



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA  
DE MÉXICO**

---

---

**FACULTAD DE CIENCIAS**

**ESTADOS TRANSPARENTES EN SISTEMAS  
APERIÓDICOS**

**T E S I S**

**QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:**

**FÍSICO**

**P R E S E N T A:**

**FERNANDO SÁNCHEZ RUEDA**



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

**2010**



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.

# Hojas de Datos del Jurado

1. Datos del alumno Sánchez Rueda Fernando 57 56 29 74 Universidad Nacional Autónoma de México Facultad de Ciencias Física 301053345
2. Datos del tutor Dra. Vicenta Sánchez Morales
3. Datos del sinodal 1 Dr. Chumin Wang Chen
4. Datos del sinodal 2 Dr. Raul Patricio Esquivel Sirvent
5. Datos del sinodal 3 Dra. Montserrat Bizarro Sordo
6. Datos sinodal 4 Dr. Jorge Humberto Arce Rincon

# Agradecimientos

A la Dra. Vicenta Sánchez Morales por su gran apoyo, orientación y paciencia que externo a largo de una gran parte de mis estudios así como en la elaboración de este trabajo de tesis; más aun por su gran visión de la vida la cual la lleva a ser una gran persona, aunque ella diga lo contrario. Infinitas gracias.

Al Dr. Wang Chen Chumin por sus comentarios, correcciones y cuestionamientos que me ayudaron a mejorar considerablemente de este trabajo de tesis.

A los miembros del jurado que a través de sus comentarios y sugerencias mejoraron este trabajo de tesis.

A la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM) por mi formación académica y por enriquecer cada uno de los aspectos de mi vida.

A la DGAPA que a través del Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación Tecnológica (PAPPIT) número IN111507 y IN117609 me brindó una beca con el fin terminar el trabajo de tesis y por tanto mis estudios de licenciatura, así mismo a la DGESCA por permitirme utilizar las computadoras Kam-Balam y Bakliz.

A mi familia por haberme apoyado en el transcurso de mis estudios, a través de su comprensión y tiempo. Especialmente a mi hermano Alejandro Sánchez, ya que escuchar y convivir con un físico no siempre es fácil.

A Gabriela Esquivel principalmente por mostrarme un nuevo panorama de la vida, su gran apoyo moral y por hacerme infinitamente feliz.

# RESUMEN

En esta tesis se estudia las propiedades físicas tales como la densidad de estados y la conductividad eléctrica  $dc$  a temperatura cero bajo el modelo de amarre fuerte, usando las funciones de Green para una sola partícula y el formalismo de Landauer para el transporte eléctrico. Los sistemas aperiódicos elegidos para el estudio de estas propiedades son: Thue Morse, Doble Período y Fibonacci. Para este fin se extendió el método de renormalización a dichos sistemas aperiódicos. El análisis realizado para sistemas unidimensionales donde hay un ordenamiento de átomos tipo Thue Morse exhibe una gran cantidad de estados transparentes -coeficiente de transmisión uno- en cada generación y conforme se incrementa el tamaño del sistema aumenta la cantidad de estos estados. Esta característica la conserva la cadena de Doble Período excepto por el hecho que en este sistema se presentan estos estados cada dos generaciones, además se confirmó que para la cadena de Fibonacci solo existe un estado transparente cada seis generaciones en energía igual a cero. Los estados transparentes en cadenas Thue Morse están inmersos en estados de alta conductividad, los cuales generan un espectro oscilatorio, situación que no ocurre para las demás cadenas. Más aun, se realiza un análisis detallado del espectro de conductividad  $dc$  en los tres sistemas aperiódicos mostrando que el promedio de la conductividad en las cadenas de Doble Período y Fibonacci decaen como una ley de potencias la cual depende de la aperiodicidad del sistema, en tanto para la cadena de Thue Morse el decaimiento es más rápido. Finalmente se extendió el estudio a sistemas aperiódicos bidimensionales empleando los métodos de renormalización desarrollados y combinándolos con la técnica de convolución. Los resultados muestran que la conductividad esta cuantizada como es reportada en la literatura y el tamaño del escalón es  $g_0 = he^2/2$ , así mismo se conserva la auto-similaridad en los espectros. Más aun, en los espectros tanto de conductividad como de densidad de estados ya no presentan gaps lo que encontramos son pseudo-gaps muy bien definidos los cuales no son afectados por cambios en el orden de la parte imaginaria y se encontró que el promedio de la conductividad en dos dimensiones tiene el mismo comportamiento que el presentado para sistemas unidimensionales.

# INDICE

## **CAPITULO 1 Estructura de la Materia**

<i>1.1 Introducción</i>	6
<i>1.2 Materiales Periódicos</i>	6
<i>1.3 Enlaces Atómicos</i>	8
<i>1.4 Estructuras Periódicas</i>	11
<i>1.5 Materiales Desordenados (Amorfos)</i>	15
<i>1.6 Estructuras Desordenadas</i>	17
<i>1.7 Tipos de Impureza</i>	18
<i>1.8 Materiales Aperiódicos</i>	20
<i>1.9 Estructuras Aperiódicas</i>	22
<i>1.9.1 Método de Corte y Proyección</i>	23
<i>1.9.2 Métodos de inflación, Deflación y Adición</i>	24
<i>1.9.3 Mosaicos de Penrose</i>	26
<i>1.10 Funciones Cuasi-Periódicas</i>	28

## **CAPITULO 2 Transporte Electrónico**

<i>2.1 Introducción</i>	29
<i>2.2 Funciones de Bloch</i>	29
<i>2.3 Modelo de Amarre Fuerte</i>	30
<i>2.4 Función de Green y Densidad de Estados (DOS)</i>	31
<i>2.5 Método de Convolución</i>	37
<i>2.6 Modelo de Drude</i>	40
<i>2.7 Conductividad Eléctrica dc para Metales</i>	41
<i>2.8 Conductancia de Landauer</i>	42
<i>2.9 Transmitancia</i>	43

## **CAPITULO 3 Resultados: Densidad de Estados**

<i>3.1 Introducción</i>	46
<i>3.2 Una Dimensión</i>	46
<i>3.3 Densidad de Estados en Dos Dimensiones (DOS<sup>2D</sup>)</i>	51

## **CAPITULO 4 Resultados: Conductividad Eléctrica**

<i>4.1 Introducción</i>	55
<i>4.2 Transmitancia</i>	55
<i>4.3 Conductividad Eléctrica Bi-Dimensional</i>	67

## **CAPITULO 5 Conclusiones** 71

### **APÉNDICE I:**

<i>Densidad de Estados para un Sistema tipo Fibonacci</i>	73
---	----

### **APÉNDICE II:**

<i>Densidad de Estados para un Sistema tipo Doble Período</i>	76
---	----

### **APÉNDICE III:**

<i>Densidad de Estados para un Sistema tipo Thue Morse</i>	80
--	----

### **APÉNDICE IV:**

<i>Transmitancia para un Sistema tipo Fibonacci</i>	84
---	----

### **APÉNDICE V:**

<i>Transmitancia para un Sistema tipo Doble Período</i>	87
---	----

### **APÉNDICE VI:**

<i>Transmitancia para un Sistema tipo Thue Morse</i>	91
--	----

## **BIBLIOGRAFIA** 94

# Introducción

Las personas siempre se han interesado por las formas que tienen los cristales, la simetría macroscópica esta basada en la simetría de los arreglos atómicos, es decir, en la estructura atómica que poseen dichos sólidos [Janssen, 2007]. El estudio de la física del estado sólido comenzó con el descubrimiento de difracción de los rayos-x. Laue realizó la primera observación experimental de la difracción de los rayos-x en cristales [Kittel, 2005]. La cristalografía se encargó de estudiar el ordenamiento atómico en los sólidos, logrando caracterizar la materia en dos grupos: cristales y amorfos. Por otra parte, debido a las características que poseen los metales como la maleabilidad y su buena conducción del calor y la electricidad, hacen que ocupen una especial posición en el estudio de los sólidos. Durante mucho tiempo los físicos han tratado de construir modelos simples, con ese propósito se analizan los sistemas de baja dimensionalidad para encontrar una explicación cualitativa y cuantitativa del sistema estudiado [Aschcroft, 1976], además, este tipo de sistemas ofrecen la oportunidad única para introducir algunos relevantes conceptos de la física del estado sólido. Con el desarrollo de las microestructuras semiconductoras, los modelos de baja dimensión han servido para el entendimiento de situaciones realistas [Grosso, 2003]. El descubrimiento de los cuasicristales [Shechtman, 1984] en la década de los ochenta abrió una nueva rama en la investigación de la física del estado sólido, por ello se han realizado esfuerzos considerables en el estudio de la localización de las excitaciones [Janot, 1994]. Sin embargo el teorema de Bloch no es válido para este tipo de estructuras ya que carecen de espacio recíproco, por ello es prácticamente imposible estudiarlos mediante los métodos de la cristalografía tradicional. Por este motivo se han desarrollado en los últimos años innovadoras técnicas matemáticas, utilizando principalmente la teoría de perturbaciones y las funciones de Green [Gonis, 1992].

En esta tesis se estudian las propiedades físicas tales como la densidad de estados y la conductividad eléctrica  $dc$  a temperatura cero bajo el modelo de amarre fuerte, usando las funciones de Green para una sola partícula y el formalismo de Landauer para el transporte eléctrico. Los sistemas aperiódicos elegidos para el estudio de estas propiedades son: Thue Morse, Doble Período y Fibonacci. Para este fin se extendió el método de renormalización a dichos sistemas aperiódicos abordando el problema de enlaces unidimensional como bidimensional.

En el primer capítulo de esta tesis se estudian tanto las estructuras como los materiales periódicos, aperiódicos y desordenados, así mismo, se

analizan los tipos de impurezas que pueden estar presentes en los sólidos y se presentan algunos métodos empleados para la obtención de las secuencias aperiódicas estudiadas en este trabajo.

En el segundo capítulo se da la base conceptual necesaria para obtener la densidad de estados y la conductividad eléctrica  $dc$  bajo el formalismo de Landauer para sistemas tanto unidimensionales como bidimensionales, mediante el método de renormalización y basándonos en el modelo de amarre fuerte. Para ello se estudian las funciones de Green, el transporte eléctrico desde el punto de vista clásico del modelo de Drude hasta el modelo cuántico que es el modelo de Landauer. Por otra parte, para abordar los sistemas bidimensionales se analiza el método de convolución.

En el tercer capítulo se presentan los resultados obtenidos para la densidad de estados en los sistemas aperiódicos Thue Morse, Doble Período y Fibonacci para una y dos dimensiones.

En el cuarto capítulo se exponen los resultados obtenidos para la conductividad eléctrica  $dc$  en una y dos dimensiones para los sistemas aperiódicos anteriormente mencionados haciendo énfasis en los estados transparentes.

En el quinto capítulo se muestran las conclusiones a las que nos llevó este trabajo. Finalmente se anexaron seis apéndices en los que se dan las expresiones para obtener la densidad de estados y la conductividad eléctrica  $dc$  bajo el método de renormalización.

# Capítulo 1: Estructura de la Materia

## 1.1 Introducción

El ser humano posee una gran cualidad: la curiosidad, esta lo ha llevado a desarrollar numerosas teorías así como herramientas, con el fin de explicar el mundo que lo rodea. Desde el tiempo de los griegos se tiene la idea que la materia está constituida por átomos, el cual fue un concepto bastante importante para su tiempo y aun para el nuestro, puesto que toda la materia tiene una estructura atómica. La cristalografía caracterizó los arreglos atómicos encontrando que existe una cantidad limitada de formas de acomodar los átomos de manera simétrica y aquellos materiales que tuvieran este ordenamiento atómico los denominó cristales ó materiales cristalinos y todos los demás que no tuvieran dichas simetrías los llamo materiales amorfos. Más aun estableció que no puede existir un material cristalino con una simetría 5, 8, 10,12 (restricción cristalográfica de Haüy). Dichas afirmaciones perduraron hasta 1982 cuando Dan Shechtman encontró un material (aleación de 86% de Al y 14% de Mg) que presentaba una simetría 5 pero que no tenía una estructura cristalina periódica y tampoco amorfa por lo que se le denominó cuasicristal, lo cual abrió una nueva rama de investigación en estado sólido.

Estudiar las estructuras atómicas de los materiales es de gran importancia para el estudio de las propiedades físicas de los mismos, debido a que estas propiedades dependen fuertemente del ordenamiento atómico, es decir, de la forma en que los átomos se acomoden para formar el material. En este capítulo estudiaremos las estructuras presentes de los materiales sólidos; es decir, estructuras periódicas, desordenadas y aperiódicas; centrándonos en conceptos clave para la comprensión de los mismos.

## 1.2 Materiales Periódicos

Explotar los recursos naturales y transformarlos a su mejor conveniencia fue uno de los primeros retos de la humanidad y continúa siendo una de las principales preocupaciones [Aguilar, 1997].

En la naturaleza podemos encontrar una gran cantidad de elementos que a lo largo del desarrollo de la humanidad hemos aprendido a emplear

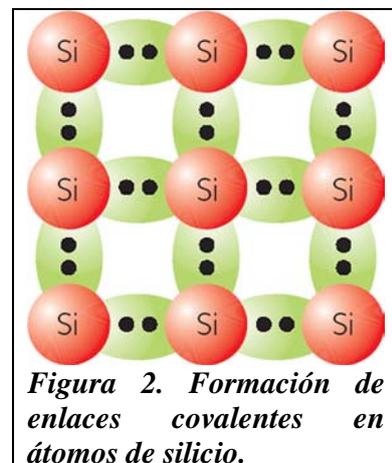
en nuestro beneficio. Los materiales se pueden clasificar en cinco grupos: metales, cerámicos, poliméricos, semiconductores y materiales compuestos [Askeland, 1998]. Se ha dedicado especial atención a aquellos materiales sólidos en que los átomos, iones o moléculas que los constituyen presentan un ordenamiento periódico tridimensional, es decir, materiales cristalinos [Rodríguez, 1986].



*Figura 1. Muestra de cobre (cristalizado).*

El mundo de los cristales es muy amplio, los podemos encontrar en muchos de los objetos que nos rodean, debido a sus propiedades eléctricas, ópticas o magnéticas son base para la fabricación de muchos dispositivos de la vida actual como láseres, dispositivos emisores de luz (LED), fotómetros, celdas solares, transistores, chips, pantallas de TV, transformadores, sensores de temperatura o de humedad, etc. Lo más interesante de los materiales cristalinos es que sus propiedades pueden ser alteradas introduciendo defectos o impurezas en el cristal [Aldabe, 2005].

Un ejemplo común de materiales periódicos son los metales (figura 1), que junto con sus aleaciones generalmente tienen como características una buena conductividad eléctrica y/o térmica, una resistencia relativamente baja, una alta rigidez, ductilidad o conformabilidad y resistencia al impacto, etc. Por otro lado, también los semiconductores, muchos de ellos cerámicos y algunos polímeros tienen una organización de átomos muy regular [Askeland, 1998].



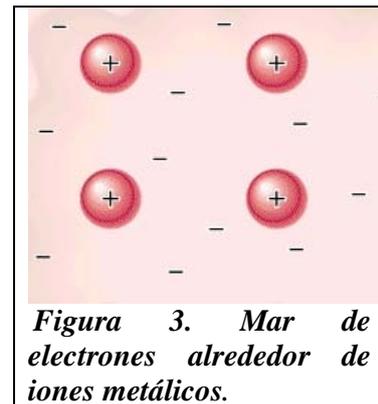
*Figura 2. Formación de enlaces covalentes en átomos de silicio.*

Las propiedades de los materiales están fuertemente ligadas a su estructura atómica, ya que la disposición de los electrones que rodean al núcleo de los átomos individuales afecta el comportamiento eléctrico, magnético, térmico y óptico. Asimismo, la configuración electrónica influye en la forma que los átomos se unen entre sí (Figura 2). Las estructuras atómicas a las cuales se hace referencia las detallaré en las subsecuentes secciones.

## 1.3 Enlaces Atómicos

Las propiedades físicas de los sólidos cristalinos, dependen tanto del acomodo de las partículas como de las fuerzas de atracción entre ellas. [Brown, 1998]. La finalidad del enlace químico es lograr la estabilidad energética de los átomos involucrados. Por tanto, la “interacción” ocurre principalmente por las diferencias en las electronegatividades que poseen.

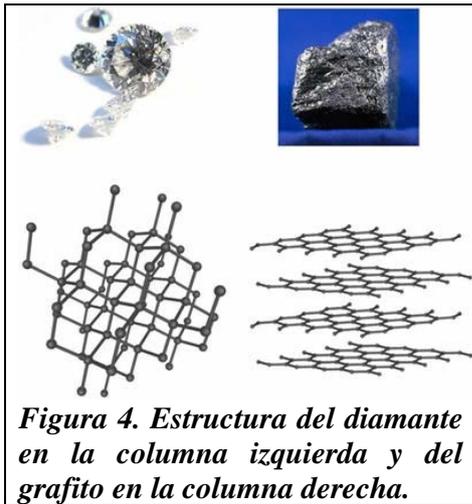
El enlace sólo ocurre con los electrones de las capas externas, puesto que son los de mayor energía y menor atracción respecto al núcleo, es decir, el enlace se consigue cuando los átomos llenan sus niveles externos *s* y *p* [Askeland, 1998]. La formación de un enlace estable supone que la estructura resultante debe tener menor energía que los átomos aislados



Los tipos de enlace son el metálico, covalente, iónico, de Van der Waals y el mixto. A continuación se describe cada uno de ellos.

Los sólidos metálicos consisten exclusivamente en átomos de metal, suelen tener estructuras de empaquetamiento compacto hexagonal así como cúbico [Brown, 1998]. Los elementos metálicos tienen una electronegatividad baja, por lo que ceden sus electrones de valencia para formar un “mar” de electrones (Figura 3) que rodea a los átomos. Los centros atómicos cargados positivamente se mantienen unidos mediante la atracción mutua con los electrones, produciendo así un fuerte *enlace metálico* [Askeland, 1998].

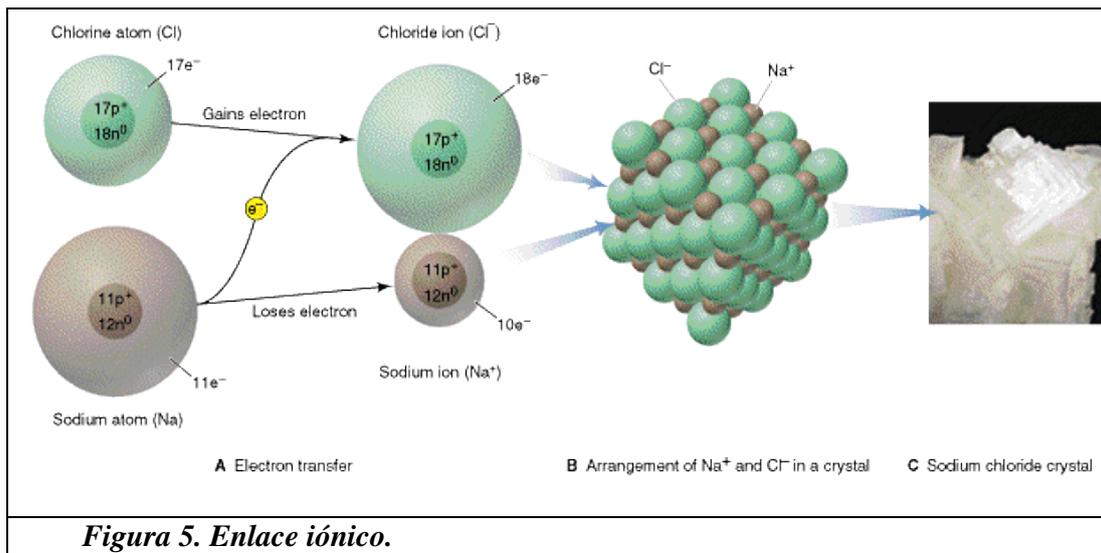
Los enlaces covalentes son muy fuertes, los materiales enlazados de esta manera comparten electrones entre dos o más átomos y por lo general tienen una pobre ductilidad así como una mala conductividad eléctrica y térmica. Para que se mueva un electrón y pueda transportar corriente, debe romperse el enlace covalente, lo que requiere de altas temperaturas o voltajes [Askeland, 1998].



Dos de los ejemplos más conocidos de sólidos de red covalente son el diamante y el grafito, dos alótropos del carbono (Figura 4). En el diamante cada átomo de carbono está unido a otros cuatro átomos de carbono. Esta matriz tridimensional interconectada con fuertes enlaces sencillos carbono-carbono contribuye a la inusitada dureza del diamante. En congruencia con su estructura y enlaces, el diamante tiene un elevado punto de fusión 3550 °C [Brown, 1998].

En el grafito los átomos de carbono están dispuestos en capas de anillos hexagonales interconectados. Cada átomo de carbono está unido a otros tres de la capa. Los electrones se mueven libremente por los orbitales deslocalizados y esto hace que el grafito sea un buen conductor de la electricidad a lo largo de las capas [Brown, 1998].

Cuando en un material se encuentran presentes más de un tipo de átomos, uno de ellos puede donar sus electrones de valencia a un átomo distinto, llenando la capa energética externa del segundo átomo. Ambos átomos ahora tendrán su nivel de energía externo lleno (o vacío), y a la vez han adquirido una carga eléctrica y se comportan como iones (Figura 5). Los iones de carga opuesta se atraen el uno al otro y producen un *enlace iónico* [Askeland, 1998].

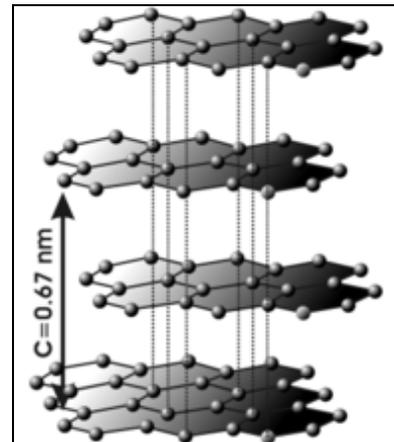


Los enlaces de *Van der Waals* unen moléculas o grupos de átomos mediante una atracción electrostática débil (Figura 6). Muchos plásticos, cerámicos, agua y otras moléculas están polarizadas de manera

permanente; esto es, algunas porciones de la molécula se encuentran cargadas positivamente, en tanto que otras negativamente.

La atracción electrostática entre regiones de carga positiva de la molécula y regiones de carga negativa de una segunda molécula unen de manera débil ambas moléculas. Esto, llamado *enlace de hidrogeno*, ocurre cuando una de las regiones polarizadas está formada de átomos de hidrogeno.

Los enlaces de Van der Waals pueden modificar de manera notable las propiedades de los materiales. Dado que los polímeros por lo general tiene enlaces covalentes, esperaríamos que el cloruro de polivinilo (plástico PVC) fuera muy frágil, pero este material contiene moléculas muy largas en forma de cadena. Dentro de cada una de estas los enlaces son covalentes, pero las cadenas individuales se unen una con otra mediante enlaces Van der Waals. El cloruro de polivinilo puede ser deformado rompiendo los enlaces Van der Waals, permitiendo que las cadenas se deslicen una frente a la otra [Askeland, 1998].



**Figura 6. Estructura del grafito. Los enlaces entre capas están unidas mediante un enlace de Van Der Waals.**



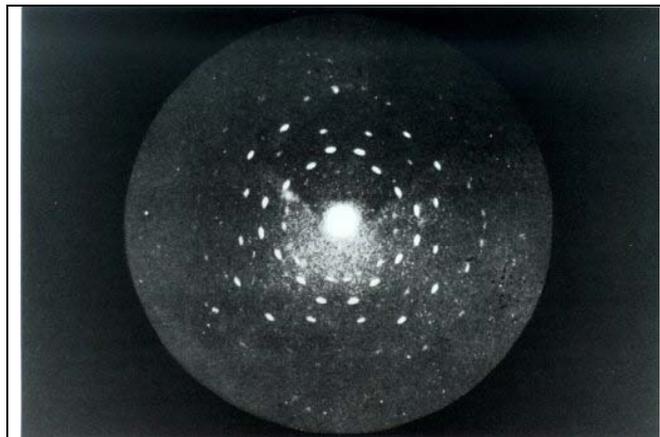
**Figura 7. Mineral de Hierro.**

En la mayor parte de los materiales, el enlace entre átomos es una mezcla de dos o más tipos (*enlace mixto*). Por ejemplo, el hierro (Figura 7) está enlazado mediante una combinación de enlaces metálicos y covalentes, lo que impide que los átomos se empaqueten tan eficientemente como pudiéramos esperar.

Los compuestos formados a partir de dos o más metales (compuestos intermetálicos) pueden ser una mezcla de enlaces iónicos y metálicos, particularmente cuando existe una diferencia importante en la electronegatividad entre elementos.

## 1.4 Estructuras Periódicas

El estudio de la física del estado sólido comenzó con el descubrimiento de la difracción de *rayos-X* en cristales (Figura 8) así como con la publicación de una serie de simples cálculos de las propiedades de los mismos [Kittel, 2005]. Los cristales los podemos encontrar en la naturaleza, en forma de minerales, rocas y demás ejemplos que han sido mencionados en las secciones anteriores. Algunos de ellos son particularmente grandes, como son las piedras preciosas [Aldabe, 2005]. El arreglo atómico juega un papel importante en la determinación de la microestructura y en el comportamiento de un material sólido. El cristal, en el que los átomos se disponen periódicamente, es el principal objeto de estudio en la física del estado sólido, y que aún mantiene un lugar importante en física de materia condensada [Duan, 2005].



*Figura 8. Equisgrafía original tomada por Von Laue, Friedrich y Knipping en 1912, haciendo incidir rayos X sobre un cristal de sulfato de cobre.*

Por ejemplo, el arreglo atómico en el aluminio proporciona buena ductilidad, en tanto que en el hierro es la causa de una buena resistencia. Los transductores cerámicos capaces de detectar tumores en el cuerpo humano se basan en un arreglo atómico que produce un desplazamiento permanente de las cargas eléctricas dentro del material [Askeland, 1998].

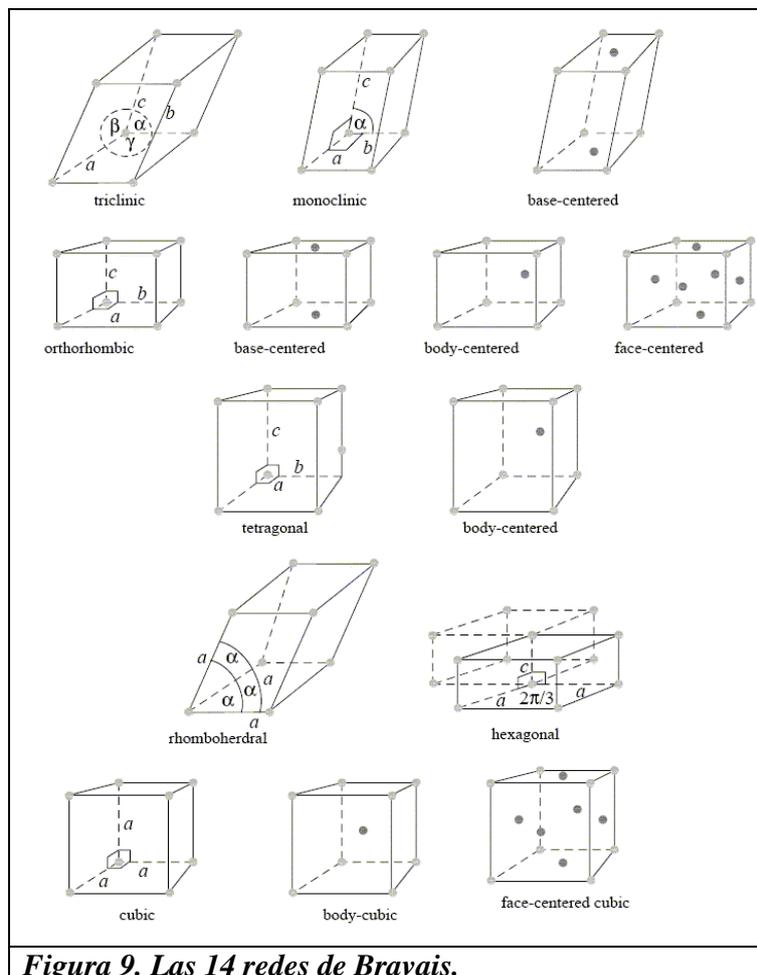
Muchos de los materiales que nos rodean (semiconductores, metales) están conformados por un gran número de átomos distribuidos en el espacio de manera ordenada, formando una *red cristalina*. Para formar esta red cristalina son necesarias dos cosas: una *base* y una *red*; siendo la base un grupo de átomos y la red un sistema de puntos matemáticos en donde se coloca la base [Kittel, 2005].

La red difiere de un material a otro tanto en tamaño como en forma, dependiendo de los átomos y del tipo de enlace entre ellos [Askeland, 1998].

La *celda unitaria* es la subdivisión de la red cristalina la cual sigue conservando las características generales de toda la red. El tamaño y la forma de la celda unitaria está descrito mediante los *parámetros de red*. Un sistema cúbico requiere de solo un parámetro de red que viene siendo la longitud de una de sus aristas en tanto que una celda unitaria compleja como lo es la celda triclinica se describe mediante tres longitudes y tres ángulos.

En tres dimensiones sólo existen 14 diferentes arreglos o patrones atómicos que son base de cualquier material cristalino, como se muestra en la figura 9. Estos arreglos atómicos reciben el nombre de Redes de Bravais, en honor al científico Frances que las estudió [Szwacka, 2000].

Podemos definir a las redes de Bravais como un arreglo infinito de puntos discretos con un acomodo y orientación que es exactamente igual, desde cualquiera de los puntos de la estructura.

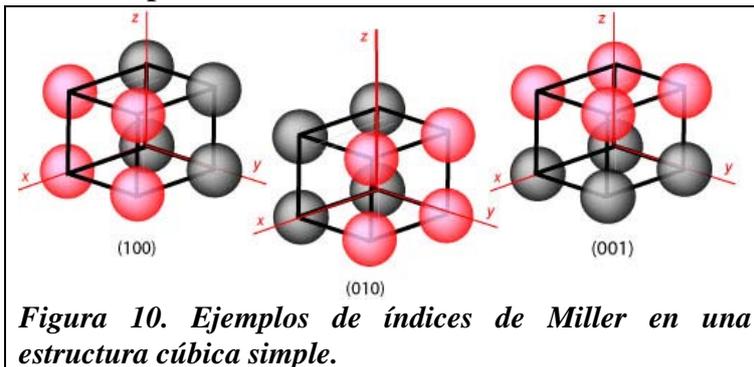


**Figura 9. Las 14 redes de Bravais.**

Cada punto en el espacio del arreglo cristalino puede ser unido mediante vectores de traslación de la forma:

$$\bar{a}_n = h_1\bar{a}_1 + h_2\bar{a}_2 + h_3\bar{a}_3 \quad (1.1)$$

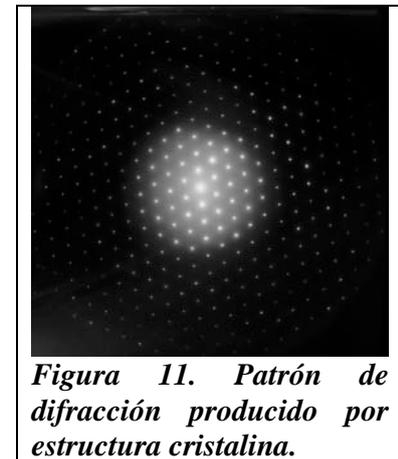
Siendo  $a_1$ ,  $a_2$  y  $a_3$  vectores no paralelos entre si, denominados *vectores primitivos* y  $h_1$ ,  $h_2$ ,  $h_3$  números enteros llamados *índices de Miller* (Figura 10). Dichos vectores primitivos dan origen a un paralelepípedo (2D) conocido como la celda primitiva. Mediante la repetición infinita de ésta, es posible obtener toda la estructura cristalina por lo que resulta de



gran importancia encontrarla. Cabe señalar que la celda primitiva sólo contiene un elemento de la estructura, por lo que es la celda de mínimo volumen.

Existen diversas formas de obtener la celda primitiva entre ellas esta el método de Wigner-Seitz, el cual consiste en dibujar líneas rectas desde un determinado elemento de la red conectándolo con los elementos más cercanos, luego se trazan líneas rectas que bisectan las primeras líneas dibujadas y finalmente la celda primitiva es el área contenida de la intersección de las bisectrices.

Los índices de Miller por su parte se utilizan como una notación abreviada para identificar ciertos planos de átomos significativos [Askeland, 1998]. Por ejemplo, los metales se deforman a lo largo de aquellos planos de átomos que están empaquetados más estrechamente. De allí su importancia al especificar la orientación de los planos cristalinos [Szwacka, 2000].

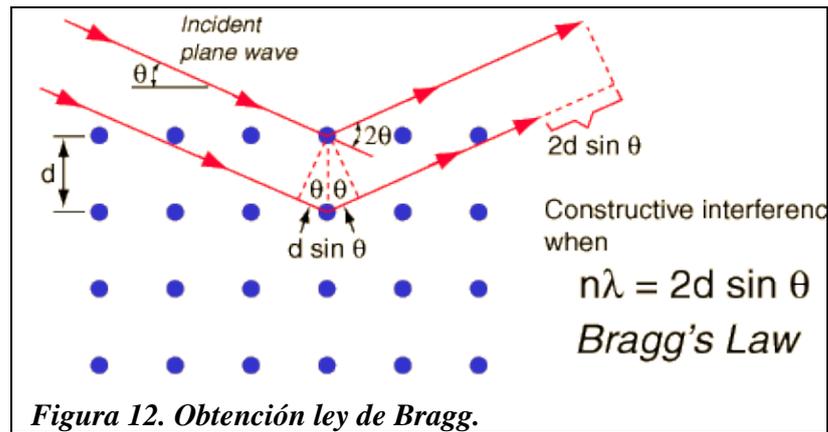


Podemos estudiar la estructura de un cristal (Figura 11) a través de la difracción de electrones (Rayos-X), así como también de la difracción de neutrones y fotones [Kittel, 2005]. Cuando un haz monocromático del mismo orden de magnitud que el espaciamiento atómico del material lo golpea, los rayos X se dispersan en todas direcciones. La mayor parte de la radiación dispersa por un átomo anula la dispersada por otros átomos. Sin embargo, los rayos X que golpean ciertos planos cristalográficos en ángulos específicos se ven reforzados [Askeland,

1998]. La diferencia de camino óptico entre dos rayos adyacentes es  $2d\sin\theta$ , donde  $\theta$  es el ángulo de incidencia (Figura 12). Para los rayos que interfieren constructivamente esta diferencia de camino debe ser un número entero de longitudes de onda, que conduce a la condición de Bragg:

$$n\lambda = 2d \sin \theta , \quad (1.2)$$

donde el entero  $n$  se conoce como el orden de la reflexión correspondiente [Kittel, 2005].



Si consideramos un sistema de puntos  $\mathbf{R}$  que constituyen una red de Bravais y una onda plana,  $e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}$ . El sistema de todos los vectores de onda  $\mathbf{K}$  que producen ondas planas con la periodicidad de cierta red de Bravais es conocida como la “red recíproca”. Podemos caracterizar a la red recíproca como un sistema de vectores de onda  $\mathbf{K}$  que satisfacen

$$e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} = 1, \quad (1.3)$$

para todo  $\mathbf{r}$  en una red de Bravais. Esta red recíproca se construye a partir del sistema de vectores primitivos de la red directa de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \bar{b}_1 &= 2\pi \frac{\bar{a}_2 \times \bar{a}_3}{\bar{a}_1 \cdot (\bar{a}_2 \times \bar{a}_3)} \\ \bar{b}_2 &= 2\pi \frac{\bar{a}_3 \times \bar{a}_1}{\bar{a}_1 \cdot (\bar{a}_2 \times \bar{a}_3)} \\ \bar{b}_3 &= 2\pi \frac{\bar{a}_1 \times \bar{a}_2}{\bar{a}_1 \cdot (\bar{a}_2 \times \bar{a}_3)} \end{aligned} \quad (1.4)$$

La celda primitiva de Wigner-Seitz de la red recíproca es conocida como la “primera zona de Brillouin”, cabe señalar que existe más de una de estas zonas, pero la información que contienen del sistema está incluida en

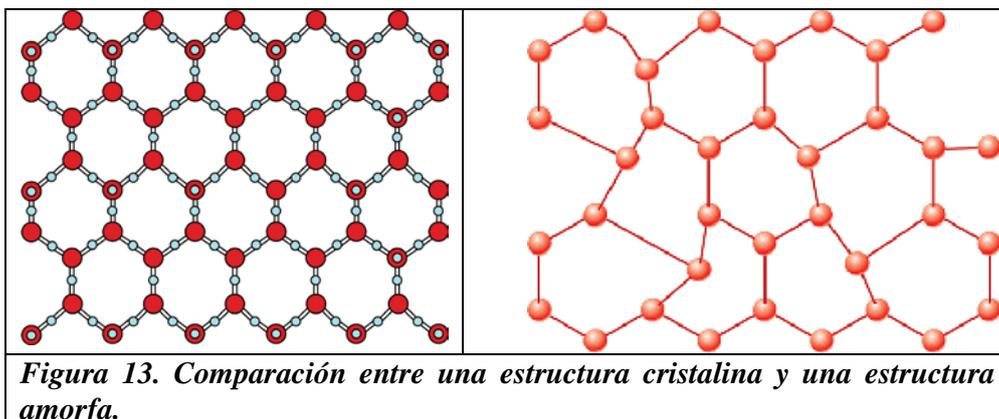
la primera zona de Brillouin; de aquí nace la importancia de encontrar y estudiar esta zona [Ashcroft, 1976].

Así como existen materiales con una estructura muy ordenada también están aquellos materiales con una estructura amorfa, algunos de ellos son parte de nuestra vida cotidiana, de este tipo de materiales se hablara en el siguiente tema.

## 1.5 Materiales Desordenados (Amorfos)

Desde tiempos muy remotos, los materiales desordenados han tenido un impacto muy importante en dos áreas claves para el desarrollo de la civilización: la economía y la energía. A fines del siglo XIX se pensaba que los electrones, con sus cargas opuestas a los núcleos, deberían tener el papel de estabilizar los sólidos, actuando como el “pegamento” que une a los átomos. Estas ideas fueron desarrolladas posteriormente –usando la mecánica cuántica, que estaba en plena fase de construcción– y ya para 1930 existía una teoría del estado sólido que explicaba diversos fenómenos con gran éxito.

En 1932 ya se sabía con certeza que los vidrios comunes no son cristales. La estructura de un vidrio es desordenada o amorfa, donde puede notarse que la estructura no es periódica de largo alcance (Figura 13) [Naomis, 2003]. Se asignó el termino “amorfo” a esta estructura antes de que la difracción de rayos X mostrara que si existe un ordenamiento, pero es de corto alcance [Reyes, 2000].



Los materiales amorfos no son algo nuevo, la misión del Apolo recuperó unos de esos materiales en la superficie lunar, que data de millones de años [Naomis, 2003]. Ejemplos de materiales desordenados

son los plásticos, los vidrios metálicos, los vidrios de espín, los vidrios calcogenoides, los cristales líquidos y los semiconductores amorfos.

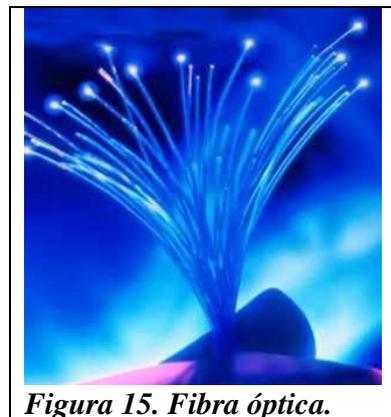
Desde un punto de vista estructural, los sólidos amorfos se clasifican según si están compuestos por redes tridimensionales no periódicas (vidrio, Figura 14), moléculas individuales de cadena larga (polímeros y plásticos) u ordenaciones intermedias entre estos 2 casos límite (cristales líquidos) [Reyes, 2000].



En el material amorfo las cadenas están más separadas que en la estructura laminar y esto se refleja en una disminución de la densidad, aunque se tenga la misma composición química.

Los factores que favorecen la formación de un sólido amorfo en lugar de uno cristalino son la alta velocidad de enfriado desde el estado líquido al sólido, la alta direccionalidad del enlace y la baja pureza del material. Las propiedades únicas de difusión iónica en los vidrios adicionados con impurezas los hacen candidatos a ser utilizados en baterías de estado sólido con gran capacidad de almacenamiento y bajo peso

Recientemente, las fibras ópticas (Figura 15), hechas a base de los mismos vidrios que descubrieron los fenicios, han producido una revolución en la transmisión de información, debido a su costo, capacidad y mínimas pérdidas energéticas [Naomis, 2003]. Así mismo la fibra óptica tiene aplicaciones en la medicina, en la tecnología láser y en los sensores. Un ejemplo interesante del uso de la comunicación por fibra óptica en la ciencia es la avanzada red desarrollada en el Gran Colisionador de Hadrones en el CERN en Ginebra que puede transferir grandes cantidades de información obtenidas por los detectores de partículas para los centros de cómputo en todo el mundo.



Debido a los revolucionarios logros, relativos a la transmisión de la luz en las fibras ópticas empleadas para la comunicación, la Real Academia Suiza de la Ciencia, otorgó la mitad del premio Nobel de Física 2009 a Charles K. Kao. La otra mitad se otorgo a dos científicos Willard S. Boyle y George E. Smith quienes inventaron el CCD (Charge-Couple Device) sensor de imagen.

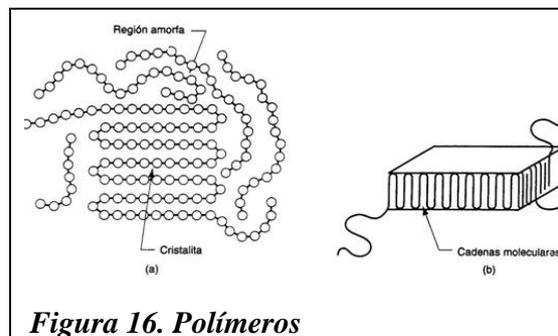
## 1.6 Estructuras Desordenadas

La estructura del vidrio es similar a la de un líquido, no existe un arreglo definido de largo alcance, pero sus propiedades elásticas son típicas de un sólido isótropo. Se obtiene en un reactor de fusión, en donde se calienta una mezcla de arena sílica y óxidos metálicos, pulverizados o granulados. La fusión forma un líquido viscoso que se hace transparente y homogéneo a una temperatura superior a 1000 °C [Reyes, 2000].

Los cationes metálicos tienen un enlace no direccional, debido a su simetría electrónica muy próxima a la esférica. Cuando los metales puros o sus aleaciones habituales son enfriados por métodos modernos, a altas velocidades ( $10^4$  a  $10^6$  °C/s), se pueden obtener materiales amorfos.

Los polímeros son compuestos moleculares de cadena larga. Su composición química es a base de C, H, y O principalmente, en algunas ocasiones pueden presentar F, N, P, S y Si entre otros. En la mayoría de los casos el C forma la columna vertebral de las cadenas. Los polímeros son resultado de la unión de moléculas simples (Monómeros) mediante una reacción química denominada polimerización. El número de monómeros en una cadena se denomina grado de polimerización y puede variar desde 100 hasta 100,000 [Reyes, 2000].

Los polímeros cuyos monómeros son relativamente sencillos en cuanto a su geometría, desarrollan cierto grado de ordenamiento formando cristales según como sean enfriados (Figura 16). Sin embargo no todo el material cristaliza. Ejemplos de materiales plásticos parcialmente cristalinos son el polietileno, polipropileno isotáctico, Nylon y el politereftalato de etilenglicol (PET) [Reyes, 2000].



**Figura 16. Polímeros**

Cuando los polímeros son sometidos a altas temperaturas se vuelven líquidos muy viscosos en los que las cadenas están constantemente en movimiento cambiando su forma y deslizándose una sobre otras. A temperaturas muy bajas, el mismo polímero se convierte un sólido duro, rígido y frágil.

Muchos de los sólidos amorfos son mecánicamente resistentes, duros extraordinariamente resistentes a la acción química, física y poseen propiedades elásticas muy valiosas. Cabe señalar que la gran mayoría de las sustancias amorfas son inútiles como materiales de construcción.

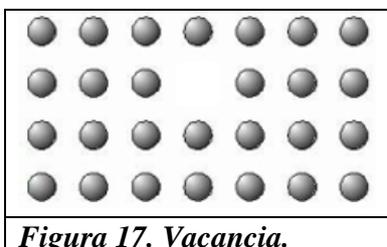
Las sustancias amorfas pueden sufrir un cambio en su plasticidad antes de estar en condiciones de ser trabajadas. Generalmente se las vuelve plásticas por algún cambio en su condición o constitución. Mientras están en este estado plástico, las sustancias son modeladas, se les da forma o se las trabaja y luego se hacen rígidas y resistentes por destrucción de plasticidad.

Muy recientemente se han fabricado aleaciones metálicas formadas por hasta unos 8 elementos, que resultan ser amorfas a velocidades moderadas de enfriamiento ( $1^{\circ}\text{C/s}$ ). En este caso, para obtener el estado amorfo, se aprovecha el “alto grado de impureza” del material.

## 1.7 Tipos de Impurezas

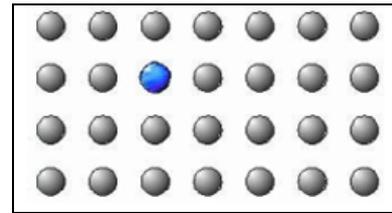
Realmente no existen los cristales perfectos ya que estos presentan varios tipos de imperfecciones y defectos, que afectan muchas de sus propiedades tanto físicas como mecánicas, también influyen en algunas propiedades de los materiales a nivel de aplicación tecnológica, por ejemplo la capacidad de formar aleaciones en frío, la conductividad eléctrica y la corrosión. Las imperfecciones se clasifican según su geometría, por ello tenemos *defectos puntuales* o de dimensión cero, *defectos lineales* o de una dimensión llamados también dislocaciones y *defectos de dos dimensiones*.

También pueden incluirse los defectos macroscópicos tales como fisuras, poros y las inclusiones extrañas.

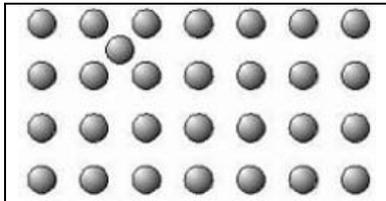


Un lugar que debería estar ocupado por un átomo a veces está vacío, este defecto recibe el nombre de *vacancia* (Figura 17). En un metal con elementos aleantes, un lugar que normalmente está ocupado por el metal huésped puede ser ocupado por otro átomo de radio atómico similar, este defecto se llama *átomo de impureza sustitucional* (Figura 18).

Cuando los átomos de impureza son considerablemente mas pequeños que los átomos del metal huésped, pueden alojarse en los huecos o intersticios de la red cristalina, este defecto se llama *átomo de impureza intersticial*. (Figura 19) [Hinojosa, 2000].



**Figura 18. Sustitucional.**

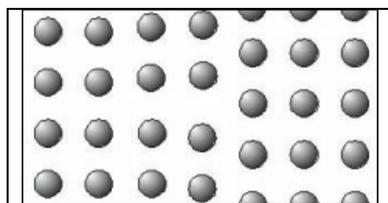


**Figura 19. Intersticial.**

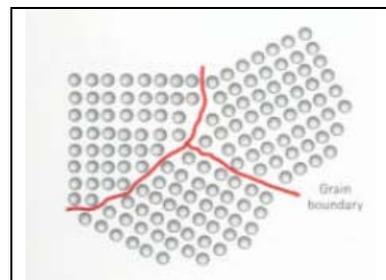
Las dislocaciones (Figura 20) son defectos que dan lugar a una distorsión de la red centrada en torno a una línea. Se crean durante la solidificación de los sólidos cristalinos o por deformación plástica, por condensación de vacantes. Entre los tipos de dislocaciones que podemos encontrar están, las de cuña, las helicoidales, (los cristales con frecuencia exhiben mezcla de estas dislocaciones) las de borde y las de tornillo.

Las dislocaciones de cuña, las helicoidales, (los cristales con frecuencia exhiben mezcla de estas dislocaciones) las de borde y las de tornillo.

También tenemos defectos interfaciales o superficiales, los cuales son límites o bordes o planos que dividen un material en regiones (Figura 21), cada una de las cuales tiene la misma estructura cristalina pero diferente orientación.



**Figura 20. Dislocación.**



**Figura 21. Borde o límite de grano.**

Hasta ahora hemos realizado una descripción de algunos de los defectos o impurezas presentes en los sólidos. A continuación haremos una particular revisión de sólidos que no son ni ordenados ni desordenados.

## 1.8 Materiales Aperiódicos

La cristalografía se encarga de caracterizar todos los tipos de simetrías posibles de los arreglos atómicos de los sólidos. Después de dos siglos de estudios efectuados en el área de la cristalografía, solo se validaba la premisa que la materia sólida se podía ordenar de dos formas: amorfa y cristalina. Dichas afirmaciones perduraron hasta que en noviembre de 1984, D Shechman, I. Blech, D. Gratias and J. W. Cahn en el U.S. National Bureau of Standards (ahora el National Institute of Standards and Technology) anunciaron que habían observado mediante la difracción de electrones una simetría 5 en un enfriamiento rápido de aluminio con 10 a 14 por ciento de manganeso (aleación de 86% de Al y 10% - 14% de Mg) [Shechman, 1984].

Posteriormente se encontraron otros con simetrías rotacionales de 8, 10 y 12 por los investigadores Ranganathan, Bendersky, Nissen, Kuo, y sus colaboradores. Estas aleaciones eran meta-estables y habían sido transformadas mediante tratamientos de calor sobre las mezclas cristalinas en equilibrio de fases. Otros cuasicristales que han sido descubiertos son las aleaciones de: Al-Li-Cu, Al-Fe-Cu, Al-Ni-Co, el Al-Cu-Co y Al-Pd-Mn

Después de las inevitables controversias que se presentaron en un inicio, la clave para entender estas nuevas simetrías finalmente fue encontrada en una generalización más amplia de la cristalografía, situándose en el hiperespacio, por sobre las 3-dimensiones.

La investigación de los materiales cuasicristalinos ha demostrado varias características deseables como alta dureza, baja fricción, resistencia a la oxidación y corrosión, baja conductividad térmica y eléctrica e inusuales propiedades ópticas. A la vez, posee mucha fragilidad a gran volumen, por lo que no es trivial fabricar cuasicristales grandes; esto ha impulsado a diversos grupos de investigación a lo largo del mundo al estudio de las estructuras y las aplicaciones de los cuasicristales, tratando de mantener las propiedades químicas, mecánicas y ópticas al reducir la fragilidad.

Las aleaciones cuasicristalinas son materiales relativamente duros. Por ejemplo la dureza de Vickers del cuasicristal decágono  $\text{Al}_{72}\text{Co}_{15}\text{Cu}_{20}\text{Si}_3$ , medidos a la temperatura del laboratorio es 9.5 GPa y para el icosaédrico  $\text{Al}_{72}\text{Pd}_{20}\text{Mn}_8$  es 7.8 GPa. En comparación con los valores de dureza para el acero que van desde 1.8 a 7.7 GPa.

Las propiedades mecánicas de materiales cuasicristalinos cambian drásticamente a temperaturas elevadas. En el  $\text{Al}_{72}\text{Pd}_{20}\text{Mn}_8$  la dureza disminuye con la temperatura, alcanzando aproximadamente 0.2 GPa a los 700 °C, una temperatura a la cual este material puede deformarse con gran facilidad. El Icosaedro  $\text{Al}_{70.5}\text{Pd}_{21}\text{Mn}_{8.5}$  se ha vuelto una clase de material de referencia para los estudios de propiedades físicas. Esto también se sostiene para los experimentos de las deformaciones plásticas dado que es la única aleación icosaédrica que puede hacerse crecer por la técnica Czochralski.

Los cuasicristales también se caracterizan por tener baja conductividad térmica y baja difusión térmica. Estas propiedades son importantes para las aplicaciones en capas de superficies, como reforzamiento de materiales blandos. Presentan una expansión térmica similar a elementos como el acero, pero menores que el Al. Más recientemente se han estudiado las fases icosaédricas basadas en el titanio. El descubrimiento de nuevas fases icosaédricas de aleaciones tales como el Al-Pd-Re y Y-Mg-Zn, y la observación de precipitados con morfología icosaédrica evidente en aceros inoxidable.

## 1.9 Estructuras Aperiódicas

Las fases cuasicristalinas fueron descubiertas por primera vez en la transición metálica de la aleación de aluminio rico en Mn en el rango de composición 10-14%. El templado de esa aleación desde una fundición, produjo una mezcla de aluminio y fases cuasicristalinas, las cuales fueron de poca dimensión. Luego, otra clase de fases cuasicristalinas fueron descubiertas en aleaciones de Mg-Al-Zn.

Los cuasicristales son materiales con orden de largo alcance perfecto, pero sin periodicidad de traslación. Lo primero se manifiesta en la ocurrencia de los puntos sostenidos de la difracción y el último, en la presencia de una simetría rotatoria no cristalográfica. Los cuasicristales los podemos clasificar a través de su estructura o bien mediante su composición, lo cual se muestra en la tabla No. 1.

Tabla No. 1					
Clasificación de la Cuasi-cristales					
Estructura		Composición			
2D	3D	Octagonal	Decagonal	Dodeca- gonal	Icosa- hedral
Octagonal con simetría 8	Icosahedral (ejes: 12x5, 20x3,30x2)	V-Ni-Si	Al-TM <sub>1</sub>	Cr-Ni	Al-Mn
Decagonal con simetría 10		Cr-Ni-Si	Al-Ni-Co*	V-Ni	Al-Mn-Si
Dodecagonal con simetría 12		Mn-Si	Al-Cu-Mn	V-Ni-Si	Al-Li-Cu*
		Mn-Fe-Si	Al-Cu-Fe		Al-Pd-Mn*
			Al-Cu-Ni		Al-Cu-Fe
			Al-Cu-Co*		Al-Mg-Zn
			Al-Cu-Co-Si*		Zn-Mg-RE
			Al-Pd-Mn*		Ti-TM <sub>2</sub>
			V-Ni-Si		V-Ni-Si
			Cr-Ni		Pd-U-Si

TM<sub>1</sub> = Ir, Pd, Pt, Os, Ru, Rh, Mn, Fe, Co, Ni, Cr

RE = La, Ce, Nd, Sm, Gd, Dy, Ho, Y

TM<sub>2</sub> = Fe, Mn, Co, Ni

\* = Fases estables [S. Weber, <http://jcrystal.com/ste@enweber/qc.html>]

Estas estructuras se pueden modelar por varios métodos como son inflación, adición, corte y proyección, etc. Las formas para generar una red aperiódica son abordadas en los subsecuentes temas.

## 1.9.1 Método de Corte y Proyección

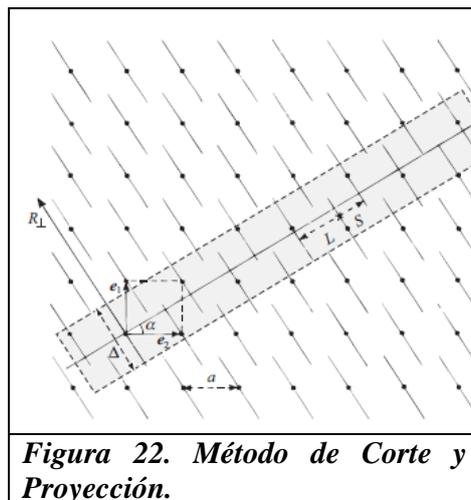
Podemos generar una red cuasiperiódica unidimensional a partir de una red periódica bidimensional, como la que se muestra en la Figura 22, empezando desde una red bidimensional cuadrada con parámetro de red  $a$ ,

$$\rho(x, y) = \sum \delta(x - na) \cdot \delta(y - ma), \quad (1.5)$$

donde  $n, m$  son enteros.

Se dibuja una línea recta  $R_{\parallel}$  en un ángulo de inclinación  $\alpha$ . Si la pendiente de esta línea es irracional, entonces esta línea no podrá tocar cualquier punto de la red cuadrada. Los puntos de la red proyectados sobre la línea  $R_{\parallel}$  pueden formar una red cuasiperiódica, siempre que los puntos de la red proyectada estén limitados dentro de una franja con un ancho  $\Delta$  a lo largo de  $R_{\perp}$  que es perpendicular a  $R_{\parallel}$ .

Al considerar el caso en que  $\tan \alpha = \tau$ , siendo  $\tau = (1 + \sqrt{5})/2 = 1.618034$  la razón áurea, el intervalo entre los puntos vecinos proyectados será  $L = a \cos \alpha$  ó  $S = a \sin \alpha$ , mientras que el ancho de la franja  $\Delta = a(\cos \alpha + \sin \alpha)$ , obteniéndose de este modo la red de Fibonacci a lo largo de  $R_{\parallel}$ . Este es el denominado *método de corte y proyección* [Duan, 2005].



Esta es una de la formas en las que podemos obtener una cadena de Fibonacci, otras formas de generarla se abordan en la siguiente sección.

## 1.9.2 Métodos de Inflación, Deflación y Adición

Recordando el problema de la cría de conejos que fue tratado por el matemático Fibonacci en 1202: Los pares de conejos grandes y pequeños, A y B respectivamente, los cuales después de una generación, un par de conejos grandes tienen un par de pequeños conejos, mientras que un par de pequeños conejos crecen hasta ser conejos grandes, de acuerdo a la siguiente regla de sustitución:

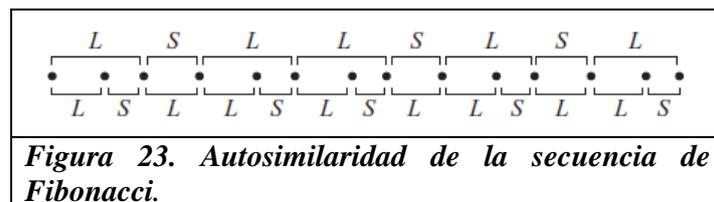
$$A \rightarrow AB, B \rightarrow A \quad (1.6)$$

Al emplear la regla anterior se obtiene la secuencia de la siguiente forma:

$$B \rightarrow A \rightarrow AB \rightarrow ABA \rightarrow ABAAB \rightarrow ABAABABA \rightarrow \dots \quad (1.7)$$

Este es el denominado *método de inflación*. La red de Fibonacci muestra una estructura autosimilar (Figura 23). La autosimilaridad implica que existen reglas de inflación y deflación para transformar una secuencia de Fibonacci en otra con diferente escala. Esto se logra mediante la siguiente regla de sustitución:

$$L \rightarrow LS, S \rightarrow L \quad (1.8)$$



Esta es la forma de realizar la *deflación* [Duan, 2005]. En cambio para el caso de la secuencia de Thue Morse se tiene la siguiente regla de sustitución:

$$L \rightarrow LS, S \rightarrow SL, \quad (1.9)$$

Implica que:

$$L \rightarrow LS \rightarrow LSSL \rightarrow LSSL LLS \rightarrow LSSL LLS LLS LLS \rightarrow \dots \quad (1.10)$$

y para la secuencia de Doble periodo se tiene:

$$L \rightarrow LS, S \rightarrow LL \quad (1.11)$$

entonces:

$$L \rightarrow LS \rightarrow LSLL \rightarrow LSLLLSLS \rightarrow LSLLLSLSLSLLLSLL \rightarrow \dots \quad (1.12)$$

Otra manera de obtener la secuencia de Fibonacci es mediante el empleo de la relación de recurrencia:

$$F_n = F_{n-1} + F_{n-2} \quad (1.13)$$

Donde  $n$  es la generación de la secuencia. Para utilizar esta relación de recurrencia se requieren de dos parámetros iniciales  $F_1=A$  y  $F_2 = AB$ ; a esto se le denomina *método de adición*. El cual se muestra de en la siguiente en la tabla N<sub>o</sub>. 2.

Tabla N <sub>o</sub> . 2 Secuencias de Fibonacci		
Generación ( $n$ )	$A \rightarrow AB, B \rightarrow A$	$F_n = F_{n-1} + F_{n-2}$
1	A	A
2	AB	AB
3	ABA	ABA
4	ABAAB	ABAAB

Esta no es la única secuencia aperiódica que podemos encontrar, como ya habíamos mencionado también existe *la secuencia de Doble Periodo, la secuencia de Thue Morse y la secuencia de Rudin Shapiro*.

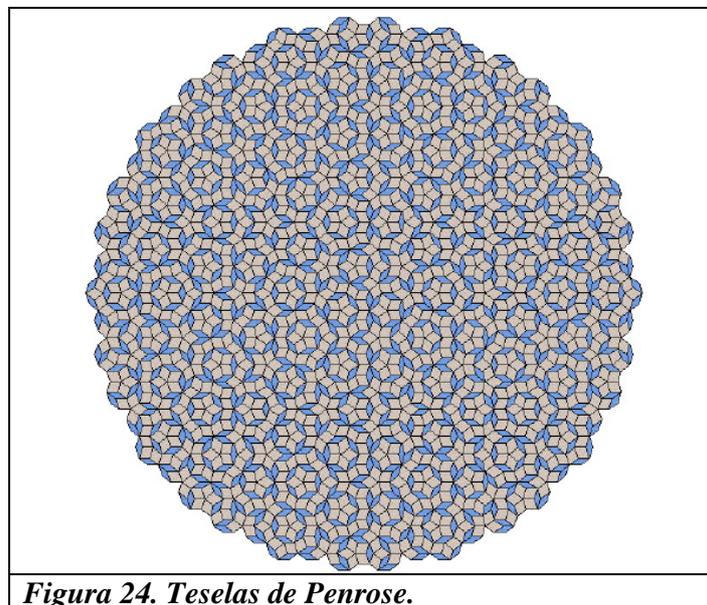
En la tabla N<sub>o</sub>. 3 muestran las primeras generaciones correspondientes a la secuencia de Thue Morse y de Doble Periodo, así como también las expresiones de recurrencia que pueden ser empleadas para su construcción.

Tabla N <sub>o</sub> . 3 Doble Periodo y Thue Morse		
Formula Recurrencia	$DP_n = DP_{n-1} + 2 * DP_{n-2}$	$TM_n = TM_{n-1} + TM_{n-1}^*$
Generación ( $n$ )	Doble Periodo	Thue Morse
1	A	A
2	AB	AB
3	ABAA	ABBA
4	ABAAABAB	ABBABAAB
5	ABAAABABABAA ABAA	ABBABAABBAAB ABBA

Note que la secuencia de Thue Morse tiene una simetría de espejo por construcción. No solo tenemos sólidos aperiódicos unidimensionales sino que también se modelan sistemas aperiódicos bidimensionales.

### 1.9.3 Mosaicos de Penrose

Los aspectos tanto matemáticos como estéticos de los mosaicos cuasiperiódicos han atraído la atención mucho antes que se descubrieran los cuasicristales [Penrose, 1974]. Bruijn ha desarrollado importantes técnicas para la construcción y análisis de los mosaicos de Penrose [Bruijn, 1981]. Aunque los mosaicos de Penrose son originalmente mosaicos 2D (Figura 24).



*Figura 24. Teselas de Penrose.*

Existen diferentes modelos de mosaicos que reflejan una simetría de rotación diferente al decagonal, así como las simetrías de dimensión superior. Una versión de los mosaicos de Penrose es un mosaico rómbico, compuesto por dos formas de baldosas, denominadas usualmente como “flaco” y “gordo” las cuales la podemos ver en la figura 25. Las reglas de correspondencia para formar el patrón rómbico de Penrose fueron formalmente expresadas por Bruijn [Bruijn, 1981]. Las reglas son las siguientes:

- 1.- Cada frontera de cualquier mosaico de Penrose puede ser marcado por una simple o una doble cabeza de flecha, así que cada uno de los mosaicos “gordo” ó “flaco” esta marcado de la misma forma.

2.- Existen sólo 8 distintas configuraciones de marcas de flechas alrededor de los vértices; las cuales se muestran en la figura 26.

Mientras estas reglas restringen las posibles configuraciones de los bloques básicos de construcción, existen adicionales restricciones; las cuales son clasificadas en sitio forzado, sitio no forzado y sitio marginal.

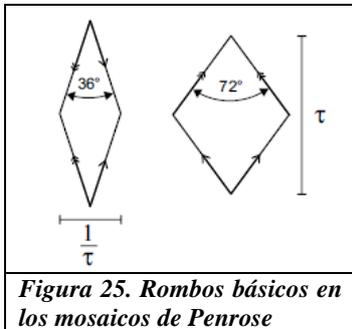


Figura 25. Rombos básicos en los mosaicos de Penrose

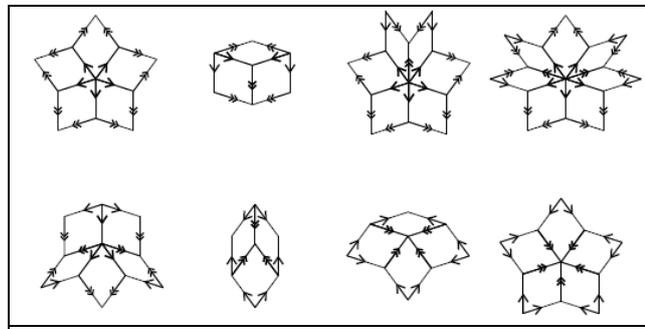


Figura 26. Las ocho configuraciones de vértices permitidos con el borde de flecha de los mosaicos de Penrose

Una forma alternativa de crear un mosaico de Penrose es mediante el empleo de dos poligonales cerrados de cuatro lados: uno cóncavo denominado “dardo” y otro convexo con forma de barrilete denominada “cometa”. Este par de figuras se deducen de un rombo cuyos ángulos internos son de 72 y 108 grados mostrados en la figura 27.

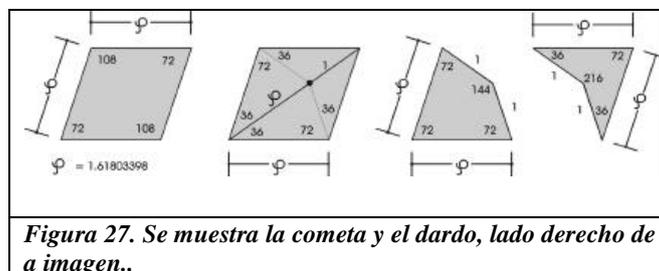


Figura 27. Se muestra la cometa y el dardo, lado derecho de a imagen..

Para evitar producir teselados periódicos, debemos evitar unir los dardos y las cometas de manera tal que formen un rombo.

La proporción áurea en que se presentan las cantidades de elementos componentes, sumada a la proporción áurea entre las dimensiones de los módulos, impone una “irracionalidad ordenada”, comparable a la serie numérica de Fibonacci.

## 1.10 Funciones Cuasiperiódicas

Las funciones cuasiperiódicas son una generalización de funciones periódicas y aparecen de forma natural en el modelado de fenómenos relacionados con varias frecuencias.

Una función  $f: \mathfrak{R} \rightarrow \mathfrak{R}$  es *cuasiperiódica* si existen constantes reales  $\omega_1, \dots, \omega_d$  y una función continua  $F: \mathfrak{R}^d \rightarrow \mathfrak{R}$ ,  $2\pi$ -periódica en cada variable de modo que podemos expresar a  $f$  como:

$$f(t) = F(\omega_1 t, \dots, \omega_d t). \quad (1.14)$$

Para cada  $t \in \mathfrak{R}$ ,  $\omega_1, \dots, \omega_d$  son las *frecuencias básicas* o *frecuencias simples*. El vector

$$\omega = (\omega_1, \dots, \omega_d)^a, \quad (1.15)$$

es también llamada la *vector de frecuencia*. El hecho de que  $F$  sea continua y  $2\pi$ -periódica en cada variable significa que uno puede considerar ésta como una función de  $T^d \rightarrow \mathfrak{R}$ . Aquí  $T$ , el toro, es el espacio cociente

$$T = \mathfrak{R} / (2\pi\mathbb{Z}). \quad (1.16)$$

Estos elementos serán llamados *ángulos*. Para superar la falta de unicidad, podemos imponer la condición que las frecuencias básicas de una función cuasiperiódica,  $\omega_1, \dots, \omega_d$ , son *racionalmente independientes*. Esto significa que solo la combinación de enteros  $k_1, \dots, k_d \in \mathbb{Z}$  pueden satisfacer la relación

$$k_1 \omega_1 + k_2 \omega_2 + \dots + k_d \omega_d = 0 \quad (1.17)$$

de forma con  $k_1 = \dots = k_d = 0$ . En general, una función es cuasiperiódica si puede ser expresada como una superposición de funciones cuyos períodos son inconmensurables (es decir, su proporción es irracional) uno respecto del otro.

# Capítulo 2 Transporte Electrónico

## 2.1 Introducción

Entre las teorías de la conductividad eléctrica en metales basada en el promedio de las velocidades se encuentra la desarrollada por Drude en 1900. Lorentz en 1905 reinvestigó el problema usando la ecuación de transporte de Boltzmann y un modelo simplificado para colisiones entre los electrones y átomos en la red. En 1928 Sommerfeld recalculó las conductividades desarrolladas en la teoría de Lorentz remplazando la estadística clásica por la estadística de Fermi-Dirac, así mismo asumió que el tiempo de relajación puede ser definido como función de la energía de los electrones solamente [Dekker, 1958].

La comprensión de muchas de las propiedades de los electrones en los cristales aperiódicos han sido obtenidas mediante el estudio de modelos simples, entre ellos el más empleado es el modelo de amarre fuerte. Al igual que los fonones, los electrones se comportan de una manera más variada en sistemas cuasiperiódicos que en los periódicos. Las funciones de onda pueden ser extendidas, localizadas o críticas, estas últimas se presentan en la transición metal-aislante, en sistemas desordenados y en cristales aperiódicos. Las funciones de onda críticas pueden decaer como una ley de potencias [Janssen, 2007]. En el presente capítulo se desarrollan el modelo de amarre fuerte, las funciones de Green como medio para obtener la densidad de estados y la transmitancia para sistemas aperiódicos dentro del formalismo de Landauer en una y dos dimensiones.

## 2.2 Funciones de Bloch

Las funciones de onda que son soluciones a las ecuaciones de Schrodinger con un potencial periódico propuestas por F Bloch son de la forma:

$$\Psi_k(\mathbf{r}) = u_k(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (2.1)$$

donde  $u_k(\mathbf{r})$  es un potencial periódico, es decir,  $u_k(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = u_k(\mathbf{r})$ , para toda  $\mathbf{T}$ , vector de traslación en una red de Bravais [Kittel, 2005].

Por lo que el teorema de Bloch se expresa:

Cualquier solución (físicamente aceptable) de la ecuación de Schrodinger en un potencial periódico toma la forma de una onda plana viajera modulada en la escala microscópica por una apropiada función con la periodicidad de la red [Grosso, 2003].

Así entonces la función de onda de un electrón de la forma (2.1) es denominada función de Bloch y puede ser descompuesta en una suma de ondas viajeras. Las funciones de Bloch pueden ser ensambladas en paquetes de onda para representar electrones que se propagan libremente a través del campo potencial del núcleo del ión.

## 2.3 Amarre Fuerte

Existen dos puntos de inicio diametralmente opuestos para obtener las eigen-energías,  $E_n(\mathbf{k})$ , y las eigen-funciones  $\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ , en sólidos cristalinos. Uno, el modelo de electrón casi libre (NFE, en sus siglas en ingles), toma el punto de vista que en un sólido el potencial total efectivo que siente cada electrón es suficientemente débil para ser tratado mediante el método de perturbación. Otro punto de vista es considerar que los sólidos están compuestos por átomos los cuales han sido traídos desde una distancia relativamente infinita. Es entonces natural tratar de expresar las funciones de onda desconocidas como una combinación lineal de orbitales atómicos (LCAO, en sus siglas en ingles). Para simplificar un poco el problema se considera un átomo por celda primitiva del cristal, sólo un orbital atómico por átomo, esta versión simplificada del LCAO es denominada “modelo de amarre fuerte” (TBM, por sus siglas en ingles) [Economou, 2006]

Este modelo se basa en las funciones de Wannier, las cuales son transformadas de Fourier de las funciones de Bloch, localizadas en las posiciones atómicas; son ortonormales entre sí y forman una base alternativa para las soluciones de la ecuación de Schrodinger [Ashcroft, 1976]. El hamiltoniano de amarre fuerte (TBH) es de la forma:

$$H = \sum_{\ell} |\ell\rangle \varepsilon_{\ell} \langle \ell| + \sum_{\ell m} |\ell\rangle V_{\ell m} \langle m| \quad (2.2)$$

donde cada estado  $|\ell\rangle$  es un orbital atómico centrado en el sitio  $\ell$ ; los sitios  $\{\ell\}$  forman una red. La cantidad  $\varepsilon_{\ell}$  es la energía de un electrón localizado en el sitio  $\ell$ ,  $V_{\ell m}$  es la matriz de elementos para la transferencia de un electrón del sitio  $\ell$  al  $m$ .

Así entonces, cuando los potenciales atómicos son muy fuertes y los electrones se mueven esencialmente alrededor de un átomo simple con solo una pequeña probabilidad de estar cerca de los átomos vecinos, entonces el modelo de amarre fuerte es más efectivo [Duan, 2005]

## 2.4 Función de Green y Densidad de Estados

Las funciones de Green pueden ser definidas como una solución de una ecuación diferencial homogénea de tipo [Economou, 2006]:

$$[z - L(r)]G(r, r'; z) = \delta(r - r'), \quad (2.3)$$

sujeto a ciertas condiciones de frontera para  $r$  ó  $r'$  en la superficie  $S$  del dominio  $\Omega$  de  $r$  y  $r'$ . Donde estamos considerando a  $z$  como una variable compleja con  $\lambda \equiv \text{Re} \{z\}$ ,  $s \equiv \text{Im} \{z\}$  y  $L(r)$  un operador diferencial independiente del tiempo, lineal y hermitiano que posee un sistema completo de eigen-funciones  $\{\phi_n(r)\}$ , es decir,

$$L(r)\phi_n(r) = \lambda_n\phi_n(r), \quad (2.4)$$

donde  $\{\phi_n(r)\}$  satisface las condiciones de frontera como  $G(r, r'; z)$ . El subíndice  $n$  puede referirse a mas de un índice único específico para cada eigen-función y le correspondiente eigen-valor. El sistema  $\{\phi_n(r)\}$  puede ser considerado como ortonormal sin pérdida de generalidad, es decir,

$$\int_{\Omega} \phi_n^*(r)\phi_m(r)dr = \delta_{nm}, \quad (2.5)$$

la completitud del sistema  $\{\phi_n(r)\}$  significa que,

$$\sum_n \phi_n(r)\phi_n^*(r') = \delta(r - r'). \quad (2.6)$$

Cabe señalar que  $n$  puede pertenecer a un conjunto de índices que pueden tomar cualquiera de los valores discretos (para la parte discreta del espectro de  $L$ ) y/o valores continuos (para la parte continua del espectro de  $L$ ).

Es más usual usar la función de Green en la notación de Dirac, teniendo la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
 (z - L)G(z) &= 1, \\
 L|\phi_n\rangle &= \lambda_n |\phi_n\rangle, \\
 \langle \phi_n | \phi_m \rangle &= \delta_{nm}, \\
 \sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| &= 1
 \end{aligned}
 \tag{2.7}$$

de las ecuaciones anteriores podemos obtener:

$$G(z) = \sum_n \frac{|\phi_n\rangle \langle \phi_n|}{z - \lambda_n},
 \tag{2.8}$$

de forma explícita esta ecuación se escribe:

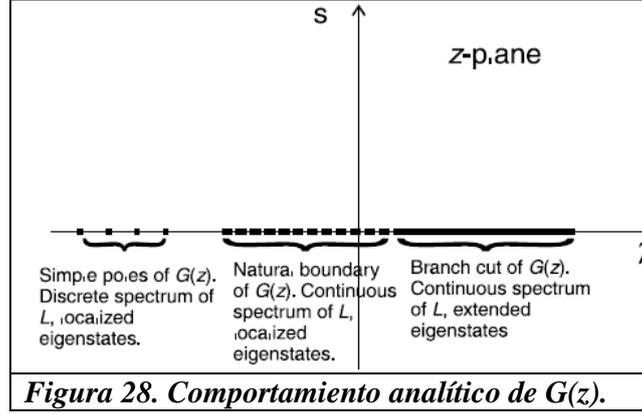
$$G(z) = \sum_n' \frac{|\phi_n\rangle \langle \phi_n|}{z - \lambda_n} + \int dc \frac{|\phi_c\rangle \langle \phi_c|}{z - \lambda_c}.
 \tag{2.9}$$

Como  $L$  es un operador hermitiano, todos los eigen-valores  $\{\lambda_n\}$  son reales. Por lo tanto si  $\text{Im}\{z\} \neq 0$ , entonces  $z \neq \{\lambda_n\}$ , lo cual significa que  $G(z)$  es una función analítica en el plano  $z$  complejo excepto en los puntos o porciones del eje  $z$  real que corresponde a los eigen-valores de  $L$ .

Si  $z$  coincide con alguno de los eigen-valores discretos de  $L$  ( $z = \lambda$ ),  $G$  no existe, como se puede observar en la expresión (2.8),  $G(z)$  tiene un polo simple en la posición de los eigen-valores discretos. Si  $z$  pertenece al espectro continuo de  $L$ , entonces  $G$  usualmente existe, pero no está unívocamente definido por que uno puede añadir a cualquier  $G$  particular, la solución general de la ecuación homogénea correspondiente a (2.3).

Dos expresiones particulares,  $G^+$  y  $G^-$ , son usualmente empleadas en el caso donde el espectro continuo de  $L$  corresponde a una rama de corte. Para sistemas desordenados infinitos, parte del espectro continuo puede dar origen a la denominada *frontera natural*. El comportamiento analítico de  $G(z)$  está resumido en la figura 28.

Debido a que  $L$  es hermitiano, todos los eigen-valores son reales; por lo tanto las singularidades de  $G(z)$  están en el eje  $z$  real.



Así entonces, para las ramas de corte de  $G(z)$  ( las cuales corresponden a un espectro continuo asociado con eigen-estados extendidos ) podemos definir los límites laterales como siguen:

$$\begin{aligned}
 G^+(r, r'; \lambda) &\equiv \lim_{s \rightarrow 0^+} G(r, r'; \lambda + is), \\
 G^-(r, r'; \lambda) &\equiv \lim_{s \rightarrow 0^+} G(r, r'; \lambda - is),
 \end{aligned}
 \tag{2.10}$$

los correspondientes operadores  $G^+(\lambda)$ ,  $G^-(\lambda)$ .

$$G^\pm(\lambda) = \lim_{s \rightarrow 0^+} G(\lambda \pm is)
 \tag{2.11}$$

Podemos expresar la discontinuidad,  $\tilde{G}(\lambda)$ , en términos de la función delta:

$$\tilde{G}(\lambda) = G^+(\lambda) - G^-(\lambda) = -2\pi\delta(\lambda - L),
 \tag{2.12}$$

o en la representación  $r, r'$

$$\tilde{G}(r, r'; \lambda) = -2\pi i \left[ \sum'_n \delta(\lambda - \lambda_n) \phi_n(r) \phi_n^*(r') - \int \delta(\lambda - \lambda_c) \phi_c(r) \phi_c^*(r') dc \right]
 \tag{2.13}$$

Que después de integrarlo con respecto de “r” se obtiene:

$$\begin{aligned}
 \int dr G^\pm(r, r'; \lambda) &= \int dr \langle r | G^\pm(\lambda) | r \rangle \equiv Tr\{G^\pm(\lambda)\} \\
 &= P \sum_n \frac{1}{\lambda - \lambda_n} \mp i\pi \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n)
 \end{aligned}
 \tag{2.14}$$

La cantidad  $\sum_n \delta(\lambda - \lambda_n)$  es la densidad de estados (DOS) en  $\lambda$ ,  $N(\lambda)$ ; donde  $N(\lambda)d\lambda$  nos da el número de estados en el intervalo  $[\lambda, \lambda + d\lambda]$ . Así mismo la DOS por unidad de volumen esta dado como:

$$N(\lambda) = \int \rho(r; \lambda) dr, \quad (2.15)$$

donde

$$\rho(r; \lambda) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im}\{G^\pm(r, r; \lambda)\} = -\frac{1}{2\pi i} \tilde{G}(r, r; \lambda), \quad (2.16)$$

por lo tanto

$$N(\lambda) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im}\{\text{Tr}G^\pm(\lambda)\}, \quad (2.17)$$

de esta forma obtenemos la densidad de estados. Por otra parte la función de Green asociada al hamiltoniano de amarre fuerte es:

$$G(z) = \sum_k \frac{|k\rangle\langle k|}{z - E(k)}, \quad (2.18)$$

siendo

$$|k\rangle = \sum_\ell c_\ell |\ell\rangle = c_0 \sum_\ell e^{ik\ell} |\ell\rangle, \quad (2.19)$$

y en una dimensión

$$E(k) = \varepsilon_0 + 2t \cos(ka). \quad (2.20)$$

Entonces la matriz de elementos  $G(z)$  son:

$$\begin{aligned} G(\ell, m; z) &\equiv \langle \ell | G(z) | m \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\langle \ell | \mathbf{k} \rangle \langle \mathbf{k} | m \rangle}{z - E(\mathbf{k})}, \\ &= \frac{\Omega}{N(2\pi)^d} \int_{1BZ} dk \frac{e^{ik\ell(\ell-m)}}{z - E(z)} \end{aligned}, \quad (2.21)$$

La integración debe estar restringida a la primera zona de Brillouin (1BZ). Así entonces sustituyendo la ecuación (2.20) en la (2.21).

$$\begin{aligned}
G(\ell, m; z) &= \frac{L}{2\pi N} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk \frac{e^{ika(\ell-m)}}{z - \varepsilon_0 - 2t \cos(ka)} \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\Phi \frac{e^{i\Phi(\ell-m)}}{z - \varepsilon_0 - 2t \cos(\Phi)}, \quad \Phi = ka.
\end{aligned} \tag{2.22}$$

realizando un cambio de variable  $\omega = e^{i\Phi}$  a lo largo del círculo unitario implica que:

$$G(\ell, m; z) = \frac{1}{2\pi i |t|} \oint d\omega \frac{\omega^{|\ell-m|}}{\omega^2 + 2x\omega + 1}, \tag{2.23}$$

donde

$$x = \frac{z - \varepsilon_0}{B}, \quad B = 2|t|. \tag{2.24}$$

Nótese que el denominador dentro del integrando tiene dos raíces:

$$\begin{aligned}
\rho_1 &= -x + \sqrt{x^2 - 1} \\
\rho_2 &= -x - \sqrt{x^2 - 1}
\end{aligned}, \tag{2.25}$$

Donde  $x$  pertenece al intervalo  $-1 \leq x \leq 1$ , entonces las raíces se encuentran dentro del círculo unitario y la integral (2.23) no está bien definida. Por lo tanto, esta condición nos da el espectro continuo de  $H$ , el cual se encuentra en el eje real  $E$  entre  $\varepsilon_0 - 2|t|$  y  $\varepsilon_0 + 2|t|$ . Para  $z$  que no coincide con esta línea singular, se obtiene  $G(\ell, m; z)$  por el método de residuos:

$$G(\ell, m; z) = \frac{1}{|t|} \frac{\rho_1^{|\ell-m|}}{\rho_1 - \rho_2} = \frac{1}{\sqrt{(z - \varepsilon_0)^2 - B^2}} \rho_1^{|\ell-m|}. \tag{2.26}$$

Para  $z$  que coincide con el espectro:

$$G^\pm(\ell, m; z) = \frac{\mp i}{\sqrt{B^2 - (E - \varepsilon_0)^2}} \left( x \pm i\sqrt{1 - x^2} \right)^{|\ell-m|}, \tag{2.27}$$

donde  $\varepsilon_0 - B \leq E \leq \varepsilon_0 + B$ ,  $x = (E - \varepsilon_0)/B$ .

Por tanto la densidad de estados por sitio de una cadena periódica infinita está dada por:

$$\rho(E) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im} \{ G^{\pm}(\ell, \ell; E) \} = \frac{\theta(B - |E - \varepsilon_0|)}{\pi \sqrt{B^2 - (E - \varepsilon_0)^2}} \quad (2.28)$$

Este problema no está restringido a casos de una dimensión si no que se puede llevar a sistemas multidimensionales por medio de las técnicas de convolución.

## 2.5 Método de Convolución

Para poder emplear el método de convolución es necesario que el hamiltoniano del sistema sea separable. El hamiltoniano de amarre fuerte en dos dimensiones es:

$$\begin{aligned}
 H^{2D} &= \sum_{i,j} \varepsilon_0 |i\rangle |j\rangle \langle i| \langle j| + V_{(i-1,j),(i,j)} |i-1\rangle |j\rangle \langle i| \langle j| \\
 &\quad + V_{(i+1,j),(i,j)} |i+1\rangle |j\rangle \langle i| \langle j| \\
 &\quad + V_{(i,j-1),(i,j)} |i\rangle |j-1\rangle \langle i| \langle j| \\
 &\quad + V_{(i,j+1),(i,j)} |i\rangle |j+1\rangle \langle i| \langle j| \\
 &= \left\{ \sum_i \frac{\varepsilon_0}{2} |i\rangle \langle j| + V_{(i-1,j),(i,j)} |i-1\rangle \langle i| + V_{(i+1,j),(i,j)} |i+1\rangle \langle i| \right\} \left\{ \sum_j |j\rangle \langle j| \right\} \\
 &\quad + \left\{ \sum_i |i\rangle \langle i| \right\} \left\{ \sum_j V_{(i,j-1),(i,j)} |j-1\rangle \langle j| + V_{(i,j+1),(i,j)} |j+1\rangle \langle j| + \frac{\varepsilon_0}{2} |j\rangle \langle j| \right\} \\
 &= H_x \otimes I_y + I_x \otimes H_y \\
 &= H_x + H_y \\
 \therefore H^{2D} &= H_x + H_y \tag{2.29}
 \end{aligned}$$

Como pudimos demostrar el hamiltoniano de amarre fuerte en dos dimensiones es separable. Esto implica que:

$$\begin{aligned}
 H\Psi &= (H_x \otimes I_y + I_x \otimes H_y)\Psi \\
 &= (E_a \otimes I_y + I_x \otimes E_B)\Psi
 \end{aligned} \tag{2.30}$$

Por otra parte tenemos que la función de Green asociada al hamiltoniano en dos dimensiones esta dada como:

$$G_{(r,j)(k,l)}(z) = \sum_{a,B} \frac{\langle r|a\rangle \langle a|k\rangle \langle j|B\rangle \langle B|l\rangle}{z - (E_a + E_B)}. \tag{2.31}$$

Y aplicando una propiedad de la función delta de Dirac:

$$f(y) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(y-x) dy. \tag{2.32}$$

Se tiene que:

$$G_{(r,j)(k,j)}(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{a,B} \frac{\langle r|a\rangle\langle a|k\rangle\langle j|B\rangle\langle B|l\rangle}{z - (E_a + y)} \delta(y - E_B) dy, \quad (2.33)$$

recordando:

$$-\frac{1}{\pi} \text{Im}[G_{lk}(z)] = \sum_a \langle l|a\rangle\langle a|k\rangle \delta(E - E_a); \text{ donde } z = E + i\eta, \quad (2.34)$$

y separamos las sumas:

$$G_{(r,j)(k,l)}(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_a \frac{\langle r|a\rangle\langle a|k\rangle}{z - (E_A + y)} \sum_B \langle j|B\rangle\langle B|l\rangle \delta(y - E_B) dy \quad (2.35)$$

Se obtiene:

$$\begin{aligned} G_{(r,j)(k,l)}(z) &= \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{a,B} \frac{\langle r|a\rangle\langle a|k\rangle}{z - (E_A + y)} \left[ -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta' \rightarrow 0} \text{Im}[G_{jl}(y + i\eta')] \right] dy \\ \Rightarrow &= -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta' \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_a \frac{\langle r|a\rangle\langle a|k\rangle}{(z - y) - E_A} \text{Im}[G_{jl}(y + i\eta')] dy \\ \Rightarrow &= -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta' \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} G_{rk}(z - y) \text{Im}[G_{jl}(y + i\eta')] dy \end{aligned} \quad (2.36)$$

$$\begin{aligned} DOS^{2D}(z) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im}[G_{(r,j)(k,l)}(z)] = -\frac{1}{\pi} \left[ -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta' \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} G_{jl}(y + i\eta') dy \text{Im}[G_{rk}(z - y)] \right] \\ \Rightarrow DOS^{2D}(z) &= \frac{1}{\pi^2} \lim_{\eta' \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im}[G_{rk}(z - y)] \text{Im} G_{jl}^{\perp}(y + i\eta') dy \end{aligned}$$

Otro camino que podemos seguir para obtener la  $DOS^{2D}$  de una forma discreta es:

$$G_{(r,j)(k,l)}(z) = \int_{-\infty}^{\infty} G_{rk}(z - y) \sum_B \langle j|B\rangle\langle B|l\rangle \delta(y - E_B) dy \quad (2.37)$$

$$\begin{aligned} G_{(r,j)(k,l)}(z) &= \sum_B \int_{-\infty}^{\infty} G_{rk}(z - y) \langle j|B\rangle\langle B|l\rangle \delta(y - E_B) dy \\ \Rightarrow &= \frac{1}{\Omega} \sum_B \int_{-\infty}^{\infty} G_{rk}(z - y) \delta(y - E_B) dy \quad \text{donde } \frac{1}{\Omega} = \langle j|B\rangle\langle B|l\rangle \end{aligned} \quad (2.38)$$

Recordando nuevamente las propiedades de la función delta de Dirac

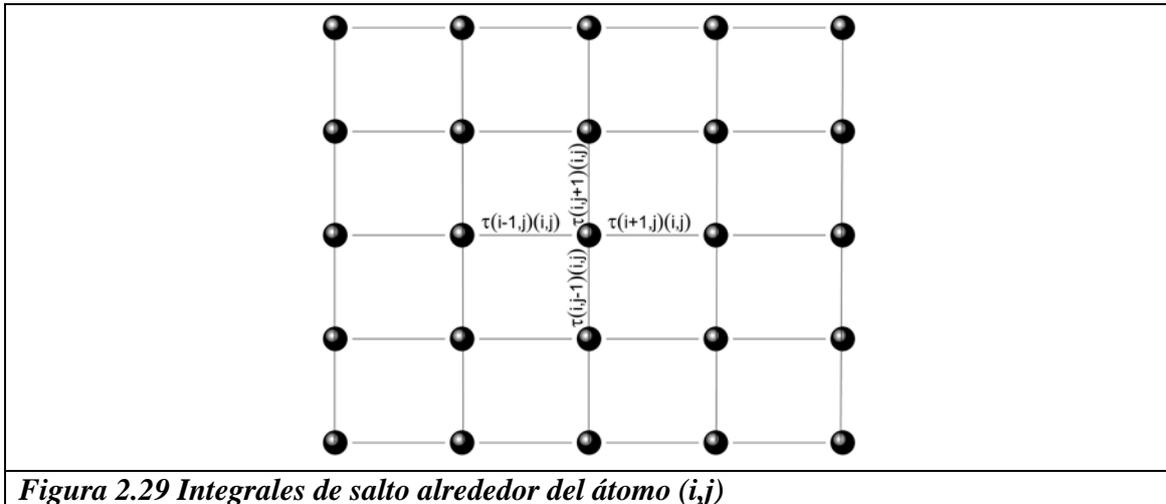
$$\Rightarrow G_{(r,j)(k,l)}(z) = \frac{1}{\Omega} \sum_B G_{rk}(z - E_B) \quad (2.39)$$

Para obtener la densidad de estados tenemos

$$DOS = -\frac{1}{\pi} \text{Im} [G_{jj}(z)] \quad (2.40)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow DOS^{2D}(z) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} [G_{(r,j)(k,l)}(z)] \\ &= -\frac{1}{\pi} \frac{1}{\Omega} \sum_B \text{Im} [G_{rr}(z - E_B)] \end{aligned} \quad (2.41)$$

$$\Rightarrow DOS^{2D}(z) = -\frac{1}{\pi} \frac{1}{\Omega} \sum_B \text{Im} \left[ \underbrace{G_{rr}(z - E_B)}_{\substack{\text{Esta función de Green} \\ \text{corresponde a la parte x}}} \right]$$



**Figura 2.29** Integrales de salto alrededor del átomo  $(i,j)$

De esta forma se obtiene la densidad de estados para un sistema bidimensional. A continuación haremos una breve descripción de algunos métodos para estudiar la conductividad eléctrica.

## 2.6 Modelo de Drude

El descubrimiento del electrón en 1897 por J. J. Thomson trajo consigo un gran impacto en las teorías de la estructura de la materia y sugirió un mecanismo para la conducción en metales. Drude construyó una teoría de la conducción eléctrica y térmica mediante la aplicación de la teoría de los gases, (aun existiendo una fuerte interacción electromagnética electrón-electrón y electrón-ión) considerando al denso gas de electrones como un gas neutro diluido, con ciertas modificaciones. Las suposiciones básicas del modelo son:

- 1) Se desprecian las interacciones electrón-electrón y electrón-ión. En ausencia de un campo magnético un electrón realiza un movimiento uniforme a largo de una línea. Caso contrario, cada electrón efectúa un movimiento que se describe mediante las leyes de movimiento de Newton.
- 2) Las colisiones entre electrones son eventos instantáneos y abruptamente alteran la velocidad de los mismos, es decir, ellos no tienen interacción antes ni después de la colisión.
- 3) Se supone que la probabilidad por unidad de tiempo con que un electrón experimente una colisión es  $1/\tau$ , donde  $\tau$  se le denomina tiempo de relajación, el cual es el tiempo entre dos colisiones consecutivas.
- 4) Se considera que los electrones alcanzan un equilibrio térmico con sus alrededores a través de las colisiones.

De acuerdo a estas suposiciones Drude desarrolló la primera teoría de la conducción electrónica de los metales. A continuación, abordaremos la conductividad  $dc$  para un metal [Ashcroft, 1976].

## 2.7 Conductividad Eléctrica *dc* para metales

En un conductor metálico que posee  $n$  electrones por unidad de volumen, donde todos los electrones se mueven a una velocidad promedio ( $\mathbf{v}$ ) y paralela a ella una densidad de corriente neta ( $\mathbf{J}$ ) que esta dada por:

$$\mathbf{J} = -nev . \quad (2.42)$$

En cualquier punto del conductor metálico los electrones se encuentran moviéndose en diversas direcciones con distintas energías cinéticas. En ausencia de un campo eléctrico externo la velocidad promedio de los electrones es cero por lo que la densidad de corriente es cero. Por otra parte cuando se aplica un campo eléctrico ( $\mathbf{E}$ ) los electrones se aceleran a partir de cero durante un tiempo  $\tau$ . Por lo tanto, en sólidos isotrópicos la velocidad promedio de los electrones es:

$$\mathbf{v}_{\text{prom}} = -\frac{e}{m} \tau \mathbf{E} , \quad (2.43)$$

y recordando que la resistividad está definida como una constante de proporcionalidad entre el campo eléctrico ( $\mathbf{E}$ ) y la densidad de corriente ( $\mathbf{J}$ ) como:

$$\mathbf{E} = \rho \mathbf{J} . \quad (2.44)$$

Entonces se deduce la ley de ohm dentro del modelo de Drude, la cual es la siguiente:

$$\mathbf{J} = \frac{ne^2\tau}{m} \mathbf{E} = \sigma_0 \mathbf{E} . \quad (2.45)$$

Donde la conductividad eléctrica *dc* ( $\sigma_0$ ) esta dada por:

$$\sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m} . \quad (2.46)$$

Esta expresión fue el resultado que obtuvo Drude para calcular la conductividad eléctrica *dc* en metales [Ashcroft, 1976].

## 2.8 Conductancia de Landauer

La conductancia ( $G$ ) de una muestra tridimensional se relaciona con la conductividad eléctrica ( $\sigma$ ) por

$$G = \sigma \frac{W}{L}, \quad (2.47)$$

donde  $L$  es la longitud y  $W$  el área de la sección transversal de la muestra. Para un conductor conectado a dos reservorios su conductancia puede escribirse como [Landauer, 1992]

$$G = \frac{2e^2}{h} MT, \quad (2.48)$$

siendo  $M$  el número de canales transversales y  $T$  es la probabilidad promedio sobre los  $M$  canales de que un electrón inyectado por un reservorio sea transmitido al otro. La ecuación (2.48) puede deducirse partiendo de un conductor ideal, es decir, sin colisiones ( $\tau \rightarrow \infty$ ). Si adicionalmente el sistema es homogéneo la ecuación conduce a que la función de distribución es una constante que puede normalizarse como uno. Para un solo canal de conducción la corriente puede calcularse como:

$$I = -\frac{e}{\pi} \int \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} dk = -\frac{e}{\pi \hbar} \int_{\mu_1}^{\mu_2} dE = -\frac{e(\mu_2 - \mu_1)}{\pi \hbar}, \quad (2.49)$$

donde  $\mu_1$  y  $\mu_2$  son los potenciales químicos de los reservorios que se conectan al conductor. Ahora bien, sabemos que  $\mu_2 - \mu_1 = -eV$ , siendo  $V$  la diferencia de voltaje aplicado. Por lo tanto

$$G = \frac{1}{V} = \frac{2e^2}{h}. \quad (2.50)$$

Si insertamos obstáculos al canal, el cual transmite electrones con un probabilidad  $T$ , la conductancia se reduce a

$$G = \frac{2e^2}{h} T. \quad (2.51)$$

Si el conductor tiene  $M$  canales transversales, la conductancia del sistema esta dada por la ecuación (2.48)

Cabe mencionar que en el formalismo de Landauer la distribución del potencial es una consecuencia del flujo de electrones en el conductor, contrario a lo convencional donde se considera a la corriente como una consecuencia del voltaje aplicado. Ahora, si el potencial se promedia sobre una región suficientemente grande para remover las oscilaciones debido a interferencias, la transmitancia ( $T$ ) en la ecuación (2.48) se reemplaza por  $T / (1-T)$  [Imry, 1999], esto es,

$$G = \frac{2e^2}{h} M \frac{T}{1-T}. \quad (2.52)$$

La principal diferencia entre las ecuaciones (2.48) y (2.52) radica en el tipo de saturadores que se conectan al sistema. Si estos son fuentes de corriente entonces se debe emplear la ecuación (2.52). En cambio, si ellos son conductores perfectos entonces debe utilizarse la ecuación (2.48) [Economou, 1981]. También, se cree que la ecuación (2.52) determina únicamente la conductancia del sistema, mientras que la ecuación (2.48) evalúa la conductancia del sistema junto con sus contactos [Datta, 1995]. En suma, dentro del formalismo de Landauer la conductancia eléctrica es proporcional a la transmitancia del sistema, la cual discutiremos a continuación.

## 2.9 Transmitancia

Consideremos una cadena finita de  $N$  átomos conectada a dos saturadores periódicos semi-infinitos en sus dos extremos. Las auto-energías y las integrales de salto entre los vecinos más cercanos del sistema son respectivamente  $\{\varepsilon_n\}$  y  $\{t_{n,n+1}\}$  y los parámetros de los saturadores son  $\varepsilon_0$  y  $t$ . Dentro del formalismo de amarre fuerte la ecuación de Schrodinger estacionaria puede representarse matricialmente de la siguiente forma:

$$\mathbf{C}_{n+1} = \mathbf{T}_n \mathbf{C}_n, \quad (2.53)$$

donde  $\mathbf{T}_n$  es la matriz de transferencia

$$\mathbf{T}_n = \begin{pmatrix} \frac{E - \varepsilon_n}{t_{n,n+1}} & -\frac{t_{n,n-1}}{t_{n,n+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.54)$$

y  $\mathbf{C}_n$ , el vector de las amplitudes de la función de onda en la base de Wannier:

$$\mathbf{C}_n = \begin{pmatrix} C_n \\ C_{n-1} \end{pmatrix}, \quad (2.55)$$

para una cadena no periódica, la sucesión de matrices de transferencia sigue la secuencia de ordenamiento de los átomos y cuyo producto es:

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}_n \mathbf{T}_{n-1} \cdots \mathbf{T}_1 = \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix}. \quad (2.56)$$

La anterior expresión describe la propagación de un electrón a lo largo de dicha cadena. Consideremos una energía  $E$  dentro de la banda permitida de la cadena, ya que en caso contrario, no hay propagación del electrón, las ondas planas en los saturadores tienen la siguiente forma:

$$\Psi_n(k) = \begin{cases} Ae^{ikna} + Be^{-ikna}, & n \leq 1 \\ Ce^{ikna} + De^{-ikna}, & n \geq N \end{cases}. \quad (2.57)$$

Para el caso en el que el electrón incide en el extremo izquierdo ( $n = 1$ ), tenemos que  $k > 0$ ,  $A = 1$ ,  $B = r$ ,  $C = \chi$  y  $D = 0$ , donde  $r$  y  $\chi$  son respectivamente las amplitudes de reflectancia y transmitancia, las cuales satisfacen la relación:

$$|\chi|^2 + |r|^2 = 1, \quad (2.58)$$

de la ecuación (2.57) se sigue que:

$$\begin{pmatrix} \chi e^{ik(N+1)a} \\ \chi e^{ikNa} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ika} + r e^{-ika} \\ 1 + r \end{pmatrix}. \quad (2.59)$$

Por lo que encontramos [Suto, 1994]

$$\chi = \frac{2i(\sin ka)e^{-ikNa}}{\tau_{11}e^{-ika} + \tau_{12} - e^{ika}(\tau_{21}e^{-ika} + \tau_{22})}, \quad (2.60)$$

y

$$r = \frac{\tau_{11}e^{ika} + \tau_{12} - e^{ika}(\tau_{21}e^{ika} + \tau_{22})}{\tau_{11}e^{-ika} + \tau_{12} - e^{ika}(\tau_{21}e^{-ika} + \tau_{22})}, \quad (2.61)$$

donde el vector de onda  $k$  se relaciona con  $E$  y  $\varepsilon_0$  a través de la relación de dispersión de los saturadores, es decir,

$$\cos ka = \frac{E - \varepsilon_0}{2t}. \quad (2.62)$$

Por lo que la transmitancia ( $T$ ) es:

$$T(E) = |\chi|^2 = \frac{4 - (E/t)^2}{\left[ \tau_{21} - \tau_{12} + (\tau_{22} - \tau_{11})E/2t \right]^2 + (\tau_{22} + \tau_{11})^2 (1 - E^2/4t^2)}. \quad (2.63)$$

La cual se relaciona con la conductancia del sistema dentro del formalismo de Landauer como se ha discutido en la sección anterior.

Para estudiar la transmitancia en dos dimensiones se ocupó la técnica de convolución, esto es posible debido a que el hamiltoniano del sistema es separable demostrado en la sección 2.5 por lo que la transmitancia en dos dimensiones la podemos escribir como:

$$\begin{aligned} T^{2D}(E) &= \sum_{E_B} T(E - E_B) \\ &= \sum_{E_B} \frac{4 - [(E - E_B)/t]^2}{\left[ \tau_{21} - \tau_{12} + (\tau_{22} - \tau_{11})(E - E_B)/2t \right]^2 + (\tau_{22} + \tau_{11})^2 \left[ 1 - (E - E_B)^2/4t^2 \right]} \end{aligned} \quad (2.64)$$

Ahora ya tenemos la herramienta necesaria para el análisis de la densidad de estados y la conductividad eléctrica  $dc$  para sistemas aperiódicos tanto unidimensionales como bidimensionales cuyos resultados se presentan en los siguientes capítulos.

# Capítulo 3. Resultados

## Densidad de Estados

### 3.1 Introducción

Los sistemas de baja dimensionalidad han sido estudiados por su simplicidad matemática, debido a que son muy útiles como límites analíticos de los sistemas tridimensionales. Más aun, los sistemas de baja dimensión son inestables ante perturbaciones dado que tiene un número reducido de primeros vecinos. Las propiedades de transporté son enteramente diferentes en dichos sistemas, debido a la localización de las excitaciones [Wang, 1999].

En el presente capítulo se muestran los resultados obtenidos para la densidad de estados por medio de los métodos de renormalización para una dimensión y de renormalización más convolución para dos dimensiones, todo dentro del formalismo de amarre fuerte para los tres sistemas aperiódicos: Thue Morse, Doble Período y Fibonacci.

### 3.2 Una Dimensión

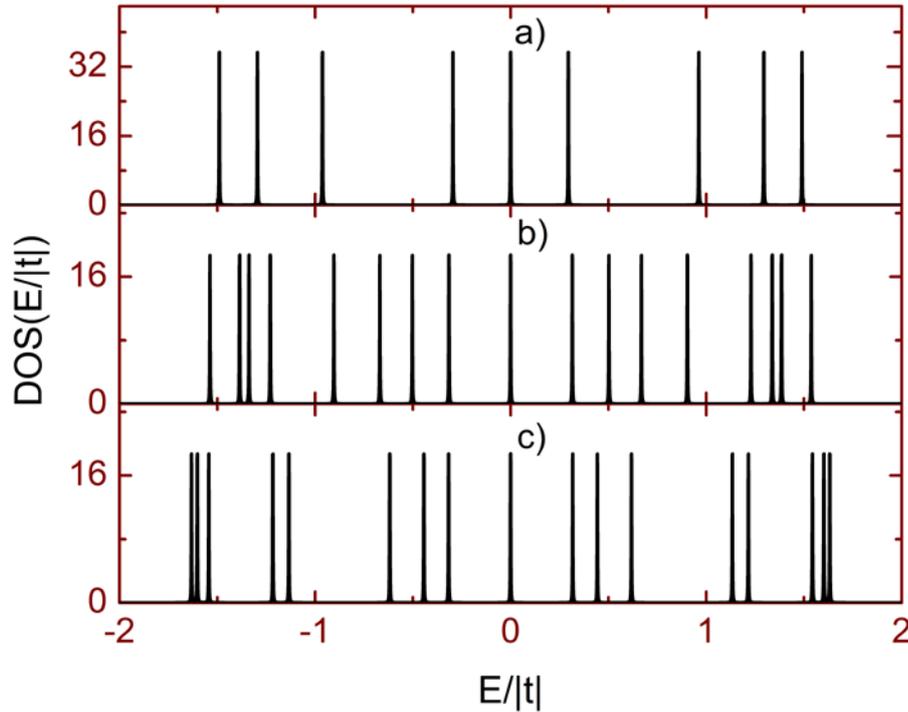
Al aplicar los métodos de renormalización que desarrollamos para la densidad de estados (*DOS*) de los tres diferentes sistemas aperiódicos, mostramos en la figura 3.1 los espectros de *DOS* contra la energía (*E*) para a)  $n=5$  con 9 átomos, b)  $n=5$  con 17 átomos y c)  $n=5$  con 17 átomos para sistemas de Fibonacci, Doble Período y Thue Morse, respectivamente. Los parámetros empleados fueron: auto-energías de sitios nulas e integrales de salto  $t_A=\tau t$  y  $t_B=t$  con una parte imaginaria de la energía ( $\eta$ ) igual a  $10^{-3}t$ . Nótese, como la altura de los picos es la misma en todos los espectros y que tenemos el mismo número de picos que de estados, dado que en una dimensión cualquier sistema es no degenerado. La altura de estos picos se obtiene a partir de la expresión 3.1, al calcular la parte imaginaria de la traza de la función de Green como se muestra a continuación:

$$\begin{aligned} DOS(E+i\eta) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im}(\text{Tr}G^+(E+i\eta)) \\ \Rightarrow DOS(E+i\eta) &= -\frac{1}{\pi} \left( -\frac{\eta}{(E-E_n)+\eta^2} \right) \end{aligned} \quad (3.1)$$

Los picos del espectro se encuentran cuando  $E$  es igual a  $E_n$ , por lo que de la expresión anterior se sigue:

$$\begin{aligned} \Rightarrow DOS(E+i\eta) &= \frac{1}{\pi} \left( \frac{\eta}{\eta^2} \right), \\ \Rightarrow DOS(E+i\eta) &= \frac{1}{\pi\eta}. \end{aligned} \quad (3.2)$$

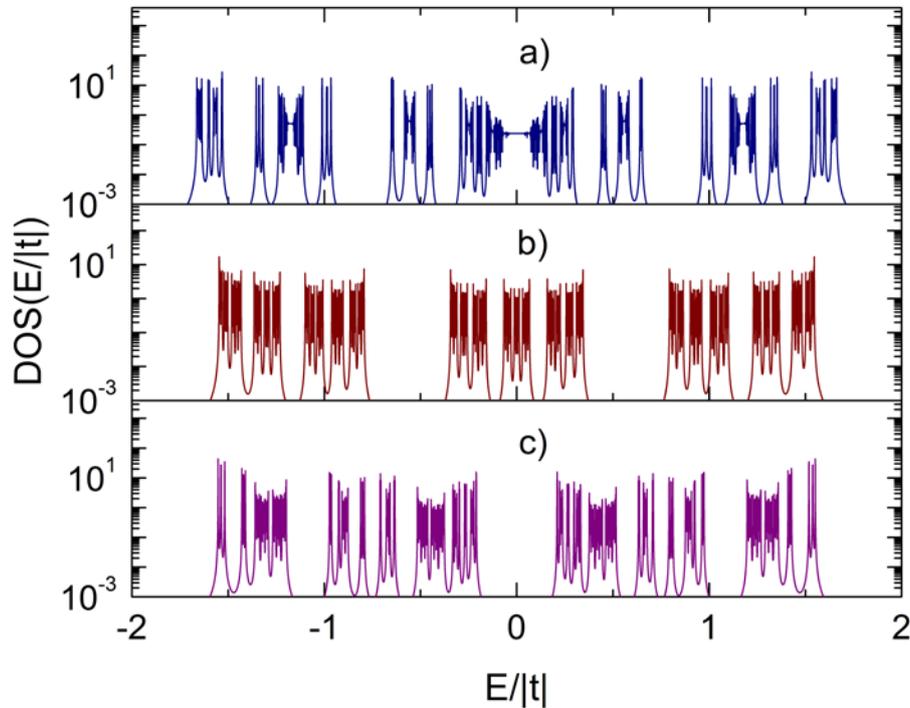
Entonces la altura de los picos viene siendo el inverso de  $\pi\eta$ .



**Figura 3.1** Densidad de estados ( $DOS$ ) versus energía ( $E$ ), a) cadena de Fibonacci de generación  $n=5$  con 9 átomos, b) cadena de Doble Período de generación  $n=5$  con 17 átomos y c) cadena de Thue Morse del mismo tamaño del anterior. Los parámetros utilizados fueron: energía de sitio nulas, integrales de salto  $t_A=\tau t$ ,  $t_B=t$  y la parte imaginaria de la energía ( $\eta$ ) igual a  $10^{-3}t$ . Estos sistemas no contienen saturador.

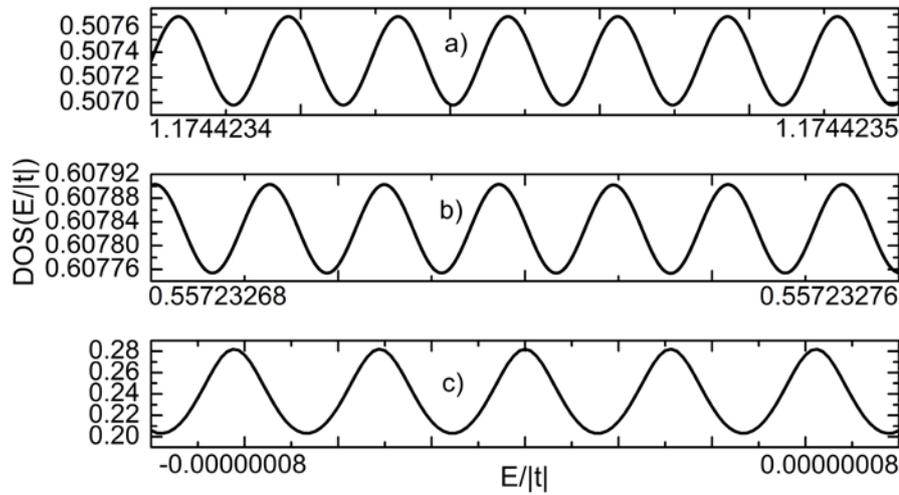
La figura 3.2 muestra los espectros de  $DOS$  versus la energía considerando energías de sitio nulas e integrales de salto  $t_A=\tau t$  y  $t_B=t$ , tomando la parte imaginaria de la energía igual a  $10^{-4}t$  para generaciones a)  $n=28$  con 134217729 átomos en sistemas unidimensionales de Thue Morse, b)  $n=42$  con 433494438 átomos en una cadena de Fibonacci y c)  $n=28$  para el sistema de Doble Período con la misma cantidad de átomos que en (a). Obsérvese la abertura de gap en el espectro (c) en comparación con el espectro del sistema periódico, el cual muestra dos singularidades de *van Hove* cerca del ancho de banda como es reportado en la literatura. El ancho de banda de los espectros es más pequeño debido a que se considero  $t_A$  menor que  $t$ . Además, los espectros b) y c) guardan cierta similitud debido

a la forma de construcción de las cadenas, ésta es apreciable en las tablas N<sub>o.</sub> 2 y N<sub>o.</sub> 3 del capítulo anterior, la principal diferencia radica en un gap en energía igual a cero que posee el sistema de Doble Período, que se conserva para toda generación.



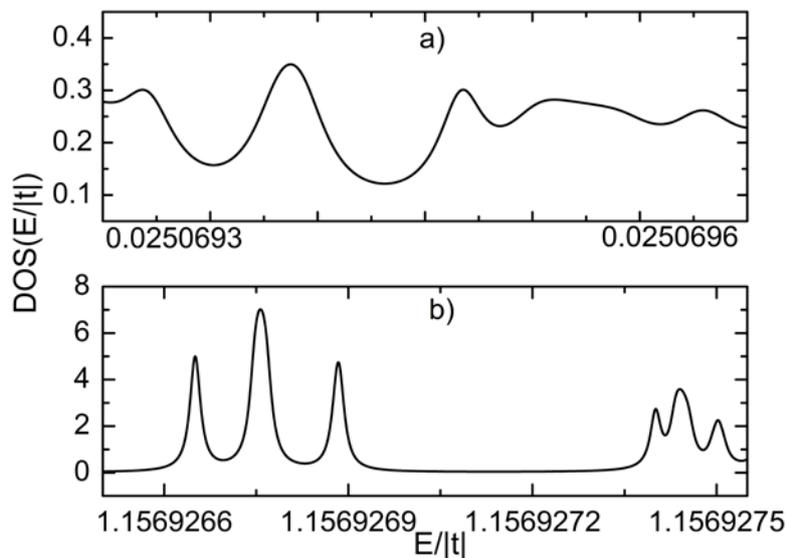
**Figura 3.2** DOS contra la energía para a) Thue Morse de  $n=28$  con 134217729 átomos, b) Fibonacci de  $n=42$  con 433494438 átomos y c) Doble Período con el mismo tamaño del sistema (a). Los parámetros son los mismos que en la figura 3.1 excepto la parte imaginaria que es igual a  $10^{-4} t$ . Todos los sistemas están conectados a dos saturadores semi-infinitos periódicos.

Más aún, el espectro de  $DOS$  en la Fig. 3.2 a) presenta gaps, solo que aparentan ser pseudo-gaps debido a que la parte imaginaria de la energía no es cero. Estos sistemas están conectados a dos saturadores semi-infinitos periódicos. También en este espectro se pueden apreciar zonas en donde la densidad de estados parece constante; el valor de la energía en el centro de cada zona corresponde a una energía de estado transparente (coeficiente de transmisión igual a uno), estas energías se mostrarán en el capítulo siguiente. La figura 3.3 nos muestra una ampliación del espectro de densidad de estados alrededor de tres diferentes energías en la cadena de Thue Morse, a)  $E= 1.17442345t$ , b)  $E= 0.55723272t$  y c)  $E=0$  nótese que el espectro no es una constante en estas regiones sino que presenta oscilaciones periódicas. Contario a lo observado cuando la energía no es de estado transparente como lo muestra la figura 3.4, alrededor de a)  $E= 0.0247745t$  y b)  $E= 1.15745t$ .



**Figura 3.3** Amplificación de DOS alrededor de energías de estado transparente, para a)  $E = 1.17442345t$ , b)  $E = 0.55723272t$  y c)  $E = 0$ , con los mismos parámetros que la figura 3.2.

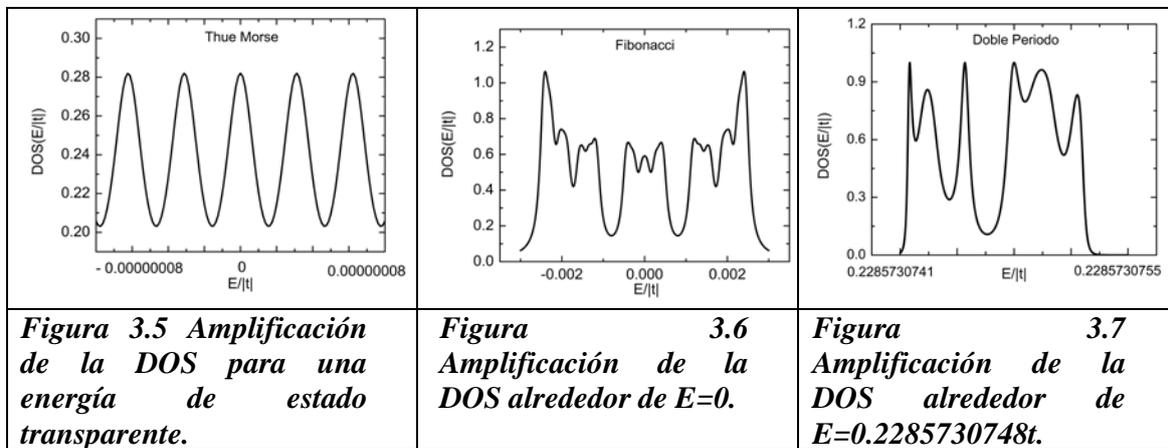
Todos los sistemas estudiados anteriormente están conectados a dos cadenas semi-infinitas periódicas con energías de salto  $t$  y auto-energías iguales a cero.



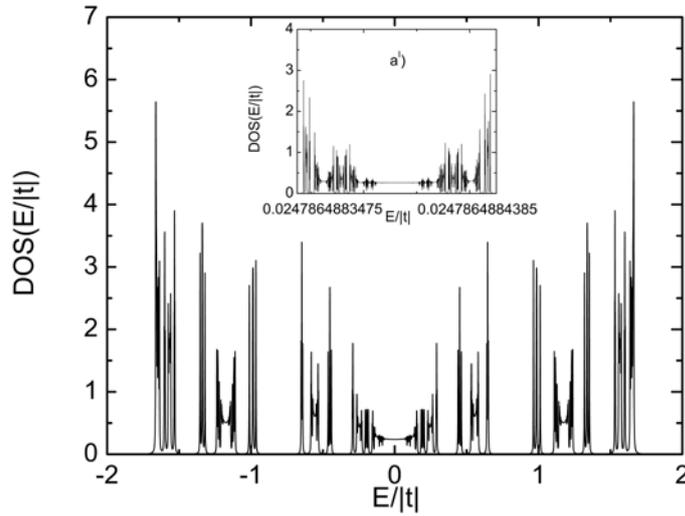
**Figura 3.4** Amplificación de DOS alrededor de energías de estado no transparentes, para a)  $E = 0.0250696t$  y b)  $E = 1.1569275t$ , con los mismos parámetros que la figura 3.2.

Es conocido que para una cadena de Fibonacci existe un estado transparente en energía igual a cero cada 6 generaciones, nosotros encontramos que tanto la cadena de Thue Morse como la de Doble Período

presentan más de un estado transparente, este número de estados se incrementa conforme va creciendo el tamaño del sistema en comparación con el único estado que presenta Fibonacci. Las figuras 3.5, 3.6 y 3.7 nos muestran una amplificación del espectro de  $DOS$  versus la energía para un estado transparente en las cadenas de Thue Morse, Fibonacci y Doble Período, respectivamente. En los dos primeros la energía se encuentra en cero en cambio para Doble Período se encuentra en  $0.2285730748t$ . Se han conservado los parámetros empleados en la Fig 3.2. Como podemos apreciar tanto el espectro de Fibonacci como el de Doble Período no presentan las oscilaciones que presenta el de Thue Morse por lo que se concluye que los estados transparentes son de diferente naturaleza, es decir, no son tan robustos ya que no tienen estados muy cercanos de alta conductividad.



En la sección 1.9.2 del capítulo 1 se mostró de forma matemática que los espectros de estos sistemas son auto-similares. La figura 3.8 muestra el espectro de  $DOS$  versus la energía para una cadena de Thue Morse de generación 55 con 18014398509481985 átomos, se usaron los mismos parámetros que en la Fig. 3.2. Nótese que la figura 3.8a' muestra una amplificación alrededor de  $E= 0.02478648836675t$ , la cual presenta el mismo espectro que la figura 3.8. Más aun, si se volviese a tomar una mayor amplificación se repetiría el mismo espectro, nótese que la amplificación es del orden  $10^{-10}$ . Por tanto el espectro es auto-similar.



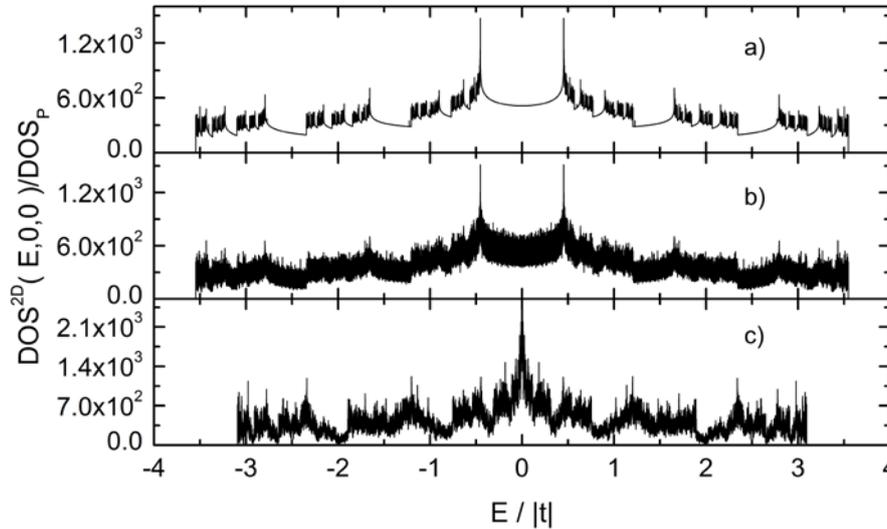
**Figura 3.8** *DOS versus la energía para la cadena de Thue Morse con los mismos parámetros que la figura 3.3 con 18014398509481985 átomos. La fig. a') es una ampliación alrededor de 0.02478648836625t.*

Este estudio se extendió a sistemas bidimensionales por medio del método de renormalización más convolución los cuales se presentan en la siguiente sección.

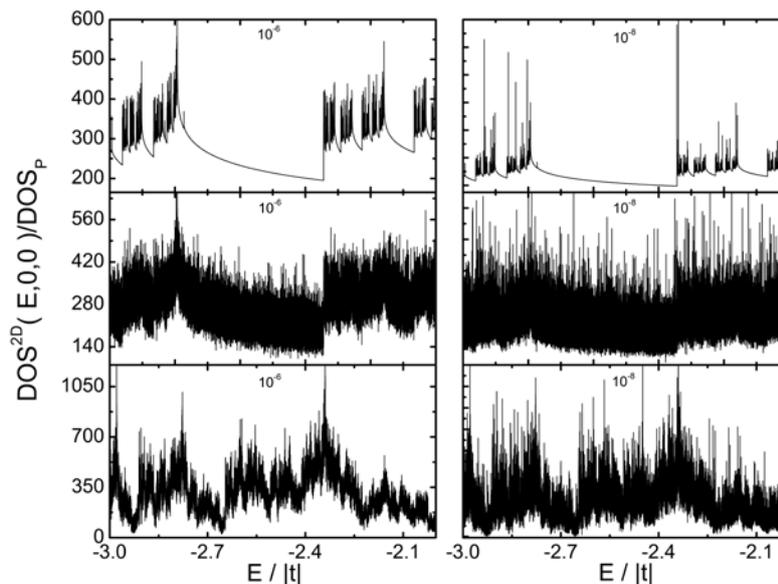
### 3.3 Densidad de Estados en Dos Dimensiones ( $DOS^{2D}$ )

Para complementar el estudio de la densidad de estados en sistemas aperiódicos extendimos el método de renormalización a dos dimensiones por medio de la técnica de convolución que se desarrolló en la sección del capítulo 2.8.1. La figura 3.9 nos muestra la  $DOS^{2D}$  versus la energía para un sistema con a) un arreglo tipo Fibonacci en sus átomos en la dirección transversal y un arreglo periódico en la dirección longitudinal, b) un orden periódico en sus átomos en la dirección transversal y uno tipo Fibonacci en la dirección longitudinal, por último c) un arreglo de Fibonacci en ambas direcciones. Los parámetros que hemos tomado para esta gráfica son: auto-energías de sitio nulas, integrales de salto  $t_B = \tau$  y  $t_A = \pi$ , la parte imaginaria de la energía es  $10^{-6}t$ , las generaciones consideradas fueron  $42_{\parallel} \times 17_{\perp}$ , teniendo un número de átomos  $433494438 \times 2584 = 1120149627792$ . En la Fig. 3.9a) podemos observar que el espectro presenta pseudo-gaps bien definidos, más aun, un análisis de estos pseudo-gaps se encuentra en la figura 3.10, también notamos una ausencia de picos en el centro del espectro, cabe señalar que este es auto-similar. En la Fig. 3.9b) se obtiene un espectro parecido al de la figura 3.9a) excepto que el espectro es ruidoso

y por ello los pseudo-gaps no son tan apreciables, por ultimo en la Fig. 3.9c) se presenta un espectro que exhibe un pico en la región central y los pseudo-gaps son más profundos, asimismo, es ruidoso de forma similar que 3.9b). Como podemos observar en estas gráficas tienen un contorno parecido al que se presenta cuando el arreglo de los átomos es periódico en las dos direcciones.

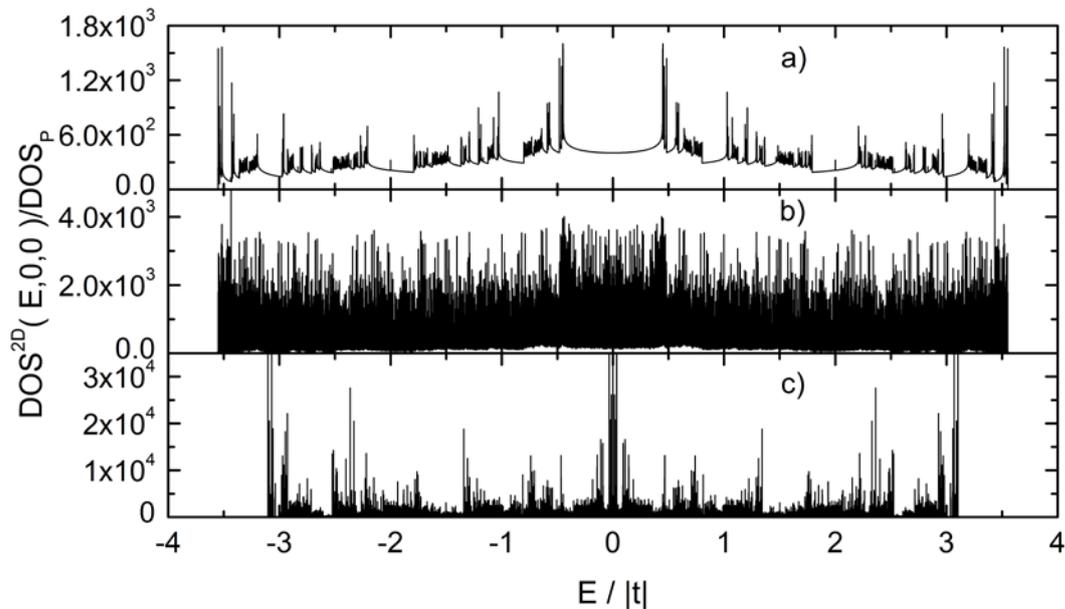


**Figura 3.9**  $DOS^{2D}$  versus la energía para un sistema con generaciones  $42_{\parallel} \times 17_{\perp}$  teniendo 1120149627792 átomos, auto-energías de sitio nulas, integrales de salto  $t_B = \tau$  y  $t_A = \pi$  y la parte imaginaria de la energía igual a  $10^{-6}t$ . En a) un arreglo periódico en sus átomos en la dirección longitudinal y tipo Fibonacci en la transversal, b) un acomodo de los átomos tipo Fibonacci en la dirección longitudinal y uno periódico en la dirección transversal, finalmente c) un arreglo tipo Fibonacci en las dos direcciones.



**Figura 3.10** Amplificación de un pseudo-gap correspondiente al espectro de  $DOS^{2D}$  alrededor de  $E = 1.5t$ , empleando el mismo orden que en la grafica 3.9

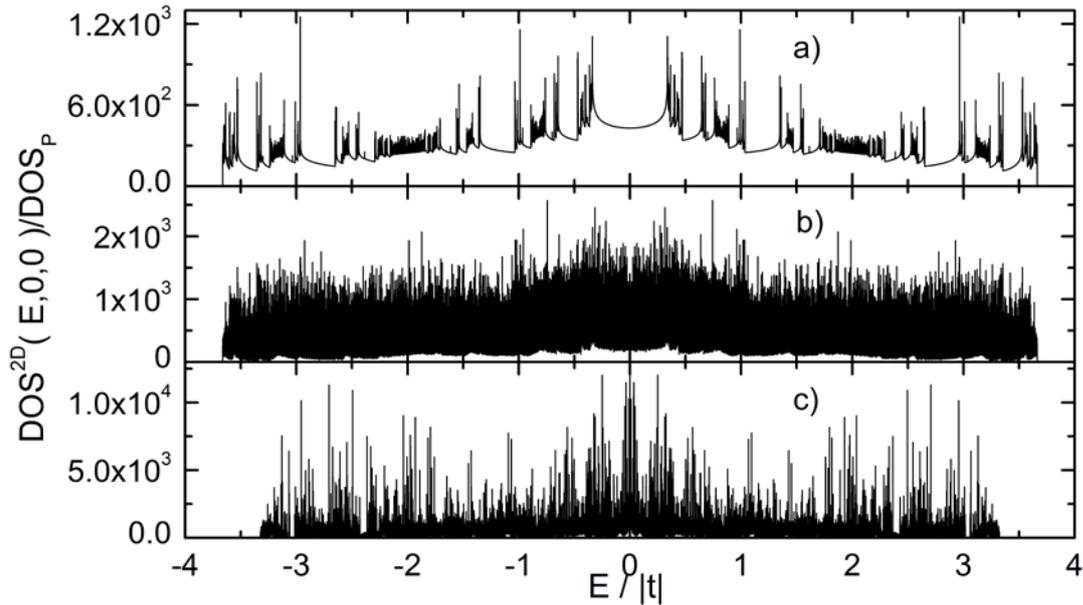
La figura 3.11 nos muestra el espectro de la  $DOS^{2D}$  versus la energía, siguiendo el orden utilizado en la figura 3.9 excepto que se emplea un sistema aperiódico tipo Doble Período. Los parámetros son los mismos que en dicha figura, en tanto que las generaciones consideradas fueron  $28_{\parallel} \times 12_{\perp}$ , teniendo  $134217729 \times 2049 = 275012126721$  átomos. En la Fig. 3.11a) se pueden observar que el espectro de la  $DOS^{2D}$  es una combinación de los espectros periódicos unidimensionales con el espectro aperiódico tipo Doble Período, lo cual lleva a que presenten pseudo-gaps, así mismo, es auto-similar, además conserva la característica de no presentar picos en el centro del espectro. En la Fig. 3.11b) distinguimos un espectro muy ruidoso con el mismo ancho de banda que el de la Fig. 3.11a) debido a que tiene una parte periódica en la dirección transversal, además el contorno del espectro es similar. En la Fig. 3.11c) el espectro mostrado presenta pseudo-gaps; más aun, muestra un pico en el centro del espectro de  $DOS^{2D}$  a diferencia de las Fig. 3.11a) y 3.11b) dado que es una combinación de espectros aperiódicos.



*Figura 3.11  $DOS^{2D}$  versus la energía empleando los mismos parámetros de la Fig. 3.9, excepto por el uso de las generaciones  $28_{\parallel} \times 12_{\perp}$  con 275012126721 átomos y un sistema aperiódico tipo Doble Período, asimismo se respeta el orden de las gráficas.*

La figura 3.12 exhibe la  $DOS^{2D}$  versus la energía, respetando el orden en que los espectros se presentaron en la figura 3.9, además de utilizar los parámetros de dicha figura excepto por el empleo de un sistema aperiódico tipo Thue Morse y las generaciones  $28_{\parallel} \times 12_{\perp}$ , con  $134217729 \times 2049 = 275012126721$  átomos. En la Fig. 3.12a) se observa el espectro de  $DOS^{2D}$  el cual presenta pseudo-gaps a lo largo del mismo, como también exhibe una ausencia de picos en el centro del espectro, cabe señalar que

dicho espectro es auto-similar. En la Fig. 3.12b) nos encontramos con un espectro ruidoso que conserva el mismo ancho y un perfil similar que el mostrado en la Fig. 3.12a), no posee picos en el centro del espectro. Finalmente en la Fig. 3.12c) se encuentran pseudo-gaps en algunas regiones del espectro, este resulta ser de menor tamaño que los anteriores espectros de esta misma figura, además presenta un pico en la vecindad del centro del espectro. Nótese que los espectros son más anchos que el de las figuras anteriores.



*Figura 3.12 DOS<sup>2D</sup> versus la energía usando los parámetros de la Fig. 3.9, excepto por el uso de las generaciones  $28_{\parallel} \times 12_{\perp}$  con 275012126721 átomos y un sistema tipo Thue Morse, además se respeta el orden de las gráficas*

Con este tipo de métodos podemos estudiar la densidad de estados de sistemas multidimensionales ya sea con orden periódico ó aperiódico en sus átomos. En el siguiente capítulo mostraremos los resultados obtenidos para la conductividad  $dc$  para los mismos sistemas estudiados en este capítulo.

# Capítulo 4. Resultados

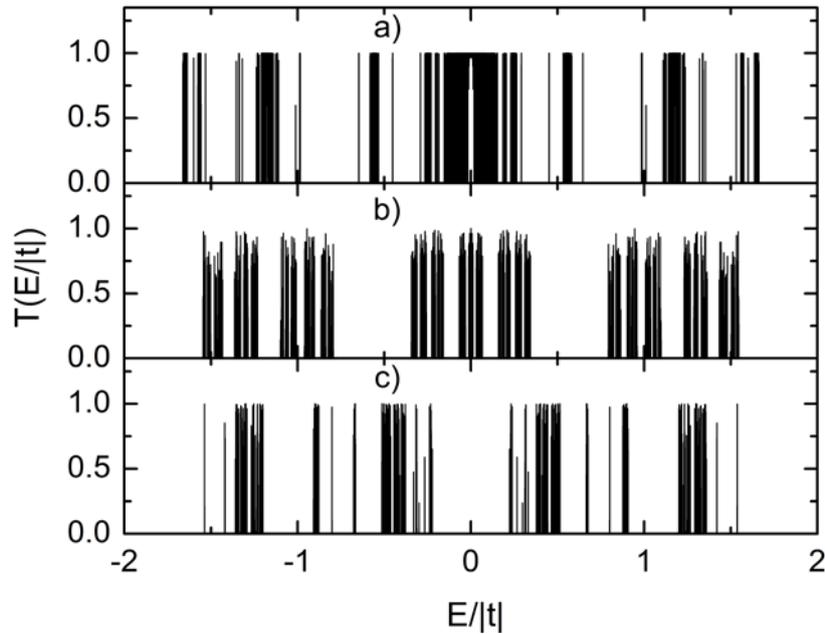
## Conductividad Eléctrica $dc$

### 4.1 Introducción

Las propiedades de los electrones en cristales aperiódicos son diferentes a los periódicos. La ausencia de zonas de Brillouin es la razón por lo que las técnicas habituales no pueden ser usadas, los eigen-estados no necesariamente son extendidos, el espectro y la densidad de estados son diferentes. Esto se refleja en las propiedades físicas como la conductividad eléctrica. La formación de pseudo-gaps en la densidad de estados puede jugar un papel en la estabilización de cuasicristales [Janssen, 2007]. En este capítulo se muestran los resultados obtenidos para la conductividad eléctrica  $dc$  dentro del formalismo de amarre fuerte en sistemas aperiódicos como lo son: Thue Morse, Doble Período y Fibonacci, mediante la extensión del método de renormalización para una dimensión y de renormalización más convolución para dos dimensiones.

### 4.2 Transmitancia

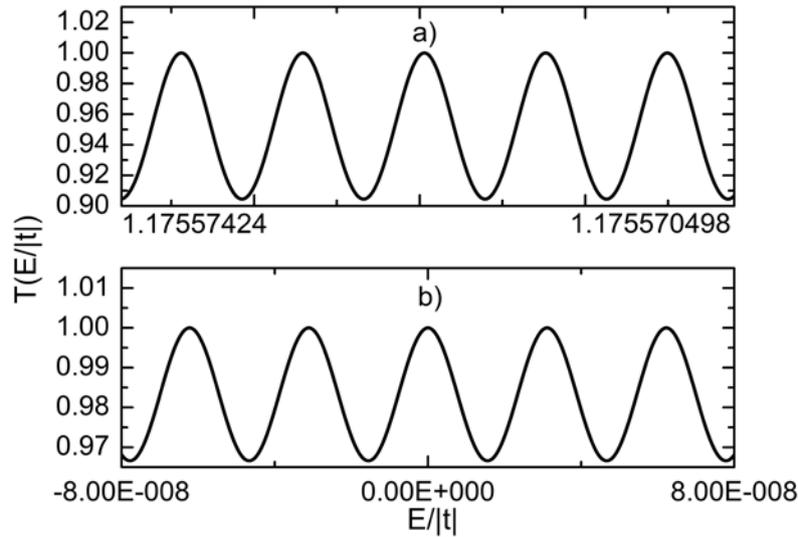
Por medio del método de renormalización analizamos la transmitancia de los diferentes sistemas aperiódicos considerados en el capítulo anterior. La figura 4.1 muestra la transmitancia versus la energía para cadenas de a) Thue Morse, b) Fibonacci y c) Doble Período en el arreglo de sus átomos. Los parámetros empleados fueron: integrales de salto  $t_A = \pi$ ,  $t_B = t$ , auto-energías nulas, las generaciones  $n=28$  con 134217729 átomos para Thue Morse y Doble Período y  $n=42$  en Fibonacci con 433494438 átomos. En los espectros de las Fig. 4.1a), Fig. 4.1b) y Fig. 4.1c) podemos observar que existen muchos estados de alta conductividad  $dc$ , los cuales presentan gaps en diferentes partes de su respectivos espectros, siendo que estos tienen los mismos parámetros a excepción de la cantidad de átomos que solo es del mismo orden. Con el fin encontrar estados de conductividad balística se realizó un estudio detallado de los estados de alta conductividad de cada espectro.



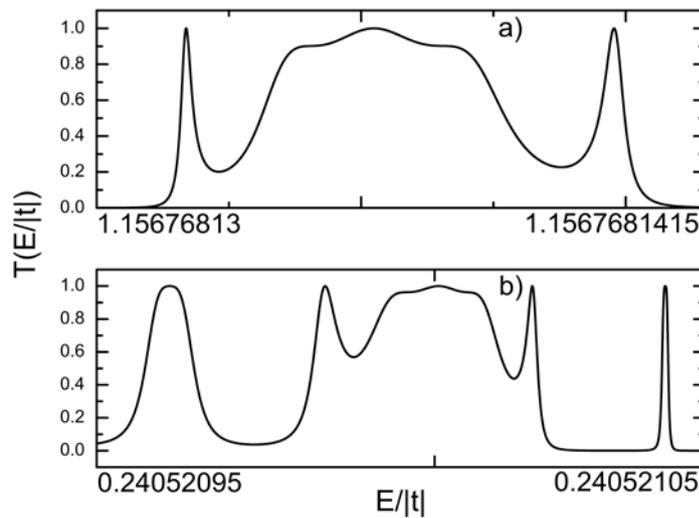
**Figura 4.1** Transmitancia versus la energía, empleando auto-energías nulas, integrales de salto  $t_A = \alpha$ ,  $t_B = t$ , generaciones a)  $n=42$  con 433494438 átomos para un sistema aperiódico tipo Fibonacci, b)  $n=28$  con 134217729 átomos para Thue Morse y c)  $n=28$  teniendo la misma cantidad de átomos que en b) para un sistema de Doble Período.

Al realizar un análisis de los estados de alta conductividad para la cadena de Thue Morse observamos que existen muchos estados con transmitancia igual a uno, haciendo una amplificación alrededor de dos de estas energías,  $E = 1.175572369t$  para la Fig. 4.2a),  $E = 0$  para la Fig. 4.2b) observamos que presentan un patrón oscilatorio, es importante resaltar que solo una de las crestas es igual a uno (estado transparente); en contraste con las figuras 4.3a) y 4.3b) en donde se muestran estados de alta conductividad pero no transparentes; el espectro no oscila periódicamente. Las energías consideradas para el centro de las amplificaciones son:  $E = 1.1575t$  en la Fig. 4.3a) y  $E = 0.0247499t$  en la Fig. 4.3b), los demás parámetros son los mismos que los empleados en la Fig. 4.1.

Es importante notar que para este tipo de sistemas el estado balístico se encuentra rodeado por una gran cantidad de estados de transmitancia alta por lo tanto el estado es robusto.



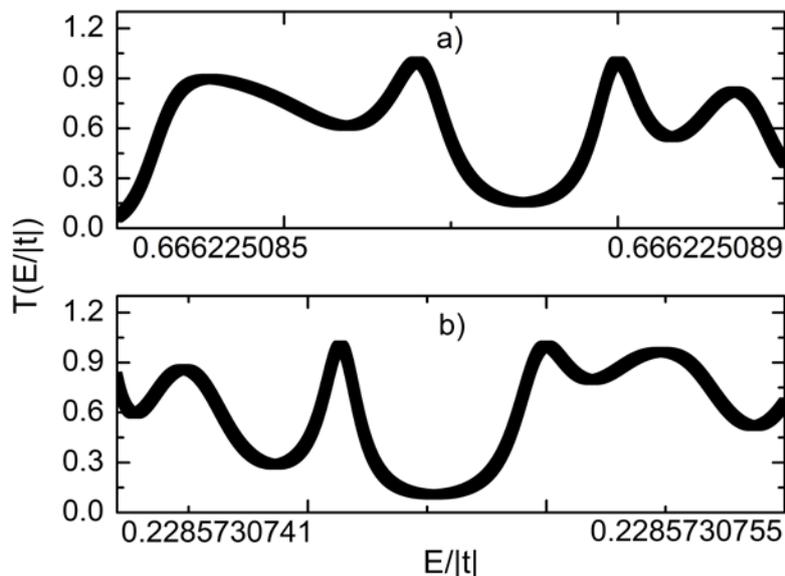
**Figura 4.2** Amplificación del espectro de la transmitancia para una sistema tipo Thue Morse conservando los parámetros empleados en la Fig. 4.1 alrededor de a)  $E = 1.175572369t$  y b)  $E = 0$ .



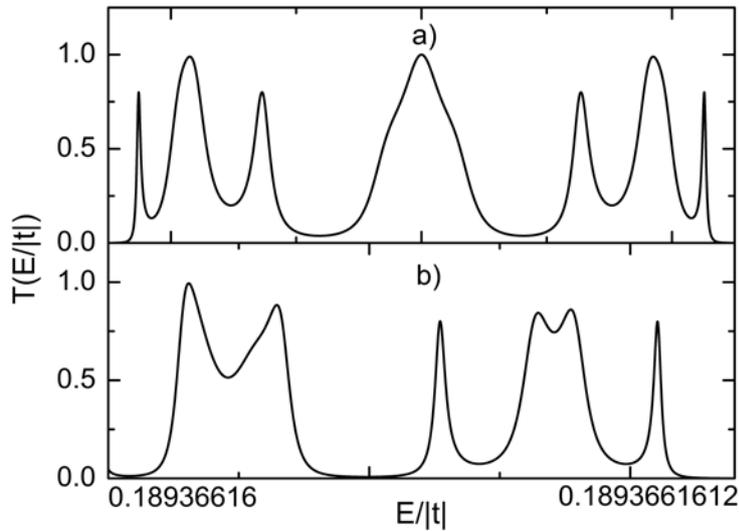
**Figura 4.3** Amplificación del espectro de la transmitancia alrededor de a)  $E = 1.1567681415t$  y b)  $E = 0.24052105t$ . Conservando los parámetros empleados en la Fig. 4.1 para una sistema tipo Thue Morse

Para el sistema de Doble Período se realizaron ampliaciones alrededor de dos energías  $E = 0.6662250880001811973t$  y  $E = 0.228573074t$  donde la transmitancia es igual a uno -estado transparente- en la primera energía, Figura 4.4a) y 4.4b) respectivamente, podemos observar que estos

espectros no muestran periodicidad como en el sistema anterior, además el estado transparente no se encuentra rodeado por estados de alta conductividad así como también el espectro no es simétrico alrededor de esta energía. Por otra parte para la cadena de Fibonacci se considero una amplificación alrededor de la energía  $E=0$ , puesto que esta es la energía reportada como de estado transparente en la literatura [Sánchez, 2004]. En la Fig 4.5a) podemos observar dicha amplificación y de igual forma que en el sistema de Doble Período el estado transparente no esta rodeado de estados de alta conductividad, sin embargo este espectro es simétrico, en cambio la amplificación alrededor de una energía de alta conductividad pero no de estado transparente  $E=0.1893661606t$  mostrado en la Fig. 4.5b) el espectro no presenta simetría y guarda cierto parecido al espectro mostrado en la Fig. 4.4a).



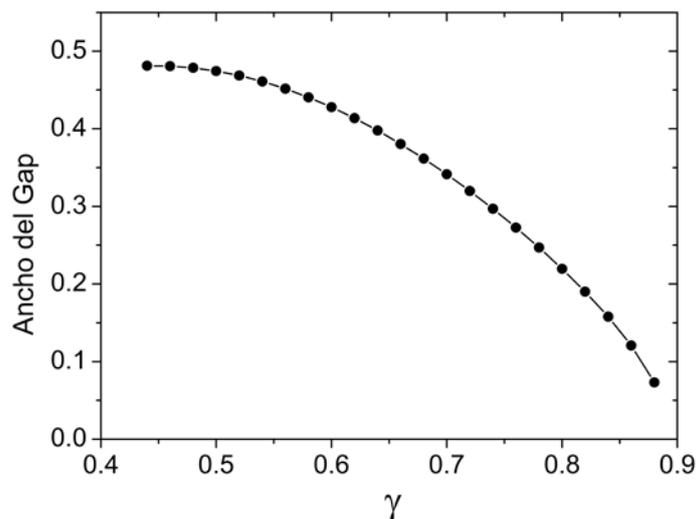
**Figura 4.4** Amplificación del espectro de la transmitancia para un sistema tipo Doble Período alrededor de la energía de estado transparente a)  $E=0.6662250880001811973t$  y no transparente b)  $E=0.228573074t$ . Conservando los parámetros empleados en la Fig. 4.1 para este tipo de sistema.



**Figura 4.5** Amplificación de transmitancia alrededor de a)  $E = 0$  (estado transparente) y b)  $E = 0.1893661606t$  para un sistema tipo Fibonacci, empleando los parámetros usados en la Fig. 4.1.

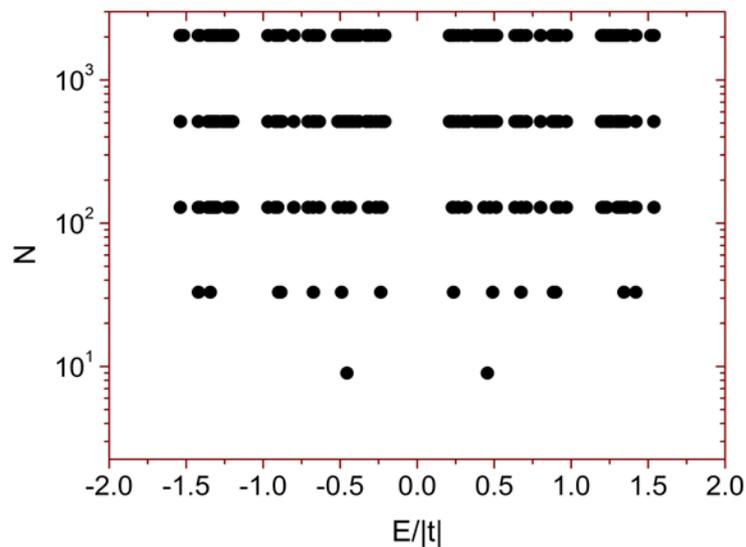
Como se observó en la figura 4.1a) existe un gap en el centro del espectro para un sistema tipo Doble Período; empleando los mismos parámetros que en la Fig. 4.1 y al ir variando la generación dicho gap permanece constante, es decir, no importa la generación considerada este siempre es el mismo. En la Fig. 4.6 mostramos el comportamiento de dicho gap; el cual disminuye su ancho (AG) cuando se incrementa la razón aperiódica  $\gamma = t_A / t_B$ , este decaimiento cumple con la expresión correspondiente a un polinomio de grado 2:

$$AG(\gamma) = 0.0797 + 1.81886\gamma - 2.06118\gamma^2 \quad (4.1)$$

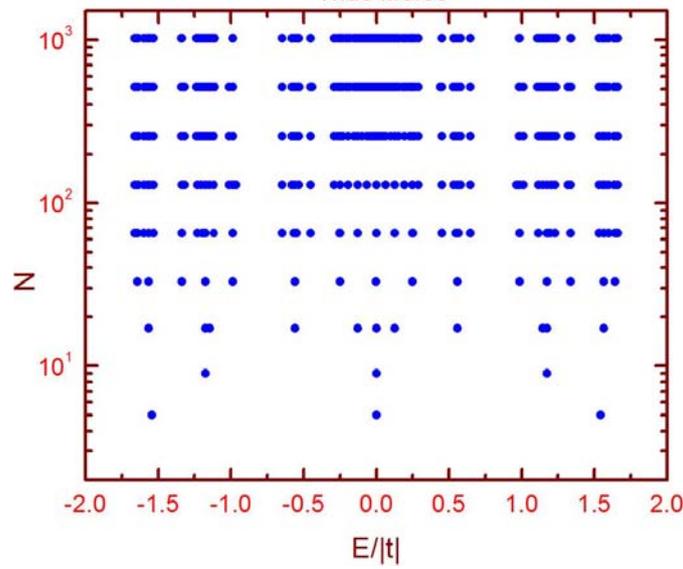


**Figura 4.6** Comportamiento del ancho del gap central para un sistema tipo Doble Período.

Continuando con el análisis de los estados de conductividad balística encontramos que tanto en el sistema de Doble Período como para el de Thue Morse, se presenta más de un estado transparente para una misma generación contrario al único estado reportado para la cadena de Fibonacci. En las figuras 4.7 y 4.8 se muestra el incremento de estados transparentes conforme aumenta el tamaño del sistema para las cadenas de Doble Período y Thue Morse respectivamente, los parámetros usados fueron integrales de salto  $t_A = \pi$ ,  $t_B = t$  y auto-energías nulas. Es importante resaltar que el sistema de Thue Morse presenta estados transparentes para toda generación, en cambio en Doble Período presenta sus respectivos estados transparentes cada dos generaciones en contraste con la cadena de Fibonacci que es cada seis generaciones.



*Figura 4.7 Energía de estados transparentes contra el tamaño del sistema para un ordenamiento de átomos tipo Doble Período, los parámetros usados fueron integrales de salto  $t_A = \pi$ ,  $t_B = t$  y auto-energías nulas*



**Figura 4.8** Energía de estados transparente versus el tamaño del sistema, empleando integrales de salto  $t_A = \tau$ ,  $t_B = t$  y auto-energías nulas para un sistema aperiódico tipo Thue Morse.

Para estos sistemas encontramos dos energías analíticas correspondientes a estados transparentes. Para la cuarta generación en un sistema con un ordenamiento tipo Doble Período encontramos que la energía del estado transparente es:

$$E = \frac{\frac{1}{9}(4\gamma^4 + \gamma^2 + 1)}{\sqrt[3]{\Xi + \beta - \frac{1}{27}}} + \sqrt{\Xi + \beta - \frac{1}{27}} + \frac{4}{3}\gamma^2 + \frac{2}{3} \quad (4.2)$$

$$\beta = \sqrt{-\frac{5}{108}\gamma^{12} - \frac{17}{54}\gamma^{10} + \frac{29}{108}\gamma^8 + \frac{1}{54}\gamma^6 + \frac{1}{36}\gamma^4} \quad \text{y} \quad \Xi = \frac{11}{54}\gamma^6 - \frac{11}{18}\gamma^4 - \frac{1}{18}\gamma^2,$$

que al sustituir el valor de  $\tau$  se obtiene:

$$E^2 = 0.20827, \quad (4.3)$$

la cual se obtiene al considerar el sistema:

$$\begin{pmatrix} \frac{E}{t} & -1 \\ t & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{E}{t} & -\tau \\ t & t \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{E}{\tau} & -t \\ \tau & \tau \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{E}{t} & -\tau \\ t & t \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{E}{\tau} & -1 \\ \tau & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{E}{\tau} & -1 \\ \tau & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{E}{\tau} & -t \\ \tau & \tau \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{E}{t} & -\tau \\ t & t \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{E}{\tau} & -t \\ \tau & \tau \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Empleando la expresión (2.63) para obtener el coeficiente de transmisión, el sistema de matrices anterior se reduce a

$$-5\tau^2 r + 4\tau^2 r^2 - 4\tau^4 r - r + 2r^2 - r^3 + \tau^2 + \tau^4 + \tau^6 = 0, \quad (4.4)$$

Con  $E^2 = r$ . Por otra parte siguiendo la misma estructura para el sistema de matrices y considerando la cuarta generación para el sistema de Thue Morse, se obtiene:

$$\begin{pmatrix} \frac{E}{t} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{E}{t} & -\tau \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{E}{\tau} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{E}{\tau} & -t \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{E}{t} & -\tau \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{E}{\tau} & -t \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{E}{t} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{E}{t} & -\tau \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{E}{\tau} & -t \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Para el cual se encuentra que la energía analítica de estado transparente involucra el parámetro aperiódico ( $\gamma$ ), así la expresión encontrada es:

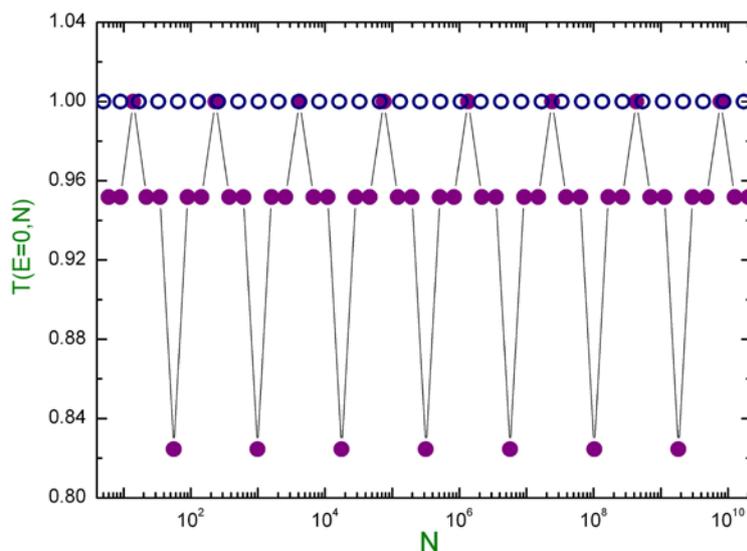
$$E = \sqrt{\gamma^2 + 1}, \quad (4.5)$$

al sustituir el valor de  $\tau$  resulta que para esta cuarta generación la energía de estado transparente es:

$$E = -1.17557, \text{ y } E = 1.17557, \quad (4.6)$$

también encontramos de forma analítica que en la energía igual a cero todas las generaciones presentan estados transparentes para este sistema

Como mencionamos anteriormente los estados transparentes en el sistema de Thue Morse cumplen un ciclo de uno, en el de Doble Período cada dos tiene más de un estado transparente y en Fibonacci un ciclo de seis, tomamos una energía de estado transparente tanto para la cadena de Thue Morse como la de Fibonacci, la energía considerada es  $E = 0$  y mostramos en la figura 4.9 sus respectivos ciclos conforme crece el tamaño del sistema.

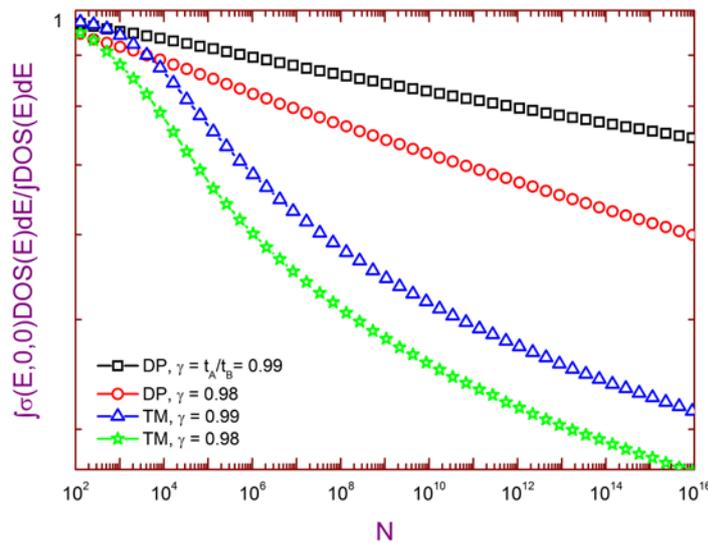


**Figura 4.9** Estados transparentes contra el tamaño del sistema en energía  $E=0$  para Thue Morse (círculos huecos) y Doble Período (círculos rellenos).

Para realizar un estudio completo del espectro de transmitancia en una dimensión calculamos el promedio espectral para el sistema de Thue Morse y el de Doble Período. El promedio espectral esta dado por la expresión:

$$\int \sigma(E,0,0)DOS(E)dE / \int DOS(E)dE . \quad (4.7)$$

Este análisis se encuentra representado en la figura 4.10 para ambos sistemas, los parámetros usados son auto-energías iguales a cero, integrales de salto  $t_A = 0.99t$  representado por cuadros huecos y triángulos huecos,  $t_A = 0.98t$  con círculos huecos y estrellas huecas.



**Figura 4.10 Promedio espectral para el sistema de Thue Morse y Doble Período, para  $\gamma = 0.99$  (cuadros huecos y triángulos huecos) y  $\gamma = 0.98$  (círculos huecos y estrellas huecas).**

Como podemos observar en la Fig. 4.10 el sistema de Doble Período tiene un comportamiento lineal tras tomar el logaritmo en ambas componentes y al realizar un análisis de su comportamiento resultó que decae como una ley de potencias de la forma  $y = aN^b$ , así entonces las correspondientes constantes se colocaron en la tabla No. 4.

<i>Tabla No. 4 Sistema de Doble Período</i>		
$t_A$	$a$	$b$
0.99	1.01008	-0.00955
0.98	1.01728	-0.01685

En cambio para el sistema de Thue Morse su decaimiento se comporta como se muestra en la siguiente expresión y las constantes empleadas están en la tabla No. 5.

$$y = A_2 + \left( \frac{A_1 - A_2}{1 + \left[ \frac{N}{x_0} \right]^p} \right) \quad (4.8)$$

<i>Tabla No. 5 Sistema de Thue Morse</i>				
$\gamma = t_A/t_B$	$A_1$	$A_2$	$x_0$	$p$
0.99	5.65608	0.32587	$3.90683^{-6}$	0.10317
0.98	8.16708	0.28824	2.03172	0.1131

Para confirmar la veracidad de estos resultados realizamos un promedio de la transmitancia para los tres sistemas aperiódicos (Thue Morse, Doble Periodo y Fibonacci) como es mostrado en la Fig. 4.11, siguiendo la expresión:

$$\langle T \rangle = \frac{1}{N_E} \sum_j^{N_E} T(E_j) \quad (4.9)$$

donde  $N_E$  es el número de divisiones de la energía.

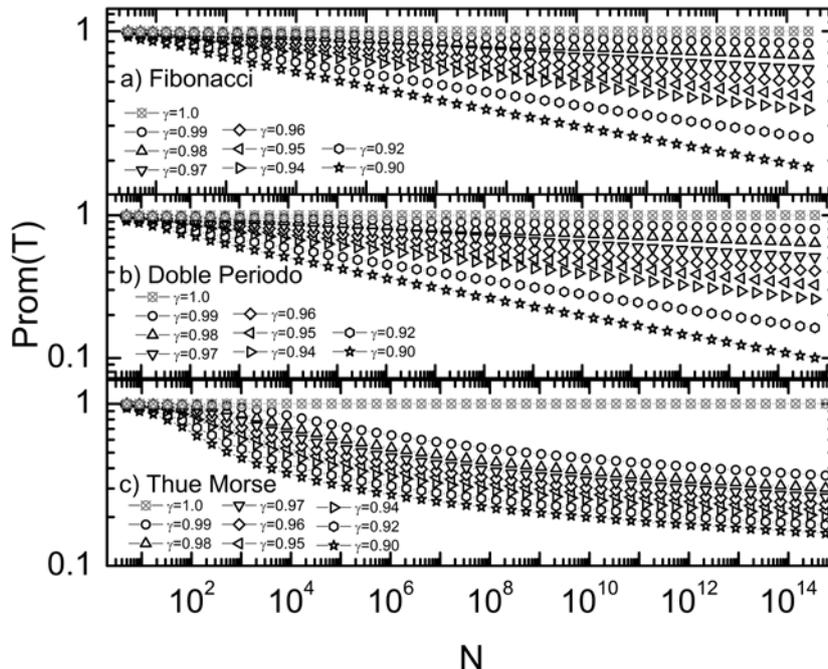


Figura 4.11 Promedio de la transmitancia para los sistemas a) Fibonacci, b) Doble Periodo y c) Thue Morse, con  $\gamma$  en el intervalo  $[0.90, 0.99]$ .

El espectro de tono gris claro mostrado en la Fig. 4.11 corresponde al promedio de la transmitancia para un sistema periódico, el cual siempre es uno. Se puede observar que el comportamiento es el mismo que en la figura anterior, lo cual respalda la fidelidad de los resultados. Al examinar y analizar la figura 4.11 llegamos a que el promedio de la transmitancia para el sistema de Fibonacci decae como una ley de potencias de acuerdo a:

$$y = aN^b \quad (4.10)$$

Se procedió a relacionar con el parámetro aperiódico ( $\gamma$ ) como se muestra en la tabla No. 6; con el fin de encontrar una relación que describa el comportamiento de estos dos sistemas de una forma general.

<i>Tabla No. 6 Sistema de Fibonacci</i>		
$\gamma = t_A/t_B$	<i>a</i>	<i>b</i>
0.99	1.01853	-0.00582
0.98	1.03176	-0.01209
0.97	1.04324	-0.01876
0.96	1.0529	-0.02571
0.95	1.06028	-0.03284
0.94	1.06445	-0.03284

Se llegó a que cualquiera de las líneas mostradas en la figura 4.11a) puede ser descrita mediante la siguiente expresión:

$$Y = ax^{(\gamma*0.73326)} \quad (4.11)$$

De esta forma comprobamos que el promedio de la transmitancia para un sistema tipo Fibonacci tiene un decaimiento como una ley de potencias. Este mismo análisis se realizó para el sistema de Doble Período obteniéndose la siguiente expresión, basándose en los datos recopilados en la tabla No. 7

$$Y = ax^{(\gamma*0.72482)} \quad (4.12)$$

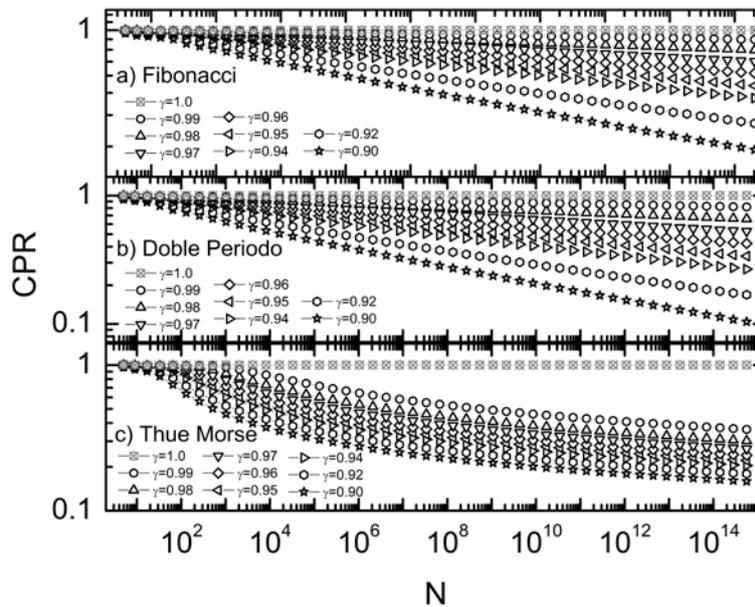
<i>Tabla No. 7 Sistema de Doble Período</i>		
$\gamma = t_A/t_B$	<i>a</i>	<i>b</i>
0.99	1.01958	-0.00659
0.98	1.02916	-0.01326
0.97	1.0339	-0.01997
0.96	1.03419	-0.0267
0.95	1.03127	-0.03346
0.94	1.02757	-0.04042

Así mismo, también se realizó un análisis similar para el sistema de Thue Morse encontrándose que el decaimiento de la transmitancia se puede describir mediante la expresión (4.8) siendo que las constantes empleadas para cada  $\gamma$  se encuentran en la tabla No. 8.

<i>Tabla No. 8 Sistema de Thue Morse</i>				
$\gamma = t_A/t_B$	$A_1$	$A_2$	$x_0$	$p$
0.99	155.79305	0.32868	$4.1659^{-21}$	0.10182
0.98	406.50306	0.2933	$3.3435^{-21}$	0.12144
0.97	593.97505	0.26549	$3.6446^{-21}$	0.13063
0.96	652.09022	0.24202	$4.1837^{-21}$	0.13447
0.95	665.65479	0.22444	$4.7514^{-21}$	0.13689
0.94	627.09016	0.2067	$3.7312^{-21}$	0.13663

Más aun se realizó el análisis de la razón de participación de la conductividad ( $CPR$ ) para los tres sistemas aperiódicos como se muestra en la Fig. 4.12, bajo la expresión:

$$CPR = \frac{\left[ \sum_{j=1}^{N_E} T^2(E_j) \right]^2}{N_E \sum_{j=1}^{N_E} T^4(E_j)} \quad (4.13)$$

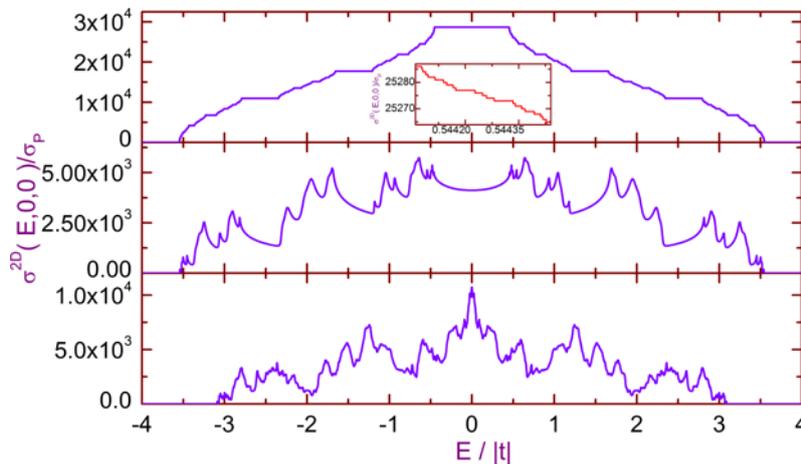


**Figura 4.12.** Razón de participación de la conductividad con  $\gamma$  en el intervalo  $[0.90,0.99]$  para los sistemas a) Fibonacci, b) Doble Período y finalmente c) Thue Morse.

De igual forma podemos observar el mismo comportamiento que el exhibido en la gráfica en donde tanto los sistemas de Doble Período como el de Fibonacci decaen como una ley de potencias, por otra parte el sistema de Thue Morse tiene un decaimiento más rápido que los sistemas mencionados anteriormente.

### 4.3 Conductividad Eléctrica en Dos Dimensiones

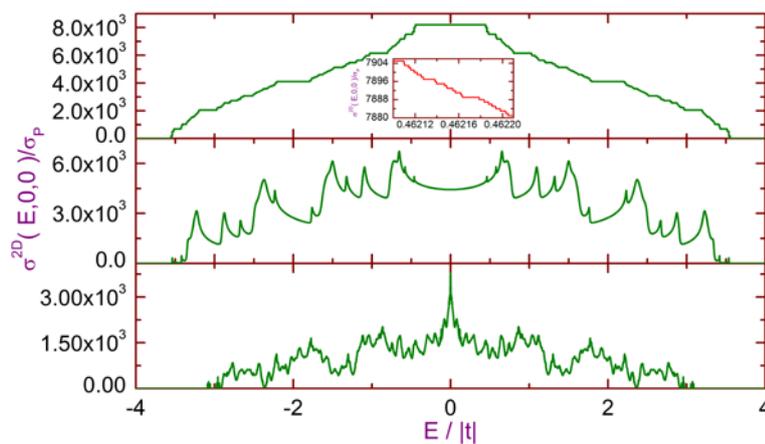
Para el estudio del transporte electrónico en sistemas bidimensionales aperiódicos extendimos el método de renormalización más convolución dentro del formalismo de amarre fuerte. La figura 4.13 muestra los espectros de conductividad versus la energía para a) un arreglo tipo Fibonacci en sus átomos en la dirección transversal y un arreglo periódico en la dirección longitudinal, b) un orden periódico en sus átomos en la dirección transversal y uno tipo Fibonacci en la dirección longitudinal, por ultimo c) un arreglo de Fibonacci en ambas direcciones. Los parámetros empleados fueron auto-energías iguales a cero, integrales de salto  $t_B=t$  y  $t_A=\pi$ , el tamaño de la red fue de  $28658 \times 433494438 = 12423083604204$  átomos. Como podemos observar el espectro en los tres casos es simétrico debido a que es un problema de enlaces. Más aun, en la Fig. 4.13a) notemos la cuantización de la transmitancia como es reportada experimentalmente para hetero-estructuras [Picciotto, 2001], la diferencia es que aquí se presenta un espectro auto-similar y el tamaño de los escalones es igual a  $g_0$ . En cambio, cuando la periodicidad se encuentra en la parte transversal Fig. 4.13b) empiezan a aparecer pseudo-gaps en el espectro teniendo uno de ellos alrededor del cero, que a diferencia de la figura 4.13c) tiene un pico de conductividad en el centro y es un espectro ruidoso menos extendido que los espectros en las Fig. 4.13a) y 4.13b).



**Figura 4.13** Conductividad versus la energía para un sistema tipo Fibonacci, con auto-energías iguales a cero, integrales de salto  $t_B=t$  y  $t_A=\pi$ , con generaciones  $28658 \times 35 = 1003030$  átomos

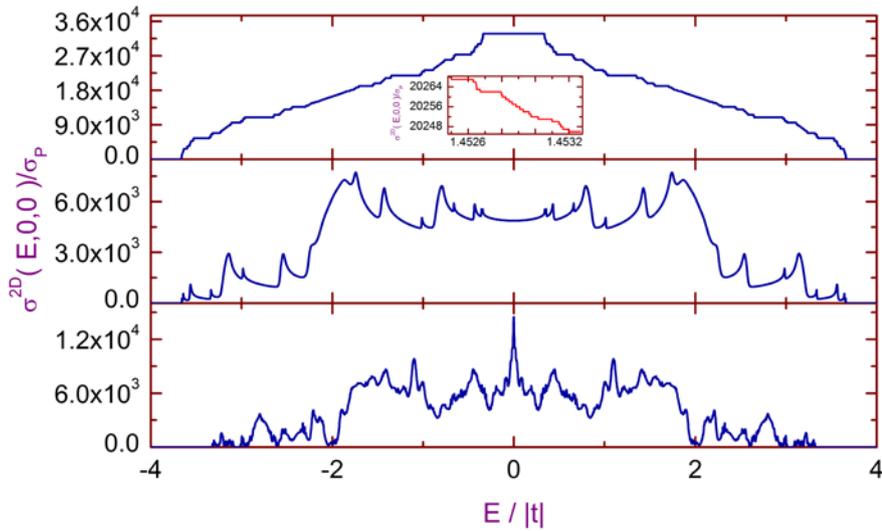
En la figura 4.14 se muestran los espectros de transmitancia versus la energía, siguiendo el mismo orden que en la figura 4.13 así como los mismos parámetros exceptuando el empleo de un sistema aperiódico tipo

Doble Período y considerando generaciones de  $8193 \times 134217729 = 1099645853697$  átomos. Como podemos observar el espectro en los tres casos es simétrico. En la Fig. 4.14a) hay una cuantización de la transmitancia, además presenta un espectro auto-similar y el tamaño de los escalones es igual a  $g_0$ . En la Fig. 4.14b) encontramos pseudo-gaps a lo largo del espectro cuyo ancho es el mismo que el del inciso anterior, dichos pseudo-gaps se deben a que la periodicidad se encuentra en la dirección transversal. Finalmente la parte central del espectro de la Fig. 4.14c) tenemos un pico de conductividad, además de que es un espectro ruidoso y de menor anchura que los otros espectros de esta figura.



**Figura 4.14** Conductividad versus la energía considerando generaciones  $8193 \times 33$  con 270369 átomos para un sistema tipo Doble Período, los demás parámetros son iguales a los utilizados en la Fig. 4.13.

En la figura 4.15 se muestran los espectros de transmitancia contra la energía, siguiendo el mismo orden así como parámetros que en la figura 4.13 excepto que se emplea un sistema tipo Thue Morse. En la figura 4.15a) notamos la cuantización de la transmitancia con el tamaño de los escalones igual a  $g_0$  y un espectro es auto-similar. En cambio, cuando la periodicidad se encuentra en la parte transversal como en la figura 4.15b) empiezan a aparecer pseudo-gaps en el espectro teniendo uno de ellos alrededor del cero, que a diferencia de la figura 4.15c) tiene un pico de conductividad en el centro.

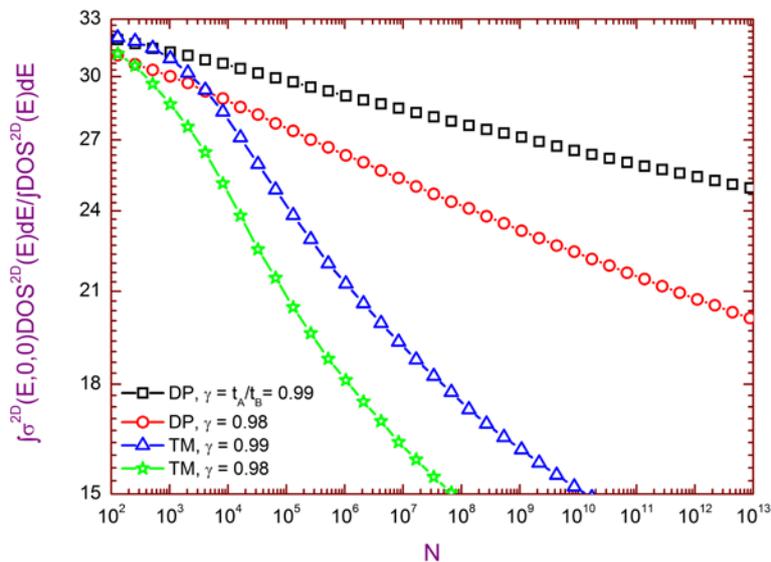


**Figura 4.15** Conductividad contra la energía baja los mismo parámetros que en la Fig. 4.14, excepto se considera para un sistema tipo Thue Morse.

Para realizar un estudio completo del espectro de transmitancia en dos dimensiones calculamos el promedio espectral para los dos sistemas aperiódicos (Thue Morse y Doble Periodo), este promedio espectral esta dado por:

$$\int \sigma^{2D}(E, 0, 0) \text{DOS}^{2D}(E) dE / \int \text{DOS}^{2D}(E) dE . \quad (4.14)$$

Este análisis se encuentra representado en la figura 4.16, con parámetros tanto para el sistema de Doble Periodo como para el de Thue Morse; con auto-energías iguales a cero,  $t_A = 0.99t$  (cuadros huecos, estrellas huecas) y  $t_A = 0.98t$  (círculos huecos, triángulos huecos).



**Figura 4.16** Promedio espectral para los sistemas de Thue Morse y Doble Período con  $\gamma = 0.99$  (cuadros huecos, triángulos huecos) y  $\gamma = 0.98$  (círculos huecos, estrellas huecas).

Así mismo como se puede apreciar en la figura 4.16 el promedio espectral para los sistemas de Thue Morse como el de Doble período muestran un comportamiento similar al presentado en la Fig. 4.10 por lo que podemos asegurar que el promedio espectral en el sistema de Doble Período decae como una serie de potencias y el de Thue Morse tiene un comportamiento descrito la expresión (4.8), pero la característica que se conserva del análisis en una dimensión es que decae de una forma más rápida que un sistema tipo Fibonacci o que el sistema Doble Período.

A través del empleo de este tipo de métodos logramos estudiar la conductividad eléctrica en sistemas multidimensionales con un orden periódico ó aperiódico en sus átomos.

# Capítulo 5 Conclusiones

En esta tesis se estudiaron las propiedades físicas tales como: la densidad de estados y la conductividad eléctrica dentro del formalismo de amarre fuerte para los sistemas aperiódicos: Thue Morse, Doble Período y Fibonacci. Para ello se extendió el método de renormalización más convolución para los tres sistemas. Inicialmente este análisis se realizó para sistemas de una dimensión y posteriormente mediante la técnica de convolución se extendió para considerar sistemas aperiódicos bidimensionales. Las conclusiones a las que llegamos son las siguientes:

1.- Se comprobó que los sistemas aperiódicos estudiados tienen un espectro auto-similar ya sea en la densidad de estados o en la conducción eléctrica tanto en sistemas aperiódicos unidimensionales como de dos dimensiones.

2.- Para el sistema de Thue Morse se encontró dos energías analíticas de estados transparentes, las cuales se conservan para todas las generaciones. En cambio, para el sistema de Doble Período encontramos una energía analítica sólo para la cuarta generación.

3.- Se observó que los sistemas de Thue Morse y Doble Período tienen más de un estado transparente cuando la generación es mayor que cuatro. Por otra parte para el sistema de Doble Período encontramos que presenta más de un estado transparente cada dos generaciones y Thue Morse presenta estos estados en todas las generaciones. Además, comprobamos que para un sistema de Fibonacci existe sólo un estado transparente cada seis generaciones.

4.- El número de estados transparentes para los sistemas aperiódicos tanto de Doble Período como de Thue Morse se incrementan conforme aumenta el tamaño del sistema.

5.- El ancho del gap central en el espectro de la conductividad eléctrica del sistema de Doble Período es invariante ante el cambio en el tamaño del sistema, pero depende del parámetro aperiódico ( $\gamma$ ).

6.- Se presenta un espectro oscilatorio en la conductividad eléctrica para un sistema aperiódico de enlaces tipo Thue Morse alrededor de los estados transparentes similar al que presenta la cadena de Fibonacci tipo mixta.

7.- La conductividad eléctrica para sistemas bidimensionales esta cuantizada, siendo la altura de cada escalón igual a  $g_0$ . Así mismo, los sistemas continúan guardando un espectro auto-similar.

8.- Se mostró que el promedio de la conductividad eléctrica decae como una ley de potencias como función del tamaño del sistema, tanto para sistemas unidimensionales como bi-dimensionales tipo Doble Período y Fibonacci. Además, el decaimiento en sistemas tipo Thue Morse es más rápido.

Finalmente, tras realizar este trabajo de tesis he logrado adquirir un panorama más amplio acerca de la física del estado sólido, asimismo las bases que constituyen un trabajo de investigación en este ámbito.

# APENDICE I

## Densidad de Estados para un Sistema Tipo Fibonacci

La densidad de estados esta dado por la siguiente expresión:

$$DOS(E + i\eta) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(\text{Tr}G^+(E + i\eta)), \quad (\text{A1.1})$$

donde G es la función de Green.

Para desarrollar el método de renormalización se propone la densidad de estados de la siguiente forma:

$$DOS(E, n) = DOS(E, n-1) + DOS(E, n-2) \rightarrow G_{ii}, \quad (\text{A1.2})$$

$\Rightarrow$

$$DOS(E, N) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} [A(N)G_{11} + B(N)G_{22} + C(N)G_{12} + D(N)]. \quad (\text{A1.3})$$

En este caso “n” corre desde 3 hasta N; siendo N la generación máxima para la cual se quiere calcular la densidad de estados.

Siendo:

$$A(n) = A(n-1) + [A(n-2) + B(n-1) - 1.0] \mu_1^2(n) + C(n-1) \mu_1(n),$$

$$B(n) = B(n-2) + [A(n-2) + B(n-1) - 1.0] \mu_2^2(n) + C(n-2) \mu_2(n), \quad (\text{A1.4})$$

$$C(n) = 2.0 [A(n-2) + B(n-1) - 1.0] \mu_1(n) \mu_2(n) + C(n-1) \mu_2(n) + C(n-2) \mu_1(n),$$

$$D(n) = [A(n-2) + B(n-1) - 1.0] \mu_3(n) + D(n-1) + D(n-2).$$

Así mismo

$$\mu_1 = \frac{T(n-1)}{E - E_M(n)},$$

$$\mu_2 = \frac{T(n-2)}{E - E_M(n)},$$

$$\mu_3 = \frac{1.0}{E - E_M(n)}, \quad (\text{A1.5})$$

Como toda relación de recurrencia se requiere de condiciones iniciales, las cuales se muestran a continuación:

$$\begin{aligned}
A(1) &= 1.0, & T(1) &= t_A, & A(2) &= 1.0 + \frac{t_A^2}{E^2}, & T(2) &= \frac{t_A t_B}{E}, \\
B(1) &= 1.0, & E_L(1) &= 0.0, & B(2) &= 1.0 + \frac{t_B^2}{E^2}, & E_L(2) &= \frac{t_A^2}{E}, \\
C(1) &= 0.0, & E_R(1) &= 0.0, & C(2) &= \frac{2.0(t_A t_B)}{E^2}, & E_R(2) &= \frac{t_B^2}{E}. \\
D(1) &= 0.0, & & & D(2) &= \frac{1.0}{E}, & &
\end{aligned} \tag{A1.6}$$

Cuando el sistema ha sido renormalizado las relaciones efectivas tanto de la energía como la energía de salto son las siguientes:

$$\begin{aligned}
E_M(n) &= E_R(n-1) + E_L(n-2), & E_L(n) &= \frac{E_L(n-1) + T^2(n-1)}{E - E_M(n)}, \\
T(n) &= \frac{T(n-1)T(n-2)}{E - E_M(n)}, & E_R(n) &= \frac{E_R(n-2) + T^2(n-2)}{E - E_M(n)}. \tag{A1.7}
\end{aligned}$$

Las funciones de Green para el caso sin saturador son:

$$\begin{aligned}
G_{LL} &= \frac{(E - E_R(N))}{[E - E_R(N)][E - E_L(N)] - T^2(N)}, \\
G_{RR} &= \frac{(E - E_L(N))}{[E - E_R(N)][E - E_L(N)] - T^2(N)}, \\
G_{LR} &= \frac{T(N)}{[E - E_R(N)][E - E_L(N)] - T^2(N)}. \tag{A1.8}
\end{aligned}$$

Y para el caso con saturador:

$$\begin{aligned}
G_{LL} &= \frac{\kappa_2}{\kappa_1 \kappa_2 - T^2(N)}, \\
G_{RR} &= \frac{\kappa_1}{\kappa_1 \kappa_2 - T^2(N)}, \\
G_{LR} &= \frac{T(N)}{\kappa_1 \kappa_2 - T^2(N)}, \tag{A1.9}
\end{aligned}$$

donde:

$$\kappa_1 = \frac{(E - E_{MP1}) - T_P^2(N)}{(E - E_{LP}(N))},$$

$$\kappa_2 = \frac{(E - E_{MP2}) - T_P^2(N)}{(E - E_{RP}(N))},$$

Con  $E_{MP1} = E_{RP}(N) + E_L(N).$   
 $E_{MP2} = E_{LP}(N) + E_R(N).$

(A1.10)

Por otra parte, las relaciones de recurrencia para los saturadores están dadas por:

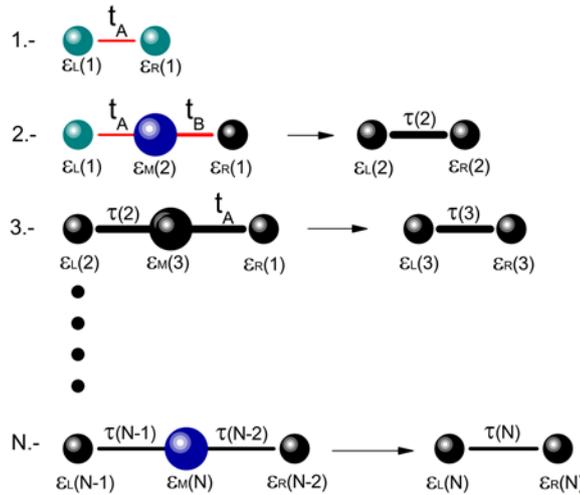
$$E_{MP}(M) = E_{RP}(M-1) + E_{LP}(M-2), \quad E_{LP}(M) = \frac{E_{LP}(M-1) + T_P^2(M-1)}{E - E_{MP}(M)},$$

$$T_P(M) = \frac{T_P(M-1)T_P(M-2)}{E - E_{MP}(M)}, \quad E_{RP}(M) = \frac{E_{RP}(M-2) + T_P^2(M-2)}{E - E_{MP}(M)}.$$
(A1.11)

Donde M es la generación máxima para esta cadena. Con las condiciones iniciales:

$$T_P(1) = t, \quad E_{LP}(1) = 0.0, \quad E_{RP}(1) = 0.0,$$

$$T_P(2) = \frac{t}{E}, \quad E_{LP}(2) = \frac{t}{E}, \quad E_{RP}(2) = \frac{t}{E}.$$
(A1.12)



**Figura A1. Método de Renormalización aplicado a la DOS de un sistema aperiódico tipo Fibonacci**

Con estas relaciones hemos obtenido todos los espectros de DOS para cadenas de Fibonacci, en el siguiente apéndice se dan las relaciones de recurrencia para sistemas de Doble Período.

## APENDICE II

### Densidad de Estados para un Sistema Tipo Doble Periodo

La densidad de estados esta dado por la siguiente expresión:

$$DOS(E + i\eta) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(\text{Tr}G^+(E + i\eta)), \quad (\text{A2.1})$$

donde G es la función de Green.

Para obtener los coeficientes método de renormalización de la densidad de estados, proponemos a la DOS de la siguiente forma:

$$DOS(E, n) = DOS(E, n-1) + \overline{DOS}(E, n-2) \rightarrow G_{ii} \quad (\text{A2.2})$$

$\Rightarrow$

$$DOS(E, N) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[A(N)G_{11} + B(N)G_{22} + C(N)G_{12} + D(N)] \quad (\text{A2.3})$$

Siendo  $\overline{DOS}$  la densidad de estados asociada a la conexión de dos secciones de generación “n-2”.

En este caso “n” corre desde 3 hasta N; siendo N la generación máxima para la cual se quiere calcular la densidad de estados.

Donde:

$$A(n) = A(n-1) + C(n-1)\kappa_A(n) + E_{ME}\kappa_A^2(n),$$

$$B(n) = \frac{B_B(n) + E_{ME}(n)T_T^2(n)}{[E - E_M(n)]^2} + \frac{C_C(n)T_T(n)}{E - E_M(n)},$$

$$C(n) = \frac{2 \cdot E_{ME}(n)T_T(n)T(n-1)}{[E - E_M(n)]^2} + \frac{C(n-1)T_T(n)}{E - E_M(n)} + \frac{C_C(n)T(n-1)}{E - E_M(n)}, \quad (\text{A2.4})$$

$$D(n) = \frac{E_{ME}(n)}{E - E_M(n)} + D(n-1) + D_D(n).$$

Así mismo

$$A_A(n) = A(n-2) + [A(n-2) + B(n-2) - 1.0]Q_U^2(n) + C(n-2)Q_U(n),$$

$$B_B(n) = B(n-2) + [A(n-2) + B(n-2) - 1.0]Q_U^2(n) + C(n-2)Q_U(n),$$

$$C_C(n) = 2.0[A(n-2) + B(n-2) - 1.0]Q_U(n) + C(n-2)Q_U(n),$$

$$D_D(n) = \frac{[A(n-2) + B(n-2) - 1.0]}{E - E_{EM}} + 2.0D(n-2), \quad (\text{A2.5})$$

$$E_{ME}(n) = [B(n-1) + A_A(n) - 1.0],$$

$$Q_U(n) = \frac{T(n-2)}{E_{EM}(n)},$$

$$\kappa_A(n) = \frac{T(n-1)}{E_M(n)}.$$

En las relaciones de recurrencia se requiere de condiciones iniciales, las cuales se muestran a continuación:

$$\begin{aligned} A(1) &= 1.0, & T(1) &= t_A, & A(2) &= 1.0 + \frac{t_A^2}{E^2}, & T(2) &= \frac{t_A t_B}{E}, \\ B(1) &= 1.0, & E_L(1) &= 0.0, & B(2) &= 1.0 + \frac{t_B^2}{E^2}, & E_L(2) &= \frac{t_A^2}{E}, \\ C(1) &= 0.0, & E_R(1) &= 0.0, & C(2) &= \frac{2.0(t_A t_B)}{E^2}, & E_R(2) &= \frac{t_B^2}{E}. \\ D(1) &= 0.0, & & & D(2) &= \frac{1.0}{E}, & & \end{aligned} \quad (\text{A2.6})$$

Cuando el sistema ha sido renormalizado las relaciones de las energías e integrales de salto efectivas del sistema son:

$$\begin{aligned} E_M(n) &= E_R(n-1) + E_{EL}(n), & E_L(n) &= \frac{E_L(n-1) + T^2(n-1)}{E - E_M(n)}, \\ T(n) &= \frac{T_T(n)T(n-1)}{E - E_M(n)}, & E_R(n) &= \frac{E_{ER}(n) + T_T^2(n)}{E - E_M(n)}, \end{aligned} \quad (\text{A2.7})$$

donde

$$\begin{aligned}
 E_{EM}(n) &= E_R(n-2) + E_L(n-2), & E_{EL}(n) &= \frac{E_L(n-2) + T^2(n-2)}{E - E_{EM}(n)}, \\
 T_T(n) &= \frac{T^2(n-2)}{E - E_{EM}(n)}, & E_{ER}(n) &= \frac{E_R(n-2) + T^2(n-2)}{E - E_{EM}(n)}.
 \end{aligned} \tag{A2.8}$$

Las funciones de Green para el caso sin saturador son:

$$\begin{aligned}
 G_{LL} &= \frac{(E - E_R(N))}{[E - E_R(N)][E - E_L(N)] - T^2(N)}, \\
 G_{RR} &= \frac{(E - E_L(N))}{[E - E_R(N)][E - E_L(N)] - T^2(N)}, \\
 G_{LR} &= \frac{T(N)}{[E - E_R(N)][E - E_L(N)] - T^2(N)}.
 \end{aligned} \tag{A2.9}$$

Y para el caso con saturador:

$$\begin{aligned}
 G_{LL} &= \frac{\kappa_2}{\kappa_1 \kappa_2 - T^2(N)}, \\
 G_{RR} &= \frac{\kappa_1}{\kappa_1 \kappa_2 - T^2(N)}, \\
 G_{LR} &= \frac{T(N)}{\kappa_1 \kappa_2 - T^2(N)},
 \end{aligned} \tag{A2.10}$$

donde:

$$\begin{aligned}
 \kappa_1 &= \frac{(E - E_{MP1}) - T_P^2(N)}{(E - E_{LP}(N))}, \\
 \kappa_2 &= \frac{(E - E_{MP2}) - T_P^2(N)}{(E - E_{RP}(N))},
 \end{aligned} \tag{A2.11}$$

Con  $E_{MP1} = E_{RP}(N) + E_L(N)$ .  
 $E_{MP2} = E_{LP}(N) + E_R(N)$ .

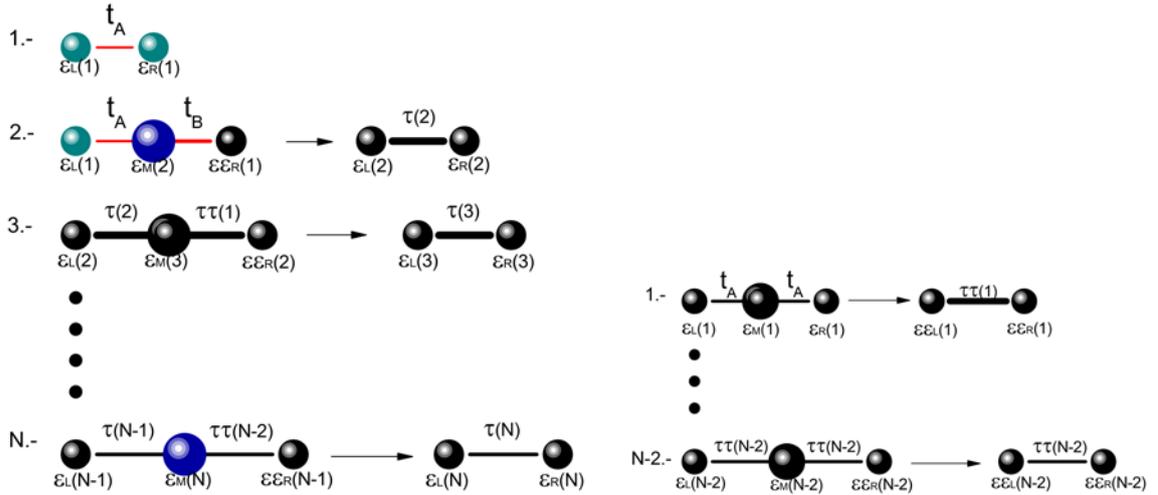
En tanto que las relaciones de recurrencia de las energías e integrales de salto para los saturadores están dadas por:

$$E_{EMP}(M) = E_{RP}(M-2) + E_{LP}(M-2), \quad E_{ELP}(M) = \frac{E_{LP}(M-2) + T_P^2(M-2)}{E - E_{EMP}(M)}, \quad (\text{A2.12})$$

$$T_{TP}(M) = \frac{T_P(M-2)T_P(M-2)}{E - E_{EMP}(M)}, \quad E_{ERP}(M) = \frac{E_{RP}(M-2) + T_P^2(M-2)}{E - E_{EMP}(M)}.$$

Donde M es la generación máxima para el saturador. Teniendo las siguientes condiciones iniciales:

$$\begin{aligned} T_P(1) &= t, & T_P(2) &= \frac{t^2}{E}, \\ E_{LP}(1) &= 0.0, & E_{LP}(2) &= \frac{t^2}{E}, \\ E_{RP}(1) &= 0.0, & E_{RP}(2) &= \frac{t^2}{E}. \end{aligned} \quad (\text{A2.13})$$



**Figura A2. Método de Renormalización aplicado a un sistema aperiódico tipo Doble Período para obtener la DOS.**

De esta forma se obtuvo todos los espectros de DOS para sistemas de Doble Período.

# APENDICE III

## Densidad de Estados para un Sistema Tipo Thue Morse

La densidad de estados esta dado por la siguiente expresión:

$$DOS(E + i\eta) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(\text{Tr}G^+(E + i\eta)). \quad (\text{A3.1})$$

Para este tipo de sistemas la densidad de estados toma la siguiente forma:

$$DOS(E, n) = DOS(E, n-1) + DOS^*(E, n-1) - G_{ii}, \quad (\text{A3.2})$$

⇒

$$DOS(E, N) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[A(N)G_{11} + B(N)G_{22} + C(N)G_{12} + D(N)]. \quad (\text{A3.3})$$

Siendo la  $DOS^*$  la densidad de estados de la cadena representada en la figura A3.

En este caso “n” corre desde 3 hasta N; siendo N la generación máxima para la cual se quiere calcular la densidad de estados.

Donde:

$$A(n) = A(n-1) + \frac{[A_A(n-1) + B(n-1) - 1.0] T^2(n-1)}{[E - E_M(n)]^2} + \frac{C(n-1)T(n-1)}{E - E_M(n)}$$

$$B(n) = B_B(n-1) + \frac{[A_A(n-1) + B(n-1) - 1.0] T_T^2(n-1)}{[E - E_M(n)]^2} + \frac{C(n-1)T(n-1)}{E - E_M(n)} \quad (\text{A3.4})$$

$$C(n) = \frac{2.0[A_A(n-1) + B(n-1) - 1.0] T_T(n-1)T(n-1)}{[E - E_M(n)]^2} + \frac{C(n-1)T_T(n-1)}{E - E_M(n)} + \frac{C_C(n-1)T(n-1)}{E - E_M(n)}$$

$$D(n) = \frac{[A_A(n-1) + B(n-1) - 1.0]}{E - E_M(n)} + D_D(n-1) + D(n-1)$$

Así mismo

$$\begin{aligned}
 A_A(n) &= A_A(n-1) + \frac{[A(n-1) + B_B(n-1) - 1.0]T_T^2(n-1)}{[E - E_{EM}]^2} + \frac{C_C(n-1)T_T(n-1)}{E - E_{EM}} \\
 B_B(n) &= B_B(n-1) + \frac{[A(n-1) + B_B(n-1) - 1.0]T_T^2(n-1)}{[E - E_{EM}]^2} + \frac{C_C(n-1)T_T(n-1)}{E - E_{EM}}
 \end{aligned} \tag{A3.5}$$

$$C_C(n) = \frac{2.0[A(n-1) + B_B(n-1) - 1.0]T_T(n-1)T(n-1)}{[E - E_{EM}]^2} + \frac{C_C(n-1)T(n-1)}{E - E_{EM}} + \frac{C_C(n-1)T_T(n-1)}{E - E_{EM}}$$

$$D_D(n) = \frac{[A(n-1) + B_B(n-1) - 1.0]}{E - E_{EM}} + D(n-1) + D_D(n-1)$$

$$E_{ME}(n) = [B(n-1) + A_A(n) - 1.0]$$

En todas relaciones de recurrencia requieren de condiciones iniciales, las cuales se muestran a continuación:

$$\begin{aligned}
 A(1) &= 1.0, & T(1) &= t_A, & A(2) &= 1.0 + \frac{t_A^2}{E^2}, & T(2) &= \frac{t_A t_B}{E}, \\
 B(1) &= 1.0, & E_L(1) &= 0.0, & B(2) &= 1.0 + \frac{t_B^2}{E^2}, & E_L(2) &= \frac{t_A^2}{E}, \\
 C(1) &= 0.0, & E_R(1) &= 0.0, & C(2) &= \frac{2.0(t_A t_B)}{E^2}, & E_R(2) &= \frac{t_B^2}{E}. \\
 D(1) &= 0.0, & & & D(2) &= \frac{1.0}{E}, & &
 \end{aligned} \tag{A3.6}$$

$$\begin{aligned}
 A_A(1) &= 1.0, & T_T(1) &= t_{tB}, & A_A(2) &= 1.0 + \frac{t_{tB}^2}{E^2}, & T_T(2) &= \frac{t_{tA} t_{tB}}{E}, \\
 B_B(1) &= 1.0, & E_{EL}(1) &= 0.0, & B_B(2) &= 1.0 + \frac{t_{tA}^2}{E^2}, & E_{EL}(2) &= \frac{t_{tB}^2}{E}, \\
 C_C(1) &= 0.0, & E_{ER}(1) &= 0.0, & C_C(2) &= \frac{2.0(t_{tA} t_{tB})}{E^2}, & E_{ER}(2) &= \frac{t_{tA}^2}{E}. \\
 D_D(1) &= 0.0, & & & D_D(2) &= \frac{1.0}{E}, & &
 \end{aligned} \tag{A3.7}$$

Cuando el sistema ha sido renormalizado las relaciones obtenidas tanto para la energía como las integrales de salto efectivas son:

$$\begin{aligned}
E_M(n) &= E_R(n-1) + E_{EL}(n), & E_L(n) &= \frac{E_L(n-1) + T^2(n-1)}{E - E_M(n)}, \\
T(n) &= \frac{T_T(n-1)T(n-1)}{E - E_M(n)}, & E_R(n) &= \frac{E_{ER}(n-1) + T_T^2(n)}{E - E_M(n)},
\end{aligned} \tag{A3.8}$$

donde

$$\begin{aligned}
E_{EM}(n) &= E_{ER}(n-1) + E_L(n-1), & E_{EL}(n) &= \frac{E_{EL}(n-1) + T_T^2(n-1)}{E - E_{EM}(n)}, \\
T_T(n) &= \frac{T_T(n-1)T(n-1)}{E - E_{EM}(n)}, & E_{ER}(n) &= \frac{E_R(n-1) + T^2(n-1)}{E - E_{EM}(n)},
\end{aligned} \tag{A3.9}$$

Las funciones de Green para el caso sin saturador son:

$$\begin{aligned}
G_{LL} &= \frac{(E - E_R(N))}{[E - E_R(N)][E - E_L(N)] - T^2(N)} \\
G_{RR} &= \frac{(E - E_L(N))}{[E - E_R(N)][E - E_L(N)] - T^2(N)} \\
G_{LR} &= \frac{T(N)}{[E - E_R(N)][E - E_L(N)] - T^2(N)}
\end{aligned} \tag{A3.10}$$

Y para el caso con saturador:

$$\begin{aligned}
G_{LL} &= \frac{\kappa_2}{\kappa_1\kappa_2 - T^2(N)} \\
G_{RR} &= \frac{\kappa_1}{\kappa_1\kappa_2 - T^2(N)} \\
G_{LR} &= \frac{T(N)}{\kappa_1\kappa_2 - T^2(N)}
\end{aligned} \tag{A3.11}$$

Donde:

$$\kappa_1 = \frac{(E - E_{MP1}) - T_P^2(N)}{(E - E_{LP}(N))}, \quad \text{Con} \quad \begin{aligned} E_{MP1} &= E_{RP}(N) + E_L(N). \\ E_{MP2} &= E_{LP}(N) + E_R(N). \end{aligned} \quad (\text{A3.12})$$

$$\kappa_2 = \frac{(E - E_{MP2}) - T_P^2(N)}{(E - E_{RP}(N))},$$

Las relaciones de recurrencia para las energías e integrales de salto de los saturadores están dadas por:

$$\begin{aligned} E_{EMP}(M) &= E_{ERP}(M-1) + E_{LP}(M-1), & E_{ELP}(M) &= \frac{E_{ELP}(M-1) + T_{TP}^2(M-1)}{E - E_{EMP}(M)}, \\ T_{TP}(M) &= \frac{T_{TP}(M-1)T_P(M-1)}{E - E_{EMP}(M)}, & E_{ERP}(M) &= \frac{E_{RP}(M-1) + T_P^2(M-1)}{E - E_{EMP}(M)}. \end{aligned} \quad (\text{A3.13})$$

Donde M es la generación máxima para el saturador. Las condiciones iniciales:

$$\begin{aligned} T_P(1) &= t & T_{TP}(1) &= t & T_{TP}(2) &= \frac{t^2}{E} & T_P(2) &= \frac{t^2}{E} \\ E_{LP}(1) &= 0.0 & E_{ELP}(1) &= 0.0 & E_{ELP}(2) &= \frac{t^2}{E} & E_{LP}(2) &= \frac{t^2}{E} \\ E_{RP}(1) &= 0.0 & E_{ERP}(1) &= 0.0 & E_{ERP}(2) &= \frac{t^2}{E} & E_{RP}(2) &= \frac{t^2}{E} \end{aligned} \quad (\text{A3.14})$$

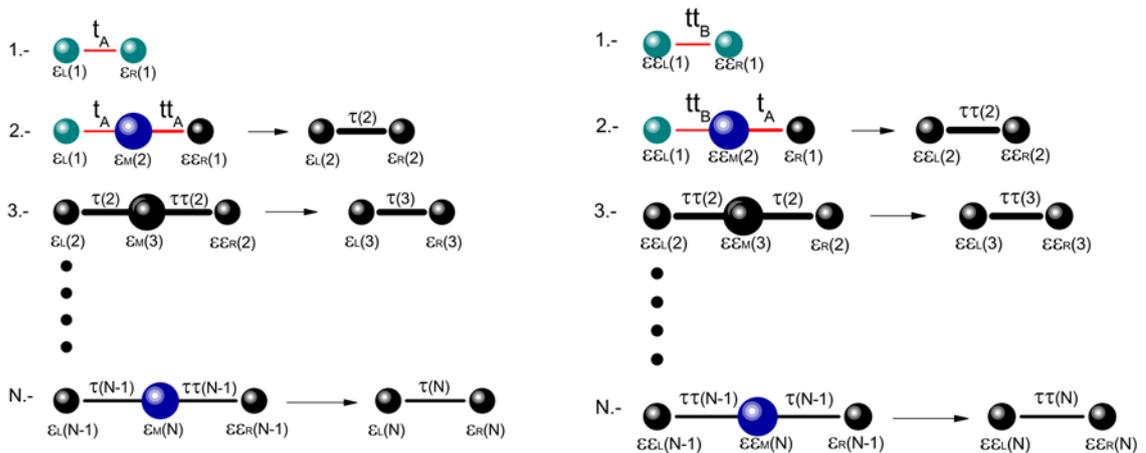


Figura A3. Método de Renormalización para un sistema aperiódico tipo Thue Morse con el fin de obtener la DOS. La figura de la izquierda muestra la cadena 1 y la de la derecha la cadena 2.

Estas son las relaciones de recurrencia con que se calcularon todos espectros de DOS para sistemas con un ordenamiento de átomos tipo Thue Morse.

## APENDICE IV

### Transmitancia para un Sistema Tipo Fibonacci

Para poder obtener el coeficiente de transmitancia se emplea la siguiente expresión anteriormente deducida:

$$T(E) = \frac{4 - \left(\frac{E}{t}\right)^2}{\left[\tau_{21} - \tau_{12} + (\tau_{22} - \tau_{11}) \frac{E}{2t}\right]^2 + (\tau_{22} + \tau_{11})^2 \left(1 - \frac{E^2}{4t^2}\right)} \quad (\text{A4.1})$$

Por ello es necesario obtener la matriz de transferencia del sistema; en el  $n$ -ésimo átomo es de la forma:

$$T_n = \begin{pmatrix} \frac{E - \varepsilon_n}{t_{n,n+1}} & -\frac{t_{n,n-1}}{t_{n,n+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A4.2})$$

Con el fin de facilitar la obtención de la matriz de transferencia total, esta se puede descomponer en tres sub-matrices: inicial, media y final. La matriz inicial para toda generación es:

$$I(n) = \begin{pmatrix} I_{11} & I_{12} \\ I_{21} & I_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{E}{t_A} & -\frac{t}{t_A} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A4.3})$$

En cambio, la matriz final cambia dependiendo si la generación es par o impar:

$$F(n) = \begin{cases} \text{Par} \left\{ \begin{pmatrix} \frac{E}{t} & -\frac{t_B}{t} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \right. \\ \\ \left. \text{Impar} \left\{ \begin{pmatrix} \frac{E}{t} & -\frac{t_A}{t} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \right. \right. \end{cases} \quad (\text{A4.4})$$

La matriz media para la generación n-esima

$$M(n) = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}. \quad (\text{A4.5})$$

Donde cada una de la entradas son:

$$\begin{aligned} M_{11}(n) &= [M_{11}(n-2) \mathcal{G}_{11}(n) M_{11}(n-1)] + [M_{12}(n-2) \mathcal{G}_{21}(n) M_{11}(n-1)] \\ &\quad + [M_{21}(n-1) M_{11}(n-2) \mathcal{G}_{12}(n)] + [M_{21}(n-1) M_{12}(n-2) \mathcal{G}_{22}(n)], \\ M_{12}(n) &= [M_{12}(n-1) M_{11}(n-2) \mathcal{G}_{11}(n)] + [M_{12}(n-1) M_{12}(n-2) \mathcal{G}_{21}(n)] \\ &\quad + [M_{22}(n-1) M_{11}(n-2) \mathcal{G}_{12}(n)] + [M_{22}(n-1) M_{12}(n-2) \mathcal{G}_{22}(n)], \\ M_{21}(n) &= [M_{11}(n-1) M_{21}(n-2) \mathcal{G}_{11}(n)] + [M_{11}(n-1) M_{22}(n-2) \mathcal{G}_{21}(n)] \\ &\quad + [M_{21}(n-1) M_{21}(n-2) \mathcal{G}_{12}(n)] + [M_{21}(n-1) M_{22}(n-2) \mathcal{G}_{22}(n)], \\ M_{22}(n) &= [M_{12}(n-1) M_{21}(n-2) \mathcal{G}_{11}(n)] + [M_{12}(n-1) M_{22}(n-2) \mathcal{G}_{21}(n)] \\ &\quad + [M_{22}(n-1) M_{21}(n-2) \mathcal{G}_{12}(n)] + [M_{22}(n-1) C_{22}(n) M_{22}(n-2) ] \end{aligned} \quad (\text{A4.6})$$

Así mismo

$$(\text{A4.7}) \quad C(n) = \begin{cases} \text{Par} \left\{ \begin{pmatrix} \frac{E}{t_A} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \right. \\ \\ \text{Impar} \left\{ \begin{pmatrix} \frac{E}{t_A} & -\frac{t_B}{t_A} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \right. \end{cases}$$

Con las condiciones iniciales

$$M_{11}(2) = \begin{pmatrix} \frac{E}{t_B} & -\frac{t_A}{t_B} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad M_{11}(3) = \begin{pmatrix} \frac{E^2}{t_B t_A} - \frac{t_B}{t_A} & -\frac{E}{t_B} \\ \frac{E}{t_B} & -\frac{t_A}{t_B} \end{pmatrix}. \quad (\text{A4.8})$$

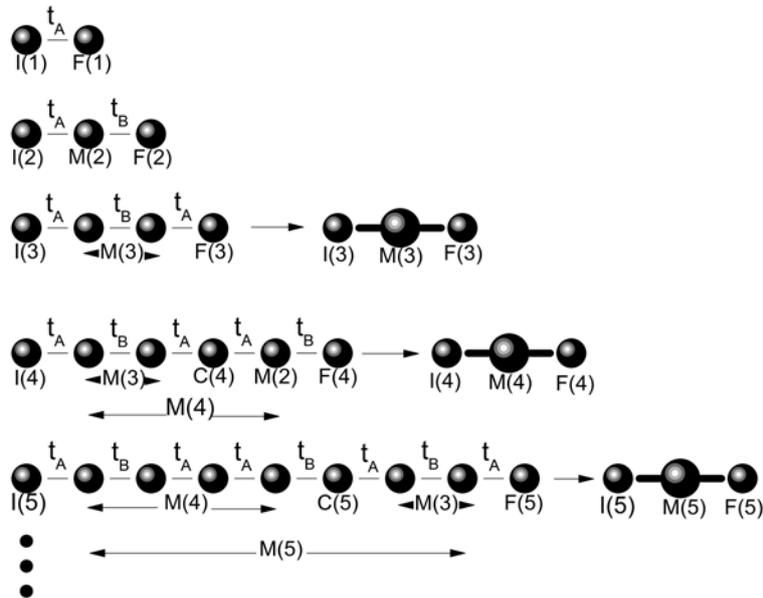
Por lo que la matriz de transferencia del sistema resulta:

$$\tau(n) = \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix}. \quad (\text{A4.9})$$

Siendo

$$\begin{aligned} \tau_{11} &= [I_{11}F_{11}M_{11}(N)] + [I_{11}F_{12}M_{21}(N)] + [I_{21}F_{11}M_{12}(N)] + [I_{21}F_{12}M_{22}(N)], \\ \tau_{12} &= [I_{12}F_{11}M_{11}(N)] + [I_{12}F_{12}M_{21}(N)] + [I_{22}F_{11}M_{12}(N)] + [F_{12}M_{22}I_{22}(N)], \\ \tau_{21} &= [I_{11}F_{21}M_{11}(N)] + [I_{11}F_{22}M_{21}(N)] + [I_{21}F_{21}M_{12}(N)] + [I_{21}F_{22}M_{22}(N)], \\ \tau_{22} &= [I_{12}F_{21}M_{11}(N)] + [I_{12}F_{22}M_{21}(N)] + [I_{22}F_{21}M_{12}(N)] + [I_{22}F_{22}M_{22}(N)]. \end{aligned} \quad (\text{A4.10})$$

De esta manera podemos encontrar el coeficiente de transmitancia.



**Figura A4. Método de Renormalización en un sistema aperiódico tipo Fibonacci para con el propósito de obtener la Transmitancia.**

## APENDICE V

### Transmitancia para un Sistema Tipo Doble Periodo

El coeficiente de transmitancia se puede obtener por medio de:

$$T(E) = \frac{4 - \left(\frac{E}{t}\right)^2}{\left[\tau_{21} - \tau_{12} + (\tau_{22} - \tau_{11}) \frac{E}{2t}\right]^2 + (\tau_{22} + \tau_{11})^2 \left(1 - \frac{E^2}{4t^2}\right)} \quad (\text{A5.1})$$

Para ello es necesario obtener la matriz de transferencia del sistema; en el n-esimo átomo es de la forma:

$$T_n = \begin{pmatrix} \frac{E - \varepsilon_n}{t_{n,n+1}} & -\frac{t_{n,n-1}}{t_{n,n+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A5.2})$$

Con el fin de obtener la matriz de transferencia total, esta la vamos a descomponer en tres sub-matrices: inicial, media y final. La matriz inicial para toda generación es:

$$I(n) = \begin{pmatrix} I_{11} & I_{12} \\ I_{21} & I_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{E}{t_A} & -\frac{t}{t_A} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A5.3})$$

En cambio, la matriz final depende si la generación es par o impar.

$$F(n) = \begin{cases} \text{Par} \left\{ \begin{pmatrix} \frac{E}{t} & -\frac{t_B}{t} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \right. \\ \\ \left. \text{Impar} \left\{ \begin{pmatrix} \frac{E}{t} & -\frac{t_A}{t} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \right. \right. \end{cases} \quad (\text{A5.4})$$

La matriz media para la generación n-esima es:

$$M(n) = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}, \quad (\text{A5.5})$$

donde,

$$\begin{aligned} M_{11}(n) = & M_{11}(n-1)(\chi_{11}(n)(M_{11}(n-2)(M_{11}(n-2)\beta_{11}(n) + M_{12}(n-2)\beta_{21}(n)) \\ & + M_{21}(n-2)(M_{11}(n-2)\beta_{12}(n) + M_{12}(n-2)\beta_{22}(n))) + \chi_{21}(n)(M_{12}(n-2)(M_{11}(n-2)\beta_{11}(n) \\ & + M_{12}(n-2)\beta_{21}(n)) + M_{22}(n-2)(M_{11}(n-2)\beta_{12}(n) + M_{12}(n-2)\beta_{22}(n))) \\ & + M_{21}(n-1)(\chi_{12}(n)(M_{11}(n-2)(M_{11}(n-2)\beta_{11}(n) + M_{12}(n-2)\beta_{21}(n)) \\ & + M_{21}(n-2)(M_{11}(n-2)\beta_{12}(n) + M_{12}(n-2)\beta_{22}(n))) + \chi_{22}(n)(M_{12}(n-2)(M_{11}(n-2)\beta_{11}(n) \\ & + M_{12}(n-2)\beta_{21}(n)) + M_{22}(n-2)(M_{11}(n-2)\beta_{12}(n) + M_{12}(n-2)\beta_{22}(n))) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} M_{12}(n) = & M_{12}(n-1)(\chi_{11}(n)(M_{11}(n-2)(M_{11}(n-2)\beta_{11}(n) + M_{12}(n-2)\beta_{21}(n)) \\ & + M_{21}(n-2)(M_{11}(n-2)\beta_{12}(n) + M_{12}(n-2)\beta_{22}(n))) + \chi_{21}(n)(M_{12}(n-2)(M_{11}(n-2)\beta_{11}(n) \\ & + M_{12}(n-2)\beta_{21}(n)) + M_{22}(n-2)(M_{11}(n-2)\beta_{12}(n) + M_{12}(n-2)\beta_{22}(n))) \\ & + M_{22}(n-1)(\chi_{12}(n)(M_{11}(n-2)(M_{11}(n-2)\beta_{11}(n) + M_{12}(n-2)\beta_{21}(n)) \\ & + M_{21}(n-2)(M_{11}(n-2)\beta_{12}(n) + M_{12}(n-2)\beta_{22}(n))) + \chi_{22}(n)(M_{12}(n-2)(M_{11}(n-2)\beta_{11}(n) \\ & + M_{12}(n-2)\beta_{21}(n)) + M_{22}(n-2)(M_{11}(n-2)\beta_{12}(n) + M_{12}(n-2)\beta_{22}(n))) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} M_{21}(n) = & M_{11}(n-1)(\chi_{11}(n)(M_{11}(n-2)(M_{21}(n-2)\beta_{11}(n) + M_{22}(n-2)\beta_{21}(n)) \\ & + M_{21}(n-2)(M_{21}(n-2)\beta_{12}(n) + M_{22}(n-2)\beta_{22}(n))) + \chi_{21}(n)(M_{12}(n-2)(M_{21}(n-2)\beta_{11}(n) \\ & + M_{22}(n-2)\beta_{21}(n)) + M_{22}(n-2)(M_{21}(n-2)\beta_{12}(n) + M_{22}(n-2)\beta_{22}(n))) \\ & + M_{21}(n-1)(\chi_{12}(n)(M_{11}(n-2)(M_{21}(n-2)\beta_{11}(n) + M_{22}(n-2)\beta_{21}(n)) \\ & + M_{21}(n-2)(M_{21}(n-2)\beta_{12}(n) + M_{22}(n-2)\beta_{22}(n))) + \chi_{22}(n)(M_{12}(n-2)(M_{21}(n-2)\beta_{11}(n) \\ & + M_{22}(n-2)\beta_{21}(n)) + M_{22}(n-2)(M_{21}(n-2)\beta_{12}(n) + M_{22}(n-2)\beta_{22}(n))) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} M_{22}(n) = & M_{12}(n-1)(\chi_{11}(n)(M_{11}(n-2)(M_{21}(n-2)\beta_{11}(n) + M_{22}(n-2)\beta_{21}(n)) \\ & + M_{21}(n-2)(M_{21}(n-2)\beta_{12}(n) + M_{22}(n-2)\beta_{22}(n))) + \chi_{21}(n)(M_{12}(n-2)(M_{21}(n-2)\beta_{11}(n) \\ & + M_{22}(n-2)\beta_{21}(n)) + M_{22}(n-2)(M_{21}(n-2)\beta_{12}(n) + M_{22}(n-2)\beta_{22}(n))) \\ & + M_{22}(n-1)(\chi_{12}(n)(M_{11}(n-2)(M_{21}(n-2)\beta_{11}(n) + M_{22}(n-2)\beta_{21}(n)) \\ & + M_{21}(n-2)(M_{21}(n-2)\beta_{12}(n) + M_{22}(n-2)\beta_{22}(n))) + \chi_{22}(n)(M_{12}(n-2)(M_{21}(n-2)\beta_{11}(n) \\ & + M_{22}(n-2)\beta_{21}(n)) + M_{22}(n-2)(M_{21}(n-2)\beta_{12}(n) + M_{22}(n-2)\beta_{22}(n))) \end{aligned}$$

(A5.6)

Asimismo

$$C(n) = \begin{pmatrix} \frac{E}{t_A} & -\frac{t_B}{t_A} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad C_A(n) = \begin{pmatrix} \frac{E}{t_A} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\beta(n) = \begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} \\ \beta_{21} & \beta_{22} \end{pmatrix} = \begin{cases} \text{Par} \left\{ \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{pmatrix}, \right. \\ \left. \text{Impar} \left\{ \begin{pmatrix} C_{A11} & C_{A12} \\ C_{A21} & C_{A22} \end{pmatrix}, \right. \right. \end{cases} \quad (\text{A5.7})$$

$$\chi(n) = \begin{pmatrix} \chi_{11} & \chi_{12} \\ \chi_{21} & \chi_{22} \end{pmatrix} = \begin{cases} \text{Par} \left\{ \begin{pmatrix} C_{A11} & C_{A12} \\ C_{A21} & C_{A22} \end{pmatrix}, \right. \\ \left. \text{Impar} \left\{ \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{pmatrix}. \right. \right. \end{cases}$$

Con las condiciones iniciales

$$M(2) = \begin{pmatrix} \frac{E}{t_B} & -\frac{t_A}{t_B} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad M(3) = \begin{pmatrix} \frac{E\alpha_{11}}{t_B} + \alpha_{12} & -\frac{t_A\alpha_{11}}{t_B} \\ \frac{E\alpha_{21}}{t_B} + \alpha_{22} & -\frac{\alpha_{21}t_A}{t_B} \end{pmatrix}, \quad (\text{A5.7})$$

$$\alpha = \begin{pmatrix} \frac{E^2}{t_A^2} + 1 & -\frac{t_B E}{t_A^2} \\ \frac{E}{t_A} & -\frac{t_B}{t_A} \end{pmatrix}.$$

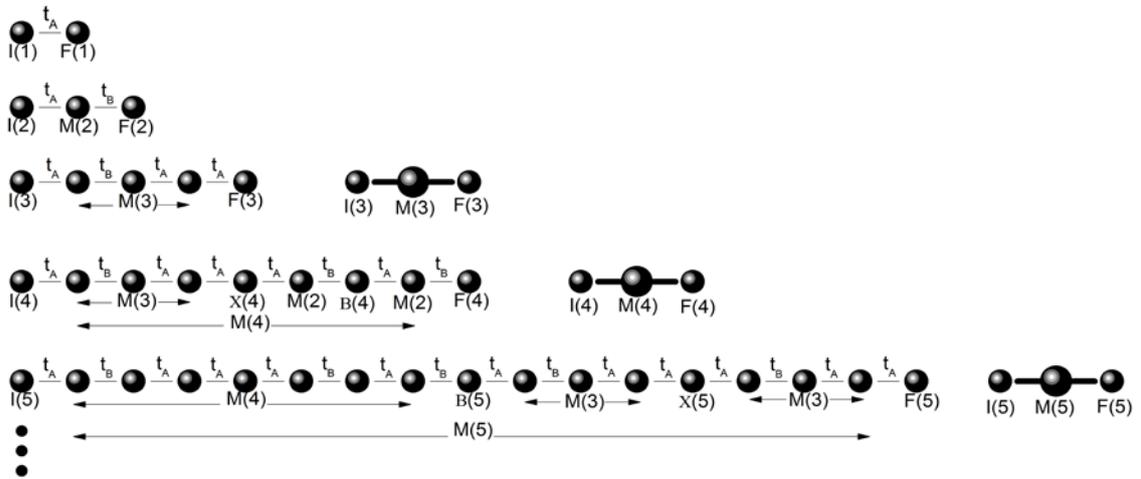
Por lo que la matriz de transferencia del sistema resulta:

$$\tau(n) = \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix}. \quad (\text{A5.8})$$

Siendo

$$\begin{aligned} \tau_{11} &= [I_{11}F_{11}M_{11}(N)] + [I_{11}F_{12}M_{21}(N)] + [F_{11}M_{12}(N)] + [F_{12}M_{22}(N)], \\ \tau_{12} &= [I_{12}F_{11}M_{11}(N)] + [I_{12}F_{12}M_{21}(N)], \\ \tau_{21} &= [I_{11}M_{11}(N)] + M_{12}(N), \\ \tau_{22} &= I_{12}M_{11}(N). \end{aligned} \tag{A5.9}$$

De esta manera podemos encontrar el coeficiente de transmitancia para este sistema.



**Figura A5. Método de Renormalización para un sistema aperiódico tipo Doble Período para obtener la Transmitancia.**

## APENDICE VI

### Transmitancia para un Sistema Tipo Thue Morse

La transmitancia eléctrica se puede obtener mediante:

$$T(E) = \frac{4 - \left(\frac{E}{t}\right)^2}{\left[\tau_{21} - \tau_{12} + (\tau_{22} - \tau_{11}) \frac{E}{2t}\right]^2 + (\tau_{22} + \tau_{11})^2 \left(1 - \frac{E^2}{4t^2}\right)} \quad (\text{A6.1})$$

Por ello es necesario obtener la matriz de transferencia del sistema; siendo que para el n-esimo átomo es de la forma:

$$T_n = \begin{pmatrix} \frac{E - \varepsilon_n}{t_{n,n+1}} & -\frac{t_{n,n-1}}{t_{n,n+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A6.2})$$

Descomponemos la matriz de transferencia total en tres sub-matrices: inicial, media y final. La matriz inicial para toda generación es:

$$I(n) = \begin{pmatrix} I_{11} & I_{12} \\ I_{21} & I_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{E}{t_A} & -\frac{t}{t_A} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A6.3})$$

La matriz final cambia dependiendo si la generación es par o impar.

$$F(n) = \begin{cases} \text{Par} \left\{ \begin{pmatrix} \frac{E}{t} & -\frac{t_B}{t} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \right. \\ \\ \left. \text{Impar} \left\{ \begin{pmatrix} \frac{E}{t} & -\frac{t_A}{t} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \right. \right. \end{cases} \quad (\text{A6.4})$$

La matriz media para la generación n-esima es:

$$M(n) = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}, \quad (\text{A6.5})$$

donde,

$$M_{11}(n) = M_{A11}(n-1)C_{11}(n)M_{11}(n-1) + M_{A12}(n-1)M_{11}(n-1) + M_{21}(n-1)M_{A11}(n-1)C_{12}(n),$$

$$M_{12}(n) = M_{12}(n-1)M_{A11}(n-1)C_{11}(n) + M_{A12}(n-1)M_{12}(n-1) + M_{22}(n-1)M_{A11}(n-1)C_{12}(n),$$

$$M_{21}(n) = M_{11}(n-1)M_{A21}(n-1)C_{11}(n) + M_{11}(n-1)M_{A22}(n-1) + M_{21}(n-1)M_{A21}(n-1)C_{12}(n),$$

$$M_{22}(n) = M_{12}(n-1)M_{A21}(n-1)C_{11}(n) + M_{12}(n-1)M_{A22}(n-1) + M_{22}(n-1)M_{A21}(n-1)C_{12}(n),$$

$$M_{A11}(n) = M_{A11}(n-1)C_{A11}(n)M_{11}(n-1) + M_{A11}(n-1)M_{12}(n-1) + M_{11}(n-1)M_{A21}(n-1)C_{A12}(n),$$

$$M_{A12}(n) = M_{11}(n-1)M_{A12}(n-1)C_{A11}(n) + M_{A12}(n-1)M_{12}(n-1) + M_{11}(n-1)M_{A22}(n-1)C_{A12}(n),$$

$$M_{A21}(n) = M_{21}(n-1)M_{A11}(n-1)C_{A11}(n) + M_{22}(n-1)M_{A11}(n-1) + M_{21}(n-1)M_{A21}(n-1)C_{A12}(n),$$

$$M_{A22}(n) = M_{21}(n-1)M_{A12}(n-1)C_{A11}(n) + M_{22}(n-1)M_{A12}(n-1) + M_{21}(n-1)M_{A22}(n-1)C_{A12}(n).$$

(A6.6)

Así mismo

$$C(n) = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{pmatrix} = \begin{cases} \text{Par} \left\{ \begin{pmatrix} \frac{E}{t_B} & -\frac{t_A}{t_B} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \right. \\ \left. \text{Impar} \left\{ \begin{pmatrix} \frac{E}{t_B} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \right. \right. \end{cases} \quad C_A(n) = \begin{pmatrix} C_{A11} & C_{A12} \\ C_{A21} & C_{A22} \end{pmatrix} = \begin{cases} \text{Par} \left\{ \begin{pmatrix} \frac{E}{t_A} & -\frac{t_B}{t_A} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right. \\ \left. \text{Impar} \left\{ \begin{pmatrix} \frac{E}{t_A} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right. \right. \end{cases} \quad (\text{A6.7})$$

Con las condiciones iniciales

$$M(2) = \begin{pmatrix} \frac{E}{t_B} & -\frac{t_A}{t_B} \\ t_B & t_B \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad M_A(2) = \begin{pmatrix} \frac{E}{t_A} & -\frac{t_B}{t_A} \\ t_A & t_A \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A6.8})$$

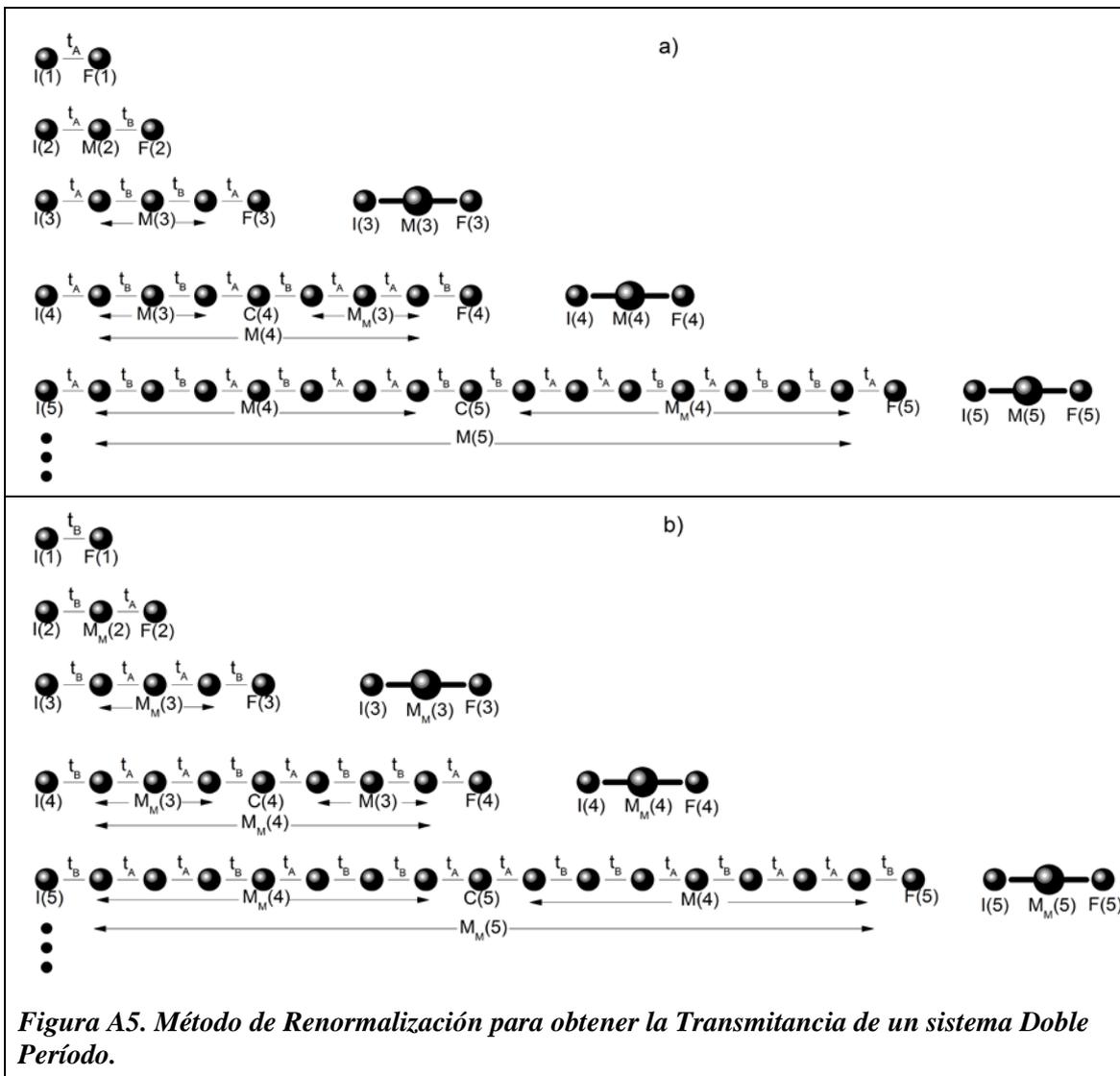
Por lo que la matriz de transferencia del sistema resulta ser:

$$\tau(n) = \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix}. \quad (\text{A6.9})$$

Siendo

$$\begin{aligned} \tau_{11} &= [I_{11}F_{11}M_{11}(N)] + [I_{11}F_{12}M_{21}(N)] + [F_{11}M_{12}(N)] + [F_{12}M_{22}(N)], \\ \tau_{12} &= [I_{12}F_{11}M_{11}(N)] + [I_{12}F_{12}M_{21}(N)], \\ \tau_{21} &= [I_{11}M_{11}(N)] + M_{12}(N), \\ \tau_{22} &= I_{12}M_{11}(N). \end{aligned} \tag{A6.10}$$

Así encontramos el coeficiente de transmitancia del sistema.



# Capítulo 6

## Bibliografía

- [Aguilar, 1997] G. Aguilar, *El Hombre y los Materiales* (Fondo de Cultura Económica, 1997).
- [Aldabe, 2005] S. Aldabe y F. Doctorovich, *Materiales Cristalinos* (Ministerio de Educación ciencia y tecnología, 2005).
- [Ashcroft, 1976] N. W. Ashcroft y N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Saunders College Publishing, 1976).
- [Askeland, 1998] D. R. Askeland, *Ciencia e Ingeniería de los Materiales* (International Thomson Editores, 1998).
- [Bakhtiari, 2006] M. R. Bakhtiari, P. Vignolo y M. P. Tosi, *Theory of coherent transport by an ultra-cold atomic Fermi gas through linear arrays of potential wells* (Elsevier Science, 2006).
- [Brown, 1998] T.L. Brown, H.E. LeMay y B.E. Bursten, *Química: La Ciencia Central*, (Prentice Hall, 1998).
- [Datta, 1995] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, (Cambridge University Press, London, 1995).
- [Dekker, 1958] A.J. Dekker, *Solid State Physics* (Prentice-Hall, 1958).
- [Duan, 2005] F. Duan y &. Guojun, *Introduction to Condensed Matter Physics* (World Scientific, Vol. 1, 2005).
- [Dubois, 2005] J. M. Dubois, *Useful Quasicrystals* (World Scientific, 2005).
- [Economou, 1981] E.N. Economou y C.M. Soukoulis, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 618 (1981).
- [Economou, 2006] E.N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics* (Springer Series in Solid-State Sciences, **Vol. 7**, 2006).

- [Gonis, 1992] A. Gonis, *Green functions for Ordered and Disordered Systems*, (North-Holland, 1992)
- [Grosso, 2003] G. Grosso & G. P. Parravicini, *Solid State Physics* (Academic Press, 2003).
- [Hinojosa, 2000] M. Hinojosa, *Ingeniería*, Julio-Septiembre, **Vol. III**, No.8 (2000).
- [Imry, et al., 1999] Y. Imry y R. Landauer, *Rev. Mod. Phys.* **71**, S306 (1999).
- [Janssen, 2007] T. Janssen, G. Chapuis y M. de Boissieu, *Aperiodic Crystals* (Oxford University Press, 2007).
- [Janot, 1994] C. Janot, *Quasicrystals A Primer* (Clarendon Press Oxford, 1994)
- [Kittel, 2005] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics* (John Wiley & Sons, 2005).
- [Landauer, 1992] R. Landauer, *Physica Scripta* **T42**, 110 (1992).
- [Louzguine, 2008] D. V. Louzguine y A. Inoue, *Formation and Properties of Quasicrystals* (Annual Review of Materials Research, 2008).
- [Naomis, 2003] G.G. Naomis, *Nuevas Tecnologías que urgen del Desorden: Los Materiales Amorfos*, Ciencias, **Vol. 54**, 4 (2003).
- [Ortiz, 1990] L. Ortiz, *Resistencia de Materiales* (McGraw-Hill, 1990).
- [Penrose, 1974] R. Penrose, *Bull. Inst. Math. Appl.* **10**, 266 (1974).
- [Picciotto, 2001] R. de Picciotto, H.L. Stormer, L.N. Pfeiffer, K.W. Baldwin, K.W. West, *Nature* **411**, 848 (2001).
- [Bruijn, 1981] N.G. de Bruijn, K. Nederl. Akad. Wetensch. *Proc. Ser. A*, **84**, 1 (1981); *ibid.* **84**, 39 (1981); *ibid.* **84**, 53 (1981).

- [Reyes, 2000] M. E. Reyes y M. Hinojosa, *Ingeniería*, Octubre-Diciembre, **Vol. III**, No.9 (2000).
- [Rodríguez, 1986] J. Rodríguez, *Fundamentos de Cristalografía Física* (Universidad de Colombia, 1986).
- [Rogan, 2000] J. Rogan, G. Gutiérrez y E. Menéndez, *Apuntes de un curso de Introducción a la Física de Sólidos* (Departamento de Física, Universidad de Chile, 2000).
- [Sánchez, 2004] V. Sánchez y C. Wang, *application of renormalization and convolution methods to the Kubo-Greenwood formula in multidimensional Fibonacci systems*. *Phys. Rev. B* **70**, 144207 (2004).
- [Shechtman, 1984] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias y J.W. Chach, *Phys. Rev. Lett*, **53**, 1951 (1984)
- [Steurer, 2009] W. Steurer y S. Deloudi, *Crystallography of Quasicrystals* (Springer Series in Materials Science, **Vol. 126**, 2009).
- [Szwacka, 2000] T. Szwacka, *Introducción a la física del estado sólido: CRISTALOGRAFÍA* (Departamento de Física, Universidad de Los Andes, 2000).