



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

FACULTAD DE CIENCIAS

**EFFECTO DE LAS IMPUREZAS FANO EN LAS
PROPIEDADES ELECTRÓNICAS DE SISTEMAS
CUASIPERIÓDICOS**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

**F I S I C O
P R E S E N T A:**

OSCAR FONTANELLI ESPINOSA



**DIRECTORA DE TESIS:
DRA. VICENTA SÁNCHEZ MORALES**

2009



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



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.

Hoja de datos del jurado

<p>1. Datos del alumno Fontanelli Espinosa Oscar Universidad Nacional Autónoma de México Facultad de Ciencias Física 30163007-2</p>
<p>2. Datos del asesor Dra. Vicenta Sánchez Morales</p>
<p>3. Datos del sinodal 1 Dr. Oracio Navarro Chávez</p>
<p>4. Datos del sinodal 2 Dra. Rosario Paredes Gutiérrez</p>
<p>5. Datos del sinodal 3 Dr. Chumin Wang Chen</p>
<p>6. Datos del sinodal 4 Dra. Susana Orozco Segovia</p>
<p>7. Datos del trabajo escrito Efecto de las impurezas Fano en las propiedades electrónicas de sistemas cuasiperiódicos 95 pp.</p>

Efecto de las impurezas Fano en las propiedades
electrónicas de sistemas cuasiperiódicos

Oscar Fontanelli Espinosa

Dedico este trabajo a mis padres Oscar y Edith por ser mis primeros maestros. A mi hermana Paola por el apoyo que siempre me ha brindado. A Dulce por todo lo que me ha dado en los últimos años. A todos mis amigos por su constante apoyo que me hace continuamente renovar esfuerzos. En realidad, nadie debe sentirse excluido.

Agradecimientos

Agradezco en primer lugar a mi asesora la Dra. Vicenta Sánchez Morales por su apoyo en la realización de este trabajo. Su orientación sobre las discusiones y acciones que a éste conciernen es su fundamento.

Doy las gracias a todos los miembros del jurado por sus valiosos comentarios y sugerencias que ayudaron a mejorar sustancialmente esta tesis.

Agradezco a la UNAM y a la Facultad de Ciencias por permitirme obtener una formación académica de excelencia.

Finalmente agradezco a la DGAPA por el apoyo recibido a través de los proyectos PAPIIT IN111507 y IN117609, y a la DGESCA por permitirme utilizar las computadoras Kam-Balam y Bakliz.

Oscar Fontanelli Espinosa México D.F., marzo de 2009.

La ciencia es el misticismo de los hechos. La verdad es que nadie sabe nada.
Leonid Andreiev

Índice general

1. Sistemas Periódicos y Cuasiperiódicos	3
1.1. Sistemas Periódicos	4
1.2. Sistemas Desordenados	7
1.3. Sistemas Cuasiperiódicos	9
1.4. Impurezas	13
2. Formalismo de Green	19
2.1. Formalismo de Amarre Fuerte	20
2.2. Funciones de Green	23
2.3. Funciones de Green de Cadena Periódica	26
3. Renormalización de la Densidad de Estados	29
3.1. Fibonacci Mixto	29
3.2. Cadena Mixta con Impureza	39
3.2.1. Impureza Puntual	39
3.2.2. Impureza tipo Fano	40
3.3. Fibonacci de Enlaces	43
3.4. Cadena de Enlaces con Impureza	47
3.4.1. Impureza Puntual	47
3.4.2. Impureza tipo Fano	48
4. Resultados	51
5. Conclusiones	81
6. Apéndice 1	83
7. Apéndice 2	87
7.1. Funciones de Green sin saturadores	88
7.2. Funciones de Green con saturadores	89
8. Apéndice 3	91
8.1. Funciones de Green sin saturador	92
8.2. Funciones de Green con saturador	92

Resumen

En esta tesis se estudió el efecto de las impurezas tipo Fano en la densidad de estados electrónicos de cadenas macroscópicas cuasiperiódicas a temperatura cero. Una impureza Fano es una cadena de átomos acoplada al sistema original.

Para este fin se hizo una extensión del método de renormalización dentro del formalismo de amarre fuerte y a primeros vecinos. En este trabajo se consideraron dos tipos de cadenas cuasiperiódicas, de Fibonacci mixta y de enlaces. Con el fin de analizar cómo el tamaño de la impureza Fano afecta estas propiedades físicas, se hizo un estudio detallado para diferentes longitudes de cadena y distintas condiciones de frontera. Los principales resultados de esta investigación muestran que si la impureza Fano es pequeña con respecto a la cadena base, el efecto es similar al producido por una impureza puntual. Más aún, si el tamaño de las cadenas es el mismo, en el espectro de densidad de estados es más evidente la superposición de los espectros originales de cada cadena, lo cual conduce a la aparición de pseudo-gaps y estados fuera de la banda si en una de las cadenas el orden de los átomos es cuasiperiódico. Finalmente, vemos que si la cadena acoplada es mucho mayor que el sistema base, el espectro de la densidad de estados corresponde casi en su totalidad al de la impureza Fano.

Introducción

Actualmente el desarrollo de nuevas tecnologías está ligado al uso y aprovechamiento de atributos y capacidades de distintos materiales, ya sea naturales o sintéticos. El estudio y comprensión de las propiedades de diferentes materiales se basa en la aplicación de la Mecánica Cuántica a las interacciones entre partículas a nivel microscópico (principalmente entre núcleos y electrones).

El descubrimiento de un nuevo tipo de simetría oculta en algunos sólidos (los cuasicristales) ha abierto una amplia gama de posibilidades en el arreglo atómico [1]. Sin embargo, el teorema de Bloch no es válido para este tipo de estructuras, por lo que éstas carecen de espacio recíproco. Esto provoca que un estudio detallado de sus propiedades tanto micro como macroscópicas sea prácticamente imposible mediante los métodos de la cristalografía tradicional. Por este motivo se han desarrollado en los últimos años innovadoras técnicas matemáticas, utilizando principalmente teoría de perturbaciones y funciones de Green [2].

Por otro lado, los materiales en la naturaleza casi nunca son puros, las impurezas que suelen presentar son muy numerosas y variadas, por lo que es importante comprender cómo éstas alteran las propiedades físicas del material.

Una resonancia Fano es un perfil fuertemente asimétrico en el espectro de transmisión o de absorción de un material [3]. Este tipo de perfiles se encuentran frecuentemente en diversos sistemas y fenómenos físicos (por ejemplo, la absorción de luz por sistemas atómicos [3], puntos cuánticos [4] o interferómetros de Aharonov-Bohm [5]). Estas asimetrías son causadas por la formación de un conjunto discreto de energías dentro de un continuo. Normalmente, una impureza o un defecto en un material producen estos niveles discretos, que al interferir constructiva o destructivamente con el continuo de energías provocan estados de transmisión o reflexión perfecta (resonancias), que a su vez dan lugar a dichas asimetrías. El modelo más simple para estudiar estas resonancias es el llamado modelo de Fano-Anderson, que consiste en acoplar lateralmente una impureza a una cadena atómica infinita [6]. Dicha impureza puede ser un simple átomo o una cadena atómica finita. Este modelo se ha utilizado por ejemplo para el estudio de las resonancias de Kondo en el transporte a través de puntos cuánticos mediante el análisis de la transmisión eléctrica a través de una cadena atómica con un punto cuántico acoplado [7]. Se ha analizado tam-

bién el efecto Dicke en alambres cuánticos con puntos cuánticos adheridos [8] y se han modelado estas mismas estructuras mediante el formalismo de amarre fuerte para investigar su transporte electrónico [9]. Además, el estudio del efecto de cadenas atómicas acopladas a otras cadenas finitas es importante para procesos de miniaturización, pues permite comprender diferentes propiedades de sistemas mesoscópicos [10]. Sin embargo, el efecto de las impurezas Fano en la densidad de estados de sistemas unidimensionales ha recibido poca atención. Cabe subrayar que la densidad de estados es una cantidad de suma importancia en varias ramas de la Física, pues muchas cantidades de interés dependen de ella. Por ejemplo, las propiedades termodinámicas de un sistema de partículas que no interactúan entre sí pueden expresarse en términos de la densidad de estados de cada partícula; coeficientes de transmisión, amplitudes de dispersión etc: dependen de la densidad de estados de los estados inicial y final [11].

El objetivo principal de esta tesis es estudiar el efecto que se tiene en la densidad de estados al adherir cadenas periódicas y cuasiperiódicas (impurezas tipo Fano) a otras cadenas macroscópicas a temperatura cero. Para este fin se emplea el método de renormalización dentro del formalismo de amarre fuerte y a primeros vecinos, obteniendo resultados exactos de la densidad de estados de cadenas periódicas y de Fibonacci, estas últimas mixtas y por enlaces, con una cadena acoplada lateralmente. Se hace especial énfasis en cómo la longitud de la cadena adherida afecta el espectro de densidad de estados del sistema original.

En el segundo capítulo de esta tesis se expone un panorama general de la Física del Estado Sólido. Se habla sobre materiales cristalinos y desordenados, las diferentes formas de estudiar sus propiedades físicas, los tipos de impurezas que estos materiales suelen tener y se introduce el concepto de cuasicristalinidad. En este capítulo se ve también cómo la carencia del espacio recíproco de los sólidos cuasicristalinos obliga al desarrollo de nuevas técnicas para el estudio de sus propiedades físicas.

En el tercer capítulo se discute el formalismo de amarre fuerte y se presenta el método de funciones de Green para calcular la densidad de estados de sistemas macroscópicos. En particular, se obtiene una forma general de la densidad de estados para una cadena periódica.

En el cuarto capítulo se expone con detalle el método de renormalización para la densidad de estados de cadenas de Fibonacci (mixtas y enlaces), haciendo una extensión del método para el caso en que se acopla lateralmente una cadena.

En el quinto capítulo se presentan los principales resultados para densidad de estados de los diferentes sistemas. Finalmente se dan las conclusiones.

Capítulo 1

Sistemas Periódicos y Cuasiperiódicos

Toda la materia se compone de átomos y moléculas. En los cristales por ejemplo, los átomos y moléculas se encuentran ordenados en patrones repetidos periódicamente, formando una especie de tapiz tridimensional. Dicho orden, de suma importancia en un material, determina muchas de sus propiedades tanto micro como macroscópicas. El ejemplo más conocido es la diferencia que hay entre un trozo de grafito y un diamante: a pesar de que la composición química de los dos es exactamente la misma, los átomos en cada uno están ordenados de manera distinta, lo cual da lugar a drásticas diferencias entre propiedades mecánicas, eléctricas y ópticas de los dos materiales.

Es también sorprendente saber que muchos metales son cristalinos, pues se está acostumbrado a características cristalinas más evidentes como las que hay en el cuarzo o en las piedras de sal. Sin embargo, la verdadera prueba de la cristalinidad es a nivel atómico, pues tiene que ver con qué tan ordenada es la estructura interna de cada material.

Una rama de la Física de los Materiales se ha dedicado principalmente al estudio de las propiedades de los cristales y al comportamiento de electrones dentro de éstos. Sin embargo, el estudio de materiales no cristalinos ha tenido auge en los últimos años. Estos materiales son muy variados, van desde líquidos hasta sólidos amorfos y estructuras inconmesurables. Algunos de ellos presentan algún tipo de orden, mientras que otros son completamente caóticos. Un tipo nuevo de material no cristalino se descubrió en la década de 1980 [1]; estas estructuras, llamadas cuasicristales, presentan un nuevo tipo de orden, por lo que no se les puede considerar ni cristalinos ni desordenados.

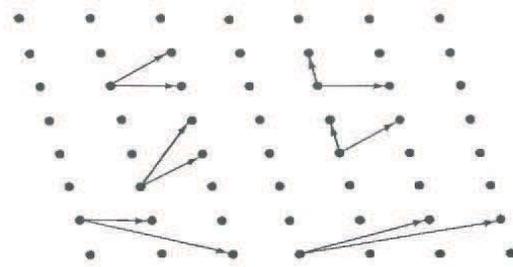


Figura 1.1: Diversas maneras, todas ellas diferentes, de elegir los vectores primitivos de una red bidimensional

En este capítulo se revisan brevemente las propiedades de las estructuras ordenadas y desordenadas, los métodos que se utilizan para estudiarlas, los tipos de impurezas que suelen presentar y se introduce el concepto de cuasiperiodicidad.

1.1. Sistemas Periódicos

Un concepto fundamental para el estudio de un sólido cristalino es el de red. Una *red* es un arreglo geométrico de puntos con simetría traslacional que se ve igual desde cualquiera de sus puntos. Una red en tres dimensiones es un arreglo de puntos cuyos vectores posición \vec{R} tienen la forma

$$\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3, \quad (1.1)$$

donde n_1, n_2 y n_3 son números enteros. A los vectores \vec{a}_1, \vec{a}_2 y \vec{a}_3 se les conoce como *vectores primitivos*, y para una cierta red no hay una forma única de escogerlos como se puede ver en la figura 1.1 [12].

Se puede mostrar que existen sólo 14 formas de acomodar puntos idénticos en tres dimensiones [13]. A estos 14 arreglos se les llama *redes de Bravais*, y se muestran en la figura 1.2.

Una *celda unitaria* es un volumen del espacio que al ser trasladado por los vectores \vec{R} de una red de Bravais adecuados llena todo el espacio sin traslaparse y sin dejar huecos. Una *celda primitiva* es una celda unitaria de volumen mínimo. Es posible encontrar más de una celda primitiva para una red, pero lo más común es tomar el paralelepípedo formado por los vectores unitarios. Las celdas primitivas pueden tener diversas formas, pero su volumen es siempre el mismo.

Sin embargo, una red es sólo un concepto abstracto; la parte material de un sistema cristalino es la *base*, que es una estructura física (usualmente un grupo de átomos o moléculas) localizada en cada punto de la red. Una *estructura cristali-*

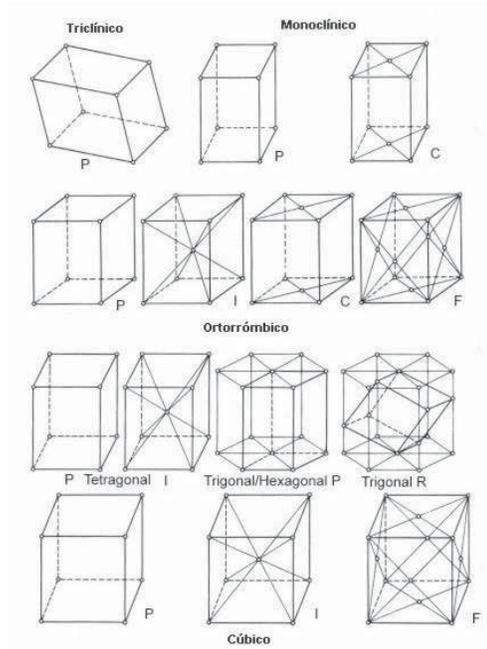


Figura 1.2: Las 14 formas de acomodar periódicamente puntos en tres dimensiones, conocidas como redes de Bravais.

na consiste entonces en una red de Bravais y una base.

Es claro que una estructura cristalina presenta simetría traslacional, sin embargo, hay otros tipos de operaciones (rotaciones y reflexiones) que transforman una estructura cristalina en sí misma. Estos conjuntos de operaciones se llaman *grupos espaciales*. En total hay 230 grupos espaciales, y cualquier estructura cristalina puede ser descrita por alguno de ellos. Entre estos 230 grupos hay 32 que transforman la estructura cristalina en sí misma dejando un punto fijo; a éstos se les conoce como *grupos puntuales cristalográficos* [12].

La *red recíproca* de una red de Bravais es el conjunto de vectores \vec{K} tales que

$$e^{\vec{K} \cdot \vec{R}} = 1, \quad (1.2)$$

para cualquier vector \vec{R} de la red de Bravais. Físicamente, la red recíproca es el conjunto de vectores de onda que le dan a una onda plana la misma periodicidad de la red de Bravais original. Una red recíproca cumple también con la definición de red de Bravais, y su red recíproca es la red original [12].

Un *plano de red* es un plano que contiene 3 puntos no colineales de una red de Bravais. Debido a la simetría traslacional de la red, un plano de red contiene una infinidad de puntos y es en sí mismo una red de Bravais bidimensional.

Además, por cada uno de estos planos hay una infinidad de planos paralelos, separados todos por la misma distancia, y el conjunto de todos ellos, la *familia de planos de la red*, contiene a todos los puntos de la red original [12]. Dada una red de Bravais, es posible dar más de una familia planos.

Uno puede determinar la orientación de un plano cualquiera dando un vector normal a éste. No es difícil probar que cada plano de red, y por tanto cada familia de planos, tiene vectores normales que pertenecen a la red recíproca [14]. Tomamos el vector más corto de ellos, y sus coordenadas se definen como los *índices de Miller* del plano de red.

Una de las técnicas más utilizadas para determinar experimentalmente la forma de una red cristalina es mediante la difracción de rayos X. Se concibe un cristal como una colección de objetos idénticos, situados en los puntos de una red de Bravais, que pueden dispersar la radiación incidente en todas direcciones (el cristal actúa como una rejilla de difracción). Al hacer incidir un haz de rayos X sobre una muestra cristalina se detectan picos de radiación reflejada en aquellas direcciones sobre las cuales los rayos dispersados interfieren constructivamente. Supongamos que el rayo que incide tiene un vector de onda \vec{k} y el rayo dispersado \vec{k}' . La condición para que haya interferencia constructiva (condición de Laue) es que el cambio en el vector de onda $\vec{K} = \vec{k} - \vec{k}'$ pertenezca a la red recíproca de la red de Bravais.

Rotando la muestra cristalina se obtienen diferentes imágenes en dos dimensiones con las que se construye un mapa tridimensional de la red recíproca asociada al material. Entonces, se puede obtener a detalle la estructura interna del cristal, tal como se muestra en la figura 1.3.

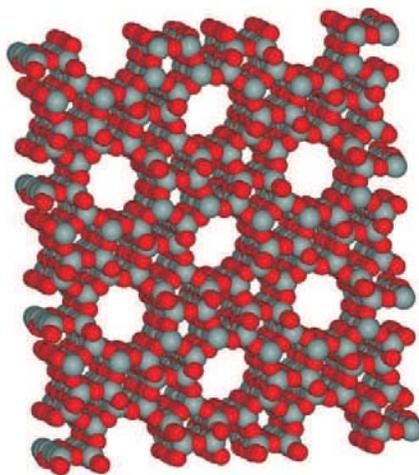


Figura 1.3: Representación computacional de un material poroso inorgánico - realizada a través de un análisis de difracción de rayos X

Como mencionamos anteriormente, sólo hay 230 grupos espaciales permitidos. Esto significa que no podemos combinar cualquier grupo puntual cristalográfico con simetría traslacional. Es fácil ilustrar lo anterior en dos dimensiones: uno puede llenar todo el plano agrupando triángulos, cuadrados o hexágonos. Esto es posible porque los ángulos de los vértices de estas tres figuras son fracciones enteras de 2π . No podemos hacer lo mismo con pentágonos o heptágonos: al tratar de llenar el plano con pentágonos veremos que siempre quedan huecos, mientras que al hacerlo con heptágonos, éstos se traslapan entre sí. En general únicamente podemos tener simetrías de rotación de orden 1, 2, 3, 4 y 6 (es decir, podemos rotar la red alrededor de uno de sus sitios por ángulos de 2π , π , $2\pi/3$, $2\pi/4$ y $2\pi/6$ obtener la misma red) [15].

1.2. Sistemas Desordenados

Un material puede no tener una perfecta simetría traslacional por varios motivos: puede ser que haya fluctuaciones en las distancias entre los puntos de la red, que el número de sitios alrededor de un punto no sea constante o que no todos los puntos de la red tengan la misma base. El tipo más sencillo de desorden se presenta en materiales cuyos átomos están acomodados en los sitios de una red, pero es impredecible el tipo de átomo que hay en cada sitio. Este tipo de desorden se llama *sustitucional* y es muy común observarlo en aleaciones metálicas. Algunas de estas aleaciones presentan un cambio de fase, de ordenados a desordenados, a una cierta temperatura crítica; por ejemplo, el β -CuZn tiene una temperatura crítica de $T_c = 743$ K; la del Cu_3Au es de $T_c = 665$ K [16].

Otro tipo de desorden se presenta cuando las átomos de un material no están situados en una red periódica; a éste se le llama *desorden topológico*, y es frecuente observarlo en líquidos y vidrios. Al combinarse estos dos tipos de desorden se forman estructuras altamente desordenadas o caóticas que presentan muchos problemas de estudio actual, muchos de ellos aún abiertos [16].

Existen además otras clases como el *desorden magnético*, observado en ferromagnetos de Heisenberg, o el *desorden de hielo*. Ambos proveen también una amplia gama de problemas interesantes [2].

Pensemos en una estructura formada por dos tipos de átomos, A y B, acomodados de manera no aleatoria en los sitios de una red periódica. Llamamos a a los sitios a los que corresponde un átomo A, y b a los que les toca un átomo B. Si introducimos desorden sustitucional en el material, podemos definir la probabilidad de encontrar un sitio a con la ocupación correcta como r_a , y la probabilidad de encontrarlo con un átomo que no le corresponde como w_a . De manera análoga definimos r_b y w_b . Definimos el *parámetro de orden* η como

$$\eta = r_a - w_b = r_b - w_a = r_a + r_b - 1. \quad (1.3)$$

La última igualdad proviene de que $w_a = 1 - r_a$. Si $r_a = r_b = 1$ entonces $\eta = 1$,

lo que indica un orden perfecto. En un estado de total desorden los sitios están ocupados de manera aleatoria, de manera que $r_a = r_b = \frac{1}{2}$ y por lo tanto $\eta = 0$. Definido de esta manera, $\eta \neq 0$ es la condición para que haya orden de largo alcance [16].

Para analizar sistemas con desorden topológico es necesario hacer otro tipo de cosas. En principio, uno puede definir el conjunto $\{\bar{r}_i\}$ como el conjunto de los vectores posición de los átomos en el material. Pero si la muestra no es demasiado pequeña y el número de sitios es del orden del número de Avogadro, el conjunto $\{\bar{r}_i\}$ es demasiado grande y un estudio detallado resulta prácticamente imposible: se vuelve necesaria entonces la introducción de parámetros estadísticos. Definimos la función de distribución

$$dP = n(\bar{r}_1, \dots, \bar{r}_s) d\bar{r}_1 \dots d\bar{r}_s \quad (1.4)$$

como la probabilidad de hayar s átomos a una distancia $d\bar{r}_1$ de \bar{r}_1 , $d\bar{r}_2$ de \bar{r}_2 , etc. Aquí, $n(\bar{r}_1, \dots, \bar{r}_s)$ representa la densidad estadística de átomos en un sistema monoatómico.

Asumiendo que la densidad promedio de átomos por unidad de volumen es constante en el espacio, es decir $n(\bar{r}_1) \equiv n \equiv \frac{N}{V}$ con N el número total de átomos en el material y V su volumen, podemos introducir la distribución atómica normalizada

$$G(\bar{r}_1, \dots, \bar{r}_s) = \frac{1}{n^s} n(\bar{r}_1, \dots, \bar{r}_s), \quad (1.5)$$

que mide la probabilidad de encontrar s átomos alrededor de las posiciones $\bar{r}_1, \dots, \bar{r}_s$.

En la práctica, casi toda la evidencia experimental que se obtiene está contenida dentro de la función $G(\bar{r}_1, \bar{r}_2)$. Dado que asumimos homogeneidad espacial, esta función depende sólo de la separación $\bar{r}_{12} = \bar{r}_2 - \bar{r}_1$, es decir

$$G(\bar{r}_1, \dots, \bar{r}_s) \equiv G(\bar{r}_{12}) \equiv G(\bar{r}) = \frac{1}{n^2} n(\bar{r}). \quad (1.6)$$

Entonces, $G(\bar{r})$ es la densidad de probabilidad de encontrar dos átomos separados por un vector \bar{r} . En la figura 1.4 se muestran cálculos de esta función para dos tipos de materiales.

Los materiales con desorden de hielo muestran una propiedad interesante: a pesar de que carecen de orden de largo alcance, presentan orden de corto alcance. Esto podemos expresarlo de la siguiente manera: supongamos que F es una propiedad física cualquiera del material (densidad electrónica, potencial, etc). Para un vector \bar{r} cuya norma es del orden de un radio atómico, encontraremos que

$$F(\bar{r} + \bar{r}_i) \simeq F(\bar{r}), \quad (1.7)$$

para cada sitio \bar{r}_i del material. físicamente esto significa que el sistema contiene muchas regiones similares, que pueden ser reminiscentes de cristales relaciona-

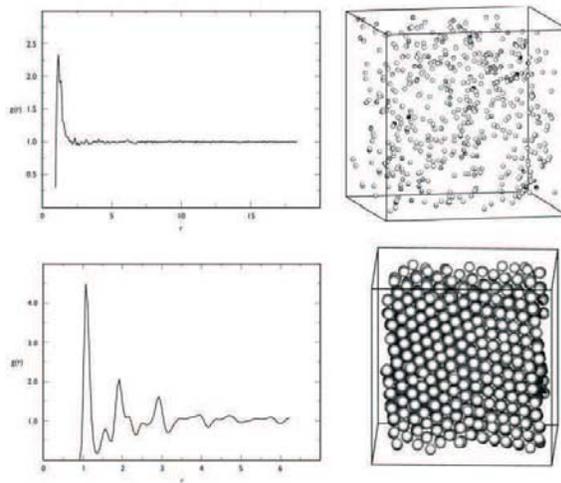


Figura 1.4: Funciones de distribución radial para un gas ideal y para un sólido desordenado.

dos, pero acomodadas de manera aleatoria.

1.3. Sistemas Cuasiperiódicos

En la década de 1980, Shechtman y sus colaboradores [1] observaron en una fase de la aleación Aluminio y Magnesio ($Al_{0,86}Mn_{0,14}$) un patrón de difracción electrónico con simetría de rotación cinco. Como mencionamos anteriormente, esta simetría no está permitida en la cristalografía tradicional (no es posible llenar el espacio sólo con pentágonos regulares), y a pesar de esto, el patrón encontrado mostraba orden de largo alcance. Estas estructuras se parecen a las cristalinas porque poseen simetría traslacional de largo alcance, pero no son periódicas y no se construyen a partir de una sola unidad estructural. Debido a estas propiedades, D. Levine y P.J. Steinhardt [17] nombraron a estas estructuras *cuasicristales*; hoy en día, se entiende por cuasicristal una estructura atómica con orden de largo alcance que no es periódica. En la figura 1.5 se presenta una simulación computacional del patrón de difracción de un cuasicristal icosaedro; las manchas nítidas en el patrón rebelan un orden de largo alcance, mientras que la simetría cinco indica que el sistema no es periódico.

Ya algunos años antes, el matemático Roger Penrose había estudiado procedimientos para llenar un plano apilando dos tipos de figuras. Las configuraciones que encontró forman redes no periódicas con simetría decagonal, pese a que el grupo decagonal no es un grupo de simetría permitido en dos dimensiones. Una red de este tipo se puede observar en la figura 1.6. El orden de largo alcance

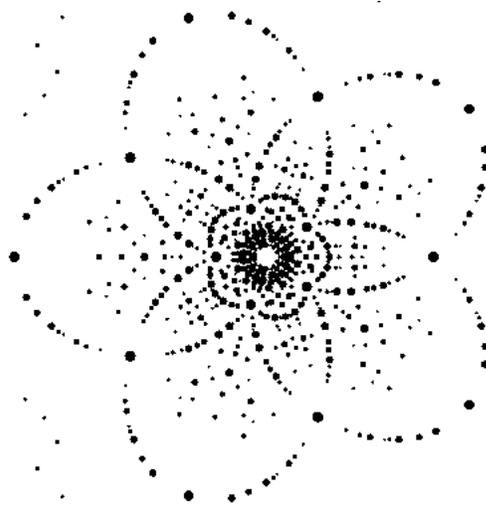


Figura 1.5: Patrón de difracción de un cuasicristal icosaedral.

y la presencia de simetrías de rotación prohibida asemeja estos sistemas a los cuasicristales [18].

Uno de los sistemas cuasicristalinos más estudiados en la literatura es la cadena de Fibonacci. Esta cadena es una estructura unidimensional compuesta por dos tipos de segmentos, uno largo \mathcal{L} y uno corto \mathcal{S} dispuestos de una manera aperiódica pero ordenada. A continuación describimos tres maneras equivalentes de generar esta cadena.

Para exponer el primer método, llamado de adición, recordemos cómo se genera la sucesión de Fibonacci: las primeras dos generaciones son los dos primeros números naturales (1 y 2); la tercer generación es la suma de los primeros dos (es decir 3), y en general $n = (n - 2) + (n - 1)$. Ahora, para construir un cuasicristal de Fibonacci, damos de nuevo las dos primeras generaciones, \mathcal{L} y \mathcal{LS} , y la siguiente generación será la adición de las primeras dos, es decir, tomamos la generación número dos y a su derecha pegamos la generación número uno, obteniendo así \mathcal{LSC} . La siguiente generación será la adición de la tres y la dos, y siguiendo esta regla obtenemos las siguientes cadenas:

\mathcal{L}
 \mathcal{LS}
 \mathcal{LSC}
 \mathcal{LSCLS}
 $\mathcal{LSCLSLSC}$
 $\mathcal{LSCLSLSCLSLSC}$
 $\mathcal{LSCLSLSCLSLSCLSLSC}$

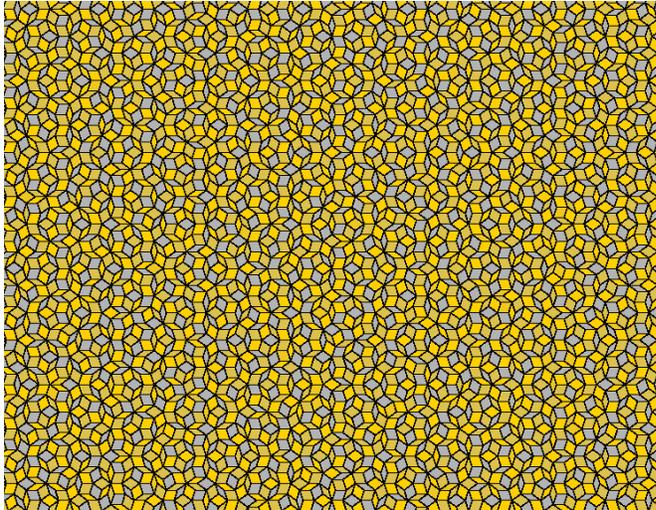


Figura 1.6: Mosaico de Penrose que ilustra una estructura cuasiperiódica en dos dimensiones. A diferencia de los sistemas periódicos, aquí necesitamos dar dos y no sólo una figura básica para llenar el espacio.

Otra forma de generar la misma cadena es mediante el método de sustitución. Aquí uno sólo necesita dar la primera generación, por ejemplo \mathcal{L} , y dos reglas de sustitución: $\mathcal{L} \rightarrow \mathcal{LS}$ y $\mathcal{S} \rightarrow \mathcal{L}$. Para construir la generación $n + 1$ tomamos la número n y a cada uno de sus segmentos le aplicamos la regla de sustitución. Al hacerlo, obtendremos las siguientes cadenas:

\mathcal{L}
 \mathcal{LS}
 \mathcal{LSC}
 \mathcal{LSLLS}
 $\mathcal{LSLLSLSL}$
 $\mathcal{LSLLSLSLLSLLS}$
 $\mathcal{LSLLSLSLLSLLSLSLLSLSL}$

El tercer método nos revela propiedades interesantes de los cuasicristales, y conviene verlo con detalle. Recordemos que los sistemas cuasiperiódicos surgen de la incompatibilidad de sus simetrías de rotación con los grupos puntuales cristalográficos. Sin embargo, estas simetrías prohibidas podrían pertenecer a sistemas periódicos en espacios de mayor dimensión. Como ya vimos, en 2 y 3 dimensiones las únicas simetrías de rotación posibles son las de orden 1, 2, 3, 4 y 6. Esto significa que el uso en 3 dimensiones de celdas unitarias para la construcción de redes periódicas está restringido a las 14 redes de Bravais. Estos poliedros, que especifican el tipo de cristal, pueden caracterizarse mediante 3

vectores, uno por cada dimensión del espacio.

Si consideramos ahora simetría de rotación de orden 5, las celdas unitarias serían pentágonos e icosaedros, en 2 y 3 dimensiones respectivamente. Un pentágono puede determinarse mediante 4 vectores del centro a los vértices; se puede esperar entonces que en un espacio tetradimensional sea posible construir redes periódicas con simetría de rotación 5. De igual modo, ya que con 6 vectores se puede caracterizar un icosaedro regular, la periodicidad de un sistema y esta simetría de rotación podrían ser compatibles en un espacio de 6 dimensiones.

Ahora ilustremos cómo es posible construir un sistema cuasiperiódico mediante la proyección o corte de una estructura periódica en un espacio de mayor dimensión. Consideremos una distribución discreta de puntos en dos dimensiones, situados en los vértices de una red cuadrada, como se ve en la figura 1.7.

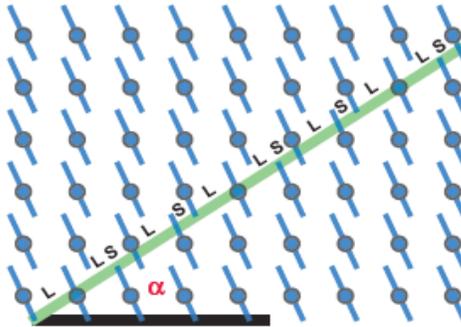


Figura 1.7: Proyección a una dimensión de una estructura periódica en dos dimensiones. La estructura unidimensional resultante es cuasiperiódica, y si se elige el ángulo adecuado, lo que se obtiene es una cadena de Fibonacci

Esta red bidimensional puede proyectarse a un espacio de una sola dimensión que sea una línea recta colocada a un cierto ángulo α respecto a las líneas horizontales de la red, como se muestra en la figura 1.7. Si el ángulo α es racional respecto a las filas de la red cuadrada, la estructura unidimensional proyectada es un conjunto discreto y periódico de puntos. Pero si el ángulo es irracional, el arreglo de puntos proyectados no es periódico y muestra distancias interatómicas demasiado cortas para ser físicamente aceptable. Mas aún, puede probarse que la densidad del conjunto de puntos es igual a la de una distribución singularmente continua [15]. Para evitar el problema de la densidad, podemos restringir la proyección a aquellos puntos de la red periódica confinados en una banda paralela a la recta que habíamos tomado, como se puede ver en la figura 1.7. La estructura proyectada ahora consiste en segmentos de longitud $a \cos(\alpha) = \mathcal{L}$ y $a \sin(\alpha) = \mathcal{S}$. Si imponemos que $\cos \alpha / \sin \alpha = \tau$ donde $\tau = 2 \cos 36^\circ$, los seg-

mentos \mathcal{L} y \mathcal{S} estarán acomodados según la secuencia de Fibonacci. Este número τ , conocido como la *razón dorada* es interesante en el contexto de simetrías icosaedrales.

1.4. Impurezas

No todos los materiales son completamente puros, por lo general presentan defectos o impurezas. Se entiende por defecto o impureza en un cristal una región cuya configuración microscópica difiere drásticamente de la de un cristal perfecto. Muchas propiedades importantes de los cristales, tales como su conducción eléctrica, color, dureza, maleabilidad y elasticidad dependen de las impurezas o defectos que contengan.

Existen principalmente dos tipos de defectos cristalinos: las vacancias o intersticios y las dislocaciones. Al final de esta sección se introduce otro tipo de impureza presente en cristales unidimensionales que es de gran importancia para los propósitos de este trabajo.

Una *vacancia*, también conocida como *defecto de Schottky*, es simplemente un sitio de la red donde no hay ningún átomo. En equilibrio térmico siempre se encuentran impurezas de este tipo, pues la entropía aumenta al haber desorden en la estructura. Si E_v es la energía necesaria para sacar un átomo de su lugar en la red, k_B la constante de Boltzmann, T la temperatura y N el número total de sitios, puede probarse minimizando el potencial termodinámico apropiado (en este caso la energía libre de Helmholtz), que el número n de vacancias presentes en el material es

$$n = N \exp(-E_v/k_B T). \quad (1.8)$$

A temperaturas finitas, este número puede llegar a ser muy pequeño, pero ciertamente no es cero. En la mayoría de los metales puros, a temperaturas cercanas a la de fusión el porcentaje de vacancias presentes es del orden de 10^{-3} o 10^{-4} %. Sin embargo, en algunas aleaciones como el *TiC* puede llegar a ser hasta del 50 % [12].

Un *intersticio* o *defecto de Frenkel* ocurre cuando un átomo es transferido a un lugar donde no debería haber ningún átomo, un sitio que no pertenece a la red. Es posible demostrar también que el número n de intersticios en una muestra es igual a

$$n = (NN')^{1/2} \exp(-E_I/2k_B T) \quad (1.9)$$

donde N' es el número de sitios intersticiales y E_I la energía que se necesita para llevar un átomo a uno de estos sitios [14].

La presencia de este tipo de impurezas es la responsable de la conductividad eléctrica de cristales covalentes; estos materiales, utilizados ampliamente como aislantes eléctricos, muestran una conductividad que, según se ha observado

experimentalmente, depende de la temperatura como $e^{1/T}$. Es la misma dependencia en la temperatura del número de vacancias e intersticios. Existe evidencia experimental y teórica de que no son los electrones libres los que transportan carga en estos cristales, sino que las vacancias se mueven a lo largo del material y se requiere muy poca energía para que lo hagan [14]. Entre mayor sea la temperatura, más vacancias habrá y por lo tanto la conductividad será más grande.

Muchas de las propiedades mecánicas de los cristales se explican mediante la introducción de otro tipo de impurezas llamadas dislocaciones. En la figura 1.8 se ilustran los dos tipos más sencillos de dislocaciones. Supongamos que tenemos una red cristalina perfecta en tres dimensiones, le quitamos un medio plano que termine en la línea de dislocación, y luego juntamos cuidadosamente los dos planos en cada lado del plano faltante de manera que restauramos el orden cristalino excepto en la región cercana a la línea de dislocación. A un defecto de este tipo se le llama *dislocación de borde*. Ahora imaginemos un medio plano que termina en la línea de dislocación arriba del cual el cristal se ha desplazado a través de un vector paralelo a la línea y se ha juntado con la parte del cristal debajo del plano de modo que se preserve la estructura periódica excepto en la región cerca de la línea. A este tipo de defecto se le conoce como *dislocación de tornillo* [14].

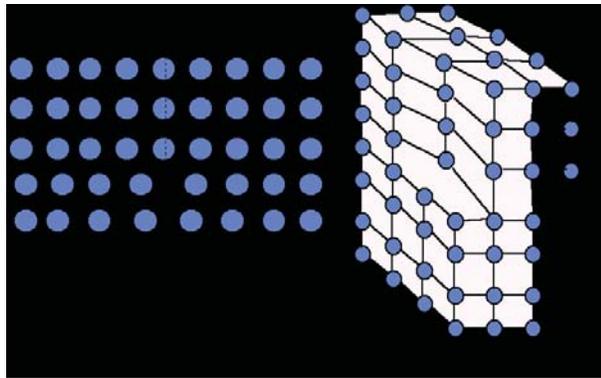


Figura 1.8: Ilustración esquemática de una dislocación de borde y una de tornillo respectivamente.

En general las dislocaciones no tienen porqué ser rectilíneas. Se puede describir una dislocación como una región del cristal tal que lejos de ella la estructura es prácticamente igual a la de un cristal perfecto; cerca de ella las posiciones de los átomos son considerablemente distintas a las de una estructura periódica y que tienen además un vector de Burgers distinto de cero. El vector de Burgers se construye de la siguiente manera: consideramos una curva cerrada dentro de un cristal perfecto que pasa a través de una sucesión de sitios de la red; luego construimos la misma línea dentro del cristal dislocado; el vector de la red de

Bravais por el cual la segunda curva falla en ser cerrada es el *vector de Burgers*. El vector de Burgers de una dislocación de tornillo es paralelo a la línea de dislocación, mientras que el de una dislocación de borde yace en el plano que se delizó.

Las dislocaciones suelen aparecer durante la formación de un cristal, o bien como resultado de esfuerzos mecánicos que se hagan sobre el material. En general una dislocación puede moverse con relativa facilidad a través de la estructura, pero pueden quedarse atoradas en regiones con grandes imperfecciones, pues requiere mucha energía para pasar. Es justamente este mecanismo lo que le da su dureza a ciertos materiales como el acero: los cristales de hierro puro son bastante suaves, pero al contaminarlos con átomos de carbón se forman impurezas que inmovilizan las dislocaciones que al no poderse mover hacen que el metal sea muy duro. Los cristales de cobre son también suaves, y un procedimiento común para endurecerlos es doblarlos en varias direcciones, produciendo alteraciones en su estructura interna que detienen el movimiento de las dislocaciones.

En años recientes ha aumentado el estudio de sistemas unidimensionales. Esto ha sido producto del desarrollo de técnicas muy precisas para la fabricación de nanoestructuras y objetos cuánticos muy pequeños. Por ejemplo, utilizando la punta de un microscopio de tunelaje es posible colocar átomos individualmente en un sustrato, construyendo así cadenas atómicas de manera totalmente controlada [19]. Esta posibilidad de crear cadenas metálicas perfectas ha motivado estudios teóricos sobre las propiedades de transporte electrónico y estructura de bandas de estos sistemas. Entre las estructuras que han generado más interés encontramos cadenas periódicas a las que se les pegan en algún sitio otras cadenas atómicas; Vasseur y otros investigadores [20] han estudiado con detalle sistemas de este tipo para simular la estructura de bandas de elementos al-

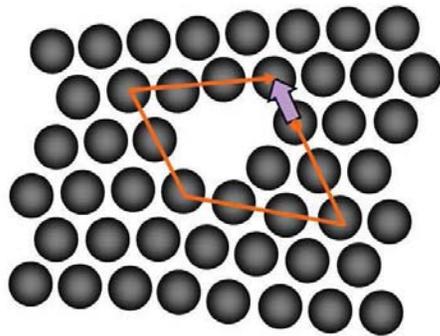


Figura 1.9: Si se reproduce alrededor de una dislocación una sucesión de sitios que sería un camino cerrado en una región sin dislocaciones se encuentra que la línea ya no es cerrada. El vector que cierra la línea es el vector de Burgers.

calinos. Orellana y sus colaboradores [21] y más tarde Domínguez-Adame [22] han utilizado el formalismo de amarre fuerte para estudiar alambres cuánticos con cadenas de puntos cuánticos acopladas lateralmente. En general se ha visto que el comportamiento de la transmitancia y la estructura de bandas en estos sistemas no es trivial, y uno de los aspectos que más interés ha despertado es la observación de resonancias Fano en la transmitancia de estas estructuras. Es por este motivo que llamamos a las cadenas acopladas lateralmente a cadenas perfectas *defectos* o *impurezas Fano*.

Una resonancia Fano [3] es un perfil fuertemente asimétrico en el espectro de transmisión o de absorción de un material. Fano calculó la forma de este perfil, el cual tiene la siguiente forma:

$$F(\omega) = \frac{(\omega + \delta)^2}{\omega^2 + 1}, \quad (1.10)$$

donde $\omega = (E - E_R)/(\Gamma/2)$, E es la energía del electrón, E_R la energía de resonancia, Γ el ancho del pico y δ es el factor de Fano que controla la asimetría en la línea. Es común observar este tipo de resonancias en física atómica [3], fotoionización atómica [23], absorción óptica [24], dispersión de Ramman [25] y tunelaje a través de una superficie con impurezas [26]; la causa física de una resonancia Fano es la aparición de un conjunto discreto de energías que interfiere con el espectro continuo de un determinado material; casi siempre una impureza en un sólido da lugar a este conjunto discreto de energías. El modelo más sencillo que se conoce para estudiar este fenómeno es el modelo de Fano-Anderson que consiste en una cadena atómica finita acoplada a una cadena infinita [6]. Sin embargo, para propósitos de miniaturización es importante también el estudio de este tipo de sistemas cuando la cadena original es finita, pues permite comprender diferentes propiedades de sistemas mesoscópicos [10].

Hasta la década de 1980, los sistemas desordenados y cuasiperiódicos habían recibido muy poca atención por parte de los físicos. La regularidad de las estructuras cristalinas hace más sencillo su estudio tanto teórico (como la determinación de la estructura de bandas) como experimental (por ejemplo, determinar la superficie de Fermi). Por otro lado, es difícil obtener muestras metalúrgicas bien caracterizadas para el estudio experimental de sólidos desordenados y cuasicristales, además de la aparición de dificultades matemáticas importantes en los análisis teóricos: la ausencia de simetría traslacional en estos materiales provoca, como se verá en el siguiente capítulo, que no se satisfaga el teorema de Bloch y que no exista un espacio recíproco, el cual es fundamental en la formalización matemática de los sistemas cristalinos.

Sin embargo, se han logrado grandes avances en el estudio de los sistemas que carecen de simetría traslacional a partir del desarrollo de innovadores métodos matemáticos, que utilizan principalmente teoría de perturbaciones y funciones de Green [2]. Esto, aunado al reciente crecimiento de la computación digital,

que ha llevado al desarrollo de métodos de cálculo y simulaciones de materiales, ha incrementado el interés por el estudio de este tipo de estructuras, lo que ha conducido también en los últimos 20 años a la búsqueda de aplicaciones tecnológicas tales como aleaciones de acero, semiconductores amorfos, metales y cristales líquidos por sólo mencionar algunos.

Capítulo 2

Formalismo de Green

Uno de los resultados más notorios de la Física Atómica es que los electrones de un átomo aislado forman orbitales que dan lugar a un espectro discreto de energías. Cuando varios átomos se juntan, los electrones más alejados de los núcleos comienzan a interactuar con los demás átomos, de modo que se forman orbitales moleculares. Si el número de átomos que se combinan es muy grande, del orden del número de Avogadro, el número de orbitales atómicos es también muy grande y la diferencia entre sus energías suele ser muy pequeña. Es posible considerar entonces que estos niveles forman bandas de energía, y normalmente el número de estados dentro de cada banda es tan grande que se acostumbra considerar la banda como un espectro continuo. Muchas de estas bandas se separan de otras por regiones de energía donde no puede haber estados electrónicos; a estas regiones se les conoce como *gaps*. A estos rangos de energía que un electrón puede o no tener dentro de un material se les llama *estructura de bandas del sólido* y determina muchas de sus características electrónicas y ópticas. Sin embargo, calcular esta estructura de bandas es casi siempre muy complicado: estrictamente, uno debe resolver la ecuación de Schrödinger para un Hamiltoniano que contenga las energías cinéticas de todos los electrones del material y sus interacciones con todos los núcleos. Como en la práctica esto es imposible, es necesario buscar soluciones aproximadas.

Una de las aproximaciones que más se utiliza es la de *amarre fuerte* en la que se consideran los átomos muy alejados entre sí y los electrones rodeándolos, fuertemente amarrados a ellos, de manera que es poco frecuente que brinquen de un átomo a otro.

Un método para calcular la estructura de bandas de un sistema muy grande y no forzosamente periódico es a través de funciones de Green. Las funciones de Green del sistema, que se calculan a través de la ecuación de Dyson, tienen polos en las energías permitidas de los electrones, es decir, en las bandas.

En este capítulo se exponen con detalle el formalismo de amarre fuerte y el

método de funciones de Green para calcular la densidad de estados de sistemas macroscópicos.

2.1. Formalismo de Amarre Fuerte

La aproximación de amarre fuerte consiste en suponer que los electrones de un sólido no interactúan entre sí, únicamente con los núcleos a los que están amarrados. En cualquier región del sólido, se puede suponer que el Hamiltoniano es sólo el debido al átomo más cercano, y el orbital respectivo decae muy rápido fuera de una región del tamaño de una celda unitaria. Cada orbital atómico puede tratarse por separado, y la solución global a la ecuación de Schrödinger del cristal es una combinación lineal de los orbitales atómicos.

Antes de desarrollar este método, es necesario demostrar un importante teorema debido a Bloch:

Teorema de Bloch: *Si tenemos un potencial periódico $V(\vec{r} + \vec{R}) = V(\vec{r})$ para todos los vectores \vec{R} de una red de Bravais, entonces para cualquier solución a la ecuación de Schrödinger*

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad (2.1)$$

existe un vector \vec{k} tal que

$$\psi(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\psi(\vec{r}). \quad (2.2)$$

Demostración: Sea $T_{\vec{R}}$ el operador de traslación de la red que actúa de la siguiente forma:

$$T_{\vec{R}}f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{R}) \quad (2.3)$$

para cualquier propiedad física f . Entonces

$$T_{\vec{R}}Hf(\vec{r}) = HT_{\vec{R}}f(\vec{r} + \vec{R}), \quad (2.4)$$

es decir, $[T_{\vec{R}}, H] = 0$. Por lo tanto los eigenvalores del Hamiltoniano, las energías permitidas, son también eigenvalores de $T_{\vec{R}}$. Entonces, para cada eigenfunción $\psi(\vec{r})$ existe una constante c que depende de \vec{R} tal que

$$T_{\vec{R}}\psi(\vec{r}) = c(\vec{R})\psi(\vec{r}). \quad (2.5)$$

Ahora, la aditividad de los operadores de traslación implica que

$$c(\vec{R})c(\vec{R}') = c(\vec{R} + \vec{R}'), \quad (2.6)$$

de modo que existe un vector \bar{k} que satisface

$$c(\bar{R}) = e^{i\bar{k}\cdot\bar{R}}. \quad (2.7)$$

Físicamente, este teorema significa que la norma de la función de onda es igual en todos los sitios de la red, lo único que cambia es la fase [13].

Obtenido este resultado vamos a desarrollar la aproximación de amarre fuerte. Supondremos dos cosas: en la vecindad de un punto de la red el Hamiltoniano global es igual al Hamiltoniano asociado a ese punto, H_{at} , y los niveles de este Hamiltoniano atómico están bien localizados, es decir

$$H_{at}\psi_n = E_n\psi_n. \quad (2.8)$$

Si la función de onda local $\psi_n(\bar{r})$ se anula en una región que excede la distancia interatómica, entonces ésta es una muy buena aproximación a la función de onda global. También lo serán las funciones $\psi_n(\bar{r} - \bar{R})$, dado que el Hamiltoniano tiene la periodicidad de la red.

Para calcular correcciones escribiremos el Hamiltoniano del cristal H como

$$H = H_{at} + V(\bar{r}). \quad (2.9)$$

Aquí, $V(\bar{r})$ es un potencial que contiene todas las correcciones requeridas para representar el potencial periódico global. Si una función de onda $\psi_n(\bar{r})$ satisface la ecuación de Schrödinger atómica (2.8), satisfará también la ecuación del cristal con el Hamiltoniano (2.9) siempre y cuando el potencial $V(\bar{r})$ se anule dondequiera que $\psi_n(\bar{r})$ no lo haga. Si éste es el caso, cada función de onda $\psi_n(\bar{r})$ da lugar a N niveles en el potencial periódico, con funciones de onda $\psi_n(\bar{r} - \bar{R})$ para los N sitios \bar{R} de la red.

Proponemos que la solución a la ecuación del cristal sea una combinación lineal de las funciones atómicas. Esta combinación lineal debe satisfacer la condición de Bloch (2.2). Proponemos entonces una solución de la forma

$$\psi(\bar{r}) = \sum_{\bar{R}} e^{i\bar{k}\cdot\bar{R}} \phi(\bar{r} - \bar{R}), \quad (2.10)$$

donde las funciones $\phi(\bar{r})$ son combinaciones lineales de los orbitales atómicos, es decir

$$\phi(\bar{r}) = \sum_n b_n \psi_n(\bar{r}). \quad (2.11)$$

Los coeficientes b_n se determinan al resolver la ecuación de Schrödinger. No es difícil ver que la solución construida de esta manera satisface la condición de

Bloch [12].

A las energías globales permitidas las llamamos $\varepsilon_n(\bar{k})$. Multiplicamos la ecuación de Schrödinger del cristal

$$H\psi(\bar{r}) = (H_{at} + V(\bar{r}))\psi(\bar{r}) = \varepsilon(\bar{k})\psi(\bar{r}) \quad (2.12)$$

por el orbital atómico conjugado $\psi_m^*(\bar{r})$, integramos respecto a \bar{r} y usamos el hecho de que

$$\int \psi_m^*(\bar{r})H_{at}\psi(\bar{r})d\bar{r} = \int (H_{at}\psi_m(\bar{r}))^*\psi(\bar{r})d\bar{r} = E_m \int \psi_m^*(\bar{r})\psi(\bar{r})d\bar{r}, \quad (2.13)$$

para encontrar que

$$(\varepsilon(\bar{k}) - E_m) \int \psi_m^*(\bar{r})\psi(\bar{r})d\bar{r} = \int \psi_m^*(\bar{r})V(\bar{r})\psi(\bar{r})d\bar{r} \quad (2.14)$$

Sustituyendo (2.10) y (2.11) en esta expresión y haciendo uso de la ortonormalidad de los orbitales atómicos, llegamos a una ecuación de valores propios que determina los valores de los coeficientes $b_n(\bar{k})$ y las energías de sistema $\varepsilon(\bar{k})$:

$$\begin{aligned} (\varepsilon(\bar{k}) - E_m)b_m = & -(\varepsilon(\bar{k}) - E_m) \sum_n \left(\sum_{\bar{R} \neq 0} \int \psi_m^* \psi_n(\bar{r} - \bar{R}) e^{i\bar{k} \cdot \bar{R}} d\bar{r} \right) b_n \\ & + \sum_n \left(\int \psi_m^*(\bar{r}) V(\bar{r}) \psi_n(\bar{r}) d\bar{r} \right) b_n \\ & + \sum_n \left(\sum_{\bar{R} \neq 0} \int \psi_m^*(\bar{r}) V(\bar{r}) \psi_n(\bar{r} - \bar{R}) e^{i\bar{k} \cdot \bar{R}} d\bar{r} \right) b_n. \end{aligned} \quad (2.15)$$

El primer término de la derecha en esta ecuación contiene integrales de la forma

$$\int d\bar{r} \psi_m^*(\bar{r}) \psi_n(\bar{r} - \bar{R}). \quad (2.16)$$

Nuestra suposición de que los orbitales atómicos están bien localizados implica que estas integrales son pequeñas. Por otro lado, el tercer sumando de la derecha de (2.15) es despreciable, puesto que contiene productos de orbitales centrados en diferentes sitios. Además, el segundo sumando es casi cero, ya que asumimos que los orbitales atómicos se anulaban a distancias suficientemente grandes. Concluimos entonces que el lado derecho de (2.15) es muy pequeño, de modo que $(\varepsilon(\bar{k}) - E_m)b_m$ casi se anula. Por lo tanto $\varepsilon(\bar{k})$ debe ser muy cercano a un nivel atómico, digamos E_0 , y todos los coeficientes b_n deben ser muy chicos con excepción de los que correspondan a dicho nivel, es decir

$$\varepsilon(\bar{k}) \approx E_0, \quad (2.17)$$

$$b_m \approx 0.$$

Si estas últimas expresiones fueran igualdades estrictas, tendríamos un caso extremo en que los estados del cristal son idénticos a los atómicos. Sin embargo esto casi nunca es así; más bien se emplean estas estimaciones para valuar el lado derecho de (2.15). Por ejemplo, se puede hacer que las sumas sobre n corran sólo para aquellos valores E_n cercanos a E_0 . Entonces se obtienen ecuaciones que determinan las bandas de energías: si se consideran niveles atómicos no degenerados (estados s), se obtiene una ecuación que arroja una expresión explícita para la energía de la banda proveniente de este estado; si se consideran niveles p (con triple degeneración), la expresión (2.15) da pie a un sistema de tres ecuaciones, cuya solución determina las tres bandas resultantes; al considerar estados d quedaría un sistema de 5 ecuaciones, y así sucesivamente.

Ya que tenemos el formalismo de amarre fuerte vamos hablar en la siguiente sección del método de las funciones de Green para calcular la densidad de estados de un sólido. Más adelante veremos cómo introducir el formalismo de amarre fuerte a dicho método para calcular la densidad de estados de una cadena de átomos.

2.2. Funciones de Green

Una función de Green G se define como la solución a la ecuación

$$[z - L(\bar{r})]G(\bar{r}, \bar{r}'; z) = \delta(\bar{r} - \bar{r}'), \quad (2.18)$$

donde z es un número complejo y L un operador lineal y hermitiano que posee un conjunto completo y ortogonal de funciones propias $\{\phi_n(\bar{r})\}$, es decir

$$L(\bar{r})\phi_n(\bar{r}) = \lambda_n\phi_n(\bar{r}) \quad (2.19)$$

y

$$\sum_n \phi_n(\bar{r})\phi_n^*(\bar{r}') = \delta(\bar{r} - \bar{r}'). \quad (2.20)$$

Usando notación de Dirac, vemos que resulta más práctico escribir (2.18) como

$$(z - L)G(z) = 1, \quad (2.21)$$

mientras que las condiciones que cumple el operador L son

$$L|\phi_n\rangle = \lambda_n|\phi_n\rangle \quad (2.22)$$

y

$$\sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = 1. \quad (2.23)$$

Vemos que si $z \neq \lambda_n$, entonces podemos resolver (2.21) formalmente como

$$G(z) = \frac{1}{z - L}. \quad (2.24)$$

Ahora, si multiplicamos (2.24) por el operador identidad, obtenemos

$$G(z) = \frac{1}{z-L} \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = \sum_n \frac{1}{z-L} |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = \sum_n \frac{|\phi_n\rangle\langle\phi_n|}{z-\lambda_n}. \quad (2.25)$$

La última igualdad proviene de la la relación general $F(L)|\phi_n\rangle = F(\lambda_n)|\phi_n\rangle$, válida por definición para cualquier función F .

Si el espectro de valores propios del operador L tiene partes discretas y partes continuas, entonces podemos escribir(2.25) de manera más explícita como

$$G(z) = \sum_n' \frac{|\phi_n\rangle\langle\phi_n|}{z-\lambda_n} + \int dn \frac{|\phi_n\rangle\langle\phi_n|}{z-L}, \quad (2.26)$$

o bien, en la representación de \bar{r}

$$G(\bar{r}, \bar{r}'; z) = \sum_n' \frac{\phi_n(\bar{r})\phi_n^*(\bar{r}')}{z-\lambda_n} + \int dn \frac{\phi_n(\bar{r})\phi_n^*(\bar{r}')}{z-\lambda_n}. \quad (2.27)$$

En estas últimas dos expresiones, la suma primada indica que ésta corre sólo en la parte discreta del espectro.

Recordemos que L es un operador hermitiano, lo cual implica que todos sus valores propios son reales. Entonces, si la parte imaginaria de z es distinta de cero, forzosamente $z \neq \lambda_n$ y la función $G(z)$ está bien definida. Así, concluimos que $G(z)$ es una función analítica en todo el plano excepto en aquellos puntos o intervalos del eje real en que $z = \lambda_n$. Esto significa que los valores propios de L son polos de la función de Green, y lo inverso también es cierto: los polos de la función $G(z)$ nos dan los valores propios del operador L [11].

Sean λ y s las partes real e imaginaria de z respectivamente ($z = \lambda + is$). Si $s = 0$ y $\lambda = \lambda_n$, entonces $G(\bar{r}, \bar{r}'; \lambda)$ tiene un polo. En el caso usual en que el espectro continuo de L no decae conforme $r \rightarrow \infty$, es posible definir los límites de $G(\bar{r}, \bar{r}'; \lambda)$ conforme $s \rightarrow 0$

$$G^+(\bar{r}, \bar{r}'; \lambda) = \lim_{s \rightarrow 0^+} G(\bar{r}, \bar{r}'; \lambda + is) \quad (2.28)$$

y

$$G^-(\bar{r}, \bar{r}'; \lambda) = \lim_{s \rightarrow 0^+} G(\bar{r}, \bar{r}'; \lambda - is). \quad (2.29)$$

A estas dos funciones se les denomina funciones de Green avanzada y retardada respectivamente. A partir de (2.27) es fácil ver que

$$G^*(\bar{r}, \bar{r}'; z) = G(\bar{r}, \bar{r}'; z^*). \quad (2.30)$$

Para una λ dentro del espectro continuo de L , se deduce entonces que

$$G^-(\bar{r}, \bar{r}'; \lambda) = [G^+(\bar{r}, \bar{r}'; \lambda)]^*, \quad (2.31)$$

lo cual implica que

$$Re\{G^-(\bar{r}, \bar{r}'; \lambda)\} = Re\{G^+(\bar{r}, \bar{r}'; \lambda)\} \quad (2.32)$$

y

$$Im\{G^-(\bar{r}, \bar{r}'; \lambda)\} = -Im\{G^+(\bar{r}, \bar{r}'; \lambda)\}. \quad (2.33)$$

Definimos ahora la discontinuidad de G en el eje real como

$$\tilde{G} \equiv G^+(\lambda) - G^-(\lambda), \quad (2.34)$$

la cual, utilizando la identidad general [27]

$$\lim_{y \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \mp iy} = P \frac{1}{x} \mp i\pi \delta(x) \quad (2.35)$$

podemos expresar como

$$\begin{aligned} \tilde{G}(\bar{r}, \bar{r}'; \lambda) &= -2\pi i \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n) \phi_n(\bar{r}) \phi_n^*(\bar{r}') \\ &= -2\pi i \sum_n^l \delta(\lambda - \lambda_n) \phi_n(\bar{r}) \phi_n^*(\bar{r}') \\ &\quad - 2\pi i \int \delta(\lambda - \lambda_n) \phi_n(\bar{r}) \phi_n^*(\bar{r}') dn. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Utilizando (2.27) y (2.35) vemos que los elementos de la diagonal de la matriz G son

$$G^\pm(\bar{r}, \bar{r}; \lambda) = P \sum_n \frac{\phi_n(\bar{r}) \phi_n^*(\bar{r}')}{\lambda - \lambda_n} \mp i\pi \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n) \phi_n(\bar{r}) \phi_n^*(\bar{r}'). \quad (2.37)$$

Integrando esta expresión sobre \bar{r} obtenemos la traza de la matriz G

$$Tr G^\pm = P \sum_n \frac{1}{\lambda - \lambda_n} \mp i\pi \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n). \quad (2.38)$$

Aquí, la cantidad $\sum_n \delta(\lambda - \lambda_n)$ es la *densidad de estados* (DOS por sus siglas en inglés) en λ . A esta densidad de estados la llamamos $N(\lambda)$, de modo que la cantidad $N(\lambda)d\lambda$ nos da el número de estados en el intervalo $[\lambda, \lambda + d\lambda]$.

Definimos ahora la densidad de estados por unidad de volumen

$$\begin{aligned}\rho(\bar{r}; \lambda) &\equiv \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n) \phi_n(\bar{r}) \phi_n^*(\bar{r}') \\ &= \sum_n' \delta(\lambda - \lambda_n) \phi_n(\bar{r}) \phi_n^*(\bar{r}') \\ &\quad + \int \delta(\lambda - \lambda_n) \phi_n(\bar{r}) \phi_n^*(\bar{r}') dn,\end{aligned}\tag{2.39}$$

de modo que

$$N(\lambda) = \int \rho(\bar{r}; \lambda) d\bar{r}.\tag{2.40}$$

A través de (2.39), podemos tener expresiones simplificadas para la densidad de estados por unidad de volumen [11]:

$$\rho(\bar{r}; \lambda) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im}[G^\pm(\bar{r}, \bar{r}; \lambda)] = -\frac{1}{2\pi i} \tilde{G}(\bar{r}, \bar{r}; \lambda)\tag{2.41}$$

y para la densidad de estados total

$$N(\lambda) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im}[\text{Tr}G^\pm(\lambda)].\tag{2.42}$$

La densidad de estados describe el número de estados que en cada región del espectro de energías es posible ocupar; por ejemplo, si la densidad de estados es cero en una región del espectro, entonces hay un gap, pues ningún estado puede existir. Por el contrario, una banda de energía es un intervalo donde la densidad de estados es distinta de cero. Vemos entonces la importancia de esta cantidad en la Física de Materia Condensada, ya que proporciona información explícita sobre la estructura de bandas del sólido.

2.3. Funciones de Green de Cadena Periódica

En esta sección vamos a analizar las funciones de Green asociadas a Hamiltonianos periódicos mediante la aproximación de amarre fuerte. Sea $\{\bar{i}\}$ el conjunto de sitios de una red periódica, e $|\bar{i}\rangle$ el orbital atómico asociado al sitio \bar{i} . El Hamiltoniano de un sistema de este tipo bajo esta aproximación es (2.9), el cual podemos reescribir con notación de Dirac como

$$H = \sum_{\bar{i}} \varepsilon_{\bar{i}} |\bar{i}\rangle \langle \bar{i}| + \sum_{\bar{i}\bar{j}} t_{\bar{i}\bar{j}} |\bar{i}\rangle \langle \bar{j}|.\tag{2.43}$$

Con esta notación, $\varepsilon_{\bar{i}}$ es la energía necesaria para arrancar un electrón del sitio \bar{i} (autoenergía) y $t_{\bar{i}\bar{j}}$ la que se requiere para transportarlo del sitio \bar{i} al \bar{j} (integral de salto). Aquí llamamos t a este último tipo de potencial para distinguirlo de

la forma más general V que aparece en la ecuación (2.9). Como suponemos que la red es periódica, todos los $\varepsilon_{\vec{i}}$ deben ser iguales, y los llamaremos ε_0 . Ahora vamos a hacer la siguiente aproximación:

$$t_{\vec{i}\vec{j}} = \begin{cases} t_0, & \text{si } i \text{ y } j \text{ son primeros vecinos} \\ 0, & \text{en otro caso.} \end{cases} \quad (2.44)$$

Esta aproximación, llamada de *primeros vecinos*, significa que un electrón en el material sólo interactúa con los átomos más cercanos a él y el potencial que siente debido a todos los demás es despreciable. Esta aproximación es adecuada para sistemas en una dimensión, pues un electrón necesita dar dos pasos para llegar al segundo átomo más cercano, y simplifica notoriamente los cálculos. Definido así, el Hamiltoniano de amarre fuerte es una matriz tridiagonal donde sólo aparece las autoenergías de los sitios y sus interacciones con los vecinos más cercanos.

Con esta notación las expresiones obtenidas al inicio de este capítulo se simplifican considerablemente: las soluciones a la ecuación del cristal (2.10) se escriben como

$$|\vec{r}\rangle = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{\vec{j}} e^{i\vec{r}\cdot\vec{j}} |\vec{j}\rangle, \quad (2.45)$$

mientras que las energías permitidas del sistema son

$$E(\vec{r}) = \varepsilon_0 + \sum_{\vec{j}} t_{\vec{r}\vec{j}} e^{i\vec{r}\cdot\vec{j}} \quad (2.46)$$

A partir de (2.45), es claro que las funciones de onda se propagan de manera que su amplitud es constante en los sitios de la red y su fase varía regularmente (ésta es justamente la condición de Bloch).

De acuerdo a la ecuación (2.25), que nos da la función de Green para un operador cualquiera en términos de sus valores y funciones propias, la función de Green para el Hamiltoniano de Amarre Fuerte es

$$G(z) = \sum_{\vec{r}} \frac{|\vec{r}\rangle \langle \vec{r}|}{z - E(\vec{r})}, \quad (2.47)$$

donde las funciones de onda y las energías están dadas por (2.45) y (2.46) respectivamente. Los elementos de matriz de $G(z)$ son por lo tanto

$$\begin{aligned} G(\vec{l}, \vec{m}; z) &\equiv \langle \vec{l} | G(z) | \vec{m} \rangle = \sum_{\vec{r}} \frac{\langle \vec{l} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \vec{m} \rangle}{z - E(\vec{r})} \\ &= \frac{\Omega}{N(2\pi)^d} \int d\vec{r} \frac{e^{i\vec{r}(\vec{l}-\vec{m})}}{z - E(\vec{r})}, \end{aligned} \quad (2.48)$$

donde d es la dimensión del sistema y Ω un factor de normalización. En particular, los elementos de la diagonal serán

$$G(\bar{l}, \bar{l}; z) = \frac{\Omega}{N(2\pi)^d} \int \frac{d\bar{r}}{z - E(\bar{r})}. \quad (2.49)$$

Ahora veremos el caso que más nos interesa para los objetivos de este trabajo, que es el de una red unidimensional. La ecuación (2.46) para el caso de una dimensión tiene la forma

$$E(r) = \varepsilon_0 + 2t_0 \cos(ra) \quad (2.50)$$

donde a es una constante característica de la red. Esto significa que las energías permitidas del sistema tienen un mínimo en $E = \varepsilon_0 - 2t_0$ y un máximo en $E = \varepsilon_0 + 2t_0$, es decir, toman valores únicamente dentro de una cierta banda. Sustituyendo esta última expresión en (2.49) obtenemos

$$\begin{aligned} G(j, m; z) &= \frac{L}{N(2\pi)} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dr \frac{e^{ira(l-m)}}{z - \varepsilon_0 - 2t_0 \cos(ra)} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\phi \frac{e^{i\phi(l-m)}}{z - \varepsilon_0 - 2t_0 \cos(\phi)}. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Esta integral depende de valor absoluto $|l - m|$. Para evaluarla se transforma entonces en una integral compleja sobre el círculo unitario y se valúa sobre el espectro de energías [11], obteniendo

$$G^\pm(l, m; E) = \frac{\mp i}{\sqrt{2t_0^2 - (E - \varepsilon_0)^2}} \left(x \mp i\sqrt{1 - x^2} \right)^{|l-m|}. \quad (2.52)$$

Aquí hemos definido $x = (z - \varepsilon_0)/2t_0$ y tomamos la parte positiva de la raíz cuadrada. Con esta función de Green podemos obtener la densidad de estados de una red en una dimensión

$$\rho(E) = \mp \text{Im}\{G^\pm(l, l; E)\} = \frac{\theta(2t_0 - |E - \varepsilon_0|)}{\pi \sqrt{2t_0^2 - (E - \varepsilon_0)^2}}. \quad (2.53)$$

En esta expresión θ es una función escalón. Vemos que si $|E - \varepsilon_0| = |2t_0|$, entonces la densidad de estados diverge. En particular, si la autoenergía es igual a cero, entonces la densidad de estados diverge si la energía es igual a alguno de los extremos de la banda. Entonces existen dos singularidades, una en cada extremo de la banda. Éstas, conocidas como *singularidades de Van Hove*, son características de las redes unidimensionales. Vemos que si la autoenergía es diferente de cero, entonces las singularidades no se sitúan en los extremos de la banda sino dentro de ella, pues hay un ligero corrimiento debido a ε_0 .

Concluimos así los conceptos necesarios para nuestros propósitos. En el siguiente capítulo se utilizarán estos conceptos para obtener los coeficientes de la extensión del método de renormalización para densidad de estados de sistemas cuasiperiódicos.

Capítulo 3

Renormalización de la Densidad de Estados

Recordemos que el objetivo del presente trabajo es calcular la densidad de estados de sistemas cuasiperiódicos de Fibonacci como los que se vieron en la sección (2.3) y estudiar lo que sucede cuando éstos presentan impurezas tipo Fano. La forma general para obtener esta propiedad se dedujo en el capítulo anterior usando funciones de Green. Vimos en particular que la densidad de estados está relacionada con la traza de la función de Green, pero si tenemos un sistema grande, de alrededor de 10^{23} sitios, tendríamos que calcular las entradas y la traza de una matriz de $10^{23} \times 10^{23}$. En este capítulo describimos a detalle el método de renormalización que permite simplificar considerablemente los cálculos y lo utilizamos para obtener la densidad de estados de dos tipos de cadenas de Fibonacci.

En general, el término renormalización se refiere a una serie de métodos teóricos y computacionales utilizados para transformaciones de cambios de escala o para eliminar divergencias que surgen al calcular algunas cantidades físicas [28]. Aunque este concepto surgió en Física de Partículas, actualmente se utiliza en diferentes áreas como Física Estadística y Materia Condensada [29]. El método de renormalización que se desarrolla en este trabajo consiste en reducir el número de grados de libertad de un sistema conservando la información física relevante [30].

3.1. Fibonacci Mixto

Este tipo de cadena se forma con dos clases de átomos, A y B , con autoenergías ε_A y ε_B respectivamente, acomodados según la sucesión de Fibonacci. La figura (3.1) muestra las primeras 4 generaciones de esta cadena.

Aquí, t_{AA} y t_{AB} representan las energías necesarias para pasar un electrón de un átomo A a uno A o de un átomo A a uno B respectivamente (inte-

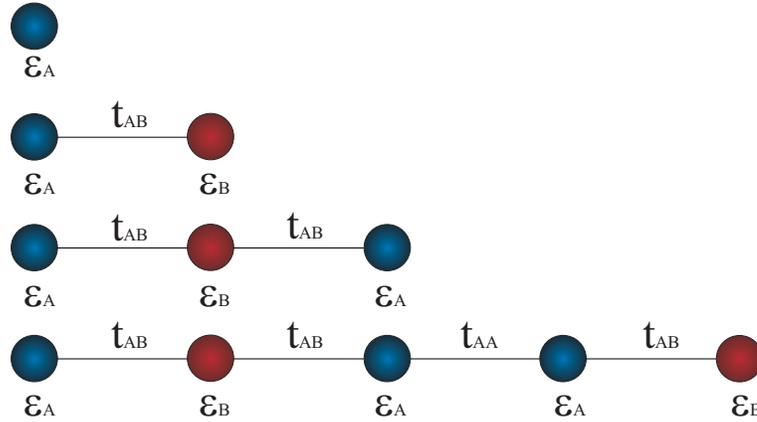


Figura 3.1: Generaciones 1,2,3 y 4 de la cadena de Fibonacci por sitios.

grales de salto). Utilizamos la aproximación de primeros vecinos y consideramos $t_{AB} = t_{BA}$. Además, hay que notar que por construcción al formar estas cadenas nunca requerimos de la energía t_{BB} .

Vamos primero a renormalizar la tercera generación para ilustrar cómo funciona el método, después podremos hacer una generalización para renormalizar la generación n . La matriz Hamiltoniana para este sistema de tres sitios es

$$H = \begin{pmatrix} \varepsilon_A & t_{AB} & 0 \\ t_{AB} & \varepsilon_B & t_{AB} \\ 0 & t_{AB} & \varepsilon_A \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

Retomamos la ecuación que define la función de Green y la aplicamos al caso en que el operador L es el operador Hamiltoniano. Esta ecuación tiene el nombre de *ecuación de Dyson*, y para este sistema tiene la forma

$$\begin{aligned} (E - H)G &= \begin{pmatrix} E - \varepsilon_A & -t_{AB} & 0 \\ -t_{AB} & E - \varepsilon_B & -t_{AB} \\ 0 & -t_{AB} & E - \varepsilon_A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & G_{13} \\ G_{21} & G_{22} & G_{23} \\ G_{31} & G_{32} & G_{33} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Al multiplicar las tres columnas de $G = G(E)$ por la segunda fila de $(E - H)$ y reacomodando obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned}
(E - \varepsilon_B)G_{21} &= t_{AB}(G_{11} + G_{31}) \\
(E - \varepsilon_B)G_{22} &= 1 + t_{AB}(G_{12} + G_{32}) \\
(E - \varepsilon_B)G_{23} &= t_{AB}(G_{13} + G_{33})
\end{aligned} \tag{3.3}$$

Estas tres ecuaciones, como se verá más adelante, contienen toda la información que necesitamos de la cadena. Multiplicando las filas 1 y 3 de $(E - H)$ por la primer columna de G , la fila 3 de $(E - H)$ por la tercer columna de G y sustituyendo G_{21} y G_{23} en las ecuaciones resultantes a partir de la primera y tercera ecuación de (3.3) nos queda

$$\begin{aligned}
\left(E - \varepsilon_A - \frac{t_{AB}^2}{E - \varepsilon_B}\right) G_{11} &= 1 + \frac{t_{AB}^2}{E - \varepsilon_B} G_{13} \\
\left(E - \varepsilon_A - \frac{t_{AB}^2}{E - \varepsilon_B}\right) G_{31} &= \frac{t_{AB}^2}{E - \varepsilon_B} G_{11} \\
\left(E - \varepsilon_A - \frac{t_{AB}^2}{E - \varepsilon_B}\right) G_{33} &= 1 + \frac{t_{AB}^2}{E - \varepsilon_B} G_{13}.
\end{aligned} \tag{3.4}$$

De la misma forma en que el sistema (3.3) contiene información sobre la cadena de tres átomos, este sistema de ecuaciones podría representar una cadena de sólo dos sitios como la que se ve en la siguiente figura:

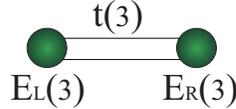


Figura 3.2: Renormalización de la tercera generación de la cadena de Fibonacci por sitios.

La ecuación de Dyson de este sistema reducido es

$$\begin{pmatrix} E - E_L(3) & -t(3) \\ -t(3) & E - E_R(3) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11} & G_{13} \\ G_{31} & G_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{3.5}$$

a partir de la cual podemos sacar tres ecuaciones análogas a (3.3) que representan al sistema de dos átomos que se muestra en la figura (3.2):

$$\begin{aligned}
(E - E_L(3)) G_{11} &= 1 + t(3)G_{13} \\
(E - E_R(3)) G_{13} &= t(3)G_{11}. \\
(E - E_R(3)) G_{33} &= 1 + t(3)G_{13}.
\end{aligned} \tag{3.6}$$

Comparando (3.4) y (3.6), vemos que el primer sistema de ecuaciones representa la cadena de la figura anterior si hacemos

$$\begin{aligned} E_L(3) &= \varepsilon_A + \frac{t_{AB}^2}{E - \varepsilon_B} \\ E_R(3) &= \varepsilon_A + \frac{t_{AB}^2}{E - \varepsilon_B} \\ t(3) &= \frac{t_{AB}^2}{E - \varepsilon_B} \end{aligned} \quad (3.7)$$

Por lo tanto, el sistema de dos átomos de la figura 3.2 con las cantidades $E_L(3)$, $E_R(3)$ y $t(3)$ tal como se acaban de ver es equivalente a la generación 3 de la cadena de Fibonacci, que cuenta con tres átomos. Decimos entonces que hemos *renormalizado* la tercer generación de la cadena.

Para renormalizar la generación 4 de la cadena lo primero que notamos es que ésta se forma al pegar las generaciones 3 y 2, y si cada una de estas generaciones la expresamos ya renormalizada, tendremos un sistema de cuatro átomos, el cual podemos reducir a uno equivalente de únicamente dos sitios siguiendo un procedimiento análogo al que usamos para renormalizar la tercer generación.

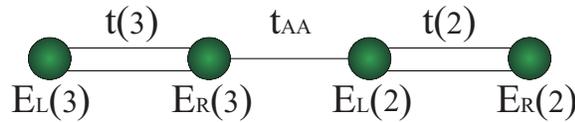


Figura 3.3: Cuarta generación de la cadena de Fibonacci por sitios vista como la unión de las dos generaciones anteriores renormalizadas.

La ecuación de Dyson para este sistema, visto como unión de dos cadenas renormalizadas, es

$$\begin{pmatrix} E - E_L(3) & -t(3) & 0 & 0 \\ -t(3) & E - E_R(3) & -t_{AA} & 0 \\ 0 & -t_{AA} & E - E_L(2) & -t(2) \\ 0 & 0 & -t(2) & E - E_R(2) \end{pmatrix} \times \quad (3.8)$$

$$\begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & G_{13} & G_{14} \\ G_{21} & G_{22} & G_{23} & G_{24} \\ G_{31} & G_{32} & G_{33} & G_{34} \\ G_{41} & G_{42} & G_{43} & G_{44} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Multiplicando las 4 filas de $(E - H)$ por la primer columna de G llegamos al

siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned}
(E - E_L(3))G_{11} &= 1 + t(3)G_{21} \\
(E - E_R(3))G_{21} &= t(3)G_{11} + t_{AA}G_{31} \\
(E - E_L(2))G_{31} &= t_{AA}G_{21} + t(2)G_{41} \\
(E - E_R(2))G_{41} &= t(2)G_{31}
\end{aligned} \tag{3.9}$$

Este sistema de ecuaciones, análogo al sistema (3.3), contiene toda la información necesaria para nuestros fines. Queremos extraer esta información en términos sólo de G_{11} , G_{44} y G_{14} pues así tendríamos un sistema de dos ecuaciones que representaría una estructura renormalizada de dos átomos y contendría la información completa de esta cadena. El motivo por el cual escogemos justamente estas G_{ij} es porque queremos de algún modo suprimir la parte intermedia de la cadena y quedarnos únicamente con las orillas. De la tercera ecuación despejamos G_{31} lo sustituimos en la segunda ecuación y reacomodamos términos para obtener

$$G_{21} = \frac{t(3)}{(E - \alpha)}G_{11} + \frac{t_{AA}t(2)}{(E - \alpha)(E - E_L(2))}G_{41}, \tag{3.10}$$

en donde definimos la constante

$$\alpha \equiv E_R(3) + \frac{t_{AA}^2}{E - E_L(2)}. \tag{3.11}$$

Sustituimos esta expresión en la primera ecuación de (3.9) y nos queda

$$\left[E - E_L(3) - \frac{t^2(3)}{(E - \alpha)} \right] G_{11} = 1 + \frac{t_{AA}t(2)t(3)}{(E - \alpha)(E - E_L(2))}G_{41}. \tag{3.12}$$

Ahora despejamos G_{21} de la segunda ecuación de (3.9), sustituimos en la tercera y ordenando términos tenemos

$$G_{31} = \frac{t(2)}{(E - \beta)}G_{41} + \frac{t(3)t_{AA}}{(E - \beta)(E - E_R(3))}G_{11}, \tag{3.13}$$

en donde hemos definido

$$\beta \equiv E_L(2) + \frac{t_{AA}^2}{E - E_R(3)}. \tag{3.14}$$

Finalmente, sustituyendo esta expresión en la cuarta ecuación de (3.9) obtenemos

$$\left[E - E_R(2) - \frac{t^2(2)}{(E - \beta)} \right] G_{41} = \frac{t_{AA}t(2)t(3)}{(E - \beta)(E - E_R(3))}G_{11}. \tag{3.15}$$

El sistema formado por las ecuaciones (3.12) y (3.15) contiene nada más las G_{ij} que deseábamos y describe un sistema renormalizado de dos átomos, cuya ecuación de Dyson sería

$$\begin{pmatrix} E - E_L(4) & -t(4) \\ -t(4) & E - E_R(4) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{11} & G_{14} \\ G_{41} & G_{44} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.16)$$

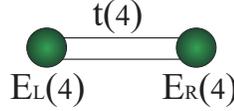


Figura 3.4: Renormalización de la generación 4 de la cadena de Fibonacci por sitios.

El par de ecuaciones (3.12) y (3.15) describe por lo tanto este sistema renormalizado siempre y cuando hagamos las sustituciones

$$\begin{aligned} E_L(4) &= E_L(3) + \frac{t^2(3)}{(E-\alpha)} \\ E_R(4) &= E_R(2) + \frac{t^2(3)}{(E-\beta)} \\ t(4) &= \frac{t_{AA}t(2)t(3)}{(E-\alpha)(E-E_L(2))} = \frac{t_{AA}t(2)t(3)}{(E-\beta)(E-E_R(3))}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Hemos entonces renormalizado la generación 4 de la cadena de Fibonacci por sitios, pero además notamos que el proceso mediante el cual lo hicimos es generalizable a la generación n : dado que la generación n se forma al pegar las generaciones $n-1$ y $n-2$, podemos sustituir en este último proceso $2 \rightarrow n-2$ y $3 \rightarrow n-1$ para sí obtener las energías de la generación n renormalizada:

$$\begin{aligned} E_L(n) &= E_L(n-1) + \frac{t^2(n-1)}{\left[E - E_R(n-1) - \frac{t_n^2}{E - E_L(n-2)} \right]} \\ E_R(n) &= E_R(n-2) + \frac{t^2(n-2)}{\left[E - E_L(n-2) - \frac{t_n^2}{E - E_R(n-1)} \right]} \\ t(n) &= \frac{t(n-1)t(n-2)t_n}{(E - E_R(n-1))(E - E_L(n-2)) - t_n^2}, \end{aligned} \quad (3.18)$$

en donde t_n es la energía con que se unen las generaciones $n-1$ y $n-2$, que cambia según si la generación es par o impar, es decir

$$t_n = \begin{cases} t_{AA} & \text{si } n \text{ es par} \\ t_{AB} & \text{si } n \text{ es impar} \end{cases} \quad (3.19)$$

Como las energías efectivas de una cadena renormalizada dependen de las energías efectivas de las dos generaciones anteriores, debemos dar dos condiciones

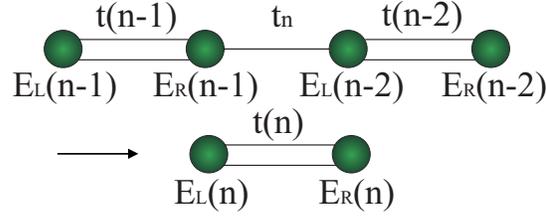


Figura 3.5: Proceso generalizado para renormalizar la n -ésima generación de la cadena.

iniciales. Elegimos las generaciones 2 y 3: las energías efectivas de la generación 2 son triviales pues esta cadena consta de sólo 2 sitios; las condiciones iniciales de la generación 3 las hemos ya calculado y se muestran en la ecuación (3.7). Por lo tanto, las condiciones iniciales que requerimos son

$$\begin{aligned}
 E_L(2) &= \varepsilon_A \\
 E_R(2) &= \varepsilon_B \\
 t(2) &= t_{AB} \\
 E_L(3) &= \varepsilon_A + \frac{t_{AB}^2}{(E - \varepsilon_B)} \\
 E_R(3) &= \varepsilon_A + \frac{t_{AB}^2}{(E - \varepsilon_B)} \\
 t(3) &= \frac{t_{AB}^2}{(E - \varepsilon_B)}.
 \end{aligned} \tag{3.20}$$

La densidad de estados de la generación n la expresamos como la suma de las densidades de estados de las generaciones $n-1$ y $n-2$, de manera que mediante la expresión que se dedujo en el capítulo anterior, podemos escribir

$$\begin{aligned}
 DOS(E, n) = & -\frac{1}{\pi} \text{Im}[A(n-1)G_{11} + B(n-1)G_{22} + C(n-1)G_{12} \\
 & + D(n-1) + A(n-2)G_{33} + B(n-2)G_{44} \\
 & + D(n-2)G_{34} + D(n-2)],
 \end{aligned} \tag{3.21}$$

donde los coeficientes A , B , C y D están por determinarse. Si queremos la densidad de estados del sistema renormalizado, entonces hay que reescribir esta expresión para que dependa sólo de G_{11} , G_{44} y G_{14} . Esto lo podemos hacer a través del sistema de ecuaciones que surge de multiplicar las filas 2 y 3 de $E - H$ por

las columnas de G en la ecuación de Dyson (3.8):

$$\begin{aligned}
 (E - E_R(3))G_{21} &= t(3)G_{11} + t_{AA}G_{31} \\
 (E - E_R(3))G_{22} &= 1 + t(3)G_{12} + t_{AA}G_{32} \\
 (E - E_R(3))G_{23} &= t(3)G_{13} + t_{AA}G_{33} \\
 (E - E_R(3))G_{24} &= t(3)G_{14} + t_{AA}G_{34} \\
 (E - E_L(2))G_{31} &= t(2)G_{41} + t_{AA}G_{21} \\
 (E - E_L(2))G_{32} &= t(2)G_{42} + t_{AA}G_{22} \\
 (E - E_L(2))G_{33} &= 1 + t(2)G_{43} + t_{AA}G_{23} \\
 (E - E_L(2))G_{34} &= t(2)G_{44} + t_{AA}G_{24}.
 \end{aligned} \tag{3.22}$$

Manipulando algebraicamente estas ecuaciones, podemos escribir todas las G_{ij} que en ellas aparecen como funciones de G_{11} , G_{44} y G_{14} . Éstas las sustituimos en la densidad de estados (3.21) y factorizando encontramos una expresión en términos de las G que queremos

$$DOS = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[A(n)G_{11} + B(n)G_{44} + C(n)G_{14} + D(n)]. \tag{3.23}$$

Los valores de las funciones de Green G_{11} , G_{44} y G_{14} se muestran en el Apéndice A. Introduciendo por razones de simplicidad las constantes

$$\begin{aligned}
 \theta &= E_R(n-1) + \frac{t_n^2}{E - E_L(n-2)} \\
 \mu &= E_L(n-2) + \frac{t_n^2}{E - E_R(n-1)},
 \end{aligned} \tag{3.24}$$

se encuentran los siguientes valores de los coeficientes de las funciones de Green:

$$\begin{aligned}
A(n) &= A(n-1) + B(n-1) \frac{t^2(n-1)}{(E-\theta)^2} + C(n-1) \frac{t_n^2}{(E-\theta)} \\
&\quad + A(n-2) \frac{t^2(n-1)t_n^2}{(E-E_R(n-1))^2(E-\mu)^2} \\
B(n) &= B(n-2) + A(n-2) \frac{t^2(n-2)}{(E-\mu)^2} + C(n-2) \frac{t_n^2}{(E-\mu)} \\
&\quad + B(n-1) \frac{t^2(n-2)t_n^2}{(E-E_L(n-2))^2(E-\theta)^2} \\
C(n) &= C(n-1) \frac{t(n-2)t_n}{(E-E_L(n-2))(E-\theta)} + C(n-2) \frac{t_n t(n-1)}{E-E_R(n-1)(E-\mu)} \\
&\quad + A(n-2) \frac{2t(n-2)t(n-1)t_n}{(E-E_R(n-1))(E-\mu)^2} + B(n-1) \frac{2t(n-2)t(n-1)t_n}{(E-E_L(n-1))(E-\theta)^2} \\
D(n) &= D(n-1) + D(n-2) + A(n-2) \frac{1}{(E-\mu)} + B(n-1) \frac{1}{(E-\theta)}
\end{aligned} \tag{3.25}$$

Así, con las fórmulas de recurrencia (3.18) y (3.25) podemos calcular la densidad de estados para cualquier generación de una cadena de Fibonacci por sitios en términos de las densidades de estados y las energías efectivas de las dos anteriores. Ahora nos falta es dar las condiciones iniciales para las constantes A, B, C y D , para lo cual hacemos

$$\begin{aligned}
DOS(E, 2) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im}[A(2)G_{11} + B(2)G_{22} + C(2)G_{12} + D(2)] \\
&= -\frac{1}{\pi} [G_{11} + G_{22}] \\
DOS(E, 3) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im}[A(3)G_{11} + B(3)G_{33} + C(3)G_{13} + D(3)] \\
&= -\frac{1}{\pi} [G_{11} + G_{22} + G_{33}].
\end{aligned} \tag{3.26}$$

Las condiciones iniciales para la generación 2 son triviales; con ayuda del sistema

(3.3) obtenemos las condiciones de la tercera generación, obteniendo finalmente

$$\begin{aligned}
 A(2) &= 1 \\
 B(2) &= 1 \\
 C(2) &= 0 \\
 D(2) &= 0 \\
 A(3) &= 1 + \frac{t_{AB}^2}{(E-\varepsilon_B)^2} \\
 B(3) &= 1 + \frac{t_{AB}^2}{(E-\varepsilon_B)^2} \\
 C(3) &= \frac{2t_{AB}^2}{(E-\varepsilon_B)^2} \\
 D(3) &= \frac{1}{(E-\varepsilon_B)}.
 \end{aligned} \tag{3.27}$$

Finalmente necesitamos dar valores a los G_{ij} de la ecuación (3.23). Consideramos dos casos: cuando la cadena tienen en sus extremos saturadores periódicos semiinfinitos y cuando carece de ellos.

Los saturadores son los cables que se colocan en los extremos de la cadena a través de los cuales se hace pasar un electrón. Suponemos que éstos son conductores perfectos y los representamos mediante cadenas periódicas (que como se sabe tienen coeficiente de transmisión 1) tan largas en comparación con el sistema de Fibonacci que podemos pensarlas como semiinfinitas. La figura 3.6 muestra una cadena de Fibonacci renormalizada con saturadores, éstos también renormalizados.

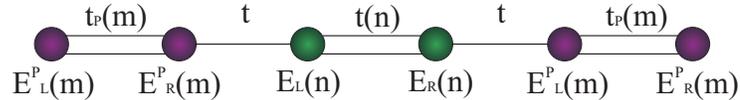


Figura 3.6: Cadena por sitios renormalizada con dos saturadores periódicos semiinfinitos en sus extremos. Éstos se muestran también renormalizados.

En esta figura, $E_L^P(m)$, $E_R^P(m)$ y $t_P(m)$ son las energías de los saturadores renormalizados. La energía t es la que se utiliza para pegar los saturadores al sistema. A partir de la ecuación de Dyson de este sistema de 6 sitios podemos obtener, de la misma forma que lo hicimos para las generaciones 3 y 4 sin

saturador, el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned}
(E - E_L^P(m))G_{1i} &= \delta_{1i} + t_P(m)G_{2i} \\
(E - E_R^P(m))G_{2i} &= \delta_{2i} + t_P(m)G_{1i} + tG_{3i} \\
(E - E_L(n))G_{3i} &= \delta_{3i} + tG_{2i} + t(n)G_{4i} \\
(E - E_R(n))G_{4i} &= \delta_{4i} + t(n)G_{3i} + tG_{5i} \\
(E - E_L^P(m))G_{5i} &= \delta_{5i} + tG_{4i} + t_P(m)G_{6i} \\
(E - E_R^P(m))G_{6i} &= \delta_{6i} + t_P(m)G_{5i},
\end{aligned} \tag{3.28}$$

donde el subíndice i toma valores desde 1 hasta el 6. Al manipular algebraicamente estas seis ecuaciones podemos obtener valores para los coeficientes G_{11} , G_{44} y G_{14} que necesitamos para calcular la densidad de estados. Los valores de dichos coeficientes se muestran en el Apéndice 1.

Por otro lado, si la cadena no tiene saturadores, el sistema de ecuaciones que necesitamos es justamente (3.9). A partir de estas cuatro ecuaciones podemos obtener los coeficientes de la función de Green que requerimos. Las funciones de Green para esta cadena sin saturadores, como se mencionó anteriormente, se encuentran en el Apéndice 1.

Tenemos por lo tanto todo lo que necesitamos para calcular la densidad de estados de cualquier generación de una cadena de Fibonacci por sitios; ahora estudiaremos el problema cuando la cadena presenta una impureza.

3.2. Cadena Mixta con Impureza

Vamos a estudiar dos casos: uno en que la cadena presenta una impureza puntual y otro en que se presenta una impureza tipo Fano.

3.2.1. Impureza Puntual

Esta impureza consiste en un sitio que no tiene la autoenergía que le corresponde. Para la generación n , que se forma pegando las $n - 1$ y $n - 2$, vamos a colocar dicha impureza al inicio de la cadena $n - 2$ como se muestra en la figura 3.7. El procedimiento para calcular la densidad de estados es análogo al de la sección anterior. Lo dividimos en tres pasos:

Primero renormalizamos la primera mitad de la cadena, la generación $n - 1$, calculando las energías y los coeficientes de la densidad de estados igual que como se hizo en la sección anterior.

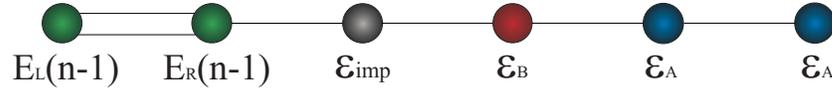


Figura 3.7: Sitio de impureza con autoenergía ε_{imp} colocado al inicio de la segunda parte de la generación n de la cadena.

Después renormalizamos la segunda mitad de la cadena, la generación $n - 2$, considerando que el primer sitio es una impureza. Para hacerlo simplemente cambiamos las condiciones iniciales de las energías y los coeficientes A, B, C y D de la densidad de estados por condiciones de impureza y en sus fórmulas de recurrencia tomamos con impureza sólo los coeficientes que dependen de $j - 1$, pues si tomáramos también aquellos que van como $j - 2$ con las condiciones alteradas no tendríamos una sola sino muchas impurezas puntuales, una al inicio de cada generación. Llegamos así a un sistema de 4 sitios.

Finalmente, para pegar estas dos cadenas, renormalizamos este sistema de 4 sitios igual que en la sección anterior, pero considerando las constantes de $n - 1$ sin impureza y las de $n - 2$ con impureza, pues fue en esta parte de la cadena donde la colocamos.

Vemos así que para introducir una impureza puntual no hay que hacer cálculos nuevos, simplemente debemos adaptar los que ya teníamos. No será así para cuando tengamos una impureza tipo Fano.

3.2.2. Impureza tipo Fano

Recordemos de la sección (1.3) que una impureza tipo Fano es una cadena de átomos que se le adhiere a otra en un determinado sitio. En este caso consideramos una cadena de Fibonacci por sitios que se le pega a otra del mismo tipo en el primer sitio de la generación $n - 2$ (el sitio donde teníamos la impureza puntual).

Para calcular la densidad de estados de este sistema tenemos que renormalizar las dos cadenas, la normal y la de impureza, a la vez. Esto nos conduce a un sistema reducido de dos sitios efectivos cuya densidad de estados es la suma de la densidad de la cadena $n - 1$, la de la $n - 2$ y la de la impureza. Al renormalizar cada una de estas tres partes llegamos al sistema de seis sitios de la figura 3.8. Queremos reducir este sistema a uno de sólo dos sitios como hemos hecho anteriormente. Llevamos a cabo un procedimiento análogo: escribimos la matriz Hamiltoniana y utilizamos la ecuación de Dyson para escribir todos los coeficientes de la función de Green en términos de las G_{ij} de los extremos. Estos coeficientes los sustituimos en la expresión explícita de la densidad de estados y obtenemos fórmulas de recurrencia para las coeficientes de la densidad de estados

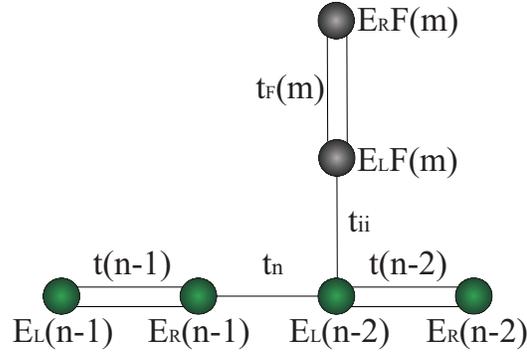


Figura 3.8: Cadena de impureza adherida a la cadena original. Todas ellas se muestran renormalizadas.

del sistema reducido.

La matriz Hamiltoniana del sistema de la figura 3.8 es la siguiente:

$$H = \begin{pmatrix} E_L(1) & t(1) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ t(1) & E_R(1) & t_i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t_i & E_L(2) & t(2) & t_{ii} & 0 \\ 0 & 0 & t(2) & E_R(2) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_{ii} & 0 & E_L F(m) & t_F(m) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & t_F(m) & E_R F(m) \end{pmatrix}. \quad (3.29)$$

Hemos hecho las sustituciones $(n-1) \rightarrow 1$ y $(n-2) \rightarrow 2$; la integral de salto t_{ii} es la que usamos para pegar impureza Fano y las cantidades $E_L F(m)$, $E_R F(m)$ y $t_F(m)$ corresponden a la renormalización de la impureza, que suponemos es de una generación arbitraria m . El sistema de ecuaciones que obtenemos de la

ecuación de Dyson es :

$$\begin{aligned}
 (E - E_L(1))G_{1i} &= \delta_{1i} + t(1)G_{2i} \\
 (E - E_R(1))G_{2i} &= \delta_{2i} + t(1)G_{1i} + tiG_{3i} \\
 (E - E_L(2))G_{3i} &= \delta_{3i} + tiG_{2i} + t(2)G_{4i} + tiiG_{5i} \\
 (E - E_R(2))G_{4i} &= \delta_{4i} + t(2)G_{3i} \\
 (E - E_L F(m))G_{5i} &= \delta_{5i} + tiiG_{3i} + t_F(m)G_{6i} \\
 (E - E_R F(m))G_{6i} &= \delta_{6i} + t_F(m)G_{5i}
 \end{aligned} \tag{3.30}$$

El subíndice i toma valores desde 1 hasta 6, de modo que el sistema anterior contienen todas las partes de la ecuación de Dyson. Al escribir la densidad de estados como la suma de las densidades de cada parte de la cadena obtenemos:

$$\begin{aligned}
 DOS(E) = & A(1)G_{11} + B(1)G_{22} + C(1)G_{12} + D(1) \\
 & + A(2)G_{33} + B(2)G_{44} + C(2)G_{34} + D(2) \\
 & + AFG_{55} + BFG_{66} + CFG_{56} + DF.
 \end{aligned} \tag{3.31}$$

De los G_{ij} de esta expresión nos quedaremos nada más con los de los extremos, es decir, G_{11}, G_{44} y G_{14} . Esto lo podemos hacer escribiendo todos los demás en términos de estos tres utilizando el sistema (3.30). Sustituyendo los resultados en la densidad de estados y reacomodando términos llegamos a una expresión del tipo

$$DOS(E) = ATG_{11} + BTG_{44} + CTG_{14} + DT, \tag{3.32}$$

donde los coeficientes tienen los valores

$$\begin{aligned}
 AT &= A(1) + F_1^2 B(1) + F_1 C(1) + F_2^2 A(2) + F_3 A_F \\
 &\quad + F_4^2 F_3 B_F + F_4 F_3 C_F \\
 BT &= B(2) + F_5^2 B(1) + F_6^2 A(2) + F_6 C(2) + F_7 A_F \\
 &\quad + F_4^2 F_7 B_F + F_4 F_7 C_F \\
 CT &= 2F_1 F_5 B(1) + F_5 C(1) - 2F_6 F_2 A(2) + F_2 C(2) \\
 &\quad + F_8 A_F + F_4^2 F_8 B_F + F_4 F_8 C_F \\
 DT &= D(1) + D(2) + D_F + F_9 B(1) + F_{10} A(2) + F_{11} A_F \\
 &\quad + F_{12} O F_4^2 F_{11} B_F + F_4 F_{11} C_F.
 \end{aligned} \tag{3.33}$$

Los valores de todas las constantes presentes en estas últimas expresiones se muestran en el Apéndice A. Las fórmulas de recurrencia para las energías de renormalización, para los coeficientes A, B, C , y D , los valores de AT, BT, CT y DT y las funciones de Green G_{ij} se utilizan para calcular numéricamente la densidad de estados de sistemas como los que se han descrito.

3.3. Fibonacci de Enlaces

En esta cadena todos los sitios tienen autoenergías iguales y las integrales de salto se acomodan según la sucesión de Fibonacci. La figura 3.9 ilustra las primeras generaciones de estos sistemas.

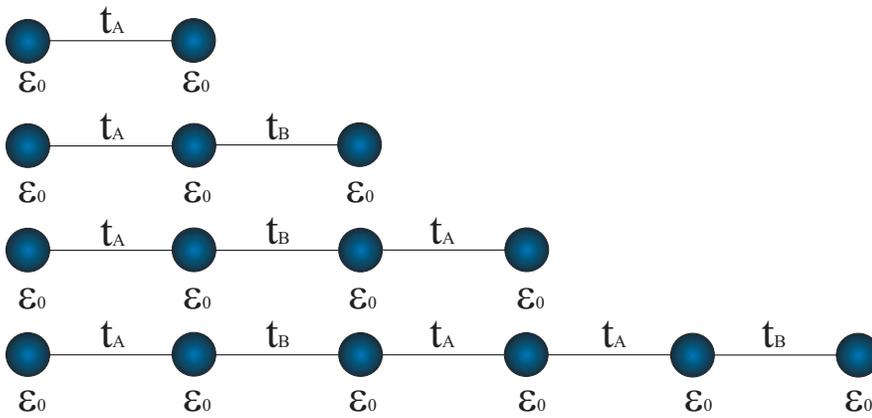


Figura 3.9: Primeras 4 generaciones de la cadena de Fibonacci por enlaces.

A diferencia de la cadena por sitios, aquí las generaciones $n - 1$ y $n - 2$ que forman la n -ésima cadena no se pegan mediante una energía de enlace sino en un sitio. Por lo tanto, en el primer paso de la renormalización de la cadena n no tendremos un sistema reducido de 4 sitios sino de únicamente 3, como se muestra en la figura 3.10.

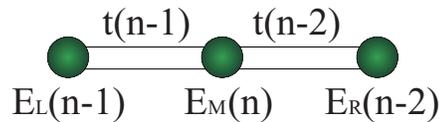


Figura 3.10: Generación n de la cadena de Fibonacci por enlaces vista como la unión de las dos generaciones anteriores renormalizadas.

Por simplificación hemos introducidos la energía central de este sistema

$$E_M(n) \equiv E_R(n-1) + E_L(n-2). \quad (3.34)$$

El procedimiento para calcular las energías efectivas del sistema renormalizado es análogo al que se siguió para renormalizar la tercera generación de la cadena por sitios. Las fórmulas de recurrencia que se obtienen son

$$\begin{aligned} E_L(n) &= E_L(n-1) + \frac{t^2(n-1)}{E-E_M(n)} \\ E_R(n) &= E_R(n-2) + \frac{t^2(n-2)}{E-E_M(n)} \\ t(n) &= \frac{t(n-1)t(n-2)}{E-E_M(n)}, \end{aligned} \quad (3.35)$$

y sus correspondientes valores iniciales son los siguientes:

$$\begin{aligned} E_L(2) &= \varepsilon_0 \\ E_R(2) &= \varepsilon_0 \\ t(2) &= t_A \\ E_L(3) &= \varepsilon_0 + \frac{t_A^2}{E-\varepsilon_0} \\ E_R(3) &= \varepsilon_0 + \frac{t_B^2}{E-\varepsilon_0} \\ t(3) &= \frac{t_A t_B}{E-\varepsilon_0}. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Para calcular la densidad de estados notamos lo siguiente: al escribirla como la suma de las densidades de estados de las dos generaciones anteriores, hay un sitio sobre el que sumamos dos veces, pues en el sitio central de la cadena n se enciman las energías derecha e izquierda de las generaciones $n-1$ y $n-2$ respectivamente. Es necesario por lo tanto restar una función de Green asociada a este sitio, es decir

$$\begin{aligned} DOS(n) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im}[A(n)G_{11} + B(n)G_{33} + C(n)G_{13} + D(n)] \\ &= -\frac{1}{\pi}[A(n-1)G_{11} + B(n-1)G_{22} + C(n-1)G_{12} \\ &\quad + D(n-1) + A(n-2)G_{22} + B(n-2)G_{33} \\ &\quad + C(n-2)G_{23} + D(n-2) - G_{22}]. \end{aligned} \quad (3.37)$$

Ahora hacemos lo mismo que hicimos para la cadena mixta: comenzamos por escribir la ecuación de Dyson del sistema, que consiste en el producto de dos

matrices de 3×3 . Al multiplicar las tres columnas de G por la segunda fila de $E - H$ llegamos al siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned}
(E - E_M(n))G_{21} &= t(n-1)G_{11} + t(n-2)G_{31} \\
(E - E_M(n))G_{22} &= 1 + t(n-1)G_{12} + t(n-2)G_{32} \\
(E - E_M(n))G_{32} &= t(n-1)G_{13} + t(n-2)G_{33}
\end{aligned} \tag{3.38}$$

Estas ecuaciones nos permiten expresar todas las G_{ij} en términos de G_{11}, G_{33} y G_{13} (dichas funciones de Green se encuentran en el Apéndice 2), las sustituimos en la densidad de estados y factorizamos para llegar a los valores de los coeficientes

$$\begin{aligned}
A(n) &= A(n-1) + [B(n-1) + A(n-2) - 1] \frac{t^2(n-1)}{(E-E_M(n))^2} \\
&\quad + C(n-1) \frac{t(n-1)}{(E-E_M(n))} \\
B(n) &= B(n-2) + [B(n-1) + A(n-2) - 1] \frac{t^2(n-2)}{(E-E_M(n))^2} \\
&\quad + C(n-2) \frac{t(n-2)}{(E-E_M(n))} \\
C(n) &= [B(n-1) + A(n-2) - 1] \frac{2t(n-1)t(n-2)}{(E-E_M(n))^2} \\
&\quad + C(n-1) \frac{t(n-2)}{(E-E_M(n))} + C(n-2) \frac{t(n-1)}{(E-E_M(n))} \\
D(n) &= D(n-1) + D(n-2) \\
&\quad + [B(n-1) + A(n-2) - 1] \frac{1}{(E-E_M(n))},
\end{aligned} \tag{3.39}$$

y se llega de manera análoga a sus correspondientes valores iniciales

$$\begin{aligned}
 A(2) &= 1 \\
 B(2) &= 1 \\
 C(2) &= 0 \\
 D(2) &= 0 \\
 A(3) &= 1 + \frac{t_A^2}{(E-\varepsilon_0)^2} \\
 B(3) &= 1 + \frac{t_B^2}{(E-\varepsilon_0)^2} \\
 C(3) &= \frac{2t_A t_B}{(E-\varepsilon_0)^2} \\
 D(3) &= \frac{1}{(E-\varepsilon_0)}.
 \end{aligned} \tag{3.40}$$

Ya que tenemos estos coeficientes A, B, C y D y las funciones de Green, podemos escribir la densidad de estados de la cadena como

$$DOS(E, n) = -\frac{1}{\pi} Im[A(n)G_{13} + B(n)G_{33} + C(n)G_{13} + D(n)]. \tag{3.41}$$

Para obtener las funciones de Green G_{11}, G_{33} y G_{13} de la densidad de estados consideramos de nuevo dos casos: el de la cadena con saturadores y el de la cadena sin saturadores.

Cuando el sistema tiene saturadores pensamos nuevamente en ellos como cadenas periódicas mucho más largas que la de Fibonacci, sólo que ahora no usamos una integral de salto para juntarlas sino que se pegan sitio con sitio (igual que como se adhieren las generaciones de la cadena de Fibonacci).

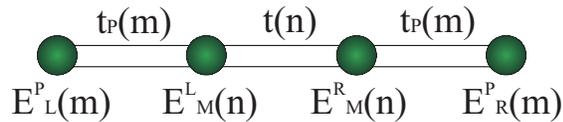


Figura 3.11: Cadena de Fibonacci por enlaces con dos saturadores periódicos renormalizados en sus extremos.

En la figura 3.11, $E_M^L(n) = E_R^P(m) + E_L(n)$ y $E_M^R(n) = E_L^P(m) + E_R(n)$. Partiendo nuevamente de la ecuación de Dyson de este sistema de cuatro sitios

efectivos, las ecuaciones que necesitamos para calcular los G_{ij} son:

$$\begin{aligned}
(E - E_L^P(m))G_{1i} &= \delta_{1i} + t_P(m)G_{2i} \\
(E - E_M^L(m))G_{2i} &= \delta_{2i} + t_P(m)G_{1i} + t(n)G_{3i} \\
(E - E_M^R(m))G_{3i} &= \delta_{3i} + t(n)G_{2i} + t_P(m)G_{4i} \\
(E - E_R^P(m))G_{4i} &= \delta_{4i} + t_P(m)G_{3i}
\end{aligned} \tag{3.42}$$

Aquí, el índice i va desde 1 hasta 4. Los valores de las funciones de Green que se obtienen a partir de estas ecuaciones se pueden ver en el Apéndice 2. Por otro lado, si la cadena carece de saturadores, las ecuaciones que necesitamos para obtener dichos coeficientes son las del sistema (3.38), y como se mencionó anteriormente, estas funciones de Green se pueden consultar en el Apéndice 2. Tenemos por lo tanto todo lo que necesitamos para calcular iterativamente la densidad de estados de cualquier generación de una cadena de Fibonacci por enlaces. Lo siguiente es ver qué pasa cuando dicha cadena tienen impurezas.

3.4. Cadena de Enlaces con Impureza

Al igual que como lo hicimos en la cadena por sitios, vamos a analizar la impureza puntual y la tipo Fano, ambas colocadas al inicio de la cadena $n - 2$ que forma la generación n .

3.4.1. Impureza Puntual

Recordemos que esta impureza es simplemente un sitio con una autoenergía que no le corresponde. Repetimos los tres pasos que se llevaron a cabo para el caso de la cadena de sitios:

Primero renormalizamos la primera mitad de la cadena, es decir la generación $n - 1$, siguiendo los procedimientos que se aclararon en la sección anterior.

Lo siguiente es renormalizar la segunda mitad de la cadena, la generación $n - 2$, considerando que su primer sitio es de impureza. Esto lo hacemos alterando las condiciones iniciales y cambiando las fórmulas de recurrencia, con impureza cuando aparece un $j - 1$ y sin impureza cuando aparece un $j - 2$.

Por último pegamos las dos cadenas, que juntas forman la generación n , tomando en cuenta que las constantes de la parte $n - 1$ no llevan impureza y las de la parte $n - 2$ sí la llevan. Vemos otra vez que no hubo necesidad de hacer cálculos nuevos para introducir una impureza puntual.

3.4.2. Impureza tipo Fano

La impureza Fano en este caso es una cadena de Fibonacci por enlaces que se adhiere con su primer sitio al sitio de impureza de la cadena original. El procedimiento para renormalizar este sistema y calcular su densidad de estados es análogo al que se hizo para la cadena por sitios. Se renormaliza todo el sistema como un conjunto y se escribe la densidad de estados como una suma de tres partes: la cadena $n - 1$, la $n - 2$ y la impureza. El sistema efectivo, en este caso de cuatro sitios, de la cadena con impureza se muestra en la figura 3.12.

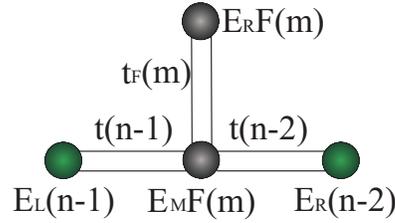


Figura 3.12: Impureza Fano adherida a una cadena de Fibonacci por enlaces.

Aquí hemos hecho las sustituciones $(n - 1) \rightarrow 1$, $(n - 2) \rightarrow 2$ y hemos definido $E_M F(m) = E_M(n) + E_L F(m)$. Las cantidades $E_L F(m)$, $E_R F(m)$ y $t_F(m)$ corresponden a la renormalización de la impureza, que es de generación m . La matriz Hamiltoniana del sistema de la figura 3.12 es la siguiente:

$$H = \begin{pmatrix} E_L(1) & t(1) & 0 & 0 \\ t(1) & E_M F(m) & t_F(m) & t(2) \\ 0 & t_F(m) & E_R F(m) & 0 \\ 0 & t(2) & 0 & E_R(2) \end{pmatrix}. \quad (3.43)$$

El sistema de ecuaciones que se obtiene a partir de la ecuación de Dyson para este Hamiltoniano es

$$\begin{aligned} (E - E_L(1))G_{1i} &= \delta_{1i} + t(1)G_{2i} \\ (E - E_M F(m))G_{2i} &= \delta_{2i} + t(1)G_{1i} + t_F(m)G_{3i} + t(2)G_{4i} \\ (E - E_R F(m))G_{3i} &= \delta_{3i} + t_F(m)G_{2i} \\ (E - E_R(2))G_{4i} &= \delta_{4i} + t(2)G_{2i} \end{aligned} \quad (3.44)$$

El subíndice i toma valores desde 1 hasta 4, de modo que estas ecuaciones contienen todas las partes de la ecuación de Dyson. Al igual que con el problema

de sitios, escribimos la densidad de estados como la suma de la densidad de cada parte del sistema y reescribimos todas las componentes de dicha suma en términos de G_{14} , G_{44} y G_{14} , es decir

$$\begin{aligned}
DOS(E, n) &= A(1)G_{11} + B(1)G_{22} + C(1)G_{12} + D(1) \\
&\quad + A(2)G_{22} + B(2)G_{44} + C(2)G_{24} + D(2) \\
&\quad + AFG_{22} + BFG_{33} + CFG_{23} + DF \\
&\quad - 2G_{22} \\
&= ATG_{14} + BTG_{44} + CTG_{14} + DT.
\end{aligned} \tag{3.45}$$

Nótese que por la construcción del sistema hemos sumado tres veces sobre el sitio $E_M F(m)$ asociado a la función G_{22} , por lo que debemos restar dos veces dicha función de Green. Se encontró que los coeficientes de las funciones de Green tienen los valores:

$$\begin{aligned}
AT &= A(1) + (B(1) + A(2) + AF - 2) \left(\frac{t(1)^2}{(E-alfa)^2} \right) + \frac{BFt_F^2 t^2(1)}{DENO3} \\
&\quad + \frac{CFt_F t^2(2)}{DENO2} \\
BT &= (B(1) + A(2) + AF - 2) \left(\frac{t^2(2)}{(E-alfa)^2} \right) + B(2) + \frac{C(2)t(2)}{E-alfa} \\
&\quad + \frac{BFt_F^2 t^2(2)}{DENO3} + \frac{2CFt_F t(1)t(2)}{DENO2} \\
CT &= (B(1) + A(2) + AF - 2) \left(\frac{2t(1)t(2)}{(E-alfa)^2} \right) + \frac{C(1)t(2)}{E-alfa} + \frac{C(2)t(1)}{E-alfa} \\
&\quad + \frac{2BFt_F^2 t(1)t(2)}{DENO3} + \frac{2CFt_F t(1)t(2)}{DENO2} \\
DT &= (B(1) + A(2) + AF - 2) \left(\frac{1}{E-alfa} \right) + D(1) + D(2) \\
&\quad + \frac{BFt_F^2}{(E-E_{RF})DENO1 + \frac{1}{E-E_{RF}}} + \frac{CFt_F}{DENO1} + DF
\end{aligned} \tag{3.46}$$

En el Apéndice 2 se muestran detalladamente los valores de todas las constantes en estas expresiones. Nuevamente, las fórmulas de recurrencia para las energías de renormalización, los coeficientes A , B , C y D y las funciones de Green G_{ij} son utilizadas para calcular de manera numérica la densidad de estados de cadenas como las que se han mencionado.

Capítulo 4

Resultados

Un típico cuasicristal unidimensional se puede modelar con el arreglo de los átomos, que siguen la secuencia de Fibonacci. Sabemos que su espectro electrónico es un conjunto de Cantor con medida de Lebesgue cero [31], y sus correspondientes estados propios son críticos. Además los sistemas cuasiperiódicos son muy sensibles a defectos locales, por lo que es importante estudiar sistemas de tamaño macroscópico para minimizar los efectos de frontera. En este trabajo hemos desarrollado una extensión del método de renormalización para densidad de estados de dos tipos de redes de Fibonacci, mixta y de enlaces, de lo cual se hace un estudio detallado en este capítulo. Cabe mencionar que con el fin de aislar los efectos de cuasiperiodicidad, en esta tesis consideramos únicamente la banda electrónica s .

Con el fin de hacer un estudio detallado de la densidad de estados, se implementaron programas en Fortran 90 para obtener resultados numéricos de la DOS en sistemas con y sin impurezas, haciendo un análisis detallado de cómo la longitud de la cadena acoplada afecta el espectro de densidad de estados del sistema original.

Los siguientes parámetros fueron los que se consideraron en todo el trabajo:

Para el problema de la cadena mixta se tomaron cadenas de generación $n = 30$ que contienen 1 346 269 átomos y se les acoplaron impurezas tipo Fano de generaciones 3 (3 átomos), 20 (10 946 átomos), 30 (1 346 269 átomos) y 50 (20 365 011 074 átomos). En los casos en que se adhirieron saturadores, éstos fueron cadenas periódicas de generación 100, y la parte imaginaria de la energía fue de $10^{-6}|t|$. Cuando consideramos cadenas periódicas tomamos las autoenergías como $\varepsilon_A = \varepsilon_B = 0$, mientras que las integrales de salto son $t_{AA} = t_{AB} = t$. Por otro lado, en las cadenas de Fibonacci consideramos los valores de autoenergías $\varepsilon_A = -\varepsilon_B = 0,1|t|$ y las integrales de salto $t_{AA} = \tau t = \frac{\sqrt{5}-1}{2}t$ y $t_{AB} = t$. Para el caso de una cadena con una impureza puntual, la autoenergía de ésta se tomó como $\varepsilon_{imp} = 0,5|t|$.

Por otra parte, en el estudio de la cadena de enlaces son consideraron cadenas de generación 30 (1 346 270 átomos) y se le adhirieron impurezas Fano de - generaciones 3 (4 átomos), 22 (28 658 átomos), 30 (1 346 270 átomos) y 50 (20 365 011 075 átomos). Nuevamente los saturadores son cadenas periódicas de generación 100 y la parte imaginaria de la energía se tomó como $10^{-6}|t|$. Las autoenergías e integrales de salto que se tomaron en cuenta para las cadenas periódicas fueron $\varepsilon_0 = 0$ y $t_A = t_B = t$. Por otro lado, para los sistemas cuasiperiódicos se consideraron las autoenergías como $\varepsilon_0 = 0$ y las integrales de salto como $t_A = \tau t = \frac{\sqrt{5}-1}{2}t$ y $t_B = t$. Nuevamente, en el caso de una cadena con una impureza puntual, se tomó la autoenergía de ésta como $\varepsilon_{imp} = 0,5|t|$.

El procedimiento que se llevó a cabo fue tomar cadenas periódicas y de Fibonacci (mixtas y por enlaces) de una longitud fija y acoplarles impurezas Fano periódicas o de Fibonacci de diferentes longitudes (a las cadenas mixtas se les colocaron impurezas mixtas y a los sistemas por enlaces impurezas por enlaces). Se analizó cómo las impurezas alteran el espectro de densidad de estados de las cadenas originales y los nuevos picos que aparecen, tanto dentro como fuera de la banda, al tener impurezas acopladas. A continuación se muestran las gráficas con los resultados obtenidos.

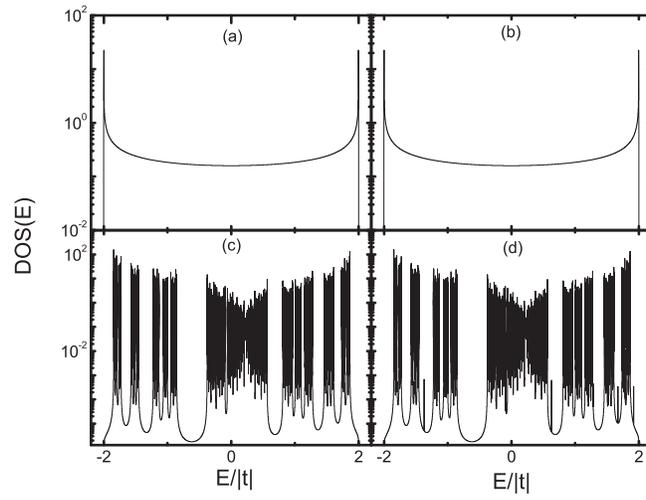


Figura 4.1: Densidad de estados contra energía para cadenas periódicas y de Fibonacci mixtas de generación 30 a) y c) sin impureza; b) y d) con una impureza puntual.

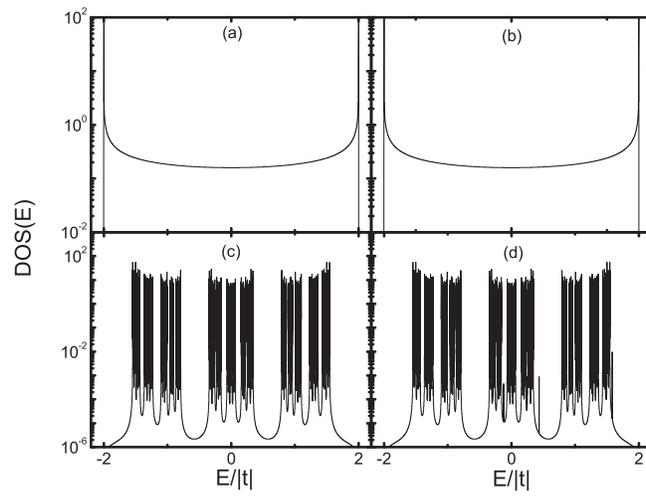


Figura 4.2: Densidad de estados contra energía para cadenas periódicas y de Fibonacci de enlaces de generación 30 a) y c) sin impureza; b) y d) con una impureza puntual.

Estos primeros resultados muestran la densidad de estados contra la energía para cadenas periódicas y de Fibonacci sin impureza y con impurezas puntuales. En la figura 4.1 (a) vemos el espectro de densidad de estados en todo el ancho de banda para una cadena periódica de generación 30; nótese las singularidades que hay en los extremos de las bandas, que son las singularidades de Van Hove mencionadas en el capítulo 2. Si a esta cadena periódica le agregamos una impureza de sitio $\varepsilon_{imp} = 0,5|t|$ el espectro de densidad de estados es el que se ve en la figura 4.1 (b). Nótese la similitud de los espectros con y sin impureza; esto se debe al gran número de átomos que tiene una cadena de generación 30, por lo que modificar la autoenergía de uno de ellos no altera significativamente la forma general de la densidad de estados, salvo por la aparición de picos fuera de la banda. Si ahora tomamos una cadena mixta de Fibonacci sin impurezas, el espectro de DOS es el que se muestra en la figura 4.1 (c). Vemos cómo la cuasiperiodicidad de la cadena hace que el espectro presente diferentes gaps. Si ahora introducimos una impureza puntual $\varepsilon_{imp} = 0,5|t|$, observamos la aparición de estados dentro de los gaps y fuera de la banda tal y como se aprecia en la figura 4.1 (d).

Por otra parte, el espectro de densidad de estados en todo el ancho de banda para cadenas periódicas y de Fibonacci por enlaces se muestra en la figura 4.2. Vemos en la figura 4.2 (a), que corresponde a una cadena periódica de generación 30, el espectro uniforme y con singularidades en las orillas igual al de la figura 4.1 (a). Al agregar una impureza de sitio $\varepsilon_{imp} = 0,5|t|$ obtenemos la gráfica de DOS de la figura 4.2 (b) y notamos nuevamente que esta impureza puntual no modifica la forma general del espectro de DOS. Por otro lado, la figura 4.2 (c) corresponde a una cadena de Fibonacci de enlaces sin impurezas; en ella vemos nuevamente la aparición de estados en las zonas prohibidas y notamos que el espectro es simétrico alrededor del cero de energía. Finalmente, tenemos en la figura 4.2 (d) la densidad de estados contra energía para una cadena de Fibonacci por enlaces con una impureza puntual $\varepsilon_{imp} = 0,5|t|$; nótese como esta impureza produce un estado dentro de uno de los gaps.

Vemos entonces que una impureza puntual no modifica de manera importante la forma general de la densidad de estados. Cabe mencionar que Economou [11] encontró una solución analítica para la densidad de estados de una cadena periódica infinita con una impureza sustitucional. Dicha solución se estudia en el Apéndice 1. Veamos ahora lo que sucede si a sistemas como estos les agregamos impurezas tipo Fano.

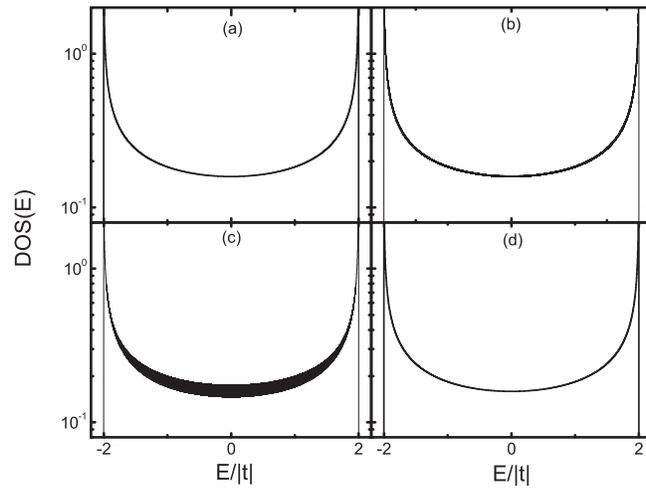


Figura 4.3: Densidad de estados vs. energía para una cadena periódica mixta de generación 30 con impurezas periódicas de generaciones a)3, b)20, c)30 y d)50.

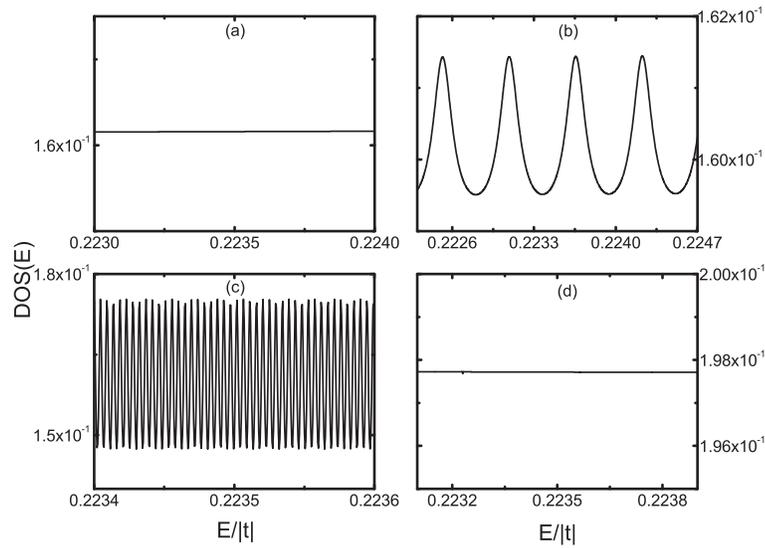


Figura 4.4: Amplificación de la densidad de estados de una cadena periódica mixta de generación 30 con impurezas periódicas de generaciones a)3, b)20, c)30 y d)50 alrededor de un estado transparente.

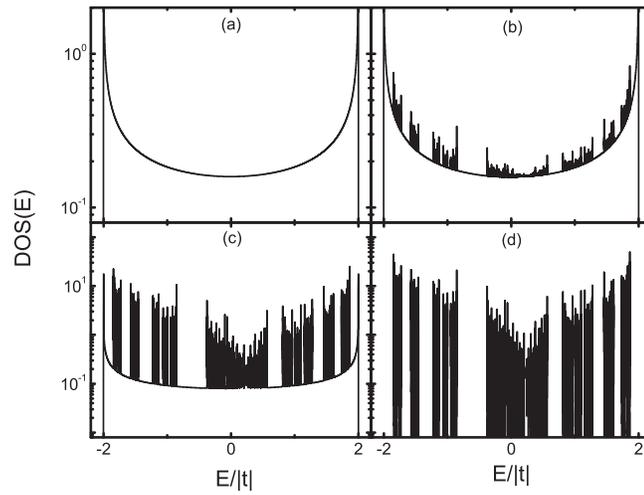


Figura 4.5: Densidad de estados vs. energía para una cadena periódica mixta de generación 30 con impurezas cuasiperiódicas de generaciones a) 3, b) 20, c) 30 y d) 50.

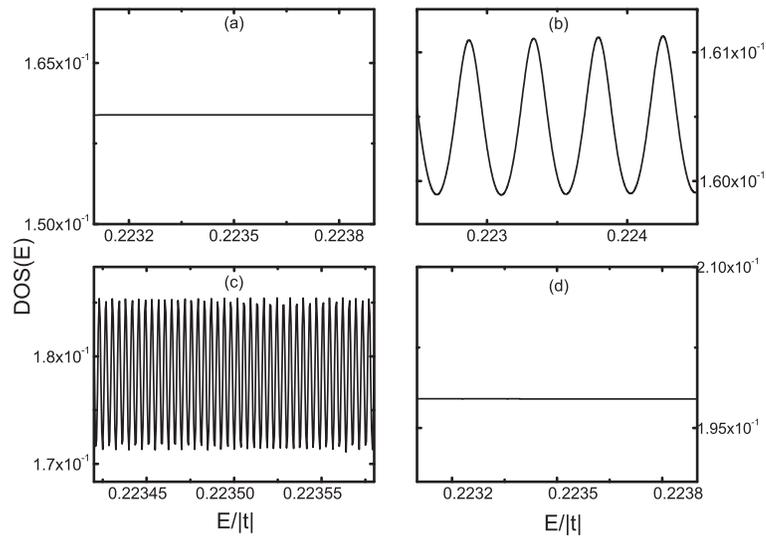


Figura 4.6: Amplificación de la densidad de estados de una cadena periódica mixta de generación 30 con impurezas cuasiperiódicas de generaciones a) 3, b) 20, c) 30 y d) 50 alrededor de un estado transparente.

Estos resultados corresponden a cadenas periódicas con impurezas Fano de generaciones 3, 20, 30 y 50. Las dos primeras figuras corresponden a sistemas con impurezas periódicas y las segundas dos a sistemas con impurezas de Fibonacci mixtas.

La figura 4.3 muestra la densidad de estados contra la energía para una cadena periódica de generación 30 (1 346 269 sitios) con impurezas Fano periódicas de generación a) 3 (3 sitios), b) 20 (10 946 sitios), c) 30 (1 346 269 sitios) y d) 50 (20 365 011 074 sitios). Nótese que los espectros son muy parecidos debido a que la parte imaginaria de la energía es de $10^{-6}|t|$ y los picos de la densidad de estados se traslapan, provocando que el espectro parezca ser continuo y en algunos casos, como en la figura 4.3 (b), la línea se vea más gruesa. Sin embargo existen grandes diferencias como se puede apreciar en la figura 4.4 donde se presenta una amplificación de la densidad de estados contra energía de los mismos sistemas en un cierto intervalo de energías. Observamos que conforme crece la generación de la impureza Fano el espectro tiene más oscilaciones tal como puede verse en la figura 4.4 (b) y (c). Esto se debe a que el sistema debe tener tantos estados como sitios, de manera que al crecer la impureza crece también el número de sitios y por lo tanto de estados (cada pico de la oscilación corresponde a un estado). Finalmente, cuando el número de estados de la impureza es mucho mayor al de la cadena original (figura 4.4 (d)), el espectro es producido casi en su totalidad por la impureza que, al ser periódica, muestra un espectro muy similar al de la cadena original con una impureza pequeña. El espectro de densidad de estados de la figura 4.4 (d) parece ser plano, sin embargo, sabemos que debe ser un espectro que oscila con tantos picos como sitios en el sistema. Este sistema, donde la cadena original es de generación 50, contiene del orden de 10^8 sitios, de manera que necesitaríamos hacer un barrido con alrededor de 10^8 datos con la parte imaginaria de la energía de 10^{-8} . Sin embargo, por limitaciones de cómputo no podemos hacer un barrido tan fino, por lo que no es posible apreciar las oscilaciones del espectro.

Ahora, si la cadena acoplada no es periódica sino de Fibonacci mixta, los espectros de densidad de estados contra energía son los que se muestran en las figuras 4.5 y 4.6 (con impurezas de las mismas generaciones 3, 20, 30 y 50). Obsérvese que en la figura 4.5 (a), donde la cadena acoplada es de generación 3, el espectro de DOS no se ve casi alterado y es similar al espectro de la figura 4.3 (a). Nótese además que cuando la cadena de impureza es de generación 20, como puede verse en la figura 4.5 (b), el espectro presenta pseudo-gaps debido a la combinación de un espectro de DOS periódico y uno cuasiperiódico; esto es más notorio si la impureza es de la misma longitud que la cadena (figura 4.5 (c)) pues ambas contribuyen de igual manera, y si la impureza es mucho más grande que la cadena original, tal como se ve en la figura 4.5 (d), el espectro corresponde prácticamente al de una cadena de Fibonacci (es decir, al de la impureza). En estas cuatro gráficas vemos que existe una energía (alrededor aproximadamente de $0,2235|t|$) donde el espectro de densidad de estados parece ser constante. Para analizar este punto hemos hecho una amplificación alrededor de esta energía y

lo que observamos es un espectro que oscila de manera periódica sin importar la longitud de la impureza (sólo cambia la frecuencia de oscilación, como se muestra en la figura 4.6). Este sitio corresponde a uno de conducción casi balística y se ha visto que aparece siempre que la generación de la cadena original es un múltiplo de 6 [37]. Nuevamente observamos que el espectro de la figura 4.6 (d) parece ser plano a pesar de que debería presentar oscilaciones. De nuevo esto se debe a que la frecuencia de la oscilación es sumamente pequeña y necesitaríamos un barrido de energías mucho más fino del que es posible hacer. Veamos ahora lo que sucede si las cadenas originales son de Fibonacci en vez de periódicas.

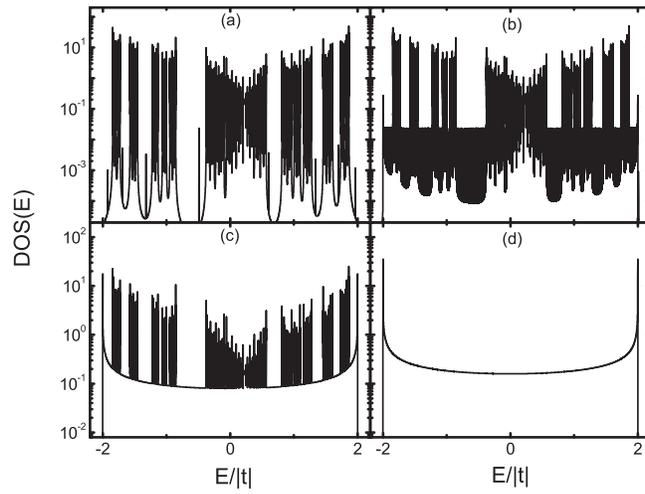


Figura 4.7: Densidad de estados vs. energía para una cadena de Fibonacci de generación 30 con impurezas periódicas de generaciones a)3, b)20, c)30 y d)50.

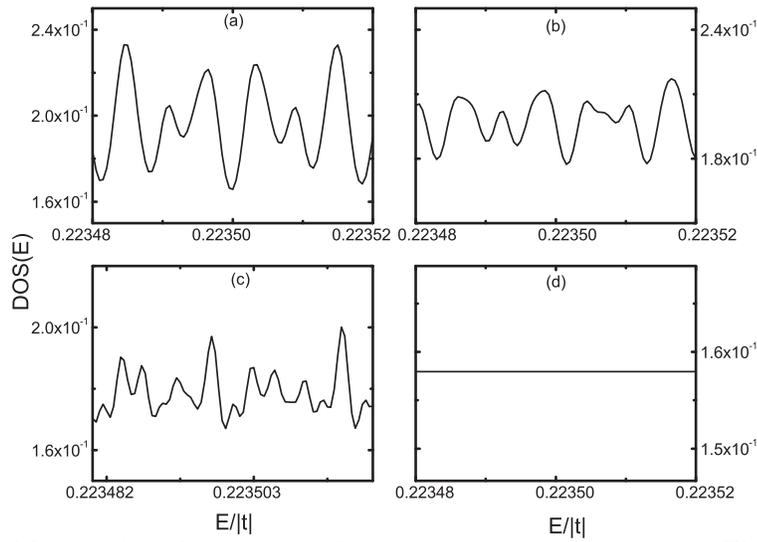


Figura 4.8: Amplificación de la densidad de estados de una cadena de Fibonacci de generación 30 con impurezas periódicas de generaciones a)3, b)20, c)30 y d)50 alrededor de un estado de transmisión uno.

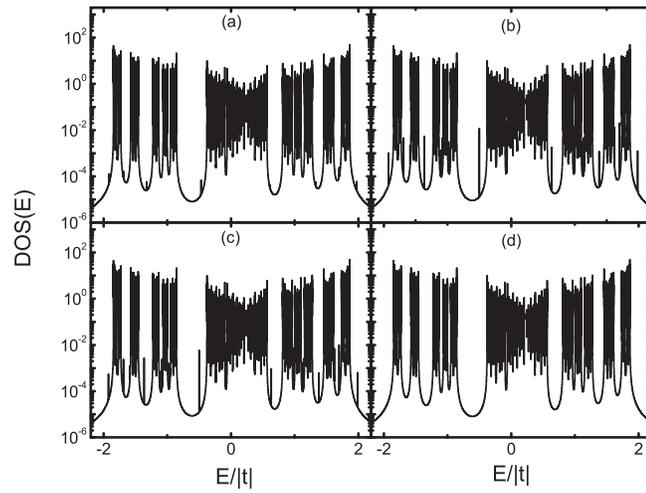


Figura 4.9: Densidad de estados vs. energía para una cadena de Fibonacci mixta de generación 30 con impurezas cuasiperiódicas de generaciones a)3, b)20, c)30 y d)50.

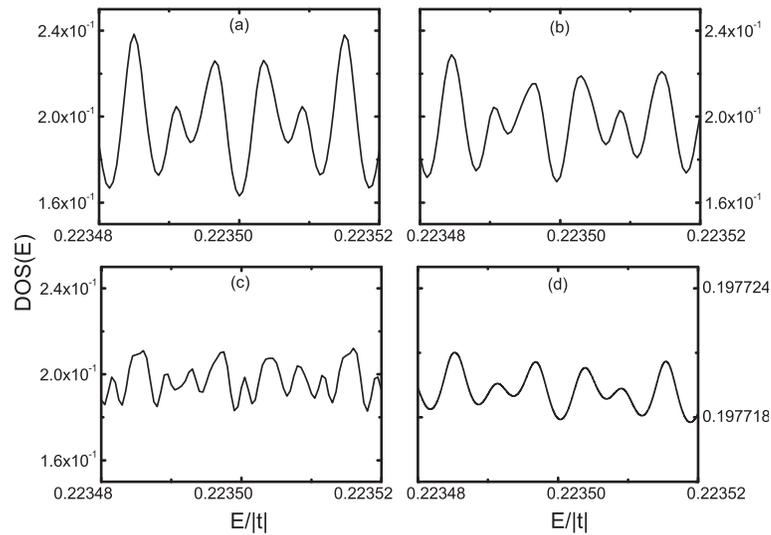


Figura 4.10: Amplificación de la densidad de estados de una cadena de Fibonacci mixta de generación 30 con impurezas cuasiperiódicas de generaciones a)3, b)20, c)30 y d)50 alrededor de un estado transparente.

Los resultados de las figuras 4.7, 4.8, 4.9 y 4.10 corresponden a cadenas de Fibonacci mixtas con impurezas Fano periódicas y de Fibonacci. Las primeras dos muestran la densidad de estados versus la energía en todo el ancho de banda y alrededor del sitio de conducción casi balística que hemos mencionado para una cadena mixta de Fibonacci de generación 30 con impurezas periódicas de generaciones a) 3, b) 20, c) 30 y d) 50. Observamos que cuando la impureza tienen muy pocos sitios en comparación con la cadena original, como vemos en la figura 4.7 (a), aparentemente sólo se percibe la densidad de estados de una cadena de Fibonacci (la cadena original), sin embargo vemos que hay sitios fuera de las singularidades de Van Hove y dentro de los gaps producto de la superposición de espectros. Si la impureza es más grande, en el caso de la figura 4.7 (b) de generación 20, los gaps empiezan a llenarse por la contribución de estados de la cadena periódica, lo cual es más claro si la impureza Fano es del mismo tamaño que la cadena original, es decir de generación 30, pues como vemos en la figura 4.7 (c) los gaps están completamente saturados. Ya hemos mencionado que mientras más grande es la cadena acoplada mayor es el número de sitios totales del sistema y mayor es el número de estados; los nuevos estados, como vemos, aparecen dentro de los gaps. Finalmente, cuando la impureza Fano es de generación 50 prácticamente vemos sólo su espectro de densidad de estados (el de una cadena periódica), tal como se muestra en la figura 4.7 (d). A diferencia del resultado obtenido para cadenas periódicas, el sitio de transmitancia perfecta parece ser menos robusto cuando la cadena principal es cuasiperiódica, pues vemos en la figura 4.8 (b) que la simetría y periodicidad de la oscilación alrededor de dicha energía comienzan a desaparecer cuando la impureza es de generación 20, hasta ser casi inexistentes cuando la impureza es de generación 30 (figura 4.8 (c)). Nótese de nuevo que si la cadena adherida es de generación 50, tal como puede verse en la figura 4.8 (d), obtenemos un espectro plano que no muestra las oscilaciones que son de esperarse debido a la gran cantidad de datos necesarios para hacerlas visibles.

Si las impurezas Fano acopladas a éste sistema cuasiperiódico no son cadenas periódicas sino de Fibonacci mixtas, los espectros de DOS son los que se muestran en las figuras 4.9 y 4.10. Observamos en las figuras 4.9 (a), (b) y (c) que a pesar de que la cadena de impureza provoca la aparición de estados dentro de los gaps y más allá de las singularidades de Van Hove, el espectro de DOS conserva siempre su forma general y los gaps nunca se saturan, sin importar la longitud de la impureza. Esto se debe a que ambas cadenas, la original y la de impureza, son del mismo tipo (de Fibonacci mixtas), por lo que acoplarlas implica la superposición de dos espectros cuyas formas son muy similares: los estados prohibidos para las dos son los mismos, así que los estados prohibidos de la superposición se conservan. Sin embargo, cuando la cadena de impureza es de generación 50, como se ve en la figura 4.9 (d), los estados dentro de los gaps desaparecen y el espectro tiene la forma exclusivamente del de la cadena acoplada. Véase además que el estado transparente se conserva aún para la impureza de generación 20 como puede apreciarse en la figura 4.10 (b), pero este estado de alta conductividad se ha perdido cuando la impureza es de generación

30 como se muestra en la figura 4.10 (c).

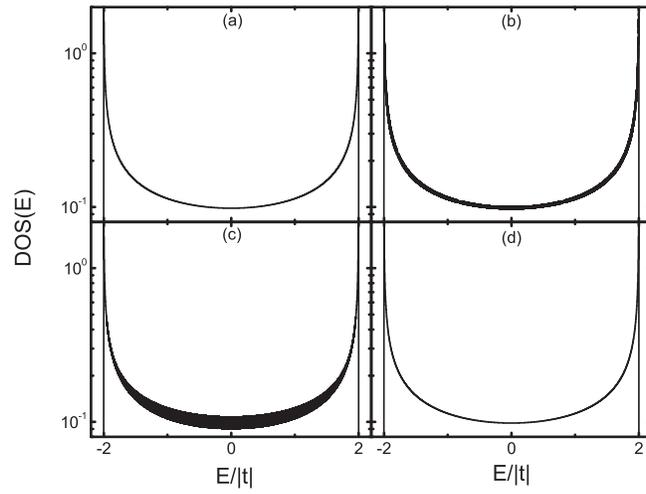


Figura 4.11: Densidad de estados vs. energía para una cadena periódica por enlaces de generación 30 con impurezas periódicas de generaciones a)3, b)22, c)30 y d)50.

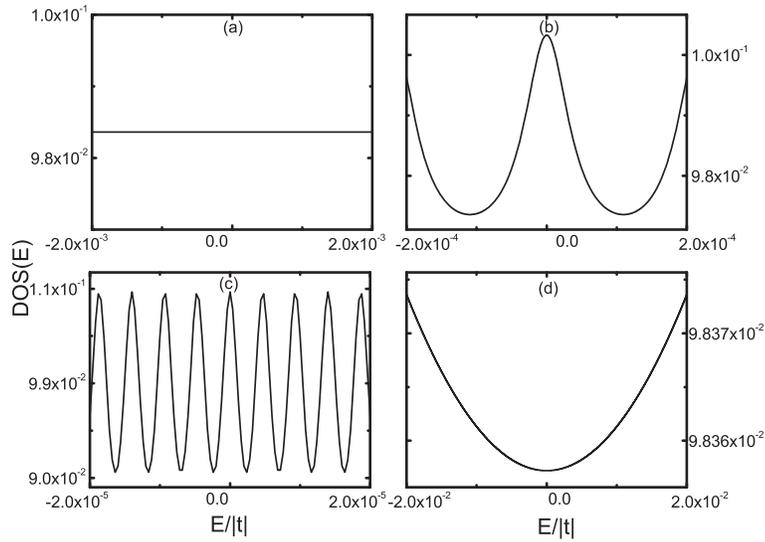


Figura 4.12: Amplificación de la densidad de estados de una cadena periódica por enlaces de generación 30 con impurezas periódicas de generaciones a)3, b)22, c)30 y d)50 alrededor del cero.

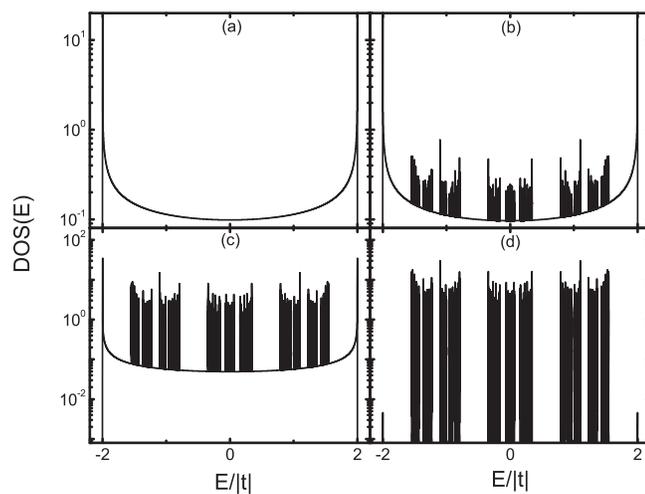


Figura 4.13: Densidad de estados vs. energía para una cadena periódica por enlaces de generación 30 con impurezas cuasiperiódicas de generaciones a) 3, b) 22, c) 30 y d) 50.

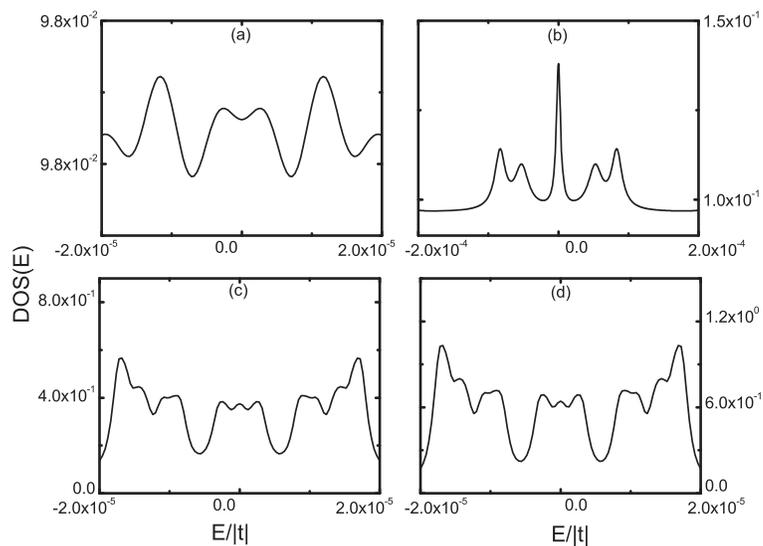


Figura 4.14: Amplificación de la densidad de estados de una cadena periódica por enlaces de generación 30 con impurezas cuasiperiódicas de generaciones a) 3, b) 22, c) 30 y d) 50 alrededor del cero.

Otro de los sistemas que se estudió fue la cadena de Fibonacci de enlaces. Los resultados para la densidad de estados cuando los sistemas no son mixtos sino de enlaces lo tenemos en las figuras 4.11, 4.12, 4.13 y 4.14. Las primeras dos figuras muestran la densidad de estados contra la energía para cadenas de generación 30 (1 346 279 sitios) con impurezas periódicas de generaciones a) 3 (4 sitios), b) 22 (28 658 sitios), c) 30 (1 346 270 sitios y d) 50 (20 365 011 075 sitios). Las ampliaciones se hacen ahora alrededor del cero, a diferencia de los sistemas mixtos, pues allí se ha reportado que para este tipo de cadenas cada 6 generaciones se tiene un estado transparente [38]. Observamos que al igual que con los sistemas mixtos, el efecto de la impureza Fano es notable en las cadenas por enlaces, pues puede verse en las figuras 4.11 (b) y (c) que la línea del espectro se hace más gruesa conforme la impureza es más grande (particularmente cuando la cadena adherida es de generación 30 como en la figura 4.11 (c)), hasta regresar a verse como la de una cadena periódica sin impureza cuando la cadena acoplada es muy larga (de generación 50 en la figura 4.11 (d)). Aún así, al igual que en los sistemas mixtos, la forma general de los espectros es similar. La razón de esto es que la parte imaginaria de la energía en los cálculos es de $10^{-6}|t|$; el tamaño de esta parte imaginaria altera el ancho de los picos: si ésta es pequeña los picos serán delgados y, al traslaparse los espectros de dos cadenas, parecerá como si la superposición fuera un espectro continuo (en este caso la superposición de dos espectros de cadenas periódicas). Sin embargo, las diferencias más notables entre estos espectros de DOS las observamos al realizar ampliaciones alrededor del cero (figura 4.12). Nótese en las figuras 4.12 (b) y (c) cómo el espectro oscila cada vez más debido a la presencia de un mayor número de estados (hay más picos), y cuando la impureza es mucho más grande que la cadena original la densidad de estados del sistema es sólo la de la impureza, como se puede ver en la figura 4.12 (d) (el mismo resultado que obtuvimos para cadenas mixtas).

Ahora, cuando la impureza Fano no es una cadena periódica sino de Fibonacci, las gráficas de densidad de estados contra energía son las que se presentan en las figuras 4.13 y 4.14. Nuevamente tenemos un resultado similar al caso de sistemas mixtos (comparar con la figura 4.5): si la impureza es pequeña, en particular de generación 3 en la figura 4.13 (a), aparentemente ésta no contribuye a la densidad de estados (los estados debidos a la impureza son muy pocos y en la gráfica no es posible apreciarlos); a partir de una cierta generación, hemos escogido en este caso generación 22, apreciamos en la figura 4.13 (b) que la contribución de la cadena adherida a la densidad de estados es palpable (ya no son tan pocos los estados producto de la impureza como para no ser apreciables) y se producen pseudo-gaps; si las dos cadenas, la original y la de impureza, son de igual tamaño, es decir ambas son de generación 30, tenemos una superposición equitativa del espectro de ambas (figura 4.13 (c)) donde nuevamente hay pseudo-gaps, y cuando la impureza es mucho más grande, de generación 50 en este caso, podemos ver en la figura 4.13 (d) que son tantos los estados debidos a dicha impureza que la contribución de la cadena original a la densidad de estados del sistema es despreciable. Es interesante además que el estado de alta conductividad se conserva para las impurezas de generaciones 3, 30 y 50

(figuras 4.14 (a), (b) y (d) respectivamente) pero se destruye para la impureza de generación 22, como se ilustra en la figura 4.14 (c). Esto lo notamos en la forma del espectro alrededor del cero, que difiere mucho de las demás cuando la impureza es de generación 22 (figura 4.14). En todos los casos constatamos la simetría de la densidad de estados alrededor del cero que presentan las cadenas por enlaces. Ahora veremos lo que pasa cuando las cadenas originales no son periódicas sino de Fibonacci.

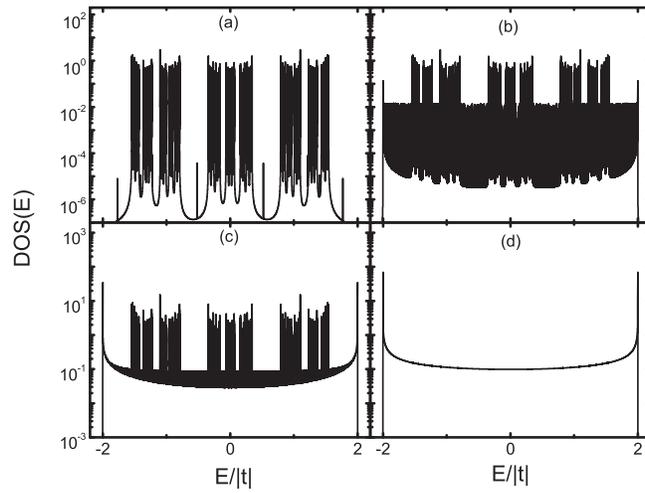


Figura 4.15: Densidad de estados vs. energía para una cadena de Fibonacci por enlaces de generación 30 con impurezas periódicas de generaciones a)3, b)22, c)30 y d)50.

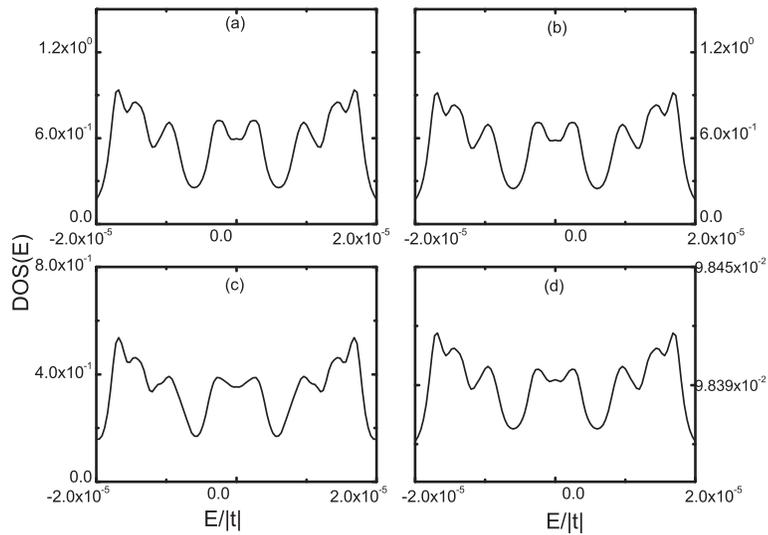


Figura 4.16: Amplificación de la densidad de estados de una cadena de Fibonacci por enlaces de generación 30 con impurezas periódicas de generaciones a)3, b)22, c)30 y d)50 alrededor del cero.

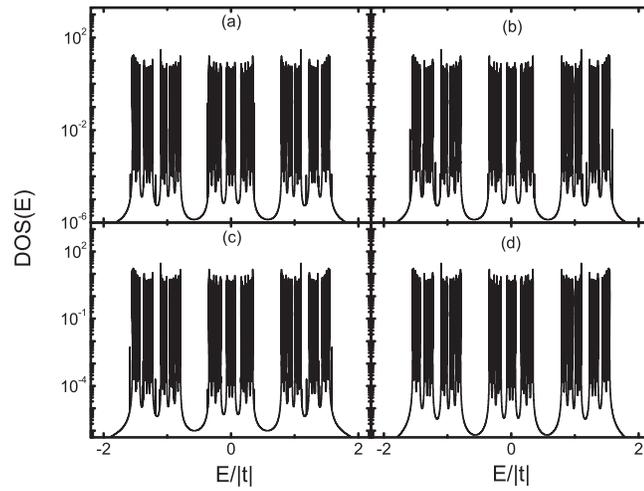


Figura 4.17: Densidad de estados vs. energía para una cadena de Fibonacci por enlaces de generación 30 con impurezas cuasiperiódicas de generaciones a)3, b)22, c)30 y d)50.

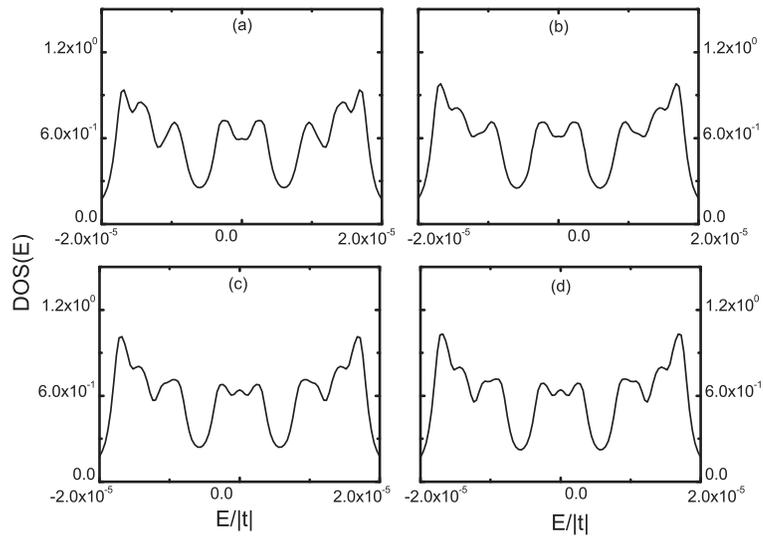


Figura 4.18: Amplificación de la densidad de estados de una cadena de Fibonacci por enlaces de generación 30 con impurezas cuasiperiódicas de generaciones a)3, b)22, c)30 y d)50 alrededor del cero.

Al tener una cadena por enlaces de Fibonacci con impurezas periódicas obtenemos las gráficas de densidad de estados versus energía que se presentan en las figuras 4.15 y 4.16. Lo primero que observamos es lo siguiente: si la impureza es pequeña respecto a la cadena original, de generación 3 para la figura 4.15 (a), se conserva la forma general de la densidad de estados de Fibonacci excepto por la aparición de estados dentro de los gaps más allá de las singularidades de Van Hove (esta figura es particularmente ilustrativa, pues vemos claramente los 4 estados producto de los 4 sitios de esta cadena de impureza, recordando que el sistema presenta tantos estados como sitios); si la cadena acoplada es de generación 22 su contribución a la densidad de estados del sistema ya es muy notoria como se aprecia en la figura 4.15 (b), pues los gaps han casi dejado de existir (se han llenado con los estados de la cadena de Fano periódica); más aún, si la impureza es del mismo tamaño que la cadena, es decir las dos son de generación 30, deja de haber estados prohibidos pues tenemos una superposición en la que los dos espectros contribuyen por igual como es posible ver en la figura 4.15 (c) (del número total de estados, la mitad corresponde a la cadena original y la otra mitad proviene de la impureza); finalmente cuando la impureza es mucho más grande que la cadena original (generaciones 50 y 30 respectivamente) la densidad de estados del sistema es prácticamente sólo la de la impureza tal como se ve en la figura 4.15 (d) (hay muchos más sitios, y por lo tanto estados, de la impureza que de la cadena original). Obsérvese además que en este sistema el estado de alta conductividad es particularmente robusto como puede apreciarse en la figura 4.16, pues las oscilaciones del espectro alrededor del cero casi no cambian de forma sin importar la longitud de la impureza.

Por otro lado, si las cadenas acopladas al sistema de Fibonacci no son periódicas sino cuasiperiódicas, obtenemos los espectros de DOS de las figuras 4.17 y 4.18. Nótese en la figura 4.17 cómo la forma de la densidad de estados de sistema casi no depende de la longitud de la impureza (observamos sin embargo la aparición de estados dentro de los gaps cuando la impureza es de generación 22 y 30 en las figuras 4.17 (c) y (d) respectivamente y la existencia de estados más allá de las singularidades de Van Hove cuando la impureza es de generación 30 en la figura 4.17 (c)). Al igual que como mencionamos en el caso de las cadenas mixtas, los estados permitidos y prohibidos de las cadenas original y de impureza se sitúan en los mismos lugares, de modo que al superponer los dos espectros llegamos a uno de la misma forma (con los mismos gaps, pues los estados prohibidos son los mismos para ambas cadenas) salvo por la aparición de algunos estados dentro de los gaps y otros tantos fuera de la banda. A fin de analizar el estado de alta conductividad realizamos de nuevo ampliaciones cerca del cero, y observamos que la periodicidad y simetría del espectro cerca de esta energía (véase la figura 4.18) se conservan a pesar de la impureza, lo cual indica que el estado transparente perdura sin importar el tamaño de la impureza. En todos los casos constatamos nuevamente la simetría alrededor del cero que deben presentar los espectros de densidad de estados para sistemas por enlaces.

Mencionamos varias veces que cuando la impureza es de generación 3 la den-

sidad de estados del sistema aparentemente no se alteraba, como se puede ver por ejemplo en las figuras 4.3 (a) y 4.5 (a) que corresponden a mixtas, o en las figuras 4.11 (a) y 4.13 (a) de cadenas por enlaces. En realidad aparecen estados muy pequeños fuera de la banda que no se perciben debido a la escala de estas gráficas, mas son perfectamente visibles al ampliar la zona cercana a las singularidades de Van Hove como puede verse en las figuras 4.19 y 4.20.

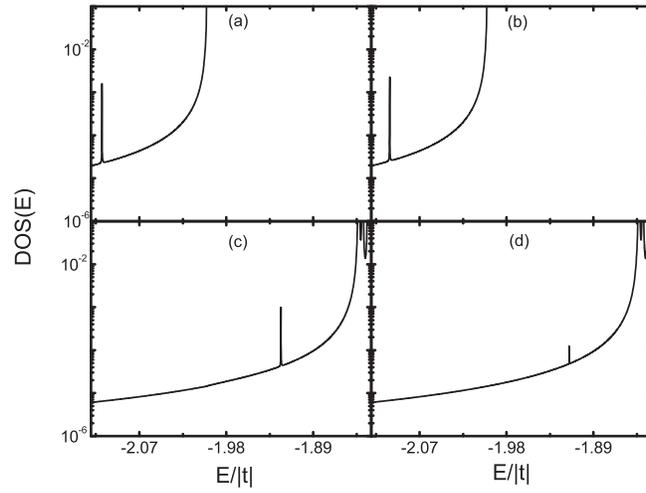


Figura 4.19: Amplificación de la densidad de estados para mostrar el estado fuera de la banda para cadenas mixtas de generación 30 con impurezas Fano de generación 3.

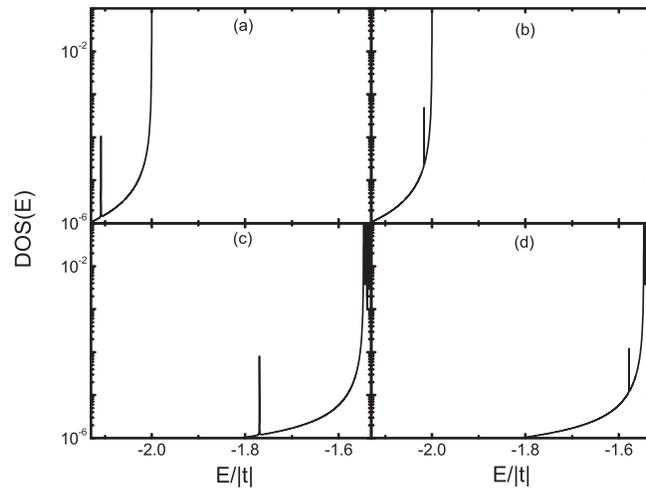


Figura 4.20: Amplificación de la densidad de estados para mostrar el estado fuera de la banda para cadenas por enlaces de generación 30 con impurezas Fano de generación 3.

La figura 4.19 muestra ampliaciones cerca de uno de los bordes de la banda para la densidad de estados contra energía para cadenas mixtas de generación 30 con una impureza Fano de generación 3 en el siguiente orden: a) cadena periódica con impureza periódica; b) cadena periódica con impureza de Fibonacci; c) cadena de Fibonacci con impureza periódica; d) cadena de Fibonacci con impureza de Fibonacci. Dichas ampliaciones se realizaron con el objeto de mostrar el pequeño estado que produce la cadena acoplada fuera de la banda y que es imposible ver con las escalas con que se hicieron las gráficas presentadas anteriormente (las que muestran todo el ancho de banda). Cabe mencionar que sólo hemos ampliado una parte de la banda, más del lado positivo de la energía, es decir cerca del borde derecho, existen impurezas similares.

Del mismo modo, la figura 4.20 muestra ampliaciones en un cierto intervalo de energías para hacer visibles los estados fuera de la banda de una cadena por enlaces de generación 30 con impurezas de generación 3 en el mismo orden: a) cadena periódica con impureza periódica; b) cadena periódica con impureza de Fibonacci; c) cadena de Fibonacci con impureza periódica; d) cadena de Fibonacci con impureza de Fibonacci. Debido a la simetría de la densidad de estados de las cadenas por enlaces alrededor del cero, las mismas impurezas existen del otro lado de la banda.

Resulta interesante cómo en algunos casos los gaps van llenándose por los estados que produce la impureza y cómo en otras ocasiones estas brechas prohibidas de energía se conservan. A continuación presentamos ampliaciones de un sólo gap para cadenas de Fibonacci con distintas generaciones de impureza para analizar con más detalle como los gaps van o no llenándose.

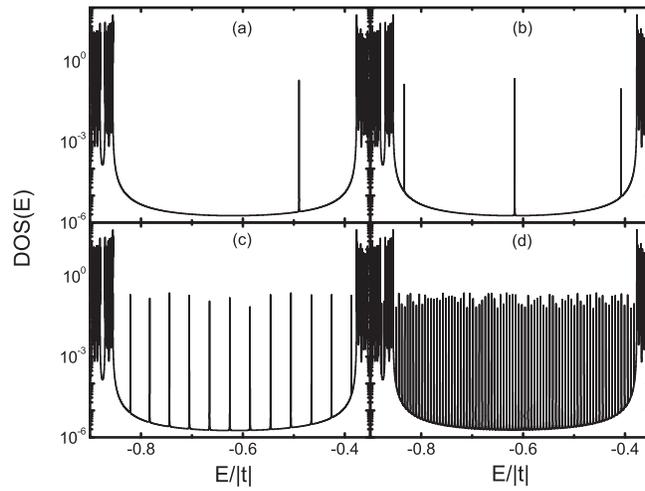


Figura 4.21: Acercamiento a un gap dentro del espectro de una cadena por sitios cuasiperiódica de generación 30 con impurezas periódicas de generación a)3, b)7, c)11 y d)15.

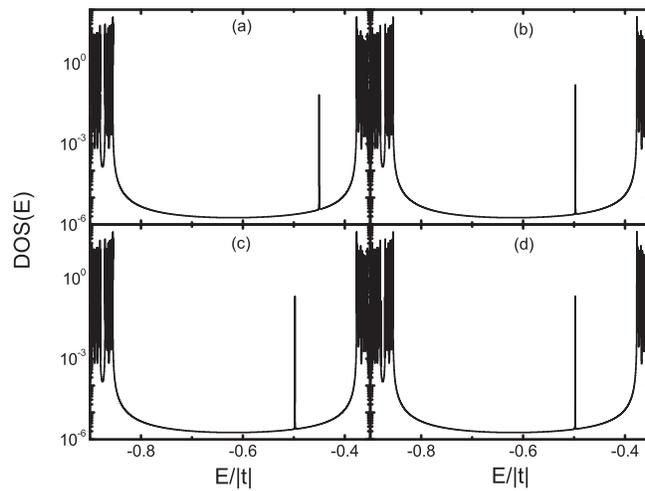


Figura 4.22: Acercamiento a un gap dentro del espectro de una cadena por sitios cuasiperiódica de generación 30 con impurezas de Fibonacci de generación a)3, b)7, c)11 y d)15.

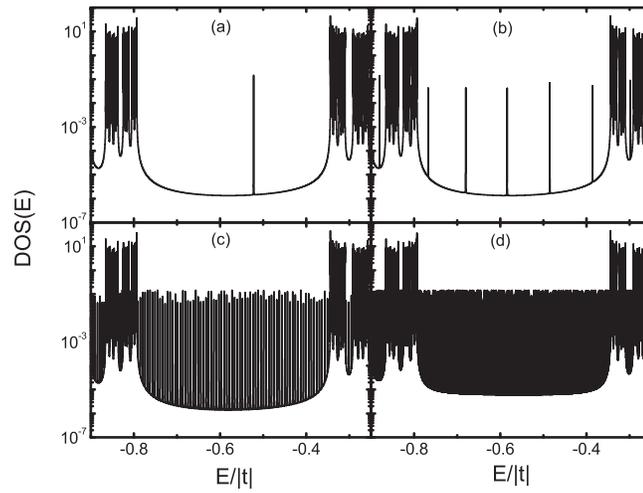


Figura 4.23: Acercamiento a un gap dentro del espectro de una cadena por enlaces cuasiperiódica de generación 30 con impurezas periódicas de generación a)3, b)9, c)15 y d)20.

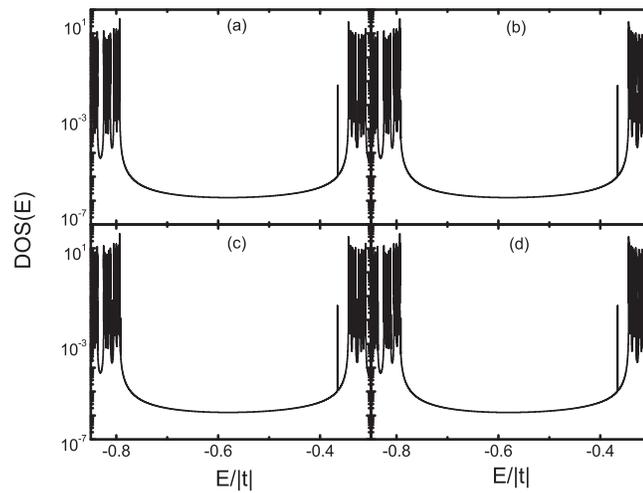


Figura 4.24: Acercamiento a un gap dentro del espectro de una cadena por enlaces cuasiperiódica de generación 30 con impurezas de Fibonacci de generación a)3, b)9, c)15 y d)20.

Los resultados mostrados en las figuras 4.21 y 4.22 son ampliaciones de la densidad de estados contra energía en un sólo gap para cadenas de Fibonacci mixtas de generación 30 con impurezas de generaciones a) 3, b) 7, c) 11 y d) 15. La primer imagen corresponde a cadenas con impurezas periódicas y la segunda sistemas donde las impurezas son cuasiperiódicas. En estas figuras se ilustra la forma en que la impureza periódica, conforme crece, aporta cada vez más estados al espectro de DOS, provocando así que los gaps vayan llenándose, pues hay cada vez menos estados prohibidos.

Por otro lado, en las figuras 4.23 y 4.24 tenemos las mismas ampliaciones de la densidad de estados contra la energía en un sólo gap pero ahora para cadenas cuasiperiódicas por enlaces (nuevamente de generación 30) con impurezas de generación a) 3, b) 9, c) 15 y d) 20. La primer imagen atañe a cadenas con impurezas periódicas, mientras que la segunda a sistemas donde la cadena acoplada es de Fibonacci. Nótese que al ser la impureza Fano una cadena de Fibonacci, ésta tiene los mismos sitios prohibidos que la cadena original, de manera que al superponerse los dos espectros los gaps se conservan.

Todos los resultados hasta ahora mostrados corresponden a sistemas donde las cadenas originales tienen saturadores. Vamos a presentar ahora algunos resultados para cadenas por enlaces sin saturadores a fin de ver las diferencias en los espectros de densidad de estados. Antes de mostrar las gráficas vamos a notar lo siguiente: recordando que el sistema debe tener el mismo número de estados que de sitios, quitar los saturadores, que los introdujimos como cadenas periódicas de generación 100, implica sustraer un enorme número de sitios y por lo tanto de estados del sistema. Aún así, una cadena de generación 30 tiene del orden de 10^6 átomos, así que el espectro de densidad de estados seguiría pareciendo un continuo a lo largo del ancho de banda pues presenta muchos estados. Por este motivo y con el objeto de ver con mayor claridad las diferencias hemos reducido el tamaño de las cadenas, son ahora de generación 18. A continuación presentamos los resultados.

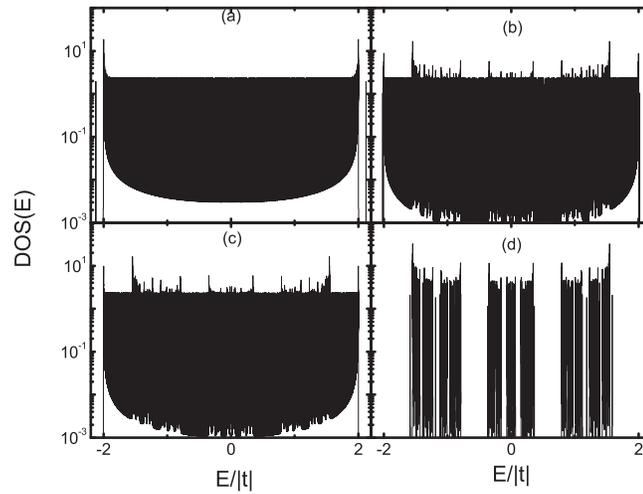


Figura 4.25: Densidad de estados contra energía para diferentes cadenas por enlaces de generación 18 sin saturadores con impurezas tipo Fano de generación 18 adheridas.

Los resultados de la figura 4.25 corresponden a la densidad de estados contra la energía para cadenas por enlaces de generación 18 sin saturadores con impurezas tipo Fano también de generación 18 en el orden siguiente: a) cadena periódica con impureza periódica, b) cadena periódica con impureza de Fibonacci, c) cadena de Fibonacci con impureza periódica y d) cadena de Fibonacci con impureza de Fibonacci. En todos los casos hemos tomado la parte imaginaria de la energía como $10^{-5}|t|$, en contraste con el valor $10^{-6}|t|$ que tomábamos en los sistemas con saturadores. Esto lo hicimos porque al haber menos estados hay también menos picos en las oscilaciones del espectro de DOS, así que es necesario hacerlos menos delgados para que se puedan ver con mayor claridad. Como podemos ver en la figura 4.25 (a), dos cadenas por enlaces acopladas sin saturadores producen un espectro casi constante de densidad de estados; por otra parte, notamos una gran similitud en los espectros de las figuras 4.25 (b) y (c); la causa de esto es que estamos acoplando en ambos casos una cadena periódica con una cuasiperiódica del mismo tamaño, y al no haber saturadores adheridos los dos sistemas son equivalentes; por último vemos en la figura 4.25 (d) que el espectro de dos cadenas de Fibonacci de igual magnitud acopladas es igual a un espectro de Fibonacci, simétrico y con las energías prohibidas respectivas, pues al adherir dos cadenas iguales se sobreponen dos espectros iguales, así que los gaps se conservan.

Para concluir este capítulo vamos a presentar gráficas que ilustran cómo los gaps se van modificando conforme la cadena original aumenta si el sistema acoplado

está fijo. Para este fin tomamos cadenas periódicas y de Fibonacci mixtas, de generaciones variables entre 3 y 30 con una impureza Fano de generación fija (en este caso 18) y buscamos, para cada generación del sistema base, en que energías se presentan estados de conducción. Para hacerlo calculamos la densidad de estados en cada energía utilizando los programas que se implementaron y se utiliza el siguiente criterio: si la densidad de estados es mayor a 10^{-6} se considera que hay un estado de conducción y le pedimos al programa que grafique un punto; si por el contrario, la densidad de estados es menor a 10^{-6} se considera que no hay estado de conducción y le pedimos al programa que no grafique nada. Se utiliza este valor particular porque es justamente la parte imaginaria de la energía, de manera que en los programas un valor de la densidad de estados de 10^{-6} es equivalente a un cero. A continuación se muestran los resultados.

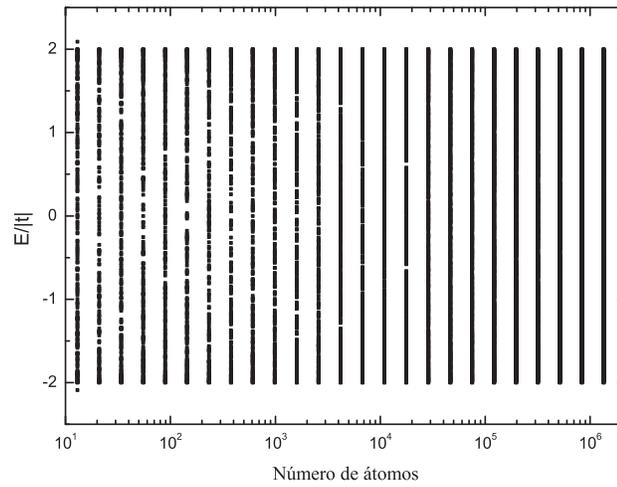


Figura 4.26: Energías donde existen estados de conducción vs. tamaño de la cadena base para una cadena periódica con una impureza Fano periódica de generación 18.

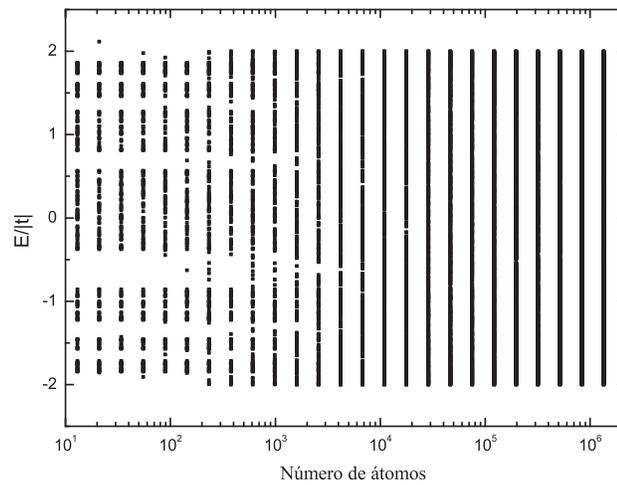


Figura 4.27: Energías donde existen estados de conducción vs. tamaño de la cadena base para una cadena periódica con una impureza Fano de Fibonacci mixta de generación 18.

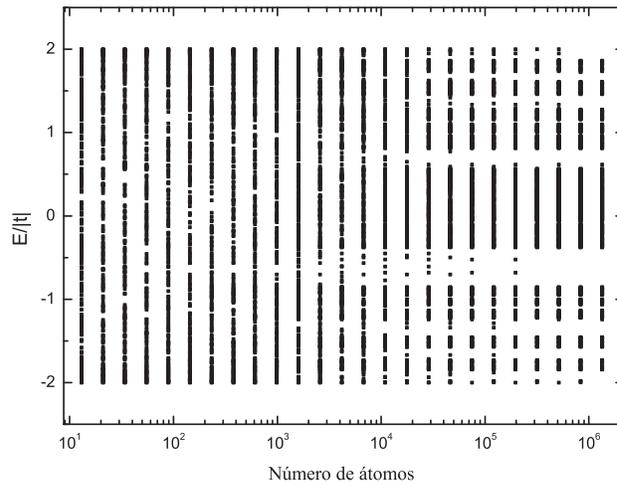


Figura 4.28: Energías donde existen estados de conducción vs. tamaño de la cadena base para una cadena de Fibonacci mixta con una impureza Fano periódica de generación 18.

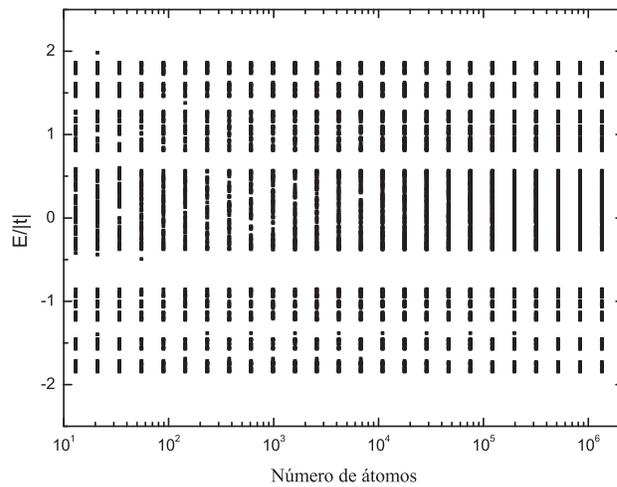


Figura 4.29: Energías donde existen estados de conducción vs. tamaño de la cadena base para una cadena de Fibonacci mixta con una impureza Fano de Fibonacci mixta de generación 18.

Los resultados de las figuras 4.26, 4.27, 4.28 y 4.29 corresponden a cadenas periódicas y de Fibonacci mixtas de generación entre 3 y 30 con impurezas Fano de generación 18 (en todos los casos las cadenas base están sin saturadores). En ellas podemos ver en qué regiones del ancho de banda existen estados de conducción en función del número de átomos de la cadena base. La figura 4.26 corresponde a cadenas periódicas con una impureza periódica adherida. En ella observamos que hay cada vez más estados de conducción conforme la cadena original crece (esto lo vemos porque las líneas son continuas a partir de una cierta generación). Esto ocurre porque si la cadena periódica es muy grande siente poco el efecto de la impureza, y como se sabe, una cadena periódica sin impurezas es un conductor perfecto. Esto es también notorio en la figura 4.27 que corresponde a una cadena periódica con una impureza de Fibonacci. Si la impureza es muy grande respecto al sistema base, tenemos un espectro de DOS de Fibonacci que presenta diversos gaps; sin embargo, estos gaps se van llenando si el sistema periódico crece (mencionamos anteriormente la aparición de pseudo-gaps), hasta que la cadena periódica es mucho mayor a la de Fibonacci y todos los estados son permitidos. Un efecto contrario ocurre cuando la cadena base es de Fibonacci y la impureza es periódica, tal como se aprecia en la figura 4.28, pues aquí vemos que los gaps van abriéndose como consecuencia de la contribución de la cadena cuasiperiódica al espectro de DOS: entre más sitios tenga el sistema base mayor será su contribución, y al ser este sistema cuasiperiódico surgen los gaps que podemos apreciar. Finalmente, al acoplar dos cadenas cuasiperiódicas obtenemos los resultados de la figura 4.29. En ella vemos que los gaps se conservan, pues estamos superponiendo dos espectros de cadenas del mismo tipo, donde los estados prohibidos son los mismos.

En resumen, hemos estudiado el efecto de las impurezas tipo Fano en cadenas periódicas y cuasiperiódicas de diferentes longitudes, dando a continuación las principales conclusiones.

Capítulo 5

Conclusiones

Una resonancia Fano se refiere a un perfil fuertemente asimétrico en el espectro de transmisión o de absorción de un material [3]. Se origina cuando aparece un conjunto discreto de energías que interfiere con el espectro continuo de un sólido. Por lo general una impureza en un material da lugar a dicho conjunto discreto de energías. El modelo más sencillo para estudiar este fenómeno es el modelo de Fano-Anderson, el cual consiste en una cadena atómica infinita a la que se le adhiere una cadena finita (impureza Fano) [6]. A pesar de que este modelo se ha estudiado con mucho interés en años recientes, se le ha prestado poca atención a la densidad de estados de estos sistemas, y a lo que ocurre cuando alguna de las cadenas (la original o la adherida) es cuasiperiódica.

En esta tesis hemos estudiado el efecto de las impurezas tipo Fano en la densidad de estados de cadenas periódicas y cuasiperiódicas a temperatura cero. Para este estudio realizamos una extensión del método de renormalización dentro del formalismo de amarre fuerte y a primeros vecinos para la DOS. Obtuvimos resultados para la densidad de estados de cadenas periódicas y de Fibonacci de dos tipos, mixta y de enlaces, y realizamos un análisis detallado de cómo la longitud de la impureza Fano afecta esta propiedad electrónica.

Las principales conclusiones de esta tesis son:

1. El método de renormalización en el espacio real constituye una herramienta eficiente y exacta para el estudio de sistemas cuasiperiódicos dada la carencia del espacio recíproco.
2. El efecto de la impureza Fano cuando ésta es pequeña respecto al sistema base es similar al producido por una impureza puntual.
3. La superposición de los espectros de DOS es más evidente cuando la longitud de la cadena base y de la impureza es la misma, más aún, cuando una de las cadenas es cuasiperiódica tenemos la aparición de pseudo-gaps.

4. En el caso en que la cadena acoplada es mucho mayor que el sistema original, la forma general del espectro de DOS es sólo el debido a la impureza.
5. El espectro de DOS cuando el sistema no tiene saturadores es el mismo cuando el ordenamiento de los átomos en la cadena base es periódico y en la impureza es cuasiperiódico, o alternando estos dos.
6. La existencia de un estado particularmente robusto, el cual no se transforma de manera significativa al crecer la generación de la impureza y depende del tipo de las cadenas base y acoplada qué tan robusto es dicho estado.

Adherir una impureza Fano a una cadena base implica agregar sitios al sistema y por lo tanto el número total de estados es mayor. Los estados nuevos que aparecen, producidos por la impureza, hacen que en ocasiones los gaps se saturen, pueden provocar la aparición de nuevos gaps y surgen también estados fuera de la banda. Por último, el presente trabajo podría extenderse a sistemas en dos y tres dimensiones usando el método de convolución, así como al estudio de otro tipo de excitaciones [28]. Así mismo, puede aplicarse el grupo de renormalización en el espacio real al estudio de la conductividad eléctrica ac y dc por medio del formalismo de Kubo [32], ya sea a temperatura cero o a temperatura finita, incluyendo los efectos de la estadística de Fermi-Dirac.

Capítulo 6

Apéndice 1

En este apéndice examinamos una solución analítica dada por Economou [11] para la densidad de estados local de una cadena periódica infinita con un sitio de impureza. Se considera un Hamiltoniano de amarre fuerte y se hace uso de la teoría de perturbaciones, llegando a una solución analítica .

Supongamos una cadena periódica infinita con autoenergías ε_0 e integrales de salto t a la que se le introduce en el sitio l una impureza puntual con autoenergía $\varepsilon_0 + \varepsilon$. Escribimos el Hamiltoniano de esta cadena como la suma del Hamiltoniano sin impureza H_0 más el Hamiltoniano de la impureza H_1 , es decir

$$H = H_0 + H_1, \quad (6.1)$$

donde H_0 corresponde a la cadena sin impureza,

$$H_0 = \sum_{\bar{m}} |\bar{m}\rangle \varepsilon_0 \langle \bar{m}| + t \sum_{\bar{n}\bar{m}} |\bar{n}\rangle \langle \bar{m}| \quad (6.2)$$

y H_1 proviene del sitio de impureza,

$$H_1 = |\bar{l}\rangle \varepsilon \langle \bar{l}|. \quad (6.3)$$

Usando la definición de la función de Green tal como se vio en el capítulo 2 podemos escribir estas funciones para los Hamiltonianos H_0 y H como $G_0(z) = (z - H_0)^{-1}$ y $G(z) = (z - H)^{-1}$ respectivamente. Utilizando (6.1) podemos escribir esta última función de Green como

$$G(z) = [1 - G_0(z)H_1]^{-1}G_0(z), \quad (6.4)$$

o bien, al expandir el término $(1 - G_0H_1)^{-1}$ en su serie de potencias, podemos reescribir

$$G = G_0 + G_0H_1G_0 + G_0H_1G_0H_1G_0 + \dots \quad (6.5)$$

Introducimos ahora la *matriz* $t T(z)$, de suma importancia en teoría de dispersión, definiéndola como

$$T(z) \equiv H_1 G(z)(z - H_0). \quad (6.6)$$

Sustituyendo la ecuación (6.5) en esta definición, podemos expresar la matriz t como

$$T = H_1 + H_1 G_0 H_1 + H_1 G_0 H_1 G_0 H_1 + \dots \quad (6.7)$$

Si en esta última expresión sustituimos el Hamiltoniano de impureza (6.3) podemos escribir

$$\begin{aligned} T &= |\bar{l}\rangle \varepsilon \langle \bar{l}| + |\bar{l}\rangle \varepsilon \langle \bar{l}| G_0 |\bar{l}\rangle \varepsilon \langle \bar{l}| + |\bar{l}\rangle \varepsilon \langle \bar{l}| G_0 |\bar{l}\rangle \varepsilon \langle \bar{l}| G_0 |\bar{l}\rangle \varepsilon \langle \bar{l}| + \dots \\ &= |\bar{l}\rangle \varepsilon [1 + \varepsilon G_0(\bar{l}, \bar{l}) + \dots] \langle \bar{l}| \\ &= |\bar{l}\rangle \frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon G_0(\bar{l}, \bar{l})} \langle \bar{l}| G_0. \end{aligned} \quad (6.8)$$

Ya que tenemos esta expresión para T , podemos ver que G tiene la forma

$$G = G_0 + G_0 T G_0 = G_0 + G_0 |\bar{l}\rangle \frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon G_0(\bar{l}, \bar{l})} \langle \bar{l}| G_0. \quad (6.9)$$

Utilizando esta última expresión y la forma general para la densidad de estados que se obtuvo en el capítulo 2, podemos finalmente escribir la densidad de estados en el sitio \bar{n} como

$$\rho(\bar{n}; E) = \rho_0(\bar{n}; E) - \frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\frac{\varepsilon \langle \bar{n} | G_0^+(E) | \bar{l} \rangle \langle \bar{l} | G_0^+(E) | \bar{n} \rangle}{1 - \varepsilon G_0^+(\bar{l}, \bar{l}; E)} \right], \quad (6.10)$$

donde ρ_0 corresponde a la densidad de estados de la cadena periódica sin impureza. En particular la densidad de estados en el sitio de impureza \bar{l} es

$$\rho(\bar{l}; E) = \frac{\rho_0(\bar{l}; E)}{|1 - \varepsilon G_0(\bar{l}, \bar{l}; E)|^2}. \quad (6.11)$$

Utilizando por último que para una red de una dimensión $G_0(\bar{l}, \bar{l}; E) = (E^2 - 2t^2)^{-1/2}$ [11], llegamos a que la densidad de estados en el sitio de impureza es

$$\rho(\bar{l}; E) = \frac{\rho_0(\bar{l}; E)}{|1 - \varepsilon (E^2 - 2t^2)^{-1/2}|^2}. \quad (6.12)$$

La densidad de estados $\rho(\bar{n}; E)$ es una función continua de la energía dentro de la banda, lo cual significa que el ancho de banda de H coincide con el ancho de banda de H_0 excepto por una singularidad que exhibe $\rho(\bar{n}; E)$ fuera de la banda. A pesar de que el Hamiltoniano que se consideró es una aproximación muy simple para describir las propiedades electrónicas de un cristal en presencia de una impureza sustitucional, se tiene una buena descripción cualitativa. Si se

quieren calcular cantidades físicas de interés cuantitativo se requiere considerar factores más complicados como el potencial producido por la impureza, la no ortogonalidad de la base, etc. [33]. Este método tiene importantes aplicaciones en diversas áreas del Estado Sólido tales como pares de Cooper, superconductividad [11] y el problema de Kondo [34].

Capítulo 7

Apéndice 2

A continuación se muestran las constantes que se utilizan en las expresiones de AT , BT , CT y DT para la densidad de estados de una cadena por sitios con una impureza tipo Fano.

$$ALF = E_L F(m) + \frac{t_f^2}{E - E_R F(m)} \quad (7.1)$$

$$BET = E_L(2) + \frac{t_{ii}^2}{E - ALF} \quad (7.2)$$

$$DR1 = (E - E_R(1))(E - BET) - t_n^2 \quad (7.3)$$

$$DENO2 = [(E - E_L(2))(E - E_R(1)) - t_n^2](E - ALF) \quad (7.4)$$

$$DENO3 = [DENO2 - t_{ii}^2(E - E_R(1))](E - ALF) \quad (7.5)$$

$$F_1 = \frac{t(1)(E - BET)}{DR1} \quad (7.6)$$

$$F_2 = \frac{t_n t(1)}{DR1} \quad (7.7)$$

$$F_3 = \frac{t_n^2 t^2(1) t_{ii}^2}{DR1 \cdot DENO3} \quad (7.8)$$

$$F_4 = \frac{t_F}{EE - E_R F(m)} \quad (7.9)$$

$$F_5 = \frac{t_n t(2)}{DR1} \quad (7.10)$$

$$F_6 = \frac{t(2)(E - E_R(1))}{DR1} \quad (7.11)$$

$$F_7 = \frac{t_{ii}^2 t^2(2)(E - E_R(1))^2}{DR1 \cdot DENO3} \quad (7.12)$$

$$F_8 = \frac{2t_n t(1)t(2)t_{ii}^2}{DR1 \cdot DENO3} \quad (7.13)$$

$$F_9 = \frac{E - BET}{DR1} \quad (7.14)$$

$$F_{10} = \frac{E - E_R(1)}{DR1} \quad (7.15)$$

$$F_{11} = \frac{DENO2}{DENO3} \quad (7.16)$$

$$F_{12} = \frac{1}{E - E_R F(m)} \quad (7.17)$$

$$ELL = E_L(1) + t(1)F_1 \quad (7.18)$$

$$ERR = E_R(2) + t(2)F_6 \quad (7.19)$$

$$TTT = t(2)F_2 \quad (7.20)$$

En la siguiente sección se presentan las funciones de Green para cadenas sin saturadores.

7.1. Funciones de Green sin saturadores

La densidad de estados está relacionada con la traza de la función de Green. Al renormalizar tomamos exclusivamente los sitios de frontera, por lo que las expresiones para las funciones de Green sin saturador son:

$$\begin{aligned} G_{11} &= \frac{1}{E - ELL - \frac{TTT^2}{E - ERR}} \\ G_{44} &= \frac{TTT}{(E - ELL)(E - ERR) - TTT^2} \\ G_{14} &= \frac{1}{E - ERR - \frac{TTT^2}{E - ELL}} \end{aligned} \quad (7.21)$$

En la siguiente sección se presentan las funciones de Green para cadenas con saturadores.

7.2. Funciones de Green con saturadores

La mayoría de las mediciones de forma experimental se hacen a través de cables entre la muestra y los aparatos de medición, por lo que los saturadores modelan este tipo de sistemas. En este apartado se dan las funciones de Green con saturadores.

$$\begin{aligned}
 G_{11} &= \frac{1}{E-ELL-\frac{TSS^2}{E-E_R^P(m)}-\frac{TTT^2}{E-ERR-\frac{TSS^2}{E-E_L^P(m)}}} \\
 G_{44} &= \frac{1}{E-ERR-\frac{TSS^2}{E-E_L^P(m)}-\frac{TTT^2}{E-ELL-\frac{TSS^2}{E-E_R^P(m)}}} \quad (7.22) \\
 G_{14} &= G_{22} \times \frac{TTT^2}{E-ELL-\frac{TSS^2}{E-E_R^P(m)}}
 \end{aligned}$$

En el siguiente apéndice se presentarán las constantes que se utilizaron para calcular la densidad de estados de sistemas por enlaces y sus respectivas funciones de Green.

Capítulo 8

Apéndice 3

Las siguientes son las constantes que se utilizan para las expresiones de AT , BT , CT y DT para la densidad de estados de una cadena por enlaces con impureza tipo Fano.

$$alfa = E_M(m) + \frac{t_F^2}{E - E_RF(m)} \quad (8.1)$$

$$DENO1 = (E - alfa)(E - E_RF(m)) \quad (8.2)$$

$$DENO2 = (E - alfa)DENO1 \quad (8.3)$$

$$DENO3 = (E - E_RF(m))DENO2 \quad (8.4)$$

$$ELL = E_L(1) + \frac{t^2(1)}{E - Alfa} \quad (8.5)$$

$$ERR = E_R(2) + \frac{t^2(2)}{E - alfa} \quad (8.6)$$

$$TTT = \frac{t(1)t(2)}{E - alfa} \quad (8.7)$$

$$E_ML = E_R^P(m) + ELL \quad (8.8)$$

$$E_MR = ERR + E_L^P(m) \quad (8.9)$$

$$thethaR = E - E_MR - \frac{t_P^2(m)}{E - E_R^P(m)} \quad (8.10)$$

$$thetaL = E - E_M L - \frac{t_P^2(m)}{E - E_L^P(m)} \quad (8.11)$$

En la siguiente sección se presentan las funciones de Green para cadenas por enlaces sin saturadores.

8.1. Funciones de Green sin saturador

Recordemos que la densidad de estados está relacionada con la traza de la función de Green. Al renormalizar sólo tomamos los sitios de frontera, de modo que las expresiones para las funciones de Green sin saturador son:

$$\begin{aligned} G_{11} &= \frac{1}{E - ELL - \frac{TTT^2}{E - ERR}} \\ G_{33} &= \frac{1}{E - ERR - \frac{TTT^2}{E - ELL}} \\ G_{13} &= \frac{TTT}{(E - ELL)(E - ERR) - TTT^2} \end{aligned} \quad (8.12)$$

Por otra parte, si consideramos sistemas con saturadores obtenemos las funciones de Green que se muestran en el siguiente apartado.

8.2. Funciones de Green con saturador

Los saturadores se utilizan para modelar los cables que se utilizan entre la muestra y los aparatos de medición para obtener resultados experimentalmente. Las siguientes son las funciones de Green que se obtienen al renormalizar este tipo de sistemas.

$$\begin{aligned} G_{11} &= \frac{1}{E - E_M L - \frac{t_P^2(m)}{E - E_L^P(m)} - \frac{TTT^2}{thetaR}} \\ G_{33} &= \frac{1}{E - E_M R - \frac{t_P^2(m)}{E - E_L^P(m)} - \frac{TTT^2}{thetaL}} \\ G_{13} &= G_{33} \frac{TTT}{thetaL} \end{aligned} \quad (8.13)$$

Tenemos así todas las funciones de Green que necesitamos para calcular la densidad de estados de este tipo de sistemas.

Bibliografía

- [1] D. Schetman, I. Blech, D. Gratias, J.W. Chahn, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1951 (1984).
- [2] Antonio Gonis, *Green Functions for Ordered and Disordered Systems*, North-Holland, Amsterdam, 1992
- [3] U. Fano, *Phys. Rev.* **124**, 1866 (1961).
- [4] M.E.Torio, K.Hallberg, S.Flach, A.E. Miroshnichenko, M.Titov, *Eur. Phys. J.B.* **37**, 399, (2004)
- [5] J.U.Nöckel, A.D.Stone, *Phys. Rev. B* **50**, 17415 (1994)
- [6] G.D.Mahan, *Many Particle Physics*, Plenum Press, N.Y., 1993
- [7] M.E.Torio, K.Hallberg, A.H.Ceccatto, C.R.Proetto, *Phys. Rev. B* **65**, 085302 (2002)
- [8] M.L.Ladrón de Guevara, F.Claro, P.A.Orellana, *Phys.Rev.B* **65**, 085302 (2002)
- [9] A.Rodríguez, F.Domínguez-Adame, I.Gómez, P.A.Orellana, *Phys. Rev. A* **320** (2003)
- [10] A. Chakrabati, *Phys. Lett. A* **366**, (2007)
- [11] E.N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics*, Springer Series in Solid State Sciences, Vol.7, 1983.
- [12] Neil W. Aschcroft, N. David Mermin, *Solid State Physics*, Harcourt College Publishers, 1976.
- [13] Chetan Nayak, *Solid State Physics*, University of California, 2000.
- [14] Charles Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, John Wiley, 1996.
- [15] C. Janot, *Quasicrystals, a primer*, Clarendon Press Oxford, 1994.
- [16] Feng Duan, Jin Guojun, *Introduction to Condensed Matter Physics* (Vol. 1), World Scientific, 2005.

- [17] D.Levine, P.J. Steinhardt, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2477 (1984).
- [18] D.Levine, P.J. Steinhardt, *Phys. Rev. B.* **34**, 2, (1985).
- [19] S.M.Cronenwett, T.H.Oosterkamp, L.P.Kouwenhoven, *Science* **281**, 5 (1998).
- [20] J. O. Vasseur, P. A. Deymier, L. Dobrzynski, J. Choi, *J. Phys.:Condens. Matter* **10**, 8973 (1998).
- [21] P. A. Orellana, F. Domínguez-Adame, I. Gómez,M. L. Ladrón de Guevara, *Phys. Rev. B* **67**, 085321 (2003).
- [22] F. Domínguez-Adame, I. Gómez, P. A. Orellana, M. L. Ladrón de Guevara, *Microelec. Jour.* **35**, 87 (2004).
- [23] U. Fano, A. R. P. Rau, *Atomic Collisions and Spectra* Academic Press, Orlando, 1986.
- [24] J. Faist, F. Capasso, C. Sirtori, K. W. West,L. Pfeiffer, *Nature London*, **390**, **589** (1997).
- [25] F. Cerdeira, T. A. Fjeldly, M. Cardona, *Phys. Rev. B* **8**, **4734** (1973).
- [26] V. Madhavan, W. Chen, T. Jamneala, M. M. Crommie, N. S. Wingreen, *Science* **280**, **567** (1998)
- [27] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, John Wiley, 1970.
- [28] G.M. López Ayón, *Renormalización Aplicada al Estudio de Fases en Sistemas Cuasiperiódicos* (Tesis de Licenciatura), UNAM, 2006.
- [29] L.P.Kadanoff, *Rev.Mod.Phys.* **39**, 395 (1967).
- [30] C. Wang, *Quasiperiodicidad en la física de sólidos de dimensión restringida* (Tesis de Doctorado), UNAM, 1989.
- [31] M. Kohmoto, B. Sutherland, C.Tang, *Phys. Rev. B* **34**, 563 (1986).
- [32] V.Sanchez, L.Perez, R.Oviedo-Roa, C.Wang, *Phys. Rev. B.* **64**, 174205 (2001).
- [33] G.F.Koster, J.C.Slater, *Phys.Rev.95*, **1167** (1954); *Phys.Rev.96* **1208** (1954).
- [34] P.W.Anderson, G.Yuval, *Phys.Rev.B1*, **1522** (1970).
- [35] Richard Feynman, *The Feynman Lectures on Physics* (Vol III), Academic Press, 2005.
- [36] Yuri M. Galperin, *Introduction to Modern Solid State Physics*

- [37] R. Oviedo-Roa, *Correlación y transporte de electrones en sistemas aperiódicos*, Tesis Doctoral, UNAM, 2001.
- [38] V. Sanchez, *Transporte Electrónico en Sistemas Cuasiperiódicos* (Tesis de Docotorado), UNAM, 2003.