares se encuentran en $E=\pm t$. Así mismo los átomos aislados tienen eigen-energías localizadas en $E=0$, ya que sus auto energías se han elegido como cero.

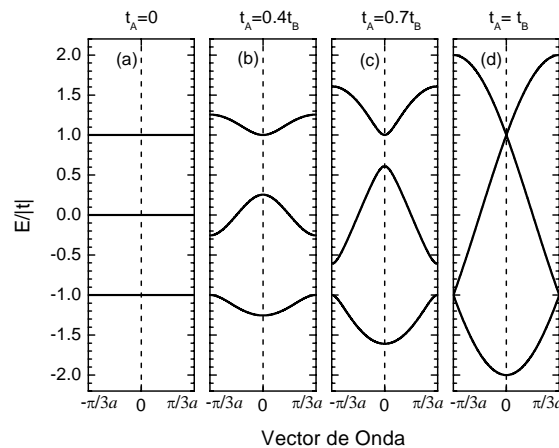


Figura 4.1. Estructuras de bandas en la primera zona de Brillouin para el problema de enlaces del aproximante generación tres de Fibonacci.

En la figura 4.2 se muestra un barrido de las eigen-energías en función de la variación de las integrales de salto t_A/t_B para el problema de enlaces del aproximante generación tres de Fibonacci. Observe que cuando $t_A/t_B=1$ existe una sola banda de

energías permitidas, lo cual era de esperarse puesto que nos encontramos en la cadena periódica. Al reducir el valor de t_A , la banda original se divide en tres asociadas a tres eigen-energías dadas por la ecuación (4.10).

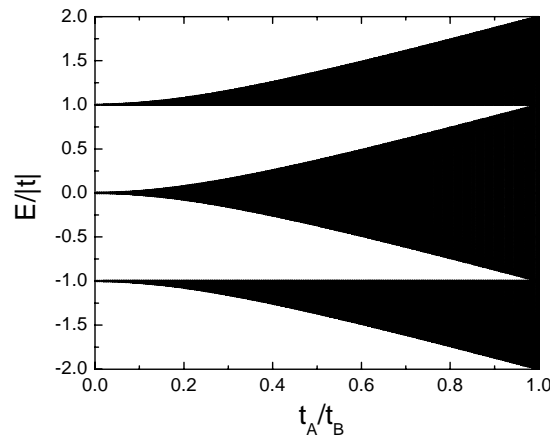


Figura 4.2. Representación gráfica de eigen-energías (E) en función del cociente de los parámetros de cuasiperiodicidad (t_A/t_B) del aproximante generación tres de Fibonacci para el problema de enlaces.

Otro aproximante soluble analíticamente consiste en celdas unitarias de 4 átomos, es decir, $\dots \bullet A \bullet B \bullet A \bullet A \bullet A \bullet B \bullet A \bullet A \bullet A \bullet B \bullet A \bullet A \bullet A \bullet \dots$, cuya celda unitaria constituye un fragmento de la cadena de Fibonacci de generación cuatro. Siguiendo un procedimiento similar al aproximante anterior se obtiene la siguiente condición de cuantización

$$\det \begin{vmatrix} -E & e^{ika}t_B & 0 & e^{-ika}t_A \\ e^{-ika}t_B & -E & e^{ika}t_A & 0 \\ 0 & e^{-ika}t_A & -E & e^{ika}t_A \\ e^{ika}t_A & 0 & e^{-ika}t_A & -E \end{vmatrix} = 0, \quad (4.11)$$

la cual puede reescribirse como

$$E^4 + (-3t_A^2 - t_B^2)E^2 + t_A^4 + t_A^2t_B^2 - 2t_A^3t_B \cos(4ka) = 0. \quad (4.12)$$

Esta última ecuación tiene las siguientes cuatro soluciones

$$E = \pm \sqrt{\frac{3t_A^2 + t_B^2 \pm \sqrt{(3t_A^2 + t_B^2)^2 + 4[t_A^4 + t_A^2t_B^2 - 2t_A^3t_B \cos(4ka)]}}{2}}. \quad (4.13)$$

La ecuación (4.13) es una relación de dispersión, una relación entre la energía (E) y el vector de onda (k), la cual puede representarse gráficamente como la estructura de bandas mostrada en la figura 4.3. Obsérvese que para el caso de $t_A=t_B$ existe una sola banda, cuyo ancho de banda es $4|t|$, lo cual corresponde a la relación de dispersión de una cadena periódica, similar al aproximante de 3 átomos discutido con anterioridad. Sin embargo, al reducir el valor de t_A se obtiene una estructura de cuatro bandas, debido a los cuatro grados de libertad internos dentro de la celda unitaria. Para el caso

límite en que $t_A=0$, la celda unitaria se reduce al caso de una molécula y dos átomos aislados, causando que la estructura de bandas se colapse en tres niveles discretos de energía localizados en $E=\pm 1$ y 0. Esta última energía se encuentra doblemente degenerada y corresponde a la auto-energía de los dos átomos aislados dentro de la celda unitaria.

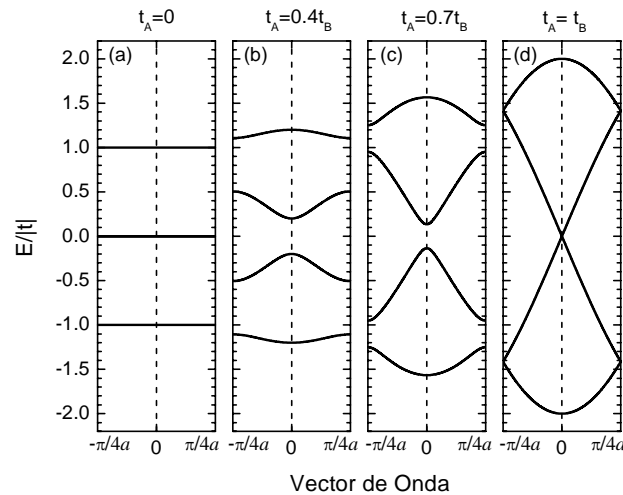


Figura 4.3. Estructuras de bandas en la primera zona de Brillouin para el problema de enlaces del aproximante de Fibonacci con celda unitaria de cuatro átomos.

En la figura 4.4 se presenta la evolución de la estructura de bandas como función de la intensidad de cuasi-periodicidad, definida como la razón entre t_A y t_B . En comparación con la figura 4.2, se observa que el nivel central a $t_A=0$ se bifurca produciendo una brecha de energía prohibida alrededor de $E=0$ que desaparece cuando $t_A=t_B$. Por otro lado, al igual que la estructura de bandas del aproximante de tres átomos, el espectro de eigenvalores es simétrico respecto a $E=0$, debido a que la red es bipartita y su espectro de eigen-energías es simétrico, como se discute en el apéndice C.

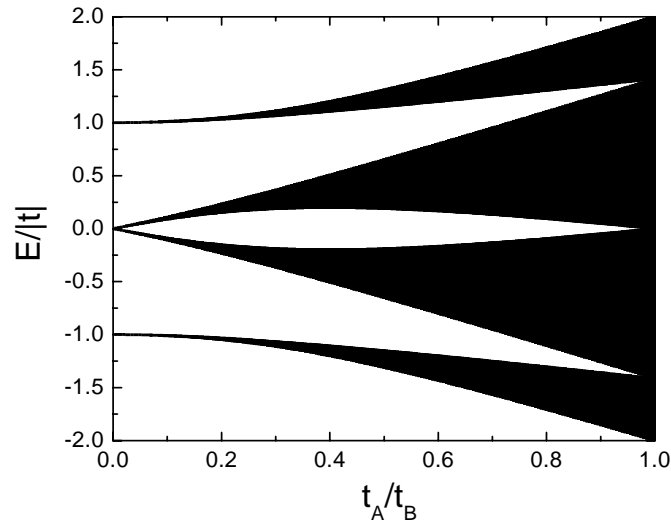


Figura 4.4. Representación gráfica de eigen-energías (E) en función del cociente de los parámetros de cuasiperiodicidad (t_A/t_B) del aproximante de Fibonacci de cuatro átomos para el problema de enlaces.

En principio el proceso de aproximantes permite estudiar redes cuasicristalinas de mayor tamaño. Sin embargo, el proceso requiere un excesivo tiempo de cómputo, ya que éste crece como N^3 , siendo N el número de sitios en la celda unitaria del aproximante. En la próxima sección se introduce un método alternativo que permite abordar redes cuasiperiódicas de tamaño macroscópico con un costo reducido en tiempo.

4.2 Renormalización Aplicada a Cadenas de Fibonacci

Como se comentó en la sección 2.3, el método de renormalización en el espacio real puede aplicarse al problema de enlaces de Fibonacci, con el objeto de describir las propiedades de dicha cadena cuasiperiódica de tamaño macroscópico.

Para el problema de Fibonacci, en el caso de enlaces existen dos tipos de enlaces t_A y t_B ordenados siguiendo la secuencia de Fibonacci. Los átomos conectados por dichos enlaces tienen todos la misma auto-energía y por simplicidad se toma como cero. En esta tesis se define a la primera generación formada por dos átomos unidos por un enlace t_A y la segunda formada por tres átomos y dos enlaces t_A y t_B que los unen. Las generaciones sucesivas siguen la relación que se muestra en la tabla 4.1

Tabla 4.1 Número de átomos y enlaces en cada generación de Fibonacci, problema de enlaces

Generación	No. Átomos	No. Enlaces	Generación	No. Átomos	No. Enlaces
1	2	1	21	17712	17711
2	3	2	22	28658	28657
3	4	3	23	46369	46368
4	6	5	24	75026	75025
5	9	8	25	121394	121393
6	14	13	26	196419	196418
7	22	21	27	317812	317811
8	35	34	28	514230	514229
9	56	55	29	832041	832040
10	90	89	30	1346270	1346269
11	145	144	31	2178310	2178309
12	234	233	32	3524579	3524578
13	378	377	33	5702888	5702887
14	611	610	34	9227466	9227465
15	988	987	35	14930353	14930352
16	1598	1597	36	24157818	24157817
17	2585	2584	37	39088170	39088169
18	4182	4181	38	63245987	63245986
19	6766	6765	39	102334156	102334155
20	10947	10946	40	165580142	165580141

El proceso de renormalización consiste en eliminar las coordenadas de los átomos interiores de las ecuaciones de movimiento. Por ejemplo, la generación dos tiene tres átomos descritos por el hamiltoniano de amarre fuerte [ver Ec. (2.4)] con integrales de salto a primeros vecinos, por lo que la ecuación de Dyson [ver Ec. (2.10)] asociada a este sistema es

$$\begin{pmatrix} z & -t_A & 0 \\ -t_A & z & -t_B \\ 0 & -t_B & z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & G_{13} \\ G_{21} & G_{22} & G_{23} \\ G_{31} & G_{32} & G_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.14)$$

donde $z=E+i\eta$ y G_{ij} representan los elementos de matriz de la función de Green. De esta última ecuación al multiplicar el segundo renglón por la primera columna se obtiene

$$zG_{21} - t_A G_{11} - t_B G_{31} = 0. \quad (4.15)$$

Dado que $z - \hat{H}$ es una matriz simétrica, ya que \hat{H} es hermitiano, la función de Green es una matriz simétrica [Lang, 1976]. Usando esta propiedad de simetría se tiene que $G_{21}=G_{12}$. Al sustituir la ecuación (4.15) en la ecuación obtenida al multiplicar el primer renglón y la primera columna de la ecuación (4.14) se obtiene

$$zG_{11} - \frac{t_A^2}{z}G_{11} - \frac{t_A t_B}{z}G_{31} = 1. \quad (4.16)$$

Identificamos t_A^2/z como la nueva auto-energía del sitio uno ó sitio izquierdo (E_{LL}) y

$t_A t_B / z$ como la nueva integral de salto $[t(2)]$ entre los sitios extremos. Continuando este proceso es posible obtener la auto-energía del sitio derecho. Por lo tanto, se pueden eliminar las coordenadas del sitio central reduciendo la ecuación (4.14) a una ecuación matricial de dos por dos de la siguiente forma,

$$\begin{pmatrix} z - E_{LL}(2) & t(2) \\ t(2) & z - E_{RR}(2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{LL} & G_{LR} \\ G_{RL} & G_{RR} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.17)$$

donde $G_{LL}=G_{11}$, $G_{LR}=G_{RL}=G_{13}$, $G_{RR}=G_{33}$, $E_{LL}(2) = \frac{t_A^2}{z}$, $E_{RR}(2) = \frac{t_B^2}{z}$ y $t(2) = \frac{t_A t_B}{z}$.

Aprovechando el método de adición para generar cadenas de Fibonacci se puede obtener la ecuación de movimiento de la generación n a partir de las generaciones $n-1$ y $n-2$ de la siguiente forma

$$\begin{pmatrix} z - E_{LL}(n-1) & -t(n-1) & 0 \\ -t(n-1) & z - E_M(n) & -t(n-2) \\ 0 & -t(n-2) & z - E_{RR}(n-2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & G_{13} \\ G_{21} & G_{22} & G_{23} \\ G_{31} & G_{32} & G_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.18)$$

donde E_{LL} , E_{RR} y $E_M = E_{RR}(n-1) + E_{LL}(n-2)$ representan respectivamente las energías de los sitios izquierdo, derecho y medio. Si se sigue un proceso análogo al caso de generación dos, puede eliminarse el sitio central y el sistema se reduce a una ecuación de la forma

$$\begin{pmatrix} z - E_{LL}(n) & t(n) \\ t(n) & z - E_{RR}(n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{LL} & G_{LR} \\ G_{RL} & G_{RR} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.19)$$

donde $E_{LL}(n) = E_{LL}(n-1) + \frac{t^2(n-1)}{z - E_M(n)}$, $E_{RR}(n) = E_{RR}(n-2) + \frac{t^2(n-2)}{z - E_M(n)}$ y $t(n) = \frac{t(n-1)t(n-2)}{z - E_M(n)}$ son los parámetros del hamiltoniano renormalizado a dos sitios. Éstas son las ecuaciones de recurrencia con las condiciones iniciales $E_{LL}(1)=E_{RR}(1)=0$, $t(1)=t_A$, $E_{LL}(2) = t_A^2/z$, $E_{RR}(2) = t_B^2/z$ y $t(2) = t_A t_B / z$.

En general, para sistemas no cristalinos el concepto del espacio recíproco carece de utilidad ya que no existe simetría traslacional. Una de las formas de estudiar la estructura de bandas del sistema es calcular la densidad de estados como función de la energía $[DOS(E)]$. Dicha DOS se define como el número de estados que se encuentran entre E y $E+dE$ y es una medida de la degeneración en cada energía. Partiendo de la ecuación (2.15) se escribe la DOS para una cadena de Fibonacci como

$$DOS(E) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} [\text{Im} S(E + i\eta)] = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left[\text{Im} \sum_j G_{jj}(E + i\eta) \right], \quad (4.20)$$

donde G_{jj} y $S(z) = \sum_j G_{jj}(z)$ representa los elementos diagonales de la matriz de la función de Green y su suma, respectivamente. Dado que $S(z)$ puede escribirse como una función de la función de Green de los sitios extremos y su correlación, es decir, G_{LL} , G_{RR} y G_{LR} , usando la ecuación de Dyson. Por ejemplo, para generación dos por definición se tiene que $S(2)=G_{11}+G_{22}+G_{33}$ y utilizando la ecuación (4.14) se obtiene

$$G_{22} = \frac{t_A^2}{z^2} G_{11} + \frac{t_B^2}{z^2} G_{33} + \frac{t_A t_B}{z^2} G_{13} + \frac{1}{z}. \quad (4.21)$$

Por lo cual

$$S(2) = \left(1 + \frac{t_A^2}{z^2}\right) G_{11} + \left(1 + \frac{t_B^2}{z^2}\right) G_{33} + \frac{t_A t_B}{z^2} G_{13} + \frac{1}{z}. \quad (4.22)$$

Una forma general de escribir la ecuación (4.22) para generación n podría ser

$$S(n) = A(n) G_{11}(n) + B(n) G_{33}(n) + C(n) G_{13}(n) + D(n). \quad (4.23)$$

Si se extiende el procedimiento anterior a generación n agregando segmentos de generaciones $F(n-1)$ y $F(n-2)$ se obtiene a partir de la ecuación (4.18) que

$$\begin{aligned} G_{12} &= \frac{t(n-1)}{z - E_M(n)} G_{11} + \frac{t(n-2)}{z - E_M(n)} G_{13} \\ G_{23} &= \frac{t(n-1)}{z - E_M(n)} G_{13} + \frac{t(n-2)}{z - E_M(n)} G_{33} \\ G_{22} &= \frac{t^2(n-1)}{[z - E_M(n)]^2} G_{11} + \frac{t^2(n-2)}{[z - E_M(n)]^2} G_{33} + \frac{t(n-1)t(n-2)}{[z - E_M(n)]^2} G_{13} + \frac{1}{z - E_M(n)} \end{aligned} \quad (4.24)$$

Por otro lado, a partir de la definición de $S(n)$ y tomando en cuenta que el sitio central se está tomando en consideración dos veces, tanto en la generación $S(n-1)$ como en la $S(n-2)$

$$S(n) = S(n-1) + S(n-2) - G_{22}. \quad (4.25)$$

Usando las ecuaciones (4.22-24) se puede reescribir $S(n)$ como

$$\begin{aligned}
S(n) &= A(n-1)G_{11} + B(n-1)G_{22} + C(n-1)G_{12} + D(n-1) \\
&+ A(n-2)G_{22} + B(n-2)G_{33} + C(n-2)G_{23} + D(n-2) - G_{22} \\
&= \left\{ A(n-1) + \frac{t^2(n-1)}{[z-E_M(n)]^2} [A(n-2) + B(n-1) - 1] + \frac{t(n-1)}{z-E_M(n)} C(n-1) \right\} G_{11} \\
&+ \left\{ B(n-2) + \frac{t^2(n-2)}{[z-E_M(n)]^2} [A(n-2) + B(n-1) - 1] + \frac{t(n-2)}{z-E_M(n)} C(n-2) \right\} G_{33} \\
&+ \left\{ \frac{2t(n-1)t(n-2)}{[z-E_M(n)]^2} [A(n-2) + B(n-1) - 1] + \frac{t(n-2)}{z-E_M(n)} C(n-1) + \frac{t(n-1)}{z-E_M(n)} C(n-2) \right\} G_{13} \\
&+ \left\{ D(n-1) + D(n-2) + \frac{1}{z-E_M(n)} [A(n-2) + B(n-1) - 1] \right\}
\end{aligned} \tag{4.26}$$

Por lo tanto, las relaciones de recurrencia para *DOS* están dadas por

$$\begin{cases}
A(n) = A(n-1) + \frac{t^2(n-1)}{[z-E_M(n)]^2} [A(n-2) + B(n-1) - 1] + \frac{t(n-1)}{z-E_M(n)} C(n-1) \\
B(n) = B(n-2) + \frac{t^2(n-2)}{[z-E_M(n)]^2} [A(n-2) + B(n-1) - 1] + \frac{t(n-2)}{z-E_M(n)} C(n-2) \\
C(n) = \frac{2t(n-1)t(n-2)}{[z-E_M(n)]^2} [A(n-2) + B(n-1) - 1] + \frac{t(n-2)}{z-E_M(n)} C(n-1) + \frac{t(n-1)}{z-E_M(n)} C(n-2) \\
D(n) = D(n-1) + D(n-2) + \frac{1}{z-E_M(n)} [A(n-2) + B(n-1) - 1]
\end{cases}, \tag{4.27}$$

con las siguientes condiciones iniciales

$$\begin{aligned}
A(1) &= B(1) = 1, \quad C(1) = D(1) = 0 \\
A(2) &= 1 + \frac{t_A^2}{z^2}, \quad B(2) = 1 + \frac{t_B^2}{z^2} \\
C(2) &= \frac{t_A t_B}{z^2}, \quad D(2) = \frac{1}{z}
\end{aligned} \tag{4.28}$$

En las figuras 4.5(a-d) se presenta la *DOS* por unidad de sitio en función de la energía (E) para una cadena de Fibonacci de enlaces generación cuarenta con $N=165'580,142$ átomos, para $t_A=0$, $0.4t_B$, $0.7t_B$ y t_B siendo $t_B=t$. Los cálculos numéricos han sido realizados en cuádruple precisión usando las relaciones de recurrencia de la ecuación (4.27) con una parte imaginaria de la energía $\eta=10^{-4}|t|$. Las gráficas están hechas con un muestreo de ochenta mil energías uniformemente distribuidas. Hemos verificado que la integral bajo estas curvas es siempre uno, puesto que se tiene un grado de libertad por átomo. En el caso en que $t_A=0$ se observan tres deltas de tipo Dirac ubicadas en $E=0$ y $E=\pm 1$, debido a que en este límite el sistema se reduce a átomos y moléculas diatómicas aislados. Adicionalmente la altura relativa de dichas deltas es la razón áurea $\tau = (1+\sqrt{5})/2 \approx 1.618034$ la cual confirma que la proporción entre enlaces tipo B y pares de enlaces tipo A en una cadena de Fibonacci suficientemente grande tiende a la razón áurea. En el otro caso límite en que $t_A=t_B=t$ se observa una sola banda permitida de energías, en cuyos

extremos localizados en $\pm 2|t|$ la DOS diverge ya que en estos puntos la velocidad de grupo es cero y a dichos puntos se les denomina singularidades de Van Hove [Kittel, 1987]. Cabe mencionar que para $t_A < t_B$ se observa un espectro de tipo Cantor [Kohmoto, 1983], el cual no contiene intervalos de energía, tampoco existen puntos aislados, por lo cual constituye un espectro singularmente continuo [Sütö, 1994].

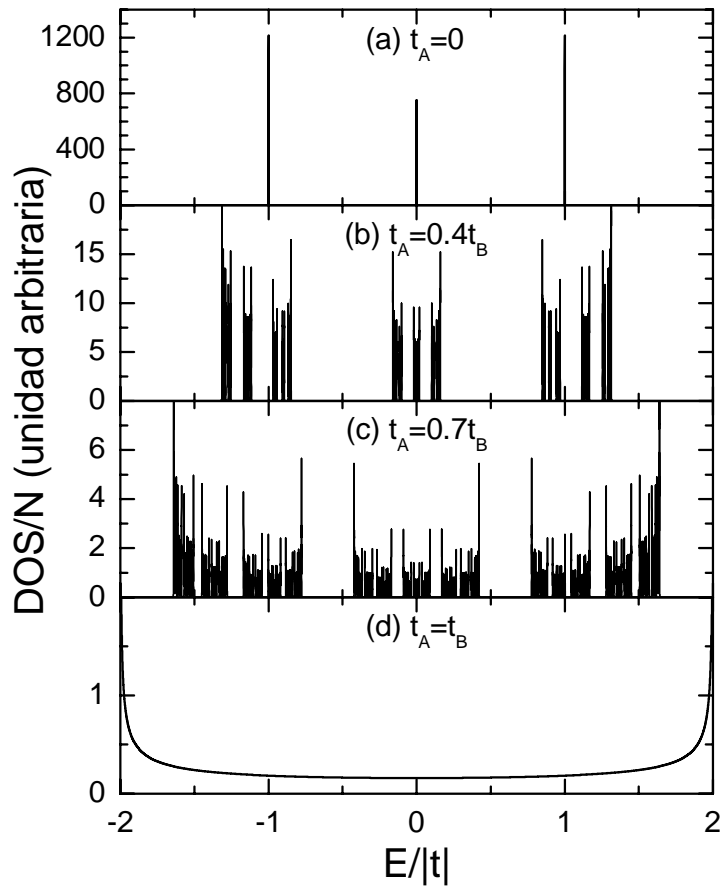


Figura 4.5 Densidad de estados (DOS) normalizada como función de energía (E) para una cadena de Fibonacci generación cuarenta con $N=165'580,142$ átomos.

A continuación se presenta en la figura 4.6 un barrido de las eigen-energías como función de la intensidad de cuasiperiodicidad (t_A/t_B) en una cadena de Fibonacci con los mismos parámetros que la figura 4.5. El barrido está compuesto de doscientos valores de t_A/t_B y las energías permitidas fueron obtenidas a partir de la DOS mostrada en la figura 4.5, registrándolas si su DOS es mayor que 0.1. Obsérvese que los casos límite $t_A=t_B=t$ y $t_A=0$ corresponden a las figuras 4.5 (a) y (d), respectivamente. Así mismo, se observa que existe una ramificación en las energías permitidas como se había notado en el análisis de los aproximantes. En este caso la estructura tiene mayor complejidad, debido a la cuasiperiodicidad. En principio el proceso de ramificación en una red cuasiperiódica infinita es de orden infinito. Sin embargo, la presentación de resultados numéricos tiene la limitación de que las funciones delta alrededor de las eigen-energías en la DOS tienen un semi-ancho de η

y el muestreo de energías es siempre un número finito. Debido a que el cálculo numérico contiene una estructura de mayor riqueza que la presentada en la figura 4.6 hemos decidido mostrar ampliaciones del espectro como se muestra en la figura 4.7.

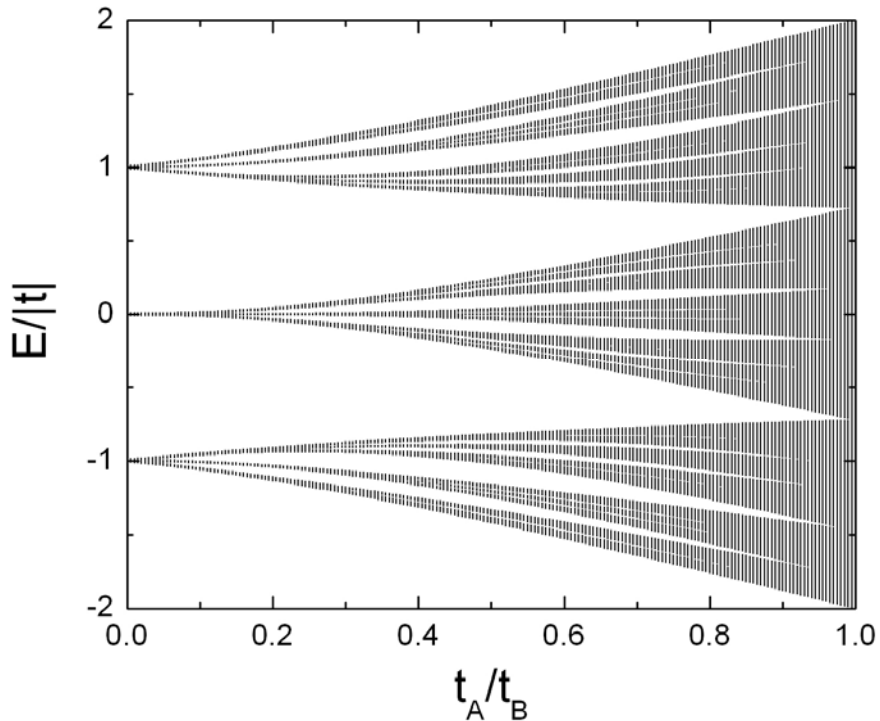


Figura 4.6 Representación gráfica de eigen-energías (E) en función del cociente de los parámetros de cuasiperiodicidad (t_A/t_B) para el mismo sistema de la figura 4.5.

En la figura 4.7 se presentan tres ampliaciones sucesivas de una porción pequeña de la DOS para $t_A=0.7t_B$ [ver figura 4.5 (c)] alrededor de $E=0$, mostrando la autosimilaridad del espectro, debido a que éste constituye un conjunto de Cantor. Cabe mencionar que las partes imaginarias de la energía en la función de Green son $\eta=10^{-4}$, 10^{-5} , 10^{-6} y 10^{-7} para las figuras 4.7 (a)-(d), respectivamente.

En la próxima sección se discutirá la capacidad de transmisión de información a través de estos estados fractalmente distribuidos, mediante un análisis de la transmitancia dentro del formalismo de Landauer.

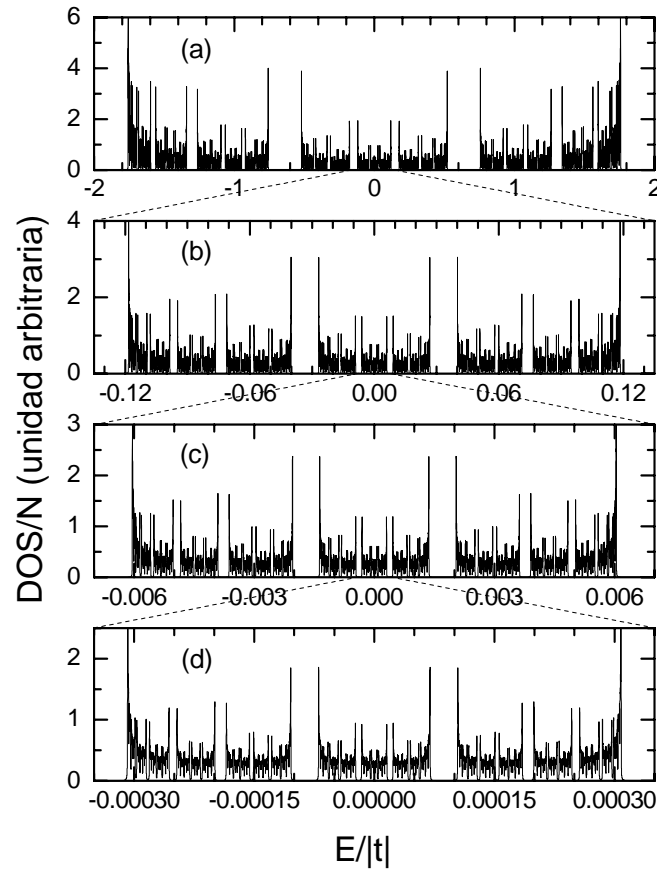


Figura 4.7 Amplificaciones de la densidad de estados (*DOS*) normalizada como función de la energía (*E*) alrededor de $E=0$.

4.3 Transmitancia

Desde el punto de vista cuántico, los electrones se comportan como ondas y como partículas. Para entender las propiedades de transporte electrónico de un material, se estudia la propagación de la función de onda electrónica dentro del mismo. Por lo que la conductividad eléctrica se relaciona con la transmitancia electrónica del sistema como se discutió en la sección 2.4.

Para conocer la manera en que se conduce la electricidad en los materiales, se requiere describir la dinámica de los electrones dentro de ellos. Consideremos un sistema localizado entre los sitios $n=1$ y $n=N$, conectado a sus extremos con dos guías semi-infinitas, donde la dinámica del electrón se describe por ondas planas en una red periódica con parámetro a , es decir, [Sütö, 1994]

$$\psi_k(n) = \begin{cases} Ae^{ikna} + Be^{-ikna} & \text{si } n \leq 1 \\ Ce^{ikna} + De^{-ikna} & \text{si } n \geq N \end{cases} \quad (4.29)$$

En el momento en que el electrón incide en un extremo del material, si su energía (E) se localiza dentro de la banda de energía permitida del mismo, se transportará con una cierta probabilidad ó transmitancia al otro extremo. Si en el extremo izquierdo del material ($n=1$) la onda incide en la dirección $+k$ con una amplitud $A=1$ y de esta onda incidente, entonces una parte de la onda se refleja en dirección opuesta a la incidental con amplitud $B=r$ y la otra se transmite a través del material con amplitud $C=t$. Si las ondas se propagan dentro de las guías sin reflexión, entonces $D=0$. Si además no existen fuentes ni sumideros de electrones de conducción en el material, las amplitudes de reflectancia y de transmitancia se relacionan como

$$|r|^2 + |t|^2 = 1. \quad (4.30)$$

En general, la dispersión de la onda al viajar a través del material se puede describir como

$$\begin{pmatrix} te^{ik(N+1)a} \\ te^{ikNa} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ika} + re^{-ika} \\ 1+r \end{pmatrix}, \quad (4.31)$$

donde se ha supuesto que al propagarse la onda en la guía la amplitud se conserva y la fase se modifica por un factor de e^{ika} entre sitios vecinos. Además, la condición a la frontera expresada en la ecuación (4.31) prevé la descripción cuántica del material dentro del formalismo de amarre fuerte a primeros vecinos, a través de la matriz de transferencia, la cual relaciona las amplitudes de la función de onda a través de la ecuación de Schrödinger cuyo hamiltoniano está dado por la ecuación (2.4). En otras palabras, si la función de onda se escribe como una combinación lineal de funciones de Wannier,

$$|\psi\rangle = \sum_j c_j |j\rangle, \quad (4.32)$$

la ecuación de Schrödinger estacionaria (4.1) derivada del hamiltoniano (2.4) puede escribirse como

$$c_{j-1}t_{j,j-1} + c_j\varepsilon_j + c_{j+1}t_{j,j+1} = Ec_j, \quad (4.33)$$

la cual puede expresarse en forma matricial como

$$\begin{pmatrix} c_{j+1} \\ c_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (E - \varepsilon_j)/t_{j,j+1} & -t_{j,j-1}/t_{j,j+1} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_j \\ c_{j-1} \end{pmatrix} = M_j \begin{pmatrix} c_j \\ c_{j-1} \end{pmatrix}, \quad (4.34)$$

donde la matriz de dos por dos se denomina como la matriz de transferencia (M_j). La ecuación (4.34) determina las amplitudes de la función de onda en los sitios j y $j+1$ a partir de $j-1$ y j . Para un sistema de N sitios los extremos se relacionan a través de la multiplicación de las matrices de transferencia como

$$\begin{pmatrix} c_{N+1} \\ c_N \end{pmatrix} = M_N M_{N-1} \cdots M_2 M_1 \begin{pmatrix} c_1 \\ c_0 \end{pmatrix}, \quad (4.35)$$

donde el producto de las matrices de transferencia se identifica con la matriz de transferencia la ecuación (4.31) al conectar la muestra por los extremos con las guías semi-infinitas, es decir,

$$\Pi(n) \equiv \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix} = M_R M_N M_{N-1} \cdots M_2 M_1 M_L = M_R M(n) M_L, \quad (4.36)$$

donde las matrices M_L y M_R que depende la naturaleza del último enlace de la cadena de Fibonacci, conectan las guías con el sistema y están dadas por

$$M_L = \begin{pmatrix} E/t_A & -t_B/t_A \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad M_R(n) = \begin{cases} \begin{pmatrix} E/t_B & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \text{si } n \text{ par} \\ \begin{pmatrix} E/t_B & -t_A/t_B \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \text{si } n \text{ impar} \end{cases}. \quad (4.37)$$

Cabe mencionar que para un sistema unidimensional de tamaño macroscópico la ecuación (4.36) involucra el producto de 10^8 matrices de transferencia y se calculará por el método de renormalización, siguiendo la filosofía discutida en la sección 4.2 basada en el método de adición. La renormalización para matriz de transferencia consiste en representar a cada generación de Fibonacci por una matriz de transferencia efectiva y construir la matriz de transferencia de generación n [$M(n)$] mediante el producto de matrices de generaciones anteriores $n-1$ [$M(n-1)$] y $n-2$ [$M(n-2)$], unidas a través de una matriz de conexión. [$M_c(n)$], es decir,

$$M(n) = M(n-2) M_c(n) M(n-1), \quad (4.38)$$

donde para el problema de enlaces con auto-energía de todos los átomos igual a cero ($\varepsilon_j=0$) la matriz de conexión está dada por

$$M_c(n) = \begin{cases} \begin{pmatrix} E/t_A & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \text{si } n \text{ es par} \\ \begin{pmatrix} E/t_A & -t_B/t_A \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \text{si } n \text{ es impar} \end{cases}. \quad (4.39)$$

Las condiciones iniciales son

$$M(2) = \begin{pmatrix} E/t_B & -t_A/t_B \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.40)$$

y

$$M(3) = \begin{pmatrix} E/t_A & -t_B/t_A \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E/t_B & -t_A/t_B \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{E^2}{t_A t_B} - \frac{t_B}{t_A} & -\frac{E}{t_B} \\ \frac{E}{t_B} & -\frac{t_A}{t_B} \end{pmatrix}. \quad (4.41)$$

Con este método de renormalización se puede calcular con muy poco esfuerzo computacional los coeficientes τ_{ij} de la ecuación (4.31). Una vez obtenidos dichos coeficientes quedan determinadas las amplitudes de reflectancia (r) y transmitancia (τ), las cuales constituyen las dos incógnitas de las dos ecuaciones expresadas en Ec. (4.31). Las soluciones de dichas ecuaciones son [Sütö, 1994]

$$\tau = \frac{-2i \sin(ka) e^{-ikNa}}{\tau_{11} e^{-ika} + \tau_{12} - e^{ika} (\tau_{21} e^{-ika} + \tau_{22})} \quad (4.42)$$

y

$$r = -\frac{\tau_{11} e^{ika} + \tau_{12} - e^{ika} (\tau_{21} e^{ika} + \tau_{22})}{\tau_{11} e^{-ika} + \tau_{12} - e^{ika} (\tau_{21} e^{-ika} + \tau_{22})}, \quad (4.43)$$

donde el vector de onda k se relaciona con la energía E a través de la relación de dispersión $2t \cos(ka) = E$, donde t es la integral de salto de la cadena periódica en las guías. Por lo tanto, la transmitancia (T) se puede escribir como [Jin, 1997]

$$T(E) \equiv |\tau|^2 = \frac{4 - (E/t)^2}{[\tau_{21} - \tau_{12} + (\tau_{22} - \tau_{11})E/2t]^2 + (\tau_{22} + \tau_{11})^2 [1 - (E/2t)^2]}. \quad (4.44)$$

En general, la transmitancia puede tomar valores entre cero y uno dada la ecuación (4.30). Si un estado tiene transmitancia uno, se conoce como estado transparente, es decir, un electrón que ocupa dicho estado se conduce de forma balística en el sistema independiente de su tamaño. Por ejemplo, en sistemas periódicos todos los estados dentro de la banda de energías permitidas son transparentes. Así mismo, se han encontrado estados transparentes para $E=0$ en cadenas de Fibonacci tipo enlaces iniciando con t_B cada tres generaciones siendo $n=3i+1$ [Sánchez, 2004] e iniciando con t_A cada seis generaciones siendo $n=6i$ (ver apéndice D), donde i es un número natural.

A continuación en las figuras 4.8(a-c) se presenta la transmitancia (T) en función de la energía (E) por unidad de la integral de salto de las guías ($|t|$) para una cadena de Fibonacci de enlaces generación cuarenta con $N=165'580,142$ átomos con $t_A=0.4t_B$, $0.7t_B$ y t_B , respectivamente, siendo $t_B=t$. Los cálculos numéricos han sido realizados en cuádruple precisión usando las relaciones de recurrencia dadas por la ecuación (4.38). Las gráficas están hechas con un muestreo de cuatro mil energías uniformemente distribuidas. Para el caso de $t_A=t_B$ [ver figura 4.8(c)] se verifica que la transmitancia del sistema es uno ya que corresponde a la de una cadena periódica en toda la banda de energía permitida que se encuentra entre $\pm 2|t|$. Al reducir el valor de

t_A [ver figura 4.5(a) y (b)] el espectro de la transmitancia se reduce a un número pequeño de energías. Este hecho podría deberse a que al incrementar el grado de desorden (reduciendo t_A) se localizan los estados que se encuentran en los extremos de cada minibanda y en consecuencia, las minibandas reducen su ancho a uno infinitesimal, generalmente centrado en un número irracional, excepto en $E=0$ y algunos más. Adicionalmente se comprueba que la altura de la transmitancia es siempre menor que uno y en particular para generación cuarenta el estado $E=0$ no es un estado transparente (ver apéndice D). Para el caso límite $t_A=0$ se observa que todo el espectro de transmitancia se reduce a cero, incluyendo los tres eigen-valores permitidos en el espectro de la densidad de estados (ver figura 4.5), ya que la cadena está fragmentada físicamente.

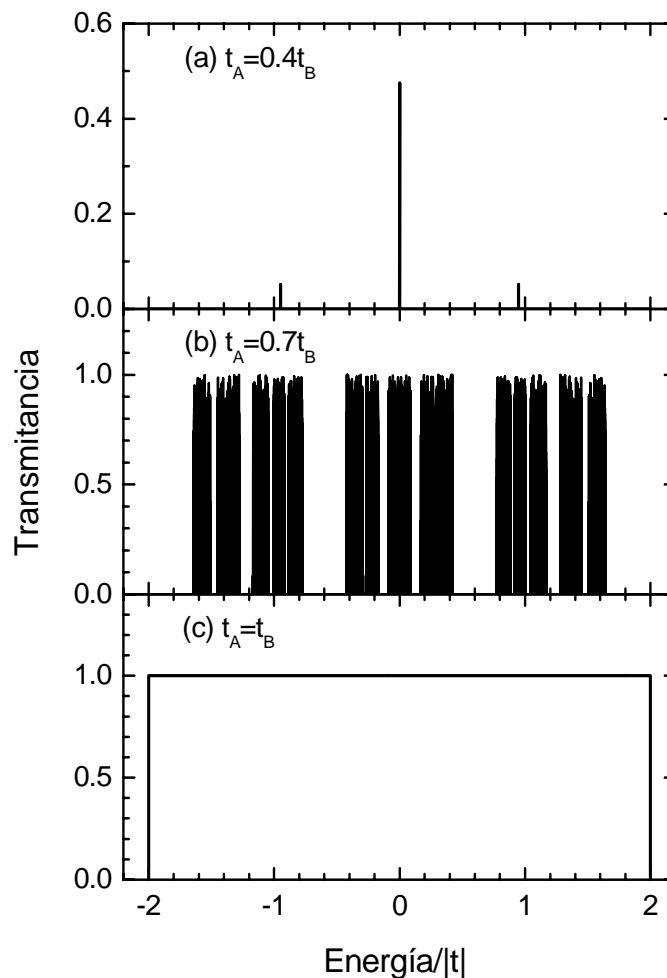


Figura 4.8 Transmitancia como función de la energía ($E/|t|$) para una cadena de Fibonacci de enlaces generación cuarenta con $N=165'580,142$ átomos, para (a) $t_A=0.4t_B$, (b) $t_A=0.7t_B$ y (c) $t_A=t_B$.

A continuación verificaremos que la estructura de bandas mostrada en el espectro de *DOS* coincide con la del espectro de transmitancia. Sin embargo, la altura ó los valores de transmitancia dependen del grado de localización de los estados

correspondientes. En las figuras 4.9(a-d) se muestra una comparación de la transmitancia (T) y la densidad de estados normalizada (DOS/N) en función de la energía ($E/|t|$) para una cadena de Fibonacci de enlaces generación $n=42$ con $N=433'494,438$ átomos, para (a) $t_A=0.5t_B$, (b) $t_A=0.7t_B$, (c) $t_A=0.9t_B$, y (d) $t_A=t_B$, siendo $t_B=t$. Los cálculos numéricos han sido realizados en cuádruple precisión usando las relaciones de recurrencia de la ecuación (4.38) y (4.27) para la transmitancia (T) y la densidad de estados (DOS), respectivamente. Las gráficas están hechas con un muestreo de cuatrocientas mil energías uniformemente distribuidas, la parte imaginaria de la energía $\eta=10^{-4}|t|$ para la DOS . Se puede constatar que la ubicación de las brechas energéticas mostradas en DOS y en T coincide. Así mismo se observa que la transmitancia electrónica para esta generación en $E=0$ es siempre un estado transparente independiente del valor de t_A , como se demuestra analíticamente en el apéndice D.

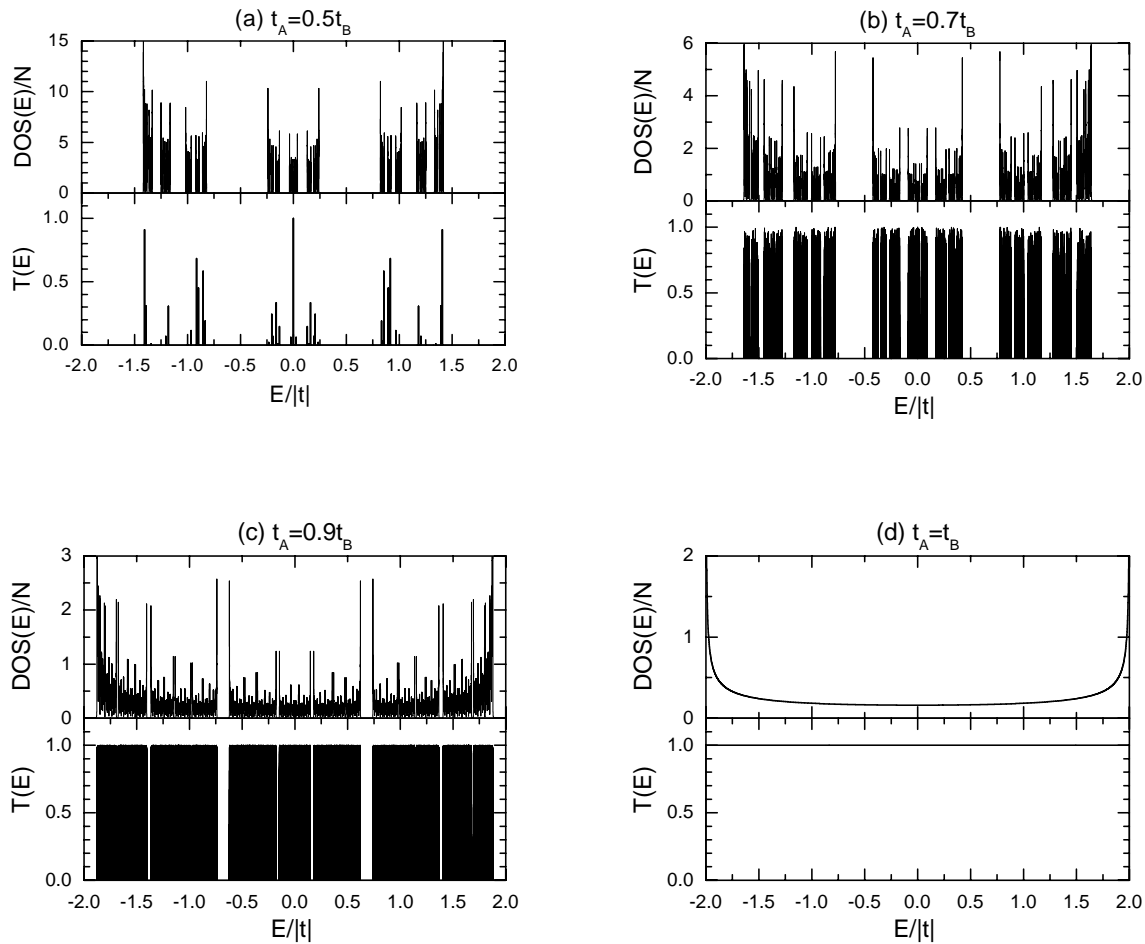


Figura 4.9 Transmitancia (T) y la densidad de estados (DOS) como función de la energía ($E/|t|$) para una cadena de Fibonacci de enlaces generación 42 con $N=433'494,438$ átomos, (a) $t_A=0.5t_B$, (b) $t_A=0.7t_B$, (c) $t_A=0.9t_B$ y (d) $t_A=t_B$.

En el siguiente capítulo se analizarán los efectos de un fasón en las propiedades electrónicas de una red cuasiperiódica.

Capítulo 5 Fasones en Sistemas Cuasiperiódicos

Durante el estudio de estructuras cuasicristalinas en los capítulos anteriores se ha supuesto que los átomos se encuentran en reposo, en posiciones de equilibrio. Sin embargo, los átomos siempre oscilan alrededor de sus posiciones de equilibrio y los modos normales de esta oscilación se conocen como fonones [Ashcroft, 1976]. Existen estructuras en las cuales ciertos átomos experimentan un doble pozo próximo en su energía potencial, cuyos mínimos tienen energías muy similares, haciendo posibles saltos ocasionales de un mínimo al otro activados por la energía térmica. A dichas imperfecciones locales se les denomina fasones [Janot, 1994]. La presencia de los fasones puede cambiar de forma notable ciertas propiedades macroscópicas del material, por ejemplo, un fasón coherente puede ser observado en los espectros de difracción [Naumis, 1999]. En esta tesis se estudian los efectos fasónicos individuales en las propiedades electrónicas de cadenas de Fibonacci.

Una particularidad de los cuasicristales es que presentan grados de libertad adicionales relacionados con el hiper-espacio y pueden tener influencia en el comportamiento de las excitaciones elementales. Para un hiper-cubo en D dimensiones, una estructura cuasiperiódica se genera al proyectar a un espacio de d dimensiones con $d < D$. De esta manera se tienen $D-d$ grados de libertad extra que pueden cambiar de manera importante algunas propiedades físicas del sistema. Un cambio en estos grados de libertad extra produce un reajuste local en algunos sitios atómicos en el espacio físico de d dimensiones y recibe el nombre de fasones.

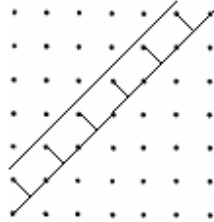
5.15.1 Variedades de Fasones

Ya que los fasones representan un reajuste de los sitios de la red y dado que existen distintos métodos de construcción para llegar a una cadena de Fibonacci como se muestra en la sección 3.2. A continuación se discuten algunos métodos para la generación de fasones en cadenas de Fibonacci.

5.1.1 Fasón por Proyección

El método de proyección discutido en la sección 3.2.3, parte de un par de líneas -una limitante y otra del espacio proyectado- que forman una ventana con pendiente irracional y generan un arreglo atómico de Fibonacci como se muestra en la figura 3.2. En seguida se presentan algunos métodos de generar un fasones haciendo uso del método de proyección.

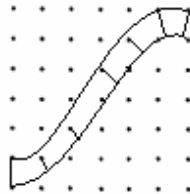
1. Cambiar la pendiente de las líneas limitante y del espacio proyectado de forma que tengan la misma pendiente racional, generando un aproximante. De esta manera las fluctuaciones fasónicas pueden también generar un orden periódico en una estructura inicialmente cuasiperiódica.



2. Modificar ambas líneas en cada intervalo a pendientes racionales, de forma que el aproximante generado cambie cada vez que se varía la pendiente de las líneas que lo generan. Este método produce una cadena formada por aproximantes distintos.



3. Curvar ambas líneas manteniendo una distancia fija entre éstas, generando así una estructura que en promedio es un arreglo de Fibonacci con algunos defectos. Si esta curva es periódica genera un fasón coherente.

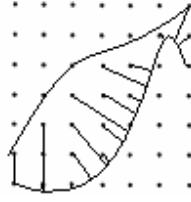


4. Torcer únicamente la línea limitante respecto a la línea del espacio proyectado, produciendo defectos en los sitios en que se encuentra curvada la línea limitante. Si esta curva es periódica genera también fasones coherentes. En otro extremo, si la limitante toma una fluctuación específica pequeña, este método puede crear un fasón local.



5. Curvar ambas líneas sin restringir la curvatura ni la distancia a ambas líneas,

generando así una secuencia altamente desordenada.



En resumen, el método de corte y proyección permite crear diversos tipos de fasones, en particular fasones locales, los cuales se estudiarán con mayor profundidad en esta tesis.

5.1.2 Fasón por Sustitución

Como se discutió en la sección 3.2.2, es posible generar cadenas de Fibonacci al suponer la reproducción de conejos inmortales. De igual manera es posible generar fasones locales haciendo uso de la regla de sustitución estándar excepto en algún momento y lugar específico de la cadena, una equivocación que consiste en sustituir A por BA en lugar de AB .

5.1.3 Fasón por Adición

Este método sigue la regla de concatenación que se discutió en la sección 3.2.1, siguiendo la filosofía de este arreglo es posible generar fasones locales al intercambiar cualesquiera dos generaciones sucesivas, es decir, invertir el orden de la adición $F_f(n) = F(n-2) \oplus F(n-1)$ en lugar de $F(n) = F(n-1) \oplus F(n-2)$. A continuación, se demuestra por inducción matemática que al invertir el orden de la adición se genera un fasón local -un intercambio en un par de enlaces adyacentes distintos- al final de la cadena de la generación en que se invierte.

Para $n=3$, la cadena perfecta es

$$F(n) = F(n-1) \oplus F(n-2) = ABA, \quad (5.1)$$

y con el fasón

$$F_f(n) = F(n-2) \oplus F(n-1) = AAB. \quad (5.2)$$

En otras palabras, en esta generación se observa que la inversión es en las últimas dos letras.

Supóngase que la hipótesis es válida para $n=m$, es decir, las dos últimas letras de la generación m se invierten en

$$F_f(m) = F(m-2) \oplus F(m-1), \quad (5.3)$$

con respecto a

$$F(m) = F(m-1) \oplus F(m-2). \quad (5.4)$$

Para $n=m+1$, se tiene que

$$F_f(m+1) = F(m-1) \oplus F(m), \quad (5.5)$$

y

$$F(m+1) = (F(m-1) \oplus F(m-2)) \oplus F(m-1) = F(m-1) \oplus F_f(m), \quad (5.6)$$

por lo que la ecuación (5.6) difiere de la (5.5) por un par de enlaces que se localizan al final de la cadena, como consecuencia de las ecuaciones (5.3) y (5.4). Por lo tanto, se cumple que al invertir el orden en la adición, se invierte un par de enlaces al final de la cadena en la generación del fasón.

Las cadenas con defectos fasónicos que se estudian a lo largo de esta tesis son generadas usando este método con un solo defecto local. En consecuencia utilizaremos dos números para caracterizar una cadena de Fibonacci con fasón, ellos son la generación total (n) de la cadena y la generación de fasón (f) donde se invierte la secuencia de adición. Cabe enfatizar que después de la generación de fasón las adiciones posteriores a f se realizan de la manera normal. Un ejemplo de este método se puede observar para $n=6$ y $f=4$, la cadena con un fasón local $F_f(n)$ está dada por $F_4(6)=ABABAABAABAAB$ a diferencia de $F(6)=ABAABABAABAAB$, es decir, los enlaces 4 y 5 están intercambiados.

En la siguiente sección se muestra el método de renormalización aplicado a cadenas cuasiperiódicas con fasones.

5.2 Renormalización Incluyendo Fasón

Como se muestra en la sección 4.2, el método de renormalización permite abordar cadenas de Fibonacci de tamaño macroscópico. En este capítulo se hace una extensión de dicho método a cadenas de Fibonacci con fasón para el caso de enlaces. A continuación se muestran las nuevas fórmulas de recurrencia.

Para el caso de la *DOS*, se parte de las mismas condiciones iniciales, dadas en la sección 4.2 $E_{LL}(1)=E_{RR}(1)=0$, $t(1)=t_A$, $E_{LL}(2)=t_A^2/z$, $E_{RR}(2)=t_B^2/z$ y $t(2)=t_A t_B/z$, las nuevas auto energías efectivas para la generación de fasón f son

$$E_{LL}(f) = E_{LL}(f-2) + \frac{t^2(f-2)}{z - E_M(f)}, \quad E_{RR}(f) = E_{RR}(f-1) + \frac{t^2(f-1)}{z - E_M(f)} \quad \text{y} \quad t(f) = \frac{t(f-1)t(f-2)}{z - E_M(f)}. \quad (5.8)$$

De igual forma, las nuevas relaciones de recurrencia para la *DOS* en la generación f están dadas por

$$\begin{cases} A(f) = A(f-2) + \frac{t^2(f-2)}{[z-E_M(f)]^2} [A(f-1) + B(f-2) - 1] + \frac{t(f-2)}{z-E_M(f)} C(f-2) \\ B(f) = B(f-1) + \frac{t^2(f-1)}{[z-E_M(f)]^2} [A(f-1) + B(f-2) - 1] + \frac{t(f-1)}{z-E_M(f)} C(f-1) \\ C(f) = \frac{2t(f-2)t(f-1)}{[z-E_M(f)]^2} [A(f-1) + B(f-2) - 1] + \frac{t(f-1)}{z-E_M(f)} C(f-2) + \frac{t(f-2)}{z-E_M(f)} C(f-1) \\ D(f) = D(f-2) + D(f-1) + \frac{1}{z-E_M(f)} [A(f-1) + B(f-2) - 1] \end{cases} \quad (5.9)$$

Estas últimas relaciones se derivan de la ecuación de Dyson para la generación f a partir de las generaciones $f-2$ y $f-1$

$$\begin{pmatrix} z - E_{LL}(f-2) & -t(f-2) & 0 \\ -t(f-2) & z - E_M(f) & -t(f-1) \\ 0 & -t(f-1) & z - E_{RR}(f-1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & G_{13} \\ G_{21} & G_{22} & G_{23} \\ G_{31} & G_{32} & G_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (5.10)$$

Por otro lado, para el caso de la transmitancia el método de renormalización se aplica para las matrices de transferencia. Al invertir el orden de adición para la cadena de Fibonacci en generación f , su matriz de transferencia $[M(f)]$ se escribe como

$$M(f) = M(f-1) M_c(f) M(f-2), \quad (5.11)$$

donde para el problema de enlaces la nueva matriz de conexión está dada por

$$M_c(n) = \begin{cases} \begin{pmatrix} E/t_A & -t_B/t_A \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \text{si } n \text{ es par} \\ \begin{pmatrix} E/t_A & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \text{si } n \text{ es impar} \end{cases} \quad (5.12)$$

El resto del procedimiento es igual al discutido en la sección 4.3.

En la siguiente sección se muestran los resultados obtenidos al efectuar los cálculos de la DOS y la transmitancia aplicando el método de renormalización a cadenas de Fibonacci con fasones en el problema de enlaces.

5.3 Efectos Fasónicos en las Propiedades Electrónicas

Una de las cantidades favoritas de la física teórica de estado sólido que pocas veces se mide en forma directa es la densidad de estados (DOS), por ejemplo a través de experimentos de foto emisión por rayos X. La importancia de dicha cantidad se debe a que contiene toda la información del sistema en el cálculo del promedio estadístico de un número importante de cantidades físicas, por ejemplo el calor específico.

Usando el método de renormalización extendido al caso de fasones discutido en la sección anterior, hemos podido cuantificar la DOS en presencia de un fasón localizado

en diferentes sitios de la cadena de Fibonacci. Los resultados muestran espectros casi idénticos a los de la figura 4.5. Pensamos que el fasón representa un defecto local en una cadena macroscópica y al calcular sus efectos en la densidad de estados total, no se esperaría un cambio significativo ya que la DOS total es una cantidad extensiva.

En las figuras 5.1 se presenta el valor absoluto de la diferencia entre la DOS de una cadena perfecta de generación $n=39$ y aquella de la misma cadena excepto por un fasón en $f=16$, es decir, $|DOS_{16}-DOS|/N$, en función de la energía (E) para (a) $t_A=0.4t_B$ y (b) $t_A=0.7t_B$, siendo $t_B=t$. Dichas cadenas tienen un total de $N=12,586'269,026$ átomos. Los cálculos numéricos han sido realizados en cuádruple precisión con una parte imaginaria de la energía $\eta=10^{-4}|t|$. Las gráficas están hechas con un muestreo de ochenta mil energías uniformemente distribuidas. Nótese que la diferencia entre la DOS de dichas cadenas es del orden de 10^{-5} . Así mismo, se distingue la existencia de brechas energéticas, mismas que se observan en el espectro de la DOS .

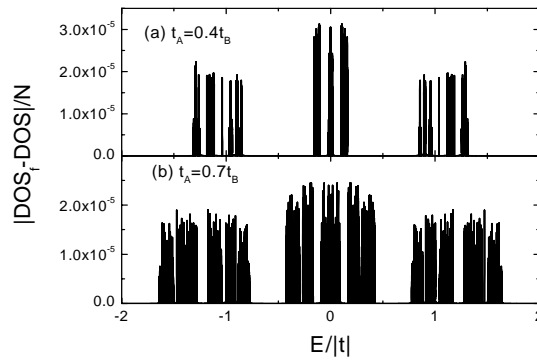


Figura 5.1 Valor absoluto de la diferencia entre la densidad de estados (DOS) de una cadena de Fibonacci de enlaces generación 39 sin fasón y otra con fasón (DOS_f) en generación 16, como una función de la energía ($E/|t|$) para (a) $t_A=0.4t_B$ y (b) $t_A=0.7t_B$.

Con el fin de realizar un estudio sistemático que de los efectos fasónicos en la DOS , la figura 5.2 muestra la integral del valor absoluto de la diferencia de la DOS para el sistema sin fasón y con fasón ($\int dE |DOS_f - DOS|/N$), como función de la ubicación del fasón local, para una cadena de Fibonacci de enlaces de generación $n=39$ y $t_A=0.7t_B$, con y sin saturadores semi infinitos. Dichas cadenas tienen un total de $N=102'334,156$ átomos. Los cálculos numéricos han sido realizados en cuádruple precisión con una parte imaginaria de la energía $\eta=10^{-4}|t|$. Las integrales están hechas con el método de Simpson con un muestreo de cuarenta mil energías uniformemente distribuidas. Obsérvese que hay treinta órdenes de magnitud de diferencia cuando el fasón se aleja de los extremos de la cadena. Cabe mencionar que el centro de la cadena se encuentra en el sitio $51'167,078$, el cual se ubica casi al final de la gráfica. Nótese también que las integrales con saturadores (ó guías) son siempre menores que aquellas sin saturadores,

hecho que podría atribuirse a que los saturadores periódicos semi-infinitos suavizan la presencia de la frontera para el sistema.

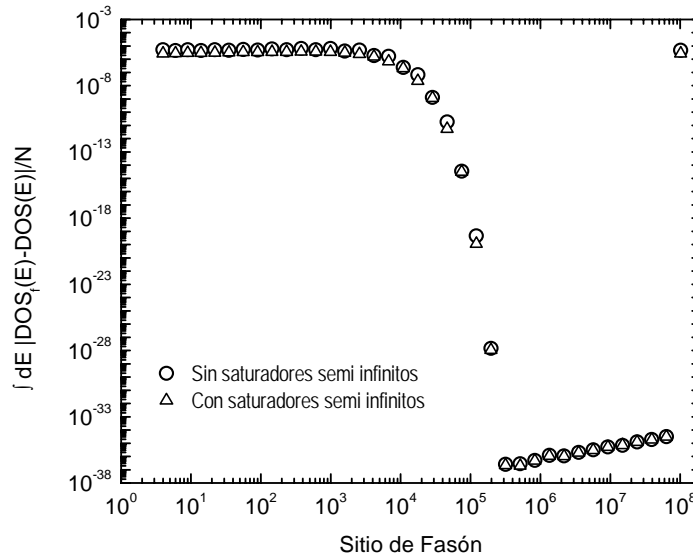


Figura 5.2 Integral del valor absoluto de la diferencia entre la densidad de estados (DOS) de una cadena de Fibonacci de enlaces generación 39 y otra con un fasón (DOS_f) en generación 16, como función de la energía ($E/|t|$) para $t_A=0.7t_B$, con y sin saturadotes semi infinitos.

Por otro lado, dado que los defectos estructurales tienen efectos importantes en la localización de los estados electrónicos [del Río, 1995] y consecuentemente en el transporte electrónico [Mott, 1971]. Dentro del formalismo de Landauer discutido en la sección 2.4, la conductividad eléctrica es proporcional a la transmitancia del sistema [ver Ec. (2.21)]. En el apéndice E se muestra analíticamente para $E=0$ que existen dos valores posibles de transmitancia para cada cadena de Fibonacci dada. En particular, para cadenas de generación $n=6l$ siendo l un número natural, la transmitancia toma un solo valor, como se muestra en la figura 5.3, la cual es una amplificación alrededor de $E=0$ para una cadena de Fibonacci de enlaces de generación $n=12$ y $t_A=0.7t_B$, siendo $t_B=t$. Los cálculos numéricos han sido realizados en cuádruple precisión y están hechas con un muestreo de cuarenta mil energías uniformemente distribuidas entre $E=-2|t|$ y $E=2|t|$. Cabe mencionar que para una cadena de generación 12 sin perturbación fasónica existe un estado transparente en $E=0$ (ver apéndice D), como se confirma en el cálculo numérico. Obsérvese que para generaciones de fasón $f=4, 5$ y 6 la curvatura y la forma de la transmitancia alrededor de $E=0$ es muy similar.

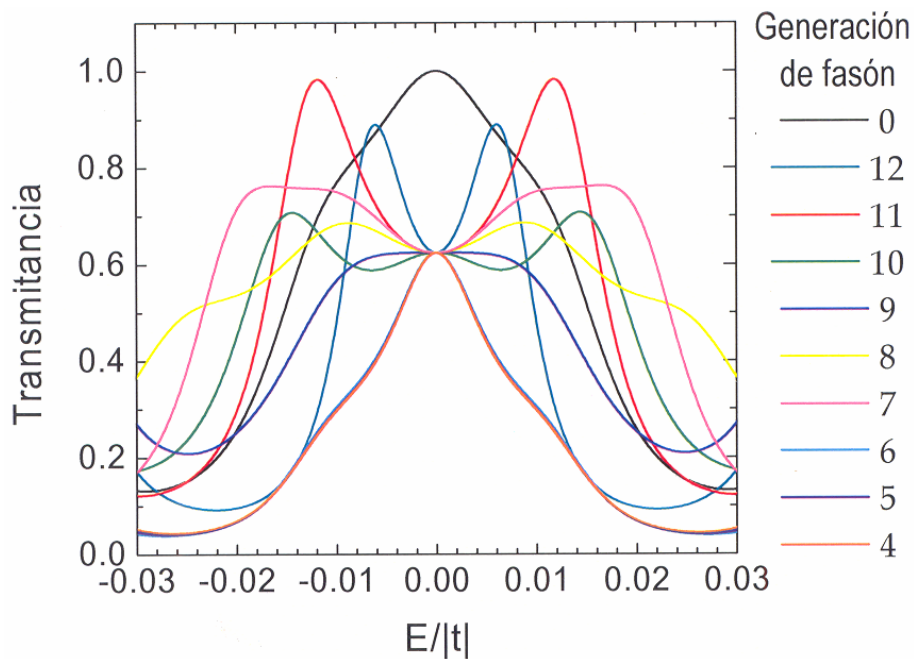


Figura 5.3 Transmítancia para una cadena de Fibonacci de enlaces generación 12 sin y con fasones, como función de la energía ($E/|t|$), para $t_A=0.7t_B$.

En la figura 5.4 se muestra el espectro de la transmítancia alrededor de $E=0$ para una cadena de Fibonacci de enlaces generación 15 con variación de ubicación de fasón y $t_A=0.7t_B$, siendo $t_B=t$. Los cálculos numéricos han sido realizados en cuádruple precisión y están hechos con un muestreo de seis mil energías uniformemente distribuidas entre $E=-0.3|t|$ y $E=0.3|t|$. Cabe mencionar que para una cadena de generación 15 sin perturbación fasónica el estado electrónico en $E=0$ no es transparente (ver apéndice D), sin embargo, observamos que para las generaciones de fasón $f=7, 8, 9, 13, 14$ y 15 existe un estado transparente en $E=0$, lo cual confirma los resultados analíticos obtenidos en el apéndice E. Cabe mencionar que la cadena sin fasón tiene un estado con alta transmítancia alrededor de $E=0.003$ sin ser transparente, es decir, su transmítancia es menor que uno.

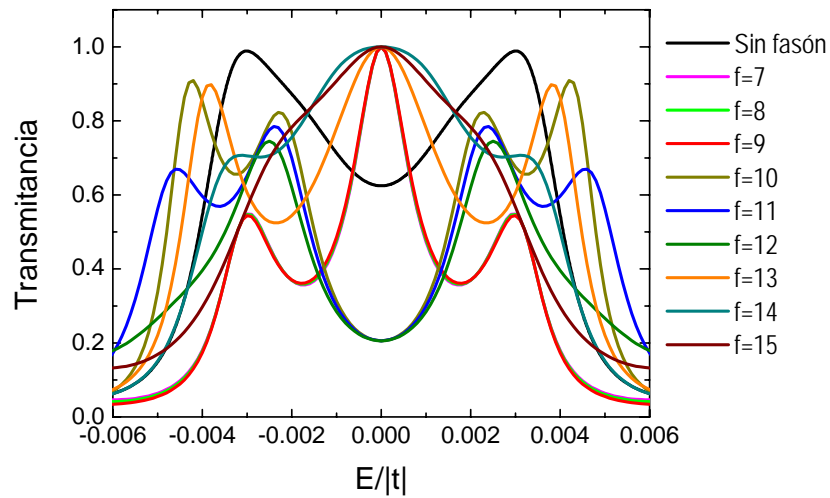


Figura 5.4 Transmitancia para una cadena de Fibonacci de enlaces generación 15 sin y con fasones, como función de la energía ($E/|t|$), para $t_A=0.7t_B$.

En este capítulo hemos estudiado los efectos fasónicos en la transmitancia y en la densidad de estados debido a la presencia de un intercambio en un par de enlaces adyacentes distintos en una cadena de Fibonacci. Dado que el fasón es un defecto local, el espectro no se ve notablemente modificado para la *DOS*. En cambio, los efectos fasónicos en la transmitancia son mucho más importantes, en consecuencia la conductividad eléctrica de dichos sistemas se modifica en la misma proporción, incluyendo la posibilidad de haber conducción balística en sistemas que originalmente no la tienen.

Conclusiones

A lo largo de esta tesis hemos estudiado los efectos fasónicos en la densidad de estados total y en la conductividad eléctrica de los sistemas cuasiperiódicos. Dicho estudio se llevó a cabo para el problema de enlaces en cadenas de Fibonacci dentro del modelo de amarre fuerte con aproximación a primeros vecinos. A pesar de que esta tesis se dedica a sistemas unidimensionales, muchos de sus resultados se pueden extender a sistemas multidimensionales a través del método de renormalización más convolución. La cuasiperiodicidad presente en las cadenas de Fibonacci se considera como el prototipo y se encuentra en cuasicristales decagonales con cuasiperiodicidad bidimensional, así como en los icosaédricos con cuasiperiodicidad tridimensional. Los cálculos numéricos se efectuaron usando el método de renormalización (ó decimación), el cual permite abordar sistemas de tamaño macroscópico, aún en presencia de defectos locales, tales como fasones. Cabe mencionar que los defectos fasónicos han sido observados en aleaciones cuasicristalinas reales y es un elemento recurrente debido a que genera un aumento mínimo en la energía estructural total y por el principio de máxima entropía [Reichl, 1998] el desorden causado por los fasones estabiliza el sistema a temperaturas finitas, a través de su energía libre.

Hemos encontrado que el espectro de eigenvalores asociados a un potencial cuasiperiódico es autosimilar. Realizamos un estudio de la aparición de brechas energéticas en la densidad de estados, en comparación con la del modelo de aproximantes. Se confirma la existencia de estados transparentes en sistemas de generación $n=6l$ dentro del problema de enlaces en cadenas de Fibonacci. Logramos extender el método de renormalización para incluir fasones individuales (intercambio de un par de enlaces adyacentes distintos al invertir el orden en el método de adición). Los resultados tanto numéricos como analíticos indican la existencia de estados transparentes con transmitancia uno en generaciones distintas a las estructuras cuasiperiódicas sin fasones. Así mismo se observa la existencia de ciclos de seis en la generación de la cadena y ciclos de tres en la generación de fasón para $E=0$.

En resumen, los resultados más novedosos de esta tesis se enlistan a continuación:

- (1) Demostración de la posibilidad de crear fasones individuales al invertir el orden de la adición.
- (2) Extensión del método de renormalización para cadenas de Fibonacci con fasones.
- (3) Hallazgo de estados electrónicos con conducción balística, hecho probado tanto numéricamente como analíticamente.

Durante el desarrollo de esta tesis hemos estudiado en detalle el problema de enlaces en cadenas de Fibonacci con un solo fasón. Dicho estudio puede extenderse a múltiples fasones al invertir múltiples veces el orden de la adición, como se hace en

la referencia [López, 1993], donde se calcula únicamente la *DOS* local. Así mismo, este método de renormalización puede extenderse a los problemas de sitios y mixto [Sánchez, 2001] incluyendo fasones. Para sistemas cuasiperiódicos multidimensionales, el método de renormalización desarrollado en esta tesis puede combinarse con el teorema de convolución, como ocurre para el caso sin fasones [Sánchez, 2004].

Con respecto a los resultados, hasta nuestro conocimiento es la primera vez que se comprueba analíticamente la existencia de estados transparentes en sistemas cuasiperiódicos con defectos fasónicos. Clásicamente el transporte balístico se relaciona con la ausencia de centros dispersores. En la mecánica cuántica la conducción balística se relaciona con un potencial periódico ya que los estados cuánticos son coherentes con dicho potencial. Para sistemas cuasiperiódicos con fasón, existen ciertos estados con conducción balística y se especula que dicha existencia se relaciona con simetrías ocultas en el potencial cuasiperiódico derivado del hiper-cubo que lo genera.

Finalmente, en la era de nanotecnología que se aproxima los efectos cuánticos serán más relevantes, en particular la conducción balística será fundamental en el diseño de los dispositivos ya que el camino libre medio de los electrones es mayor que el tamaño del sistema. Aunado a esto, la cuasiperiodicidad crea una estructura de bandas multifractal, la cual podría usarse en el diseño de nuevas estructuras de MOSFET (Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistor). En esencia, el desarrollo y la aplicación adecuada de la ciencia básica genera las herramientas necesarias para una vida con mayor libertad; por ejemplo, los aviones nos permiten volar y los teléfonos celulares nos permiten tener comunicación inalámbrica en el globo terrestre.

Si buscas resultados distintos, no hagas siempre lo mismo.

Albert Einstein.

Apéndice A Signo de la Integral de Salto para Orbitales Tipo s

En este apéndice se muestra que para orbitales tipo s la integral de salto es siempre negativa. Considere una molécula diatómica con un solo electrón cuyo hamiltoniano está dado por

$$\hat{H}_{12} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|\vec{r} - \vec{R}_1|} - \frac{Ze^2}{|\vec{r} - \vec{R}_2|}, \quad (\text{A.1})$$

donde \vec{r} , \vec{R}_1 y \vec{R}_2 son la posición del electrón, el primer ión y el segundo ión, respectivamente. La integral de salto

$$\begin{aligned} t_{12} &= \langle 1 | \hat{H}_{12} | 2 \rangle = \langle 1 | \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|\vec{r} - \vec{R}_1|} - \frac{Ze^2}{|\vec{r} - \vec{R}_2|} | 2 \rangle = \langle 1 | -\frac{Ze^2}{|\vec{r} - \vec{R}_1|} | 2 \rangle + \langle 1 | \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|\vec{r} - \vec{R}_2|} | 2 \rangle \\ &= -\langle 1 | \frac{Ze^2}{|\vec{r} - \vec{R}_1|} | 2 \rangle + \langle 1 | E_2 | 2 \rangle = -\int \psi_s^*(\vec{r} - \vec{R}_1) \frac{Ze^2}{|\vec{r} - \vec{R}_1|} \psi_s(\vec{r} - \vec{R}_2) d^3r, \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

donde ψ_s representa la función de onda de l orbital s , la cual es siempre positiva, por lo que la integral de salto en la ecuación (2.4) es siempre positiva. En consecuencia, la integral de salto t_{12} es siempre un número menor que cero.

Apéndice B Solución Analítica de Ecuaciones de Tercer Grado

Consideremos una ecuación de tercer grado de la forma

$$E^3 + pE + q = 0. \quad (\text{B.1})$$

Esta ecuación es similar a la (4.8), siendo

$$\begin{aligned} p &= -(2t_A^2 + t_B^2) \\ q &= -2t_A^2 t_B \cos(3ka) \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Para resolver la ecuación (B.1), se supone $E=u+v$ y al sustituir en la ecuación (B.1) se obtiene

$$E^3 - 3uv(u+v) - (u^3 + v^3) = E^3 - 3uvE - (u^3 + v^3) = 0. \quad (\text{B.3})$$

Comparando con la ecuación (A.1), se observa que

$$\begin{cases} u^3 + v^3 = -q \\ 3uv = -p \end{cases} \quad (\text{B.4})$$

Al despejar u ó v de la segunda ecuación de Ec. (B.4) y al sustituirla en la primera se encuentra que u^3 y v^3 son soluciones de la siguiente ecuación cuadrática

$$x^2 + qx - \frac{p^3}{27} = 0. \quad (\text{B.5})$$

Entonces

$$\begin{cases} u^3 = -\frac{q}{2} + \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}} \\ v^3 = -\frac{q}{2} - \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}} \end{cases} \quad (\text{B.6})$$

Extrayendo la raíz cúbica de las expresiones anteriores y considerando las tres soluciones de $\omega^3=1$ en el plano complejo que son $\omega=1$ y $\omega_{\pm} = (-1 \pm \sqrt{-3})/2$, se obtienen las tres soluciones de la ecuación (B.1)

$$\begin{cases} E_1 = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}}} + \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}}} \\ E_2 = \omega_+ \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}}} + \omega_+^2 \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}}} \\ E_3 = \omega_- \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}}} + \omega_-^2 \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}}} \end{cases} \quad (\text{B.7})$$

Las soluciones (B.7) se conocen como *fórmulas de Cárđano* que fueron publicadas

por primera vez por Gerolamo Cardano en su libro *Ars Magna* en el año de 1545.

Para el caso en que el discriminante (Δ), definido como

$$\Delta = \frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}, \quad (\text{B.8})$$

es negativo, las soluciones de la ecuación (B.1) pueden expresarse en la representación angular definiendo

$$r(\cos \varphi \pm i \sin \varphi) = -\frac{q}{2} \pm \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}}, \quad (\text{B.9})$$

es decir,

$$r = \sqrt{\frac{-p}{27}} \quad \text{y} \quad \cos \varphi = -\frac{q}{2r}. \quad (\text{B.10})$$

Por lo tanto, las soluciones (B.7) se puede reescribir como

$$E_j = 2 \sqrt[3]{r} \cos \frac{\varphi + 2\pi(j-1)}{3}, \quad (\text{B.11})$$

donde $j=1,2$ y 3 .

Apéndice C Redes Bipartitas

Una red se denomina bipartita cuando ésta puede dividirse en dos subredes α y β intercaladas, es decir, todos los sitios de la subred α están rodeados por sitios de β como vecinos más cercanos y todos los de β se encuentran rodeados por los de α . Por ejemplo, la red cuadrada es una red bipartita, mientras que la red triangular no lo es. Esta simetría estructural tiene consecuencias importantes en la distribución espectral de eigen-energías. Una de estas consecuencias es la simetría especular de la estructura de bandas con respecto a su centro. Consideremos el problema de enlaces en una dimensión con auto-energías iguales a cero y una distribución arbitraria de integrales de salto. Sea la función de onda ($|\psi\rangle$) dada por

$$|\psi\rangle = \sum_m \left[c_{2m}^{(\alpha)} |2m\rangle + c_{2m+1}^{(\beta)} |2m+1\rangle \right], \quad (\text{C.1})$$

donde $|j\rangle$ son las funciones de Wannier localizadas en el sitio j y el superíndice de los coeficientes indica la subred a la que pertenece el sitio. Supongamos que la eigen-energía correspondiente a la función de onda dada por la ecuación (C.1) es E , es decir,

$$\begin{cases} c_{2j}^{(\alpha)} E = \langle 2j | E | \psi \rangle = \langle 2j | \hat{H} | \psi \rangle = c_{2j+1}^{(\beta)} \langle 2j | \hat{H} | 2j+1 \rangle + c_{2j-1}^{(\beta)} \langle 2j | \hat{H} | 2j-1 \rangle \\ c_{2j+1}^{(\beta)} E = \langle 2j+1 | E | \psi \rangle = \langle 2j+1 | \hat{H} | \psi \rangle = c_{2j+2}^{(\alpha)} \langle 2j+1 | \hat{H} | 2j+2 \rangle + c_{2j}^{(\alpha)} \langle 2j+1 | \hat{H} | 2j \rangle \end{cases} \cdot (\text{C.2})$$

Consideremos una función de onda ($|\psi'\rangle$) dada por

$$|\psi'\rangle = \sum_m \left[c_{2m}^{(\alpha)} |2m\rangle - c_{2m+1}^{(\beta)} |2m+1\rangle \right], \quad (\text{C.3})$$

de la cual se deriva a

$$\begin{cases} c_{2j}^{(\alpha)} E' = \langle 2j | E' | \psi' \rangle = \langle 2j | \hat{H} | \psi' \rangle = -c_{2j+1}^{(\beta)} \langle 2j | \hat{H} | 2j+1 \rangle - c_{2j-1}^{(\beta)} \langle 2j | \hat{H} | 2j-1 \rangle \\ -c_{2j+1}^{(\beta)} E' = \langle 2j+1 | E' | \psi' \rangle = \langle 2j+1 | \hat{H} | \psi' \rangle = c_{2j+2}^{(\alpha)} \langle 2j+1 | \hat{H} | 2j+2 \rangle + c_{2j}^{(\alpha)} \langle 2j+1 | \hat{H} | 2j \rangle \end{cases} \cdot (\text{C.4})$$

En consecuencia, $|\psi'\rangle$ también es solución de la ecuación de Schrödinger estacionaria con eigen-valor $E' = -E$. Por lo tanto, el espectro de eigenvalores es simétrico.

Apéndice D

Transmitancia en $E=0$ sin Fasón

Como se mencionó en la sección 4.3, un estado es transparente si su transmitancia es uno. En particular, para los estados con $E=0$ las matrices de transferencia de generaciones dos y tres tienen la siguiente forma

$$M_0(2) = \begin{pmatrix} 0 & -t_A/t_B \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ y } M_0(3) = \begin{pmatrix} -t_B/t_A & 0 \\ 0 & -t_A/t_B \end{pmatrix}, \quad (\text{D.1})$$

donde los subíndices cero indican la ausencia de fasón. Usando la ecuación (4.38) se obtienen

$$\begin{aligned} M_0(4) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & t_A/t_B \end{pmatrix}, & M_0(5) &= \begin{pmatrix} 0 & t_B/t_A \\ -t_A/t_B & 0 \end{pmatrix}, \\ M_0(6) &= \begin{pmatrix} t_A/t_B & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, & M_0(7) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ M_0(8) &= \begin{pmatrix} 0 & -t_A/t_B \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ y } M_0(9) = \begin{pmatrix} -t_B/t_A & 0 \\ 0 & -t_A/t_B \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

Obsérvese que las matrices para generaciones ocho y nueve son las mismas que las de generaciones dos y tres, respectivamente. Por lo tanto, la transmitancia derivada de estas matrices tiene ciclo de seis. En particular, para $n=6i$ sin fasón se observa que la matriz de transferencia total (Π_0), incluyendo las matrices de conexión, está dada por

$$\Pi_0(6i) = M_R M_0(6i) M_L = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_A/t_B & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -t_B/t_A \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{D.3})$$

Por lo tanto, la transmitancia en $E=0$ es uno para cada seis generaciones de cadenas de Fibonacci tipo enlaces.

Apéndice E Transmítancia en $E=0$ con Fasón

Como se discutió en la sección 5.1 un fasón puede generarse al invertir el orden en la adición de los segmentos de generaciones anteriores. En particular, para $E=0$ las matrices de transferencia totales $[\Pi_f(n)]$ de la generación n con un fasón producido al sumar $F(f)=F(f-2)\oplus F(f-1)$, el cual genera un fasón localizado al final del segmento de la generación f , están dadas por

Tabla E.1 Matriz de Transferencia Total $[\Pi_f(n)]$

n	f	$\Pi_f(n)$
$6l-1$	$6m-2$	$\begin{pmatrix} 0 & -t_B/t_A \\ t_A/t_B & 0 \end{pmatrix}$
	$6m-1$	
	$6m$	
	$6m+1$	$\begin{pmatrix} 0 & -(t_A/t_B)^3 \\ (t_B/t_A)^3 & 0 \end{pmatrix}$
	$6m+2$	
	$6m+3$	
$6l$	$6m-2$	$\begin{pmatrix} -(t_A/t_B)^2 & 0 \\ 0 & -(t_B/t_A)^2 \end{pmatrix}$
	$6m-1$	
	$6m$	
	$6m+1$	$\begin{pmatrix} -(t_B/t_A)^2 & 0 \\ 0 & -(t_A/t_B)^2 \end{pmatrix}$
	$6m+2$	
	$6m+3$	
$6l+1$	$6m-2$	$\begin{pmatrix} -(t_A/t_B)^3 & 0 \\ 0 & -(t_B/t_A)^3 \end{pmatrix}$
	$6m-1$	
	$6m$	
	$6m+1$	$\begin{pmatrix} -t_B/t_A & 0 \\ 0 & -t_A/t_B \end{pmatrix}$
	$6m+2$	
	$6m+3$	
$6l+2$	$6m-2$	$\begin{pmatrix} 0 & (t_B/t_A)^3 \\ -(t_A/t_B)^3 & 0 \end{pmatrix}$
	$6m-1$	
	$6m$	
	$6m+1$	$\begin{pmatrix} 0 & t_A/t_B \\ -t_B/t_A & 0 \end{pmatrix}$
	$6m+2$	
	$6m+3$	
$6l+3$	$6m-2$	$\begin{pmatrix} (t_A/t_B)^4 & 0 \\ 0 & (t_B/t_A)^4 \end{pmatrix}$
	$6m-1$	
	$6m$	

	$6m+1$ $6m+2$ $6m+3$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$
$6l+4$	$6m-2$ $6m-1$ $6m$	$\begin{pmatrix} -(t_A/t_B)^3 & 0 \\ 0 & -(t_B/t_A)^3 \end{pmatrix}$
	$6m+1$ $6m+2$ $6m+3$	$\begin{pmatrix} -t_B/t_A & 0 \\ 0 & -t_A/t_B \end{pmatrix}$

donde l y m son números naturales con la restricción de $m < l$. La matriz de transferencia total fue calculada usando la ecuación (4.36). Nótese que n tiene ciclos seis y para un n dado f tiene ciclo de tres. Así mismo, existe un estado transparente en $E=0$ para cadenas de Fibonacci con generaciones $n=9, 15, 21, \dots$ y fasón en $f=7, 8, 9, 13, 14, 15, \dots$ siendo $f < n$.

Referencias

- [Abraham, 1979] E. Abrahams, P.W. Andeson, D.C. Licciardello y T.V. Ramakrishnan, *Scaling Theory of Localization: Absence of Quantum Diffusion in Two Dimensions*, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979).
- [Ashcroft, 1976] N.W. Ashcroft y N.D. Mermin, *Solid State Physics* (Saunders Company, 1976).
- [Besicovitch, 1932] A.S. Besicovitch, *Almost Periodic Functions* (Cambridge University Press, 1932) p.1.
- [Born, 1927] M. Born y R. Oppenheimer, *Ann. d. Phys.* **389**, 457 (1927).
- [Bruus, 2004] H. Bruus y K. Flensberg, *Many-body Quantum Theory in Condensed Matter Physics* (Oxford University Press, 2004) p.65
- [Conway, 1996] J.H. Conway y R. Guy, *The Book of Numbers* (Springer Verlag, 1996) p.111-113.
- [Chandra, 1999] P. Chandra y E.W. Weisstein, *Fibonacci Number* de [MathWorld](http://mathworld.wolfram.com/FibonacciNumber.html) - Wolfram Web <http://mathworld.wolfram.com/FibonacciNumber.html>.
- [Datta, 1995] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge University Press, 1995) p. 65.
- [del Río, 1995] R. del Río, S. Jitomirskaya, Y. Last y B. Simon, *What is Localization?* Phys. Rev. Lett. **75**, 117 (1995).
- [Dubost, 1986] B. Dubost, J.M.Lang, M. Tanaka, P. Stainford y M. Audier, *Large AlCuLi Single Cuasicrystals with Triacotrahedral Solidification Morfology*, Nature **324** 48 (1986).
- [Economou, 1983] E.N. Economou, *Green's Function in Quantum Physics* (Springer-Verlag, 1983) p. 7.
- [Elliott, 1974] R.J. Elliott, J.A. Krumhansi y P.L. Leath, *The Theory and Properties of Randomly Disordered Crystals and Related Physical Systems*, Rev. Mod. Phys. **46**, 465 (1974).
- [Gelleerman, 1994] W. Gelleerman, M. Komot, B. Sutherland y P.C. Taylor, *Localisation of Light Waves in Fibonacci Dielectric Multylayers*, Phys. Rev. Lett. **72**, 633 (1994).
- [Goldman, 1993] A.I. Goldman y R.F. Kelton, *Quasicrystals and Crystalline Approximants*, Rev. Mod. Phys. **65**, 213 (1993).
- [Ishimasa, 1988] T. Ishimasa, Y. Fukano y H. Nissen, *The Crystalline Alloyd Structure in Ni- Cr Small Particles. In Cuasicrystalline Materials*, (ed. C. Janot and J.M. Dubois, 1988, World Scientific Singapore) pp.168.
- [Imry, 1999] Y. Imry y R. Landauer, *Conductance Viewed as Transmission*, Rev. Mod. Phys. **71**, S306 (1999).
- [Janot, 1994] C. Janot, *Quasicrystals, a Premier*, 2^{da} ed. (Oxford University Press, 1994).

- [Jin, 1997] G.J. Jin y D. Wang, *Are Self-Similar States in Fibonacci Systems Transparent?*, Phys. Rev. Lett, **79**, 5298 (1997).
- [Kadanoff, 1967] L.P. Kadanoff, *et al.*, *Static Phenomena Near Critical Points: Theory and Experiment*, Rev. Mod. Phys. **39**, 395 (1967).
- [Kittel, 1987] C. Kittel, *Quantum Theory of Solids* (John Wiley & Sons Inc., 1987) p.31.
- [Kittel, 1996] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 7th ed. (John Wiley & Sons Inc., 1996).
- [Kohmoto, 1983] M. Kohmoto, L.P. Kadanoff y C. Tang, *Localization Problem in One Dimension: Mapping and Escape*, Phys. Rev. Lett. **50**, 1870 (1983).
- [Landauer, 1957] R. Landauer, *Spatial Variation of Currents and Fields due to Localized Scatterers in Metallic Conduction*, IBM J. Res. Dev. **1**, 223 (1957), reimpresso en J. Math. Phys. **37**, 5259 (1996).
- [Lang, 1976] S. Lang, *Álgebra Lineal* (Fondo Educativo Interamericano, 1976) p.199.
- [Levine, 1984] D. Levine y P.J. Steinhardt, *Quasycrystals: a New Class of Ordered Structures*, Phys. Rev. Lett, **53**, 2477 (1984).
- [López, 1993] J.C. López, G. Naumis y J.L. Aragón, *Renormalization Group of Random Fibonacci Chains*, Phys. Rev. B **48**, 12459 (1993).
- [Mahan, 1990] G.D. Mahan, *Many-Particle Physics* 2nd Ed. (Plenum Press, 1990).
- [Mantegna, 1999] R.N. Mantegna y H.E. Stanley, *Econophysics: an Introduction*, (Cambridge University Press, 1999).
- [Marder, 2000] M.P. Marder, *Condensed Matter Physics* (John Wiley & Sons Inc., 2000) p. 185, 135.
- [Mattuck, 1992] R.D. Mattuck, *A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem*, 2nd Ed. (Dover Publications, 1992).
- [Mayer, 1987] J. Mayer, K. Urban y J. Fidler, *Phase Transitions Between the Quasicyrstalline, Crystalline and Amorphous Phases in Al-16*, Phys. Stat. Sol. (a) **99** 467 (1987)
- [Merzbacher, 1998] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, 3th Ed. (John Wiley & Sons Inc., 1998) p. 42.
- [Mott, 1971] N.F. Mott y E.A. Davis, *Electric Processes in Non-Crystalline Materials* (Oxford University Press, 1971).
- [Naumis, 1994] G.G. Naumis, R.A. Barrio y C. Wang, *Effects of Frustration and Localization of States in the Penrose Lattice*, Phys. Rev. B **50**, 9834 (1994).
- [Naumis, 1999] G.G. Naumis, C. Wang, M.F. Thorpe y R.A. Barrio, *Coherency of Phason Dynamics in Fibonacci Chains*, Phys. Rev. B **59**, 14302 (1999).

- [Reichl, 1998] L.E. Reichl, *A Modern Course in Statistical Physics* (John Wiley & Sons Inc., 1998) p. 31 y 366.
- [Sánchez, 2001] V. Sánchez, L.A. Pérez, R. Oviedo-Roa y C. Wang, *Renormalization Approach to the Kubo Formula in Fibonacci Systems*, Phys. Rev. B **64**, 174205 (2001).
- [Sánchez, 2004] V. Sánchez y C. Wang, *Application of Renormalization and Convolution Methods to the Kubo-Greenwood Formula in Multidimensional Fibonacci Systems*, Phys. Rev. B **70**, 144207 (2004).
- [Shechtman, 1984] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias y J.W. Cahn, *Metallic Phase with Long-range Orientational Order and no Traslational Symmetry*, Phys. Rev. Lett. **53**, 1951 (1984).
- [Sherrill, 1995] C.D. Sherrill, *An Introduction to Configuration Interaction Theory* (Free Science, 1995).
- [Stanley, 1999] H.E. Stanley, *Scaling, Universality, and Renormalization: Three Pillars of Modern Critical Phenomena*, Rev. Mod. Phys. **71**, S358 (1999).
- [Süto, 1987] A. Süto, *The Spectrum of a Quasiperiodic Schrödinger Operator*, Commun. Math. Phys. **111**, 409 (1987).
- [Süto, 1989] A. Süto, *Singular Continuous Spectrum on a Cantor Set of Zero Lebesgue Measure*, J. Stat. Phys. **56**, 525 (1989).
- [Sütö, 1994].A. Sütö, *Beyond Quasicrystals*, (editado por F. Axel y D. Gratias, Les Editions de Phisique, France, 1994), p. 495 y 502.
- [Sutton, 1994] A.P. Sutton, *Electronic Structure of Materials* (Oxford University Press, 1994) p. 107.
- [Tsai, 1987] A.P. Tsai, A. Inoue y T. Matsumoto, *A Stable Cuasicrystal in AlCuFe System*, Japan J. Appl. Phys. **26** L1505-7 (1987).
- [Wang, 1988] C. Wang y R.A. Barrio, *Theory of the Raman Response in Fibonacci Superlattices*, Phys. Rev. Lett. **61** 191 (1988).
- [Wen, 2004] X.G. Wen, *Quantum Field Theory of Many-Body Systems* (Oxford University Press, 2004).
- [Ziman, 1972] J.M. Ziman, *Principles of the Theory of Solids* (Cambridge University Press, 1972) p. 200.
- [Ziman, 1979] J.M. Ziman, *Models of Disorder* (Cambridge University Press, 1979) p. 362.
- [Zhu, 1997] Shi-ning Zhu, Yong-yuan Zuh, Yi-qiang Quiun, Hai-feng Wang, Chuan-zhen Ge y Nai-ben Ming, *Experimental Realization of Second Harmonic Generation in a Fibonacci Optical Superlattice of LiTaO₃*, Phys. Rev. Lett., **78**, 2752, (1997).