



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

FACULTAD DE CIENCIAS

**CONDUCTIVIDAD ELÉCTRICA EN CADENAS
APERIÓDICAS**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

FÍSICO

P R E S E N T A:

JUAN GUILLERMO MUNGUÍA FERNÁNDEZ



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

2012



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

DATOS DEL JURADO

1. Datos del alumno
Juan Guillermo
Munguía
Fernández
juanguillermo@ciencias.unam.mx
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ciencias
300339208

2. Datos del tutor
Dra.
Vicenta
Sánchez
Morales

3. Datos del sinodal 1
Dra.
María de los Ángeles
Ortiz
Flores

4. Datos del sinodal 2
Dra.
Rosario
Paredes
Gutiérrez

5. Datos del sinodal 3
Dra.
Estrella Angélica
Ramos
Peña

- Datos del sinodal 4
6. Dr.
Raúl Patricio
Esquivel
Sirvent

7. Datos del trabajo escrito
Conductividad eléctrica en cadenas aperiódicas
108p
2012

A MIS PADRES...

AGRADECIMIENTOS

A mis padres. Silvia Fernández Hernández y Lucas Munguía Mora...

Que siempre me enseñaron que nunca hay que darse por vencido a pesar de las limitaciones que uno padezca, me mostraron que siempre hay que tener una sonrisa en todo momento. Aunque los decepcioné muchas veces y perdieron las esperanzas en mi, nunca dejaron de apoyarme. Habría tantas cosas que decir pero nunca acabaría y solo finalizo que los AMO MUCHISIMO.

A mi hermana. Silvia Munguía Fernández...

Es difícil decir algo cuando has conocido a una persona desde que nació y has crecido con ella, porque nunca hicieron falta palabras para expresar mis sentimientos hacia ti, sin embargo ahora que las palabras son importantes agradezco tu compañía, tu cariño y porque este viaje ha sido divertido a tu lado.

A Betsabe Méndez Ramos...

Has sido la persona que le ha dado tranquilidad a mi vida tan agitada y loca, has confiado mucho en mi capacidades y siempre me has motivado. Por todas estas cosas y otras más te AMO.

A los de la cuadra...

Mencionar a todos lo que he conocido y he compartido el aplanado de las calles desde la infancia es complicado, es aquí donde aprendí mucho de mis aciertos y sin embargo aun más de mis errores. Por quererme comer la vida en un solo bocado, viví uno de los episodios más desafortunados pero también de mucho aprendizaje en mi vida. Aprendí la lealtad y que a un amigo nunca se le deja solo. Hay muchas cosas que no olvidare y el mas grande aporte que me dieron fue que aprendí y disfrute bailar Salsa, y lo sigo haciendo.

A los Tx7's...

Como olvidar el paso por el CCH Sur, donde conocí grandes amistades como Santos Zarco, Niel Mata, Víctor Mora, Juan Maldonado y Edgar Sánchez, donde este último se nos ha adelantado, tengo la dicha de seguir viendo a los demás; a ellos les doy gracias por haberme brindado su amistad.

Mis amigos de ciencias...

En esta etapa he conocido a tanta gente que no puedo recordar a todos con los que me juntaba, por que esto de la amistad es liquida, ya que es compleja y fluida, que un semestre estas tomando clases con algunos y en otro ya estas

empezando nuevas relaciones, pero siempre hay relaciones que son inamovibles como Alejandro Becerril, Hans Cruz, Estrella Terán, Yadhira Salazar, Mary Loli, Ricardo Barrera, Mariana Centeno, Nohemí Araceli, Néstor Cotzomi, Fernando Yautenzi, Ulises Guzmán, Arturo Rodríguez, Adriana Argumedo, Citlalli Mendez, Edward Reyes, Carlos Aguilera, Estefany Méndez, Karla Ortiz y Gina Prado, en el mas reciente año Roxana Marisol y Fernando Buendía.

Hay amigos que aunque haya una discusión y por más que pase el tiempo la amistad parece que queda intacta, en este caso me refiero a mis grandes amigos y cómplices Zeus Valtierra, Mario Morales y Xareni Soriano, en los cuales puedo confiar plenamente ya que nos conocemos tal y como somos, en pocas palabras como dice Zeus "conozco como trabaja mi gente".

Mi grupo de trabajo. Dra. Vicenta Sánchez Morales y Fernando Sánchez Rueda...

Antes solo era un compañero de la facultad pero con el pasar de los días se ha vuelto un gran amigo y de no ser por él esta tesis no seria posible, ya que fue él quien me presento con la Dra. Vicenta y por eso le doy las gracias.

A la Dra. Vicenta le doy las gracias por tenerme una infinita paciencia ya que sé que no es fácil trabajar conmigo, pero aparte de ser mi asesora también ha sido mi amiga lo cual le agradezco mucho, aun más le doy las gracias ya que es ella la culpable de animarme y de que ahora este haciendo la Maestría.

A mi segunda casa...

Agradezco a la UNAM y en especial a la Facultad de Ciencias la cual me ha permitido utilizar sus instalaciones para mi formación, y así desarrollar mis capacidades y aportarme herramientas para hacerle frente a la vida diaria. También agradezco al Departamento de Física de la Facultad por que me permitieron utilizar el cubículo 405 para realizar mi tesis.

A mí jurado...

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

A la DGAPA y DGTIC...

Finalmente agradezco a la DGAPA por el apoyo recibido a través del proyecto PAPIIT IN119011 y a la DGTIC por permitirme utilizar las supercomputadoras Bakliz y Kan-Balam para la realización de mis cálculos utilizados en esta tesis.

Fábula de Esopo: El Escorpión y la Rana

Estaba una rana descansando junto a la orilla de un río, cuando se le acercó un escorpión que le dijo:

—Amiga rana, ¿puedes ayudarme a cruzar el río llevándome en tu espalda?

— ¿Que te lleve sobre mi espalda? contestó la rana ¡Ni pensarlo! ¡Te conozco! Si te llevo en mi espalda, sacarás tu aguijón, me picarás y me matarás. Lo siento, pero no puede ser.

—No seas tonta, le respondió el escorpión ¿No ves que si te pico con mi aguijón, te hundirás en el agua y como yo no se nadar, también me ahogaré?

La rana se negó al principio, pero la incuestionable lógica del escorpión la convenció y al final acepto.

—Mira, escorpión. Después de haberlo meditado, te voy a ayudar a cruzar el río, ¡Sube! El escorpión se colocó sobre la espalda de la rana y empezaron juntos a cruzar el río.

Cuando habían llegado a la mitad del trayecto, el escorpión picó con su aguijón a la rana y ésta sintió el picotazo y cómo el veneno mortal se extendía por su cuerpo. Mientras se ahogaba, sacó las últimas fuerzas que le quedaban para preguntarle al escorpión por su acción:

—No entiendo nada... ¿Por qué lo has hecho? Tú también vas a morir. El escorpión le respondió:

—Lo siento ranita, no he podido evitarlo ¡Es mi naturaleza!!

Índice general

Resumen	I
Introducción	II

Capítulo I Sistemas Aperiódicos

Introducción	1
Cristales	2
Periodicidad y celda unitaria	3
Simetría de los cristales	5
Sistema de coordenadas	7
Sistema de índices para planos cristalinos	9
Red recíproca	10
Función de Bloch	11
Cristales amorfos	13
Aleatoriedad y desorden	15
Cuasicristales	16
Aleaciones cuasicristalinas	18
Aplicaciones	20
Cuasicristales unidimensionales	21

Capítulo II Propiedades eléctricas

Funciones de Wannier	23
Modelo de amarre fuerte	24
Función de Green	25
Conductividad eléctrica	28
Conductividad eléctrica dc para metales	30
Fórmula de Landauer	31
Transmitancia	32
Localización	34

Capítulo III Transporte Electrónico

Introducción	39
Cadenas de Fibonacci	40
Cadenas de Thue Morse	44

Cadenas de doble período	48
Estados transparentes	52
Localización	61
Conclusiones	66
Apéndice A	69
Apéndice B	71
Apéndice C	74
Apéndice D	77
Apéndice E	79
Apéndice F	82
Apéndice G	85
Apéndice H	88
Apéndice I	92
Apéndice J	96
Apéndice K	98
Apéndice L	102
Referencias	106

Resumen

En esta tesis se estudia las propiedades físicas tales como densidad de estados, transmitancia y el coeficiente de Lyapunov para las cadenas aperiódicas de Fibonacci, Thue Morse y doble periodo. Los problemas abordados fueron el de enlaces, donde solo varían de forma aperiódica las integrales de salto. El de sitios, en el cual varían solo las energías de sitio de forma aperiódica y el mixto donde tanto las energías de sitio como las integrales de salto varían. En este estudio se empleó el formalismo de amarre fuerte a temperatura cero. Para llevar a cabo esta investigación desarrollamos doce métodos de renormalización para las distintas cadenas aperiódicas, con el objetivo de poder investigar como la aperiodicidad y la longitud de las cadenas afectan al transporte electrónico. Los resultados muestran que los espectros de la transmitancia y del coeficiente de Lyapunov son muy similares, por lo que cualquiera de los dos nos sirve para poder estudiar la localización de los sistemas aperiódicos. Más aún, demostramos de forma analítica y numérica la existencia de estados transparentes –coeficiente de transmisión uno- en algunos de los sistemas aperiódicos, encontrando que la cadena de Thue Morse tiene un mayor número de estos estados por generación, debido a la simetría de espejo y anti-espejo que presenta esta cadena. Además, observamos como la aperiodicidad en los sistemas genera bandas de energía prohibida en los espectros de eigen-energías. Finalmente, el promedio espectral de la transmitancia decae como una ley de potencias en función de la longitud de las cadenas aperiódicas, lo cual contrasta con el decaimiento exponencial de los sistemas aleatoriamente desordenados y el comportamiento constante de las cadenas periódicas.

Introducción

El estudio de los estados electrónicos en medios aperiódicos reviste un gran interés en el ámbito de la física moderna. La localización de los estados electrónicos en presencia de desorden constituye por lo tanto un ingrediente importante para entender el carácter metálico o aislante de los sólidos. Por lo que la localización modifica fuertemente las propiedades electrónicas, ópticas y de transporte en estos sistemas. En los sistemas de escala nanoscópica un modelo de transporte cuántico es adecuado por los efectos que se producen al ir reduciendo la sección transversal de los nanoalambres o nanoestructuras.

Por otro lado, tres décadas atrás el área de la cristalografía en materia de estado sólido, se dividía en estructuras cristalinas (los átomos están ordenados según la simetría de translación) o amorfas (desorden) [Ashcroft, 1976]. Hasta ese momento, la cristalografía podía representar de una manera simple y eficiente todas las posiciones atómicas dentro de cualquier cristal, mediante sólo una celda de referencia (celda unitaria). Cada tipo de celda unitaria podía ser deducida por medio de una cantidad restringida de posiciones y por una serie de parámetros definidos para la celda en particular (ángulos y parámetros de red). Demostrándose que solamente existían 14 maneras de arreglar los átomos en el espacio tridimensional siguiendo una simetría de translación (estructuras cúbicas, hexagonales, tetragonales y estructuras asociadas). Sin embargo, con el descubrimiento de los cuasicristales en la década de los ochenta cambió la forma de construir el área de la cristalografía [Shechtman, 1984], lo que trajo consigo una nueva gama de posibilidades en el arreglo atómico y en consecuencia la aparición de los estados críticos que no son extendidos ni localizados, sino autosimilares en el espacio real [Janot, 1994]. La formación del orden cuasicristalino se ha atribuido a la aparición de una pseudobrecha energética alrededor del nivel de Fermi, similar al caso de las ondas de densidad de carga donde la estabilidad estructural se debe a una fuerte correlación electrónica.

Hoy en día, los cálculos cuánticos de sistemas que contienen más de 10^5 átomos son prácticamente imposibles de realizar en las computadoras existentes, ya que el consumo de tiempo en el proceso de diagonalización es proporcional a N^3 , siendo N el número de átomos del sistema que carece de

simetría. Cabe mencionar que los sólidos reales contienen más de 10^{23} átomos y este número rebasa significativamente la capacidad de análisis numérico actual. Una alternativa eficiente para estudiar estos sistemas es el método del grupo de renormalización, el cual es particularmente importante en sistemas donde los métodos tradicionales del estado sólido, tales como el teorema de Bloch y la primera zona de Brillouin carecen de validez [Ma, 1973].

Este trabajo de tesis se divide en tres capítulos. En el capítulo uno presentamos una descripción de los sistemas periódicos, amorfos y cuasicristalinos con el objetivo de ubicar donde se encuentran nuestros sistemas aperiódicos unidimensionales en la literatura actual.

En el capítulo dos desarrollamos la teoría básica necesaria para obtener las propiedades físicas tales como densidad de estados, transmitancia y el coeficiente de Lyapunov.

En el capítulo tres presentamos los resultados obtenidos para la densidad de estados, la transmitancia y el coeficiente de Lyapunov en los tres sistemas aperiódicos (Fibonacci, Thue Morse y doble período) abordando tres diferentes problemas (enlaces, sitios y mixto).

Finalmente, se presentan las conclusiones y los apéndices de renormalización para las propiedades físicas estudiadas.

Capítulo I

Sistemas Aperiódicos

Introducción

La mayoría de los avances en la tecnología han provenidos del conocimiento profundo de las propiedades de los materiales. Además, de utilizar las características de aquellos con lo que nos provee la naturaleza, la ciencia ha alcanzado hoy en día una cota de desarrollo en la que podemos diseñar, producir sustancias y compuestos cuyas propiedades pueden ser debidamente ajustadas a requerimientos específicos. Por ejemplo, una rama de la investigación actual dentro del marco de la física del estado sólido está dedicada a entender y mejorar las propiedades de conducción eléctrica de los materiales.

La Física del estado sólido constituye una parte importante de la Física Cuántica. Con su ayuda podemos comprender las propiedades mecánicas, térmicas, eléctricas, magnéticas y ópticas de la materia en sus tres estados conocidos. En materia condensada se observa que, para cualquier sustancia o elemento material, modificando sus condiciones de temperatura o presión, pueden obtenerse distintos estados o fases, denominados *estados de agregación de la materia*, en relación con las fuerzas de unión de las partículas (moléculas, átomos o iones) que la constituyen. La existencia de un estado u otro de la materia depende de las condiciones de presión (P), y temperatura (T) en las que se formaron. La Fig. 1-1 muestra un diagrama de fases P-T del agua a volumen constante [Kittel, 1996].

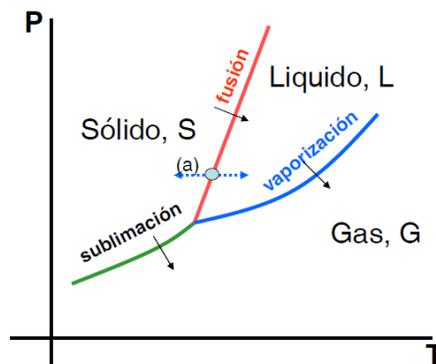


Figura 1-1. Diagrama de fases P-T a volumen constante de los estados de agregación.

Como se puede observar en la Fig. 1-1, a altas presiones y bajas temperaturas predomina el estado sólido (S), mientras que a bajas presiones y altas temperaturas el estado gaseoso (G). Más aún, en los estados sobre las líneas coexisten ambas fases. Por otro lado, si se calienta una sustancia a P constante, se puede pasar por una secuencia de estados (cambios de fases). La línea punteada (a) indica que podemos pasar del estado S al líquido (L) si calentamos en torno al punto de fusión y del estado L al S si enfriamos. Mientras el sólido funde su temperatura se mantiene constante.

Por otro lado, en un sólido lo podemos modelar como átomos conectados entre sí mediante resortes (Fig. 1-2), la energía interna del sólido se compone de energía potencial elástica de sus átomos y energía cinética. La presión es una medida del grado de compresión de sus átomos y la temperatura una medida de su energía cinética interna.

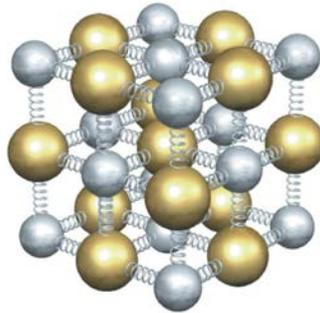


Figura 1-2. Ejemplo de un sólido tridimensional.

En las siguientes secciones vamos a describir algunas propiedades de los materiales en estado sólido, como son los cristales, los sólidos amorfos y los cuasicristales.

Cristales

Estructura cristalina

Todos los cristales, aunque sólo sea respecto de alguna de sus propiedades, son anisótropos, es decir, sus propiedades dependen de la dirección en el cristal.

Una particularidad de la estructura de las sustancias cristalinas es la existencia de una correlación en la disposición mutua de los átomos (moléculas) a distancias mayores que la interatómica media. Esta correlación se debe al equilibrio de muchas fuerzas o procesos que se producen durante

las interacciones de los átomos y las capas electrónicas de estructura específica. En este estado de equilibrio los átomos (moléculas) se disponen ordenadamente, formando las figuras características de cada cristal.

Los cristales son sustancias en las cuales las partículas que las componen (átomos, moléculas) están dispuestas con rigurosa periodicidad, formando una estructura cristalina regular [Kittel, 1996]. Cada sustancia cristalina se diferencia de las otras sustancias, también cristalinas, por su estructura atómica. Un cristal se dice que es homogéneo si para un punto cualquiera, tomado dentro de él, existe otro punto, totalmente idéntico al primero por sus propiedades, situado a cierta distancia finita de él.

La principal diferencia entre un sólido cristalino y un sólido amorfo es su estructura. En un sólido cristalino existe una ordenación de los átomos a largo alcance, mientras que en los sólidos amorfos no se puede predecir donde se encontrará el próximo átomo. En este hecho se basan los diferentes métodos de diferenciación entre ambos tipos de sólido, que en algunos casos no es fácil de establecer a simple vista. En la Fig. 1-3 se presenta una red periódica y una red amorfa. A continuación describiremos algunas características de los cristales periódicos.

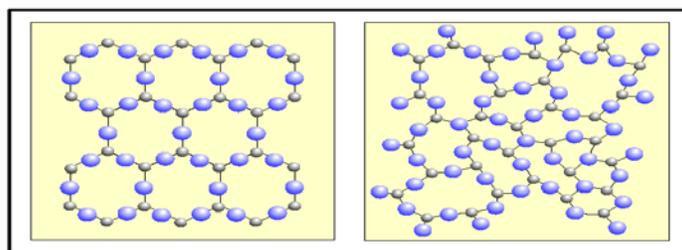


Figura 1-3. Red ordenada periódicamente y red de un cristal amorfo.

Periodicidad y celda unitaria

El estado cristalino es aquel que partiendo de la definición de homogeneidad y teniendo en cuenta la estructura atómica ordenada y repetitiva, los puntos idénticos están ligados con el punto inicial, elegido arbitrariamente, al cual llamamos nodo, por tres vectores de traslación no coplanares y sus traslaciones forman una red periódica tridimensional que abarca todo el espacio del cristal. Se le ha dado el nombre de red porque los puntos idénticos del cristal pueden unirse entre si por medio de líneas (ver Fig. 1-4).

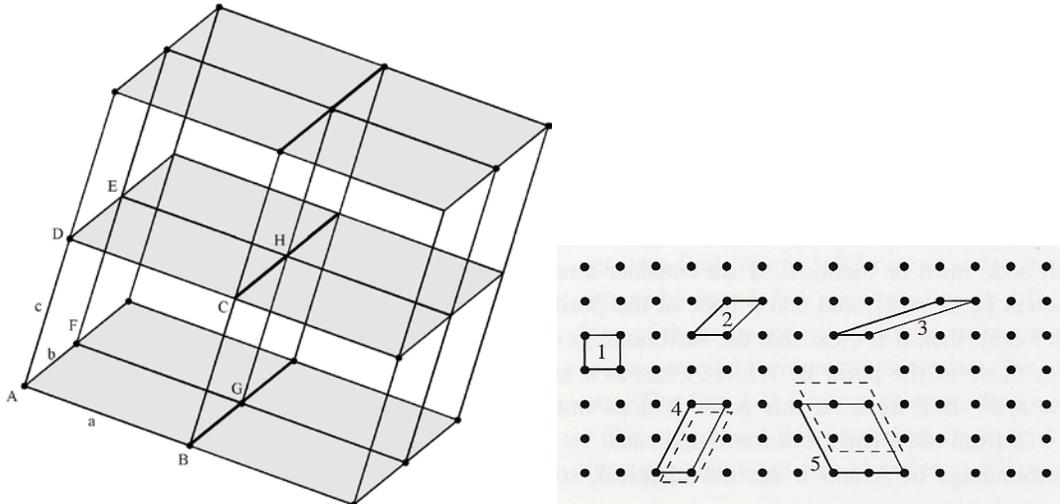


Figura 1-4. Los nodos o puntos idénticos se marcan con un círculo

La red puede describirse por medio de un paralelepípedo elemental ABCDEFGH llamado *celda unitaria* (Fig. 1-4), el cual se repite periódicamente en el espacio construido sobre los tres vectores no coplanares de traslación o traslaciones unitarias \vec{a} , \vec{b} y \vec{c} (Fig. 1-4) [Kittel, 1996]. Las traslaciones actúan no sobre un punto cualquiera de la red, si no sobre toda la red en su conjunto. Si como origen se toma un nodo cualquiera, el radio vector \vec{R} de cualquier otro nodo de la red puede determinarse por la formula

$$\vec{R} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c} \quad (1.1)$$

donde m, n, p son números enteros que se expresan en fracciones de las aristas de la celda y se llaman índices del nodo. El conjunto de los tres índices suele escribirse entre corchetes $[mnp]$ y recibe el nombre de símbolo del nodo.

La celda unitaria, en el caso general, es un paralelepípedo oblicuo cuyas aristas son a, b y c y sus ángulos α (bc), β (ca) y γ (ab) (Fig. 1-5). Las seis magnitudes se denominan parámetros de red. Los parámetros a, b, c que definen la dimensión de la celda unitaria suelen llamarse constantes de la red.

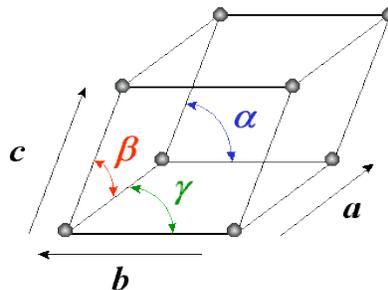


Figura 1-5. Puntos reticulares

El paralelepípedo elemental construido sobre las traslaciones mas cortas a , b y c es el paralelepípedo fundamental de la red. Este paralelepípedo no tiene nodos adicionales en ningún punto interior ni en la superficie, aparte de los situados en los vértices, y recibe el nombre de paralelepípedo primitivo o celda elemental primitiva. Al volumen del paralelepípedo fundamental corresponde un nodo de la red. Porque en cada nodo situado en un vértice del paralelepípedo le corresponde $1/8$ de este nodo.

Al observar los sistemas cristalinos notamos que en la mayoría de ellos presentan un alto grado de simetría. Estas simetrías juegan un papel muy importante en el estudio de los materiales ya que por medio de ciertas operaciones de simetría permiten que los cálculos de propiedades en los materiales se simplifiquen.

Simetría de los cristales

La simetría está vinculada con muchas de las formas estructuradas más profundas de la naturaleza y hoy en día nos resulta fundamental para comprender científicamente el universo. Los principios de conservación, tales como los relativos a la energía y al impulso o al momento cinético expresan una simetría que posee la totalidad del espacio-tiempo continuo: las leyes de la física son las mismas en cualquier lugar. Las simetrías de los cristales no sólo sirven para clasificar sus formas, sino que determinan muchas de sus propiedades naturales, desde las estrellas de mar hasta las gotas de lluvia, desde los virus hasta las galaxias, poseen llamativas simetrías.

El estudio de la simetría es importante tanto en física clásica como en física cuántica porque muchos aspectos de la conducta observable de los sistemas son deducibles de la existencia de las simetrías. Las simetrías describen la invariancia de las ecuaciones fundamentales ante transformaciones de coordenadas.

En el sentido más amplio, la palabra simetría representa la existencia de un invariable respecto a ciertas transformaciones. Haciendo girar un objeto alrededor de un eje o reflejarlo en un punto o en un plano, la figura debe coincidir consigo misma. Estas operaciones se llaman transformaciones simétricas, y la imagen geométrica, que caracteriza una transformación simétrica por separado, se denomina elemento de simetría. Todo cuerpo, lo mismo que toda figura geométrica, puede considerarse como un sistema de puntos. Cada figura finita tiene por lo menos un punto que permanece en su sitio durante las transformaciones simétricas. Este es un punto singular. En este sentido los cristales poseen simetría puntual, a diferencia de la simetría

espacial característica de las redes cristalinas, cuyo elemento fundamental de simetría es la traslación.

En los cristales el número de elementos de simetría es limitado. En ellos, lo mismo que en las figuras finitas, se distinguen los siguientes elementos principales de simetría: el plano especular de simetría, de rotación y el centro de inversión.

El *plano especular de simetría* corresponde a la reflexión simple en el plano como en un espejo. Este plano divide al cuerpo en dos partes iguales que coinciden entre sí en todos sus puntos al reflejarse.

El *eje de simetría por rotación simple* es una recta que tiene la propiedad de que si alrededor de ella se gira, en una fracción de circunferencia igual a $2\pi/n$, en la que n es el orden del eje, la figura, esta coincide consigo misma en todos sus puntos. Así, si la figura tiene un eje de simetría de sexto orden ($n=6$), el giro será igual a $2\pi/6$ de circunferencia (60°). Los valores de n están limitados en redes infinitas por las ligaduras de los operadores de traslación a los valores 2, 3, 4 y 6 [Ashcroft, 1976].

El *centro de simetría o centro de inversión*, es un punto singular dentro de la figura, en el cual, al reflejarse esta coincide consigo misma, es decir, la operación de inversión consiste en la reflexión de la figura en un punto, después de lo cual esta resuelta vuelta e invertida.

Estas tres simetrías están representadas en la Fig. 1-6, con líneas y planos.

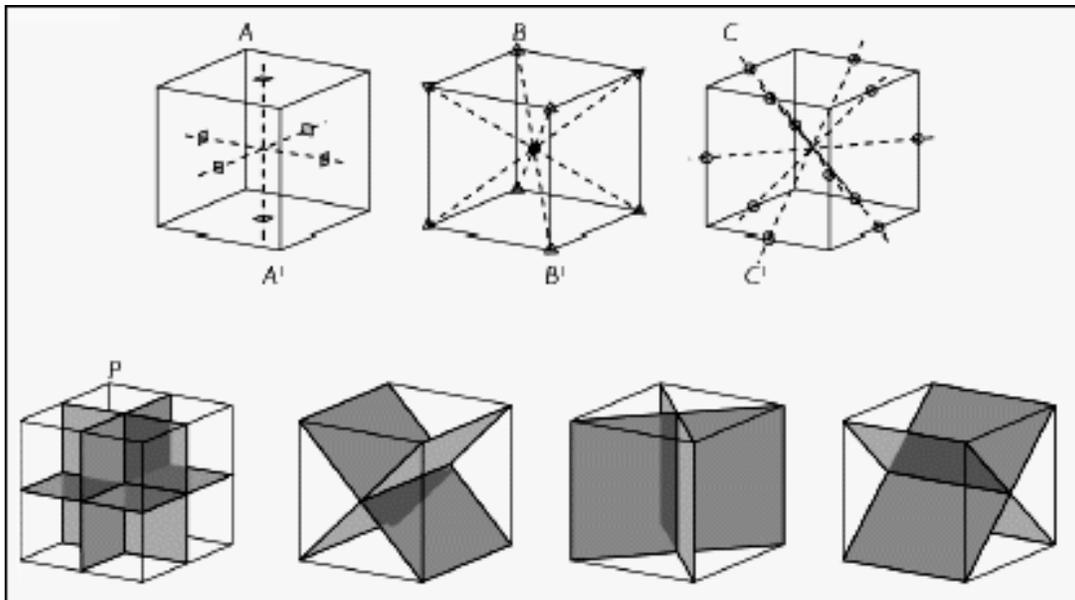


Figura 1-6. Muestra los ejes, los planos y los centros de simetría

Cuando se pide que la simetría rotacional sea compatible con la traslacional, el número total de operaciones de simetría se reduce significativamente, como se discute a continuación.

Sistema de coordenadas

En cristalografía, para la descripción analítica de los cristales se utiliza un sistema de coordenadas tridimensionales, que se elige de acuerdo con la simetría del cristal. Los ejes de coordenadas, por lo general, coinciden con las aristas de la celda unitaria, la cual se caracteriza por medio de los seis parámetros a , b , c , α , β , γ .

Tabla I-1. Estructura cristalina

Sistema	Longitud	Ángulos	Parámetros a especificar
Cúbico	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	a
Tetragonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	a, c
Ortorrómbico	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	a, b, c
Monoclínico	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$	a, b, c, γ
Triclínico	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	$a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$
Romboédrico	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	a, γ
Hexagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ ; \gamma = 120^\circ$	a, c

Al elegir los ejes cristalográficos hay que cumplir las reglas (véase la Tabla I-1) adoptadas en la cristalografía. El cumplimiento de estas reglas reduce al mínimo la posible arbitrariedad.

Los ejes *-aristas de la celda unitaria-* se eligen de tal modo que coincidan con direcciones principales de la red y sean iguales a las traslaciones más cortas en estas direcciones. Si no existen direcciones particulares, las aristas de la celda se eligen por las filas de la red cristalinas o por las aristas del poliedro cristalino.

En 1848, Bravais consiguió demostrar matemáticamente que sólo existen 14 tipos de redes de traslación diferentes por su simetría. Bravais enunció tres

condiciones cuyo cumplimiento sucesivo permite elegir, del conjunto innumerable de celdas unitarias, una determinada que caracteriza a la red en su totalidad. Estas condiciones son las siguientes [Ashcroft, 1976]:

- 1) El sistema cristalino de la celda elegida debe ser la misma que la del sistema cristalino de toda la red, es decir, su simetría debe corresponder a la simetría de toda la red.
- 2) El número de ángulos rectos y lados iguales debe ser máximo;
- 3) Cumpliéndose las dos primeras condiciones, el volumen de la celda debe ser mínimo.

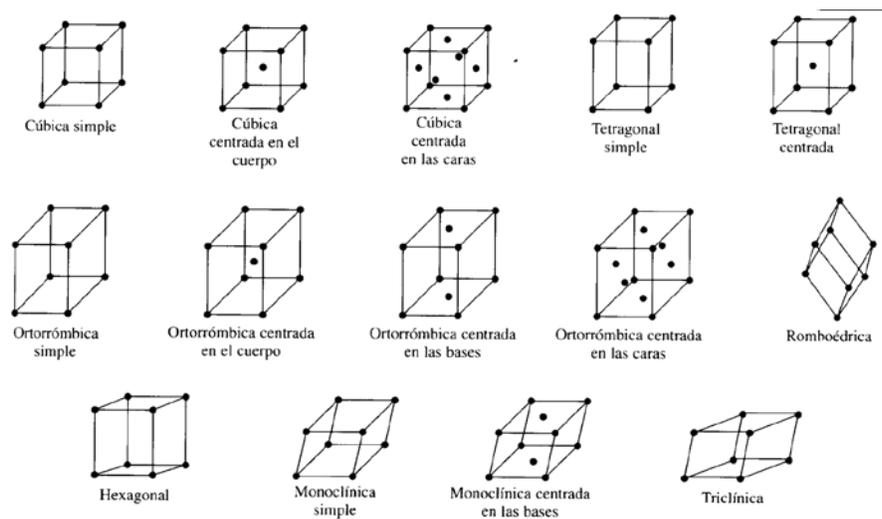


Figura 1-7. Las catorce redes de Bravais en el espacio tridimensional.

Cualquier operación de simetría de una red de Bravais puede descomponerse en una traslación por medio de un vector de la red \vec{R} , dado por la Ec. (1-1), y una operación que deja fijo al menos un punto de la red. Esto permite clasificar a las redes de Bravais en grupos de simetrías. Si se considera sólo las operaciones que dejan al menos un punto fijo, se tiene una clasificación por grupos puntuales. Si a ello se añade las operaciones de traslación se obtienen los grupos espaciales. Con estas consideraciones se presenta el número de grupos puntuales y espaciales de las redes cristalinas.

Como se ha mencionado, el procedimiento para escoger la celda unitaria no es único, y algunas veces una celda arbitraria no refleja la simetría de la red, por ejemplo Fig. 1-8.

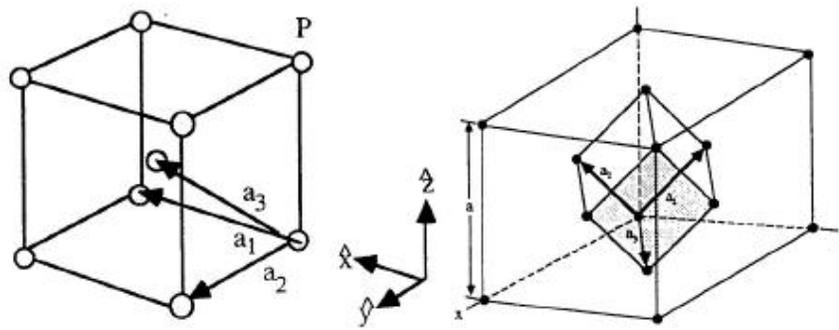


Figura 1-8. Vectores primitivos para redes BCC (izquierda) y FCC (derecha).

Existe un procedimiento muy conveniente para escoger una celda asociada a un punto que sí refleja la simetría de la red. Ésta celda se encuentra dibujando líneas que conecten ese punto con el resto en la red, bisectando cada línea con un plano y tomando el poliedro más pequeño que contenga al punto delimitado por estos planos. A ésta región que rodea al punto la definimos como la celda de Wigner-Seitz para un punto de la red [Kittel, 1996].

Sistemas de índices para planos cristalinos

La orientación de un plano cristalino está determinada por tres puntos en el plano no colineales. Si cada punto se encuentra en un eje del cristal distinto, el plano se puede especificar dando las coordenadas de los puntos en términos de las constantes de la red \vec{a}_1 , \vec{a}_2 y \vec{a}_3 . Resulta más útil para el análisis estructural, el especificar la orientación de un plano por los índices determinados de la forma siguiente [Ashcroft, 1976]:

Encuentra las intersecciones en los ejes en términos de las constantes de la red \vec{a}_1 , \vec{a}_2 y \vec{a}_3 .

Se toman los recíprocos de esos números y se reducen a tres enteros que tengan la misma razón, usualmente los tres enteros más pequeños. Al resultado, encerrado en paréntesis (hkl), se le llama índice del plano ó de Miller. Los índices de Miller se escriben sin comas y entre paréntesis, utilizando tildes para los valores negativos.

Con el propósito de estudiar la periodicidad del enrejado cristalino, supondremos que el cristal se extiende infinitamente en el espacio, una forma de abordar estos sistemas macroscópicos es a partir del espacio recíproco.

Red recíproca

En la física del estado sólido cuando se analizan muchos fenómenos tales como difracción, movimiento de los electrones en un campo de potencial periódico, dispersión de los fonones, etc., relacionados con la disposición periódica de las partículas discretas, desempeña un papel de extraordinaria importancia y utilidad la red recíproca. Esta no es una red en el sentido ordinario como se define a la red espacial del cristal. La red recíproca no existe en el cristal, es una abstracción cómoda que da la posibilidad de describir matemáticamente con bastante sencillez y exactitud las condiciones en que transcurre tal o cual fenómeno en un sólido cristalino.

La periodicidad del cristal origina muchas consecuencias importantes. A saber, que todas las propiedades como el potencial electrostático son periódicas [Kittel, 1996]

$$\vec{V}(\vec{r}) = \vec{V}(\vec{r} + \vec{R}'), \quad (1.2)$$

donde $\vec{R}' = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$, para n_i enteros. Esto implica el uso de la transformada de Fourier.

Denotando con ξ_s a coordenadas con período a_s , se obtiene

$$\vec{V}(\vec{r}) = \sum_{k_1, k_2, k_3 \rightarrow -\infty}^{\infty} \vec{V}_{k_1, k_2, k_3} \exp\left[2\pi \sum_s \frac{k_s \xi_s}{a_s}\right], \quad (1.3)$$

con lo que se puede regresar a coordenadas cartesianas mediante la transformación

$$\xi = \sum_k a_{s,k} x_k, \quad (1.4)$$

lo que finalmente se obtiene

$$\vec{V}(\vec{r}) = \sum_b \vec{V}_b e^{i\vec{b} \cdot \vec{r}}, \quad (1.5)$$

y utilizando la Ec. (1-2), se tiene

$$\vec{V}(\vec{r} + \vec{R}') = \sum_b \vec{V}_b e^{i\vec{b} \cdot \vec{r}} e^{i\vec{b} \cdot \vec{R}'}, \quad (1.6)$$

donde se observa que $e^{i\vec{b} \cdot \vec{R}'}$ debería ser igual a uno, y que puede obtenerse si

$$\vec{b} \cdot \vec{a}_1 = 2\pi g_1, \vec{b} \cdot \vec{a}_2 = 2\pi g_2, \vec{b} \cdot \vec{a}_3 = 2\pi g_3, \quad (1.7)$$

con g_i son enteros. Se puede mostrar que

$$b_g = b = \vec{b}_1 \cdot \vec{g}_1 + \vec{b}_2 \cdot \vec{g}_2 + \vec{b}_3 \cdot \vec{g}_3, \quad (1-8)$$

una aplicación inmediata del producto vectorial es el cálculo del volumen de la celda elemental de la red recíproca, $\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3$, por lo que los vectores de la red recíproca son:

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}, \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}, \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}. \quad (1-9)$$

Los vectores \vec{b}_k definido por la Ec. (1-9) no son coplanares, como no lo son los \vec{a}_i , y son ortogonales a los \vec{a}_i . Luego entonces \vec{b}_1, \vec{b}_2 y \vec{b}_3 , tienen la propiedad

$$\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi \delta_{i,j} \quad (1-10)$$

donde $\delta_{i,j}$ es una delta de Kronecker.

Los puntos en la red recíproca son mapeados por el conjunto de vectores

$$\vec{G} = \nu_1 \vec{b}_1 + \nu_2 \vec{b}_2 + \nu_3 \vec{b}_3 \quad (1-11)$$

donde ν_1, ν_2, ν_3 son enteros. Un vector \vec{G} de esta forma es un vector de la red recíproca. La red recíproca juega un papel esencial en la teoría de los sólidos, por su íntima conexión con el análisis de Fourier, la difracción cristalina y el estudio analítico de las funciones periódicas.

Función de Bloch

Bloch demostró que las funciones de onda, que son las soluciones de la ecuación de Schrödinger con potencial periódico, cuyo período es igual al de la red, representan ondas planas modulada por cierta función con la periodicidad de la red [Ashcroft, 1976], es decir,

$$\Psi_K(\vec{r}) = U_K(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}. \quad (1-12)$$

Aquí $U_k(\vec{r})$ es cierta función periódica, con período igual al de la red, que depende del vector de onda \vec{k} .

Escribimos la condición de periodicidad de la energía potencial del electrón en el cristal:

$$V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{n}), \quad (1-13)$$

en la que

$$\vec{n} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c} \quad (1-14)$$

donde \vec{a} , \vec{b} y \vec{c} son los vectores unitarios de las traslaciones y n_1 , n_2 y n_3 , son números enteros arbitrarios. Cuando el cristal se desplaza en la magnitud \vec{n} , coincide consigo mismo. De la condición de simetría de traslación se sigue que la función de onda $\psi(\vec{r})$ del electrón se diferencia de la función de onda $\psi(\vec{r} + \vec{n})$ en un factor constante, o sea,

$$\psi(\vec{r} + \vec{n}) = C\psi(\vec{r}) \quad (1-15)$$

De la condición de normalización se infiere que

$$|C|^2 = 1 \quad (1-16)$$

La condición de normalización se cumple suponiendo que

$$C = e^{i\vec{k} \cdot \vec{n}} \quad (1-17)$$

Efectivamente $|C|^2 = \left| e^{i\vec{k} \cdot \vec{n}} \right|^2 = |\cos kn + i \sin kn|^2 = \cos^2 kn + \sin^2 kn = 1$.

En la expresión \vec{k} es el vector de onda que caracteriza el estado cuántico del electrón en el cristal. Es natural que el exponente de la función exponencial deba ser una magnitud adimensional. Como n tiene dimensión de longitud, \vec{k} debe tener la dimensión recíproca de la longitud, es decir, cm^{-1} . El modulo del vector \vec{k} se llama número de onda. Su sentido físico es el de número de longitudes de onda que caen en el segmento 2π :

$$|\vec{k}| = k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (1-18)$$

Teniendo en cuenta (1-17), escribimos (1-15) en la forma

$$\psi(\vec{r} + \vec{n}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{n}} \psi(\vec{r}) \quad (1-19)$$

o bien

$$\psi(\vec{r}) = e^{-i\vec{k}\cdot\vec{n}}\psi(\vec{r} + \vec{n}) = U_k(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}. \quad (1-20)$$

Aquí $U_k(\vec{r})$ designa la función

$$U_k(\vec{r}) = e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{r}+\vec{n})}\psi(\vec{r} + \vec{n}), \quad (1-21)$$

que es periódica, con período igual a la de la red. En virtud de (1-18) y (1-21) tenemos

$$\begin{aligned} U_k(\vec{r} + \vec{n}') &= e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{r}+\vec{n}+\vec{n}')} \psi(\vec{r} + \vec{n} + \vec{n}') \\ &= e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{r}+\vec{n}+\vec{n}')} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{n}'} \psi(\vec{r} + \vec{n}) \\ &= e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{r}+\vec{n})} \psi(\vec{r} + \vec{n}) \\ &= U_k(\vec{r}) \end{aligned}$$

Así, en efecto, la función de onda del electrón en el cristal representa una onda progresiva $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ modulada por la función periódica $U_k(\vec{r})$, que tiene el período de la red y que depende del vector de onda \vec{k} . La función $\psi_k(\vec{r})$, determinada por la Ec. (1-20), recibe el nombre de *función de Bloch*.

Del vector de onda \vec{k} depende también la energía del electrón. La forma concreta de esta dependencia $E(\vec{k})$ puede hallarse resolviendo la ecuación de Schrödinger

$$\hat{H}\psi_k(\vec{r}) = E(\vec{k})\psi_k(\vec{r}) \quad (1-22)$$

Encontrar la dependencia $E(\vec{k})$ es uno de los problemas más importantes de la física del estado sólido.

Cristales amorfos

Hay materiales que no presentan una estructura repetida en las tres direcciones del espacio, es decir, no presentan cristalinidad y por tanto sólo poseen orden a corto alcance. A éste tipo de materiales que presentan orden a corto alcance se denominan materiales amorfos.

Un mismo compuesto, según sea el proceso de solidificación, puede formar una red cristalina o un sólido amorfo. Por ejemplo, según la disposición espacial de las moléculas de sílice (SiO₂), se puede obtener una estructura cristalina (el cuarzo) o un sólido amorfo (el vidrio) [Zallen, 1998].

Estructura atómica

Los sólidos amorfos, al igual que los líquidos y gases, son isótropos, es decir sus propiedades son iguales en todas las direcciones. Esto se debe a la falta de regularidad en el ordenamiento o una distribución al azar de las partículas, lo cual determina que todas las direcciones sean equivalentes.

La viscosidad se entiende por la resistencia de una sustancia a deformarse. Si un líquido puede ser enfriado rápidamente, sin que cristalice, su viscosidad tiende a aumentar hasta un valor muy elevado. Tan elevado que el flujo bajo una presión moderada puede volverse despreciable y difícil de medir experimentalmente.

Si una fuerza se aplica al material (aunque sea relativamente liviana) y por un intervalo razonable de tiempo, la sustancia desarrollará una deformación pseudo-permanente, es decir, fluirá como si fuera un líquido de viscosidad extremadamente alta. Cada material amorfo tiene un punto de fusión bien definido. Ahora bien, si se calienta dos materiales amorfos de la misma composición, tales sustancias pueden diferir en su respuesta (según el grado de amorfización en su estructura), ablandándose progresivamente, aumentando con relativa rapidez la tendencia a una deformación permanente bajo carga, es decir, se le proporciona capacidad plástica.

Las relativamente altas densidades de sólidos y líquidos, similares además entre sí, señalan que, en ambos casos, las distancias interatómicas son suficientemente pequeñas como para que los enlaces jueguen un papel relevante. Los enlaces contribuyen a ordenar los átomos del sólido según corresponda a ese tipo de enlace. Por el contrario, en un gas, los enlaces entre moléculas juegan un rol de orden limitado o prácticamente nulo.

Se puede obtener un material amorfo al enfriar un líquido de forma suficientemente rápida, de modo que los átomos no alcancen a ordenarse al pasar al estado sólido. De esta manera, los sólidos amorfos tienen una estructura interna, en términos del grado de ordenamiento atómico, similar a la de un líquido (un cierto orden de corto alcance pero no de largo alcance).

Así, si obtuviésemos una fotografía instantánea (imagen congelada) del ordenamiento atómico de un sólido amorfo y de un líquido, no podríamos establecer la diferencia. Sin embargo, por tratarse de un sólido, la movilidad atómica será de moderada a nula.

Los factores que favorecen la formación de un sólido amorfo en el lugar de uno cristalino son [Zallen, 1998]:

- Alta velocidad de enfriamiento desde el estado líquido al sólido.
- Alta direccionalidad del enlace.
- Varios elementos aleantes.

De esta manera, será mucho más fácil obtener un sólido amorfo entre materiales con enlace covalente (direccional) que en los de enlace metálico (no direccional).

Los enlaces que forman la estructura amorfa de una misma sustancia son del mismo tipo que los enlaces en su forma cristalina, sea cual sea el tipo de enlace (a presión y temperatura ambiente). Hay casos en que aumentando la presión se puede pasar de un tipo de enlace a otro.

En términos de entropía, un enlace direccional es muy “ordenado” y cuesta más formarlo. Es decir, un material con este tipo de enlaces se puede enfriar más lentamente (procesos más baratos) sin que los átomos se agrupen de forma suficientemente periódica, es decir, en cristales.

Los átomos del borde no están tan fuertemente enlazados como los del interior del grano cristalino, con lo que es más fácil afectarlos.

Por eso una de las grandes ventajas de los materiales amorfos es su resistencia a la corrosión, ya que al no haber bordes de grano, no hay zonas donde se pueda afectar al material.

Aleatoriedad y desorden

La aleatoriedad se puede caracterizar de distintas formas, por ejemplo: de acuerdo a la geometría del material, al spin, al desorden vibracional de los átomos, etc. Este desorden se entiende mejor al compararlo con la forma estándar de un cristal perfecto, en el que un grupo de átomos se encuentran arreglados como parte de un modelo periódico en tres dimensiones y de extensión infinita. Con esta definición, para que un material sea considerado como un cristal imperfecto le bastaría ser solamente finito, con claros defectos en su estructura geométrica como las vacantes, huecos intersticiales, dislocaciones atómicas, etc.

El desorden geométrico debido a la aleatoriedad es producto de la no-periodicidad de su estructura [Zallen, 1998]. Estos materiales, como se mencionó anteriormente, presentan también una aleatoriedad en el sentido del spin y en su comparación con el spin de los cristales perfectos.

Los materiales amorfos están afectados también por el movimiento vibracional aleatorio de sus átomos fuera de la posición de equilibrio,

destruyendo de otra forma la perfecta periodicidad, siendo esto independiente del desorden geométrico. El concepto vibracional es válido sólo a 0 K, ya que someter las sustancias a una cierta temperatura finita es proporcionar una cantidad de energía cinética para vibrar.

El estado vítreo hasta donde se sabía era un estado energéticamente no estable (no es un mínimo estable de la energía de Gibbs) con lo que con el tiempo tiende a buscar un estado de mas baja energía. Pero se ha tenido evidencia que los estados vítreos pueden tener estados con equilibrio termodinámico, lo cual en años recientes se han desarrollado hipótesis para describir este fenómeno. Una de estas hipótesis sugiere que el potencial de Gibbs solo debe ser función de los tres invariantes del tensor de presión [Bautista, 2012].

Cuasicristales

Esta sección está dedicada a los cuasicristales, introduciremos algunas de sus características básicas, su terminología y sus propiedades físicas. Los conceptos básicos de los cuasicristales están dirigidos a mostrar la diferencia con los cristales y los sólidos amorfos.

Los cuasicristales, o sólidos cuasiperiódicos, fueron crecidos por vez primera por el grupo de Dan Shechtman en National Bureau of Standards en 1984 [Shechtman, 1984]. Ellos estaban estudiando la estructura de la aleación $\text{Al}_{86}\text{Mn}_{14}$, la cual exhiben simetrías icosaédricas, es decir, simetría de rotación de orden 5, incompatible con la simetría de las redes cristalográficas clásicas. Por tanto, su estructura cristalina no es periódica, es decir, no se puede construir mediante la repetición de una celda unidad. El método tradicional para su crecimiento se basa en el enfriamiento rápido de metales fundidos, de manera que los átomos no tienen tiempo de acceder a las posiciones de equilibrio correspondiente a los sólidos cristalinos

El diagrama de difracción electrónica de la muestra de $\text{Al}_{86}\text{Mn}_{14}$ exhibía máximos de difracción nítidos y brillantes (tradicionalmente indica una periodicidad traslacional), dispuestos de tal forma que daban lugar a una formación simétrica de orden 5. En la Fig. 1-9 se encuentra la foto del profesor Shechtman y el patrón de difracción de la muestra estudiada.

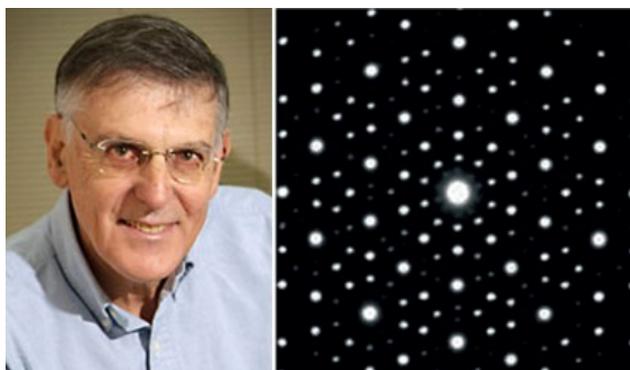


Figura 1-9. Diagrama de difracción electrónica de la muestra $\text{Al}_{86}\text{Mn}_{14}$.

Posteriores estudios [Janssen, 2007] de difracción confirmaron que esta nueva fase mostraba íntegramente la simetría total del grupo puntual icosaédrico. Esta fase, ahora llamada fase icosaédrica, o fase-*i*, se ha encontrado en una gran variedad de aleaciones de metales de transición 3d. También se descubrieron otras fases con simetrías prohibidas, que producían diagramas de difracción nítidos. La más importante es la fase decagonal, que posee un eje periódico ortogonal a dos ejes no periódicos. Las fases que han sido observadas son de orden 5, 8, 10 y 12 en un gran número de aleaciones metálicas, en las que el *Al* es su elemento mayoritario. Al conjunto de estas fases no periódicas se les ha denominado cuasicristales.

En general los cuasicristales se caracterizan por un orden de largo alcance sin tener simetría traslacional tridimensional. El primero se manifiesta por la aparición de puntos nítidos en el patrón de difracción y la segunda en la ocurrencia de simetrías rotacionales prohibidas para los cristales convencionales.

La clasificación que existía hasta el momento entre dos tipos de cristales (periódicos y amorfos) tuvo que ser modificada al constatarse la existencia de una clase de materia que, sin ser cristalina en el sentido convencional, mostraba diagramas nítidos de difracción, por lo que no se podía considerar amorfa. Es decir, nos hallábamos ante una nueva forma de ordenamiento de la materia, lo que se denominó orden cuasicristalino.

Aleaciones cuasicristalinas

Las primeras fases cuasicristalinas descubiertas, obtenidas por técnicas de enfriamiento ultrarrápido, eran metaestables y pasaban a estado cristalino cuando se las sometían a tratamientos térmicos para mejorar su estructura.

Por esta razón, el estudio de sus propiedades físicas no se pudo hacer de forma intensa hasta que se descubrió un número importante de materiales cuasicristalinos termodinámicamente estables.

Las aleaciones cuasicristalinas se clasifican de acuerdo a su simetría rotacional, tales como de orden cinco (icosaedro), ocho (octagonal), diez (decagonal) y doce (dodecagonal) [Stadnik, 1999]. Las aleaciones metaestables son principalmente producidas por solidificación rápida ($\sim 10^6$ K/s), por ejemplo $\text{Al}_{86}\text{Mn}_{14}$ dentro del grupo de aleaciones Al-(Mn, Fe, Cr) [Shechtman, et al., 1984]. Bancel y Heiney estudiaron las aleaciones Al-(Mn, Re, Cr, Ru, V, W y Mo), en las cuales adicionando Si o Ru en dos de ellas (Al-Mn y Al-Cr) parecen estabilizar la fase, resultando un aumento de la longitud de correlación espacial. Por otro lado, un cuasicristal termodinámicamente estable es un material cuyo estado base estructural es cuasiperiódico independiente del proceso de preparación, es decir, el material puede sufrir tratamientos térmicos sin modificar su orden estructural. El primer cuasicristal estable fue la aleación $\text{Al}_{5.1}\text{Li}_3\text{Cu}$ [Ball, et al., 1985]. Se cree que la participación de Li es fundamental para la estabilidad de la aleación, debido a su tamaño atómico. Otras aleaciones icosaedrales estables son Zn-Mg-Ga [Ohashi, et al., 1987] y Mg-Al-Pd [Koshikawa, et al., 1992]. En la tabla I.2 presentamos algunos ejemplos de aleaciones estables y metaestables [Huttunen-Saarivirta, 2004].

Tabla I-2. Ejemplos de aleaciones cusicristalinas

Estabilidad	Aleaciones cuasicristalinas
Metaestables	Fase icosaédrica
	Al-MT (V, Cr, Mn, Ru, Re,...) Al () MN, Cr, Fe)-(Si,Ge) Al-(Cu, Pd)-MT(Cr,Mn,Fe,Mo,Ru,Re,Os) Ga-Pb-Mn Mg-Al-(Zn, Cu, Au, Pd) Al-Mg-(Cu, Ag) Ga-Mg-Zn Al-Li-(Cu, Au, Zn, Mg) Zn-Mg-TR(Y, Nd, Sm, Dy, Gd, Er, Ho, Tb) Ti ₄₅ Zr ₃₈ Ni ₁₇
	Fase decagonal
	Al-MT(Mn, Co, Fe,Pd) Al-(Cu, Ni, Pd)-MT(Fe, Ru, Re, Co, Rh, Ir) Fe ₆₀ Nb ₄₀ Zn-Mg-TR(Y, Dy, Ho, Lu, Tb, Gd)
	Fases
	Octagonales: Ni-Si, V-Ni-Si, Mn ₄ Si Dodecagonales: Cr-Ni, Bi-Mn
Estables	Fase Icosaédrica
	Al ₆₃ Cu ₂₅ MT ₁₂ (MT=Fe, Ru, Os) Al ₇₀ Pd ₂₀ MT ₁₀ (MT=Mn, Re) Al ₇₀ Pd ₂₀ V ₅ Co ₅ Al ₇₀ Pd ₂₀ Cr ₅ Fe ₅ Al ₇₀ Pd ₂₀ Mo ₅ Ru ₅ Al ₇₀ Pd ₂₀ W ₅ Os ₅ Al ₅₆ Li ₃₃ Cu ₁₁ Ga ₂₀ Mg ₃₇ Zn ₄₃ Ti ₄₅ Zr ₃₈ Ni ₁₇ Mg ₄₇ Al ₃₈ Pd ₁₅ Zn ₆₀ Mg ₃₈ TR ₁₀ (TR=Y, Dy, Gd, Ho, Tb, Er)
	Fase Decagonal
	Al ₇₀ Ni _x Co _{30-x} (X=10-20) Al ₆₅ Cu ₁₅ Co ₂₀ Al ₇₅ Pd ₁₅ MT ₁₀ (MT=Fe, Ru, Os) Al ₇₀ Pd ₁₃ Mn ₁₇ Zn ₆₀ Mg ₃₈ TR ₂ (TR=Y, Dy, Ho, Lu, Tb, Gd)
	Fases
	Octagonales: Ni-Cr-Si Dodecagonales: Al-Co-Fe-Cr, Ni-V-Si

Por otro lado, Linus Pauling ([Pauling, 1985] [Pauling, 1987]) trató de encontrar una explicación convencional de los diagramas de difracción anómalos, tratando de ajustarlos a cristales de celda superceldas. Sin embargo, estas aproximaciones no fueron suficientes para encontrar dicha explicación.

Por tanto, queda en evidencia que los cuasicristales no son como los cristales tradicionales, ni como los vidrios o líquidos. Ellos constituyen una nueva clase de materia condensada caracterizada por una simetría con orientación no cristalográfica.

Aplicaciones

Estos cuasicristales, aparte de ser toda una revolución dentro de la física del estado sólido en cuanto a la estructura que presentan, también tienen un gran interés desde el punto de vista de sus propiedades, que nada tienen que ver con las de los elementos que les constituyen.

Propiedades magnéticas: Los cuasicristales presentan propiedades magnéticas que, de nuevo, son distintas a las de sus componentes. Por ejemplo, para una aleación de hierro, en lugar de observarse un comportamiento para-, ferro- o antiferromagnético, resulta ser diamagnético a temperatura ambiente. Cerca del punto de fusión, se observa una transición de fase a paramagnético, lo que es lógico sería de esperar al pasar a estado líquido [Janot, 1994].

Fricción, dureza y elasticidad: Otra característica relevante de los cuasicristales es la fricción superficial. Al no haber una concordancia u orden claro ni periódico entre ambas superficies, los cuasicristales que se rocen no alinearán sus átomos o celdas unidad, y la fricción sería pequeña y estaría disgregada en zonas locales o microscópicas. El coeficiente de rozamiento tan bajo de los cuasicristales tiene aplicaciones muy importantes. Por otro lado, resisten bien la deformación y a la corrosión, son extremadamente duros y más elásticos que los metales ordinarios a altas temperaturas. De hecho, exhiben en su mayoría superplasticidad por encima de 700°C.

Como hemos visto, el teselamiento aperiódico es posible y existe de manera artificial y natural en los materiales llamados cuasicristales. Su comprensión requiere matemáticas muy complejas, y es un campo de estudio muy reciente, exótico, totalmente distinto a lo conocido en Física de Estado Sólido hasta 1984, con simetrías en el patrón de difracción hasta entonces prohibidas. Debido a la ausencia de periodicidad, no aplican ecuaciones usuales (las premisas de las que se parten no se cumplen en los cuasicristales),

y existen no pocas dificultades a la hora de explicar con teorías las observaciones experimentales. Todavía hoy en día queda mucho camino por recorrer. Las propiedades que exhiben los cuasicristales son muy interesantes y novedosas, y podrían tener aplicaciones prometedoras especialmente en la ciencia de los materiales; algunas de ellas ya están en marcha y otras estarían por plantear y desarrollar. Algunos de los obstáculos que todavía están por superar es la dificultad de producir cuasicristales de alta calidad (pocos defectos) en cantidades industriales, su elevado costo así como la tradicional posición conservadora de la industria a la hora de introducir cambios e innovaciones. Este proceso, como es lógico, sería progresivo e irá a la par de los últimos avances en las investigaciones en torno a los cuasicristales y sus aplicaciones, un campo de la Física del Estado Sólido con un futuro prometedor.

Cuasicristales unidimensionales

Un modelo simple de una dimensión permite demostrar, de una manera completa y clara, muchas peculiaridades de las estructuras cuasicristalinas, las cuales existen en 2 o 3 dimensiones. Un cuasicristal de una dimensión puede ser descrito mediante la siguiente construcción matemática: partimos de una red de Bravais cuadrada (plana), elegimos un nudo donde colocamos el origen de un sistema de coordenadas cartesianas y dibujamos la celda unitaria centrada en dicho nudo (celda de Wigner-Seitz). Dibujamos una recta con pendiente irracional (elegimos que sea el número áureo) que pase por el origen. Debido a ser un número irracional, no cortará ningún otro nudo de la red [Janot, 1994].

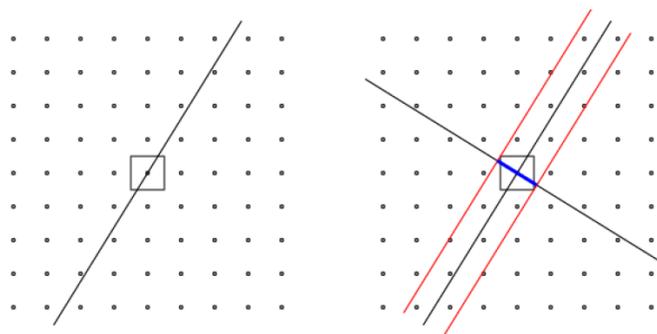


Figura 1-10. Construcción matemática de la red de Fibonacci

Se dibujan dos rectas (rojas) paralelas a la recta inicial (Fig. 1-10) y que pasen por una esquina de la celda primitiva unidad. El espacio limitado por ambas rectas selecciona un subconjunto de nudos de toda la red 2D. A

continuación, se deben proyectar estos puntos sobre la recta original. Estas proyecciones cortan la misma en segmentos de dos tamaños (largo y corto) de manera aperiódica. Como hemos elegido que la pendiente sea el número áureo, el teselamiento de la recta es similar al generado por la secuencia de Fibonacci.

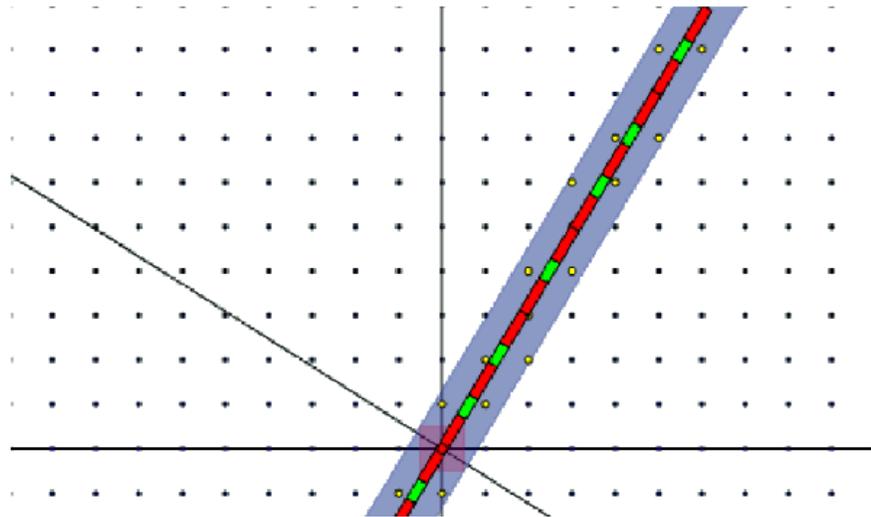


Figura 1-11. Proyección de los puntos para obtener el teselamiento de Fibonacci.

Por tanto, a partir de la proyección de un subconjunto de nudos de una red periódica 2D sobre una recta con pendiente irracional, hemos teselado la misma de manera aperiódica. Este razonamiento se puede generalizar a más dimensiones, pero se complica matemáticamente y se hace más abstracto.

Para obtener los mosaicos de Penrose, hay que partir de un espacio de 5 dimensiones y proyectar el hipercubo sobre un plano 2D con pendiente irracional respecto al espacio de dimensión superior, es decir, que no corte puntos de la red del hipercubo salvo en el origen.

Por tanto, la visualización de esta proyección se hace muy compleja y hay que deducirlo de manera abstracta mediante matrices, teoría de grupos, subespacios, álgebra de Lie, etc. Aparte, es posible hacer un razonamiento análogo en espacios de 5, 6 ó más dimensiones para obtener un teselamiento aperiódico en 3D.

Capítulo II

Propiedades eléctricas

Introducción

En el capítulo anterior repasamos los conceptos generales sobre estructuras periódicas, aperiódicas y amorfas. Dedicaremos este segundo capítulo al desarrollo de las herramientas de cálculo que utilizaremos en la obtención de las propiedades electrónicas de nuestro sistema.

Nuestra investigación se basa en la aplicación del modelo amarre fuerte, en el que se considera que sólo existe interacción entre los vecinos próximos del sistema. Así pues, comenzaremos este capítulo explicando en detalle las ecuaciones que se derivan de la aplicación de este modelo.

En segundo lugar, describiremos la función de Green del sistema (FG), dicha función representa una manera muy efectiva de abordar el cálculo de la densidad de estados en cualquier sistema. A partir de la ecuación de Schrödinger se pueden obtener diversas magnitudes de interés físico como las amplitudes de reflexión y transmisión.

Funciones de Wannier

Los estados electrónicos de menor energía de un sistema periódico se describen usualmente en términos de los orbitales de Bloch extendidos, eigenestados simultáneos del Hamiltoniano periódico y de las traslaciones de la red directa. Una representación alternativa en términos de orbitales localizados se introdujo por Gregory Wannier en 1937.

Las funciones de Wannier para distintos sitios de red en un cristal son ortonormales, las cuales forman una base conveniente para la expansión de estados electrónicos. Las funciones de Wannier son ampliamente utilizadas, por ejemplo en el análisis de fuerzas de amarre que actúan en los electrones, y se ha probado que en general son localizadas, al menos para aislantes [Ashcroft, 1976].

La conexión entre la representación de Bloch y la representación de Wannier se realiza mediante familias de transformaciones en un espacio

continuo de matrices unitarias. Las funciones de Wannier son la transformada de Fourier de las funciones de Bloch: al sumar sobre las funciones de Bloch extendidas se obtiene un conjunto de funciones de Wannier localizadas.

Hemos visto que las funciones de Bloch son continuas en el vector \vec{k} y periódicas en la red cristalina y en la red recíproca, de modo que pueden clasificarse tanto a través de \vec{k} como de $\vec{k} + \vec{K}$, $\vec{K} \in \mathfrak{R}_R$. Por ello, podemos escribir el desarrollo para la banda n :

$$\psi_{\vec{k}n}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} \omega_{\vec{R}n}(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}, \quad (2-1)$$

que multiplicada por $e^{-i\vec{k} \cdot \vec{S}}$ e integrada sobre la primera zona de Brillouin (PZB) queda

$$\begin{aligned} \int_{v_R} \psi_{\vec{k}n}(\vec{r}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{S}} d\vec{k} &= \sum_{\vec{R}} \omega_{\vec{R}n}(\vec{r}) \int_{v_R} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R} - \vec{S})} d\vec{k} \\ &= \sum_{\vec{R}} \omega_{\vec{R}n}(\vec{r}) \delta_{\vec{R}, \vec{S}} v_R, \\ &= \omega_{\vec{S}n}(\vec{r}) v_R \end{aligned}, \quad (2-2)$$

y por lo tanto

$$\omega_{\vec{S}n}(\vec{r}) = v_R^{-1} \int_{v_R} \psi_{\vec{k}n}(\vec{r}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{S}} d\vec{k}, \quad (2-3)$$

donde $\vec{S} \in \mathfrak{R}_R$, v_R es el volumen de la PZB. Utilizando el teorema de Bloch permite escribir la Ec. (2-3) en la forma

$$\omega_{\vec{S}n}(\vec{r}) = v_R^{-1} \int_{v_R} \psi_{\vec{k}n}(\vec{r} - \vec{R}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{S}} d\vec{k} = \omega_n(\vec{r} - \vec{R}), \quad (2-4)$$

que es la definición más común de la función de Wannier. Decimos que $\omega_n(\vec{r} - \vec{R})$ es la función de Wannier de la banda n , centrada en el sitio \vec{R} .

Modelo de amarre fuerte

Este modelo se basa en el uso de las funciones de Wannier, la cuales son transformadas de Fourier de las funciones de Bloch. Para este modelo se hacen una serie suposiciones tales como [Kittel, 1996]:

- Se conocen los eigen-valores y las eigen-funciones de la energía para un electrón en un átomo aislado.
- Cuando se juntan los átomos para formar un sólido, éstos permanecen lo suficientemente separados como para que cada electrón sea asignado a un sitio atómico particular. Esta suposición no es válida para electrones de valencia en metales.
- El potencial periódico es aproximado por una superposición de potenciales atómicos.

La diferencia entre el potencial actual y el potencial atómico se puede tratar por medio de teoría de perturbaciones.

El hamiltoniano de amarre fuerte tiene la forma:

$$H = \sum_l \alpha_l |l\rangle\langle l| + \sum_l \sum_{k \neq l} t_{kl} |l\rangle\langle l| \quad (2-5)$$

donde la energía de sitio $\alpha_l = \langle l|H|l\rangle$ es la energía necesaria para colocar un electrón en el sitio l y la energía de salto $t_{kl} = \langle k|H|l\rangle$ es la amplitud de probabilidad de transición entre los estados k y l .

Función de Green

Las funciones de Green se pueden definir como soluciones para ecuaciones diferenciales no homogéneas del tipo [Economou, 1983]:

$$[z - L(\vec{r})]G(\vec{r}, \vec{r}'; z) = \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (2-6)$$

asumimos que z es un complejo con $\lambda = \text{Re}(z)$, $s = \text{Im}(z)$; y $L(\vec{r})$ es un operador hermitiano, independiente del tiempo, lineal y que posee un conjunto de eigen-funciones $\Phi_n(\vec{r})$ completo, es decir,

$$L(\vec{r})\Phi_n(\vec{r}) = \lambda_n \Phi_n(\vec{r}), \quad (2-7)$$

donde $\Phi_n(\vec{r})$ satisface las mismas condiciones de frontera que $G(\vec{r}, \vec{r}'; z)$. El conjunto $\Phi_n(\vec{r})$ puede ser considerado sin pérdida de generalidad como ortonormal,

$$\int_{\Omega} \Phi_n^*(\vec{r})\Phi_m(\vec{r})d\vec{r} = \delta_{nm}. \quad (2-8)$$

La completéz del conjunto $\Phi_n(\vec{r})$ significa que

$$\sum_n \Phi_n(\vec{r})\Phi_n^*(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (2-9)$$

Nótese que n puede correr sobre un conjunto discreto de valores y/o uno continuo. Ahora, si utilizamos notación de Dirac para la Ec. (2.6), obtenemos

$$zG(\vec{r}, \vec{r}'; z) - \langle \vec{r} | LG(z) | \vec{r}' \rangle = \langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle. \quad (2-10)$$

Utilizar notación de *bras* y *kets* presenta ciertas ventajas, por ejemplo, se facilitan las manipulaciones algebraicas intermedias, y uno se restringe a la representación en el espacio real (\vec{r}). Si todos los eigen-valores de $z-L$ son distintos de cero, entonces podemos obtener con un poco de álgebra que

$$G(z) = \frac{1}{z-L}, \quad (2-11)$$

pues $z \neq \lambda_n$. Tomando en cuenta que para cualquier función F se tiene que $F(L)|\Phi_n\rangle = F(\lambda_n)|\Phi_n\rangle$, entonces

$$G(z) = \sum_n \frac{|\Phi_n\rangle\langle\Phi_n|}{z-\lambda_n} = \sum_n \frac{|\Phi_n\rangle\langle\Phi_n|}{z-\lambda_n} + \int \frac{|\Phi_n\rangle\langle\Phi_n|}{z-\lambda_n} dn, \quad (2-12)$$

y utilizando la representación en el espacio real llegamos a que

$$G(\vec{r}, \vec{r}'; z) = \sum_n \frac{\Phi_n(\vec{r})\Phi_n^*(\vec{r}')}{z-\lambda_n} + \int \frac{\Phi_n(\vec{r})\Phi_n^*(\vec{r}')}{z-\lambda_n} dn \quad (2-13)$$

ahora, dado que L es un operador Hermitiano, todos sus eigen-valores (λ_n) son reales. Entonces, si $\text{Im}(z) \neq 0$, $z \neq \lambda_n$ lo que significa que $G(z)$ es una función analítica en el plano complejo, excepto en aquellos puntos o intervalos del eje real que correspondan a los eigen-valores de L .

Podemos intentar definir $G(\vec{r}, \vec{r}'; \lambda)$ por medio de límites. Usualmente, donde los eigen-estados asociados con el espectro continuo son extendidos (es decir, no decaen conforme \vec{r} tiende a infinito), los límites por ambos lados de $G(\vec{r}, \vec{r}'; \lambda \pm is)$ cuando $s \rightarrow 0^+$ existen pero son distintos entre sí. Por tanto, este tipo de espectro continuo que consiste de eigen-estados extendidos, definimos dos funciones de Green como sigue

$$G^+(\vec{r}, \vec{r}'; \lambda) = \lim_{s \rightarrow 0^+} G(\vec{r}, \vec{r}'; \lambda + is), \quad (2-14)$$

$$G^-(\vec{r}, \vec{r}'; \lambda) = \lim_{s \rightarrow 0^+} G(\vec{r}, \vec{r}'; \lambda - is), \quad (2-15)$$

con definiciones similares para los operadores $G^+(\lambda)$ y $G^-(\lambda)$, se puede ver fácilmente de la Ec. (2-13) que

$$G^*(\vec{r}, \vec{r}'; z) = G(\vec{r}', \vec{r}; z^*), \quad (2-16)$$

si z es real, $z = \lambda$ y $\lambda \neq \{\lambda_n\}$ por lo que se sigue que $G(\vec{r}, \vec{r}'; \lambda)$ es Hermitiano; en particular, $G(\vec{r}, \vec{r}; \lambda)$ es real. Por otro lado, para λ dentro del espectro continuo, tenemos de la Ec. (2-16)

$$G^-(\vec{r}, \vec{r}'; \lambda) = [G^+(\vec{r}', \vec{r}; \lambda)]^* \quad (2-17)$$

lo cual muestra que

$$\text{Re}[G^-(\vec{r}, \vec{r}'; \lambda)] = \text{Re}[G^+(\vec{r}', \vec{r}; \lambda)]^*, \quad (2-18)$$

$$\text{Im}[G^-(\vec{r}, \vec{r}'; \lambda)] = -\text{Im}[G^+(\vec{r}', \vec{r}; \lambda)]^*. \quad (2-19)$$

Entonces, utilizando la identidad

$$\lim_{y \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm iy} = P \left[\frac{1}{x} \right] \mp i\pi \delta(x), \quad (2-20)$$

y con la Ec. (2-13), obtenemos para el elemento de matriz diagonal

$$G^\pm(\vec{r}, \vec{r}'; \lambda) = P \left[\sum_n \frac{\Phi_n(\vec{r}) \Phi_n^*(\vec{r}')}{z - \lambda_n} \right] \mp i\pi \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n) \Phi_n(\vec{r}) \Phi_n^*(\vec{r}'), \quad (2-21)$$

e integrando sobre \vec{r} obtenemos

$$\text{Tr} G^\pm(\lambda) = P \left[\sum_n \frac{1}{\lambda - \lambda_n} \right] \mp i\pi \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n). \quad (2-22)$$

La cantidad $\sum_n \delta(\lambda - \lambda_n)$ es la densidad de estados (DOS) en λ , $N(\lambda)$; $N(\lambda)d\lambda$ es el número de estados en el intervalo $[\lambda, \lambda + d\lambda]$. Entonces la relación

$$\begin{aligned} \rho(\vec{r}; \lambda) &= \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n) \Phi_n(\vec{r}) \Phi_n^*(\vec{r}') = \\ &= \sum_n' \delta(\lambda - \lambda_n) \Phi_n(\vec{r}) \Phi_n^*(\vec{r}') + \int \delta(\lambda - \lambda_n) \Phi_n(\vec{r}) \Phi_n^*(\vec{r}') dn, \end{aligned} \quad (2-23)$$

es la densidad de estados por unidad de volumen. Es claro que,

$$N(\lambda) = \int \rho(\vec{r}; \lambda) d\vec{r}, \quad (2-24)$$

y como

$$\rho(\vec{r}; \lambda) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im} \{ G^\pm(\vec{r}, \vec{r}; \lambda) \}, \quad (2-25)$$

se tiene que

$$N(\lambda) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im} \{ \text{Tr} G^\pm(\lambda) \}. \quad (2-26)$$

Entonces para analizar la densidad de estados vamos a tomar la expresión

$$DOS(E, \eta) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im} \{ \text{Tr} G(E \pm \eta) \}, \quad (2-27)$$

donde E es la energía y η es la parte imaginaria de la energía, a esta ecuación le vamos aplicar el método de renormalización para obtener los espectros de densidad de estados.

Conductividad eléctrica

Introducción

Las medidas del transporte electrónico en sólidos es una herramienta muy valiosa para caracterizar a los materiales. Desde inicios del siglo pasado la teoría de conducción electrónica en sistemas con alto grado de degeneración tales como los metales se basan en el modelo de Drude-Sommerfeld, donde el transporte se fundamenta sobre las ecuaciones dinámicas como las de Newton o de Schrödinger. Sin embargo, estas ecuaciones por sí mismas no son suficientes para describir el transporte, independiente de que sea clásico o cuántico, debido a que las ecuaciones dinámicas son reversibles mientras los procesos de transporte son disipativos e irreversibles. Las teorías de transporte usualmente introducen esta irreversibilidad asumiendo que el sistema de interés está en contacto con un gran reservorio que está siempre en equilibrio termodinámico y continuamente trata de restaurar el equilibrio al sistema a través de interacciones aleatorias. Esto es evidente en la teoría de Landauer [8], donde el sistema está conectado a dos reservorios de electrones.

En general, las propiedades de transporte dependen de los procesos de dispersión microscópicos. Es posible hacer una clasificación de 3 diferentes

regímenes de transporte (Fig. 2-1) de acuerdo a sus escalas de longitud típicas. A saber, difusivo, localizado, y balístico [Ferry, 1997].

Se puede definir al régimen difusivo de transporte, para el caso en que $\lambda_F \ll l \ll L \ll \zeta$, donde $\lambda_F = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$ es la longitud de onda de Fermi, l es el camino libre medio, L el tamaño del sistema y ζ la longitud de localización. Por lo que en este régimen, casi todos los estados son extendidos y la conductancia $g \propto L^{d-2}$.

Para el régimen localizado, el tamaño del sistema excede la longitud de localización $L \ll \zeta$. En este régimen la conductancia $g \ll 1$ y decae exponencialmente con el tamaño del sistema, $g \propto \exp\left(\frac{-L}{\zeta}\right)$, además crece exponencialmente con la temperatura, $g \propto \exp\left[-\left(\frac{\Delta}{k_B T}\right)^{1/2}\right]$.

En el caso del régimen balístico el tamaño del sistema es más pequeño que el camino libre medio ($L < l$) y en consecuencia los efectos de la interferencia cuántica son particularmente importantes.

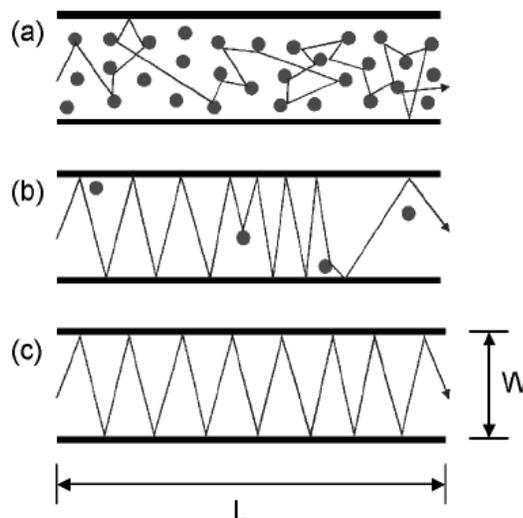


Figura 2-1 (a) Régimen difusivo (b) Régimen localizado (c) Régimen balístico.

Se tienen distintos modelos para intentar describir el comportamiento de los electrones en sólidos cristalinos. Uno de los primeros fue propuesto por P. Drude en 1900. Drude estudió, desde un punto de vista puramente clásico, la

causa de la resistencia finita en los metales. Los electrones se toman como esferas cargadas que se desplazan a través de una "sopa" de iones, con una probabilidad finita de dispersión. Es esta dispersión la que ocasiona la resistividad.

Modelo de Drude

El modelo de Drude contiene algunas simplificaciones y estimaciones extremas, como la ausencia de mecánica cuántica y el hecho de que no se toma en cuenta la interacción entre los electrones, ni la de éstos con los iones positivos.

Conductividad eléctrica *dc* para metales

El modelo consiste en considerar a un conjunto de portadores de carga (electrones de carga $-e$ y masa m), que tienen una densidad por unidad de volumen (n) [Ashcroft, 1976]. Por ejemplo, en un conductor metálico, los iones forman enrejados periódicos, y tienen una movilidad mucho menor que los electrones. En la presencia de un campo eléctrico \vec{E} , sólo los electrones se pueden mover, y lo hacen de acuerdo a las leyes de Newton, es decir, si \vec{v} es la velocidad de un electrón, entonces

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = (-e)\vec{E}. \quad (2-28)$$

Por lo tanto, la velocidad de los electrones es de la forma

$$\vec{v}(t) = \vec{v}_0 - \frac{e}{m}\vec{E}t. \quad (2-29)$$

Al modelo no le interesa el comportamiento de los electrones individuales, sino sólo el promedio sobre un número muy grande de electrones, por este motivo, la cantidad de interés es el promedio de la velocidad. Se toman las siguientes hipótesis sobre el movimiento del conjunto de electrones:

- No se toman en cuenta las interacciones electrón-electrón ni electrón-ión.
- Las colisiones entre electrones son instantáneas y cambian abruptamente la velocidad de los mismos, es decir, ellos no tienen interacción antes ni después de la colisión.
- Existe un tiempo de relajación (τ), el cual está relacionado con el tiempo promedio entre dos colisiones consecutivas.

- Se supone que los electrones alcanzan un equilibrio térmico con sus alrededores a través de las colisiones.

De esta manera, dado que la velocidad promedio \vec{v}_0 es cero, obtenemos la velocidad media de los electrones

$$\vec{v} = -\vec{E}\tau \frac{e}{m}. \quad (2-30)$$

Ahora, la densidad de corriente (\vec{J}) en un conductor metálico, está dada por

$$\vec{J} = ne\vec{v}, \quad (2-31)$$

por lo que la ley de Ohm dentro de este modelo queda:

$$\vec{J} = \vec{E} \frac{ne^2\tau}{m} = \sigma_0 \vec{E}, \quad (2-32)$$

donde σ es la conductividad eléctrica y está dada por $\sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m}$.

En general, esta es una forma clásica de ver el transporte, sólo que en los sistemas de escala nanoscópica la conducción electrónica debe ser estudiada por medio de las teorías cuánticas. En la siguiente sección reviraremos el formalismo Landauer.

Fórmula de Landauer

En esta sección, introducimos la fórmula de Landauer y el método de matriz de transferencia, tomando un modelo de amarre fuerte.

La formula de Landauer ha sido usada para calcular la conductancia de sistemas mesoscópicos [Landauer, 1957]. La idea esencial es considerar una región molecular conectada a dos saturadores balísticos, con potenciales químicos μ_L y μ_R .

El flujo de corriente a través de un conductor es proporcional al coeficiente de transmisión, el cual describe la transmisión de electrones en un conductor. La conductancia de una muestra es proporcional a la conductividad eléctrica (σ) dada por

$$G = \sigma \frac{W}{L}, \quad (2-33)$$

donde L es la longitud y W es el área de la sección transversal de la muestra. Tomando en cuenta la idea de Landauer la conductancia es

$$G = \frac{2e^2}{h} MT, \quad (2-34)$$

donde M es el número de canales transversales y T es la probabilidad promedio sobre los canales M .

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 Ec. (2-34) se reemplaza por $T/(1-T)$ [Imry, 1999], esto es

$$G = \frac{2e^2}{h} M \frac{T}{1-T}. \quad (2-35)$$

La principal diferencia entre las ecuaciones (2-34) y (2-35) radica en el tipo de saturador que se conecta al sistema. Si éstos son fuentes de corriente entonces se debe de usar la Ec. (2-35). En cambio, si ellos son conductores perfectos entonces la Ec. (2-34) debe ser utilizada [Economou, 1981]. En resumen la conductancia eléctrica de Landauer es proporcional a la transmitancia del sistema, la cual discutiremos a continuación.

Transmitancia

Para discutir la dispersión de un electrón en una cadena finita unidimensional consideramos el caso de una cadena de N átomos, cuyos extremos se encuentran conectados a dos saturadores periódicos (cadenas periódicas) semi-infinitos. Tomamos a las energías de sitio y a las integrales de salto de la red como $\{\varepsilon_n\}$ y $\{t_n, t_{n+1}\}$ respectivamente, donde n corre de 1 a N (número de átomos), y para las integrales de salto estamos considerando una aproximación a primeros vecinos. Por último, suponemos que el potencial fuera de la red es constante, es decir que $\varepsilon_n = \varepsilon_0$ si $n \leq 0$ o $n > N$. Si utilizamos formalismo de amarre fuerte, y tomando en cuenta que estamos en el caso unidimensional,

entonces la ecuación de Schrödinger estacionaria puede representarse de la siguiente manera:

$$\vec{C}_{n+1} = \vec{T}_n \vec{C}_n, \quad (2-36)$$

donde T_n es la matriz de transferencia

$$\vec{T}_N = \begin{pmatrix} \frac{E - \varepsilon_n}{t_{n,n+1}} & -\frac{t_{n,n-1}}{t_{n,n+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2-37)$$

y el vector de las amplitudes de la función de onda C_n

$$\vec{C}_n = \begin{pmatrix} C_n \\ C_{n-1} \end{pmatrix}, \quad (2-38)$$

está representado en la base de Wannier.

Para una cadena no periódica, existe una sucesión de matrices de transferencia que sigue la secuencia de ordenamiento de los átomos y cuyo producto

$$\vec{T} = \vec{T}_N \vec{T}_{N-1} \dots \vec{T}_1 = \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix}, \quad (2-39)$$

describe la propagación de un electrón a lo largo de dicha cadena. La norma de la matriz T se define como [Süto, 1994]

$$\|\vec{T}\| = \sqrt{T_{11}^2 + T_{12}^2 + T_{21}^2 + T_{22}^2}. \quad (2-40)$$

Ahora, cuando un electrón con energía E incide en uno de los extremos de la red, consideramos sólo energías E dentro de la banda permitida en la cadena, ya que en el caso contrario no hay propagación del electrón. Las ondas planas en los saturadores tienen la siguiente forma

$$\psi_n(k) = \begin{cases} Ae^{ikna} + Be^{-ikna}, & \text{si } n \leq 1 \\ Ce^{ikna} + De^{-ikna}, & \text{si } N \leq n \end{cases} \quad (2-41)$$

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

$$|\chi|^2 + |r|^2 = 1. \quad (2-42)$$

Para poder expresar a $|\chi|$ y $|r|$ en términos de T_{11} , T_{12} , T_{21} , y T_{22} , escribimos la Ec. (2-41) de la siguiente forma

$$\begin{pmatrix} \chi e^{ik(N+1)a} \\ \chi e^{ikNa} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ika} + r e^{-ika} \\ 1 + r \end{pmatrix} \quad (2-43)$$

por lo que encontramos que [Süto, 1994, Maciá, 1996]

$$\chi = -\frac{2i(\sin ka)e^{-ikNa}}{\tau_{11}e^{-ika} + \tau_{12} - e^{ika}(\tau_{21}e^{-ika} + \tau_{22})} \quad (2-44)$$

y

$$r = -\frac{\tau_{11}e^{ika} + \tau_{12} - e^{ika}(\tau_{21}e^{-ika} + \tau_{22})}{\tau_{11}e^{-ika} + \tau_{12} - e^{ika}(\tau_{21}e^{-ika} + \tau_{22})} \quad (2-45)$$

donde el vector de onda k se relaciona con E y ε_0 a través de la relación de dispersión de los saturadores, es decir, mediante la relación

$$\cos ka = \frac{E - \varepsilon_0}{2t}. \quad (2-46)$$

Por lo que finalmente encontramos que la transmitancia (T) está dada mediante la ecuación,

$$T(E) = |\chi|^2 = \frac{4 - \left(\frac{E}{t}\right)^2}{\left[\tau_{21} - \tau_{12} + (\tau_{22} - \tau_{11})\frac{E}{2t}\right]^2 + (\tau_{22} + \tau_{11})^2 \left(1 - \frac{E^2}{4t^2}\right)}, \quad (2-47)$$

la cual está relacionada con la conductancia del sistema dentro del formalismo de Landauer. En el capítulo III utilizaremos las ecuaciones (2-27) y (2-47) para obtener la densidad de estados y la conductancia eléctrica en redes aperiódicas.

Localización

En la Física del Estado Sólido el teorema de Bloch como ya sabemos describe que los electrones pueden encontrarse con la misma probabilidad en cualquier región, pero esto se aplica sólo para sólidos periódicos. Cuando el sólido es

aperiódico no se aplica el teorema de Bloch. Hasta 1958 no se conocía las características de los estados electrónicos en sistemas aperiódicos, hasta que Phil Anderson publicó el artículo: *Ausencia de Difusión en Ciertas Redes Aleatorias* [Anderson, 1958]. Poco después se publicó un extenso trabajo en el que conjeturaron que, en una dimensión espacial, todos los estados electrónicos son localizados sea cual sea el tipo y grado de desorden [Mott, 1961]. A diferencia de lo que sucede en tres dimensiones, en este caso no existe un umbral en el grado de desorden para la aparición de estados localizados. Dado que se encontró un resultado similar para sistemas en dos dimensiones, se postuló que la transición metal-aislante antes mencionada sólo podría tener lugar en un sistema tridimensional, mientras que para una y dos dimensiones la única fase posible a temperatura cero de un sistema desordenado para cualquier tipo y cantidad de desorden sería la fase aislante. Por estos y otros trabajos, P. Anderson y N. Mott compartieron con J. van Vleck el premio nobel de física en 1977.

A estos trabajos pioneros le siguieron más de cuarenta años de investigación sobre fenómenos de localización, área que se convirtió muy atractiva dentro de la física de estado sólido.

La primera sacudida de consideración que afectó al teorema de localización ocurrió a causa de los trabajos publicados por C. Flores a finales de 1989 [Flores, 1989] y por D. Dunlap y colaboradores a mediados de 1990 [Dunlap, 1990], ellos demostraron estados extendidos en sistemas con desorden correlacionado de corto alcance. Más aún, Moura y Lyra [Moura, 1998] han encontrado recientemente evidencias de estados extendidos cuando la correlación es de largo alcance. Este hecho tiene una enorme relevancia en el estudio del transporte en sistemas biológicos como la secuencia de nucleóticos en las moléculas de ADN, sistemas que no son periódicos pero que por contener información presentan este tipo de correlaciones.

La localización puede ser cuantificada por medio del coeficiente de Lyapunov (γ) [Süto, 1994]. Este coeficiente se obtiene mediante la siguiente expresión:

$$\gamma \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\ln \|\vec{T}\|}{N}. \quad (2-48)$$

En sistemas desordenados unidimensionales los coeficientes de la función de onda (C_i) disminuyen exponencialmente a grandes distancias [Ishii, 1973], es decir,

$$\|C_N\| \approx \|C_1\| \exp(-N/\xi_0), \quad (2-49)$$

donde ξ_0 es la longitud de localización de la función de onda. Por otro lado, como $\|C_1\| \approx 1$, lo cual implica

$$\|C_N\| = \|TC_1\| \approx \|T\|. \quad (2-50)$$

Por lo tanto, en el contexto de la matriz de transferencia, la longitud localización está dada por

$$\xi_0 \approx |\gamma^{-1}|. \quad (2-51)$$

Cabe mencionar que existe actualmente discusión en la literatura sobre la aplicación adecuada de dicho coeficiente en su presente definición, ya que se requiere el conocimiento del centro de localización de la función de onda [Naumis, 1999], es decir, de la ubicación donde ocurre el máximo de la función de onda. Entonces el coeficiente de Lyapunov en términos de la matriz de transferencia es

$$\gamma = \frac{1}{N} \text{Ln} \sqrt{\tau_{1,1}^2 + \tau_{1,2}^2 + \tau_{2,1}^2 + \tau_{2,2}^2}, \quad (2-52)$$

a esta fórmula le vamos aplicar los coeficientes de la matriz de transferencia ya renormalizados para obtener los espectros de cadenas aperiódicas de tamaño macroscópico.

Capítulo III

Transporte electrónico

Introducción

La conducción electrónica en sólidos con defectos es un problema abierto en la física del estado sólido, ya que se combinan dos problemas difíciles de por sí que son los fenómenos fuera de equilibrio y el desorden estructural. Los procesos de transporte son disipativos e irreversibles, las teorías de conducción usualmente introducen esta irreversibilidad asumiendo que el sistema de interés está en contacto con un gran reservorio que está siempre en equilibrio termodinámico y continuamente trata de restaurar el equilibrio al sistema a través de interacciones aleatorias. Esto está particularmente claro en la teoría de Landauer, la cual está estrechamente relacionada con la transmitancia. Por otro lado, existen muchas formas en que podemos estudiar la densidad de estados (DOS), la transmitancia y el coeficiente de Lyapunov en sólidos, dos de ellas son el espacio real y el espacio recíproco. La primera puede ser por medio de invertir directamente el hamiltoniano para obtener la función de Green y aplicarla a la Ec. (2-11) o la matriz de transferencia Ec. (2-37). Con este método sólo podemos calcular la DOS y la transmitancia para muy pocos átomos debido al tiempo de cómputo que consume invertir el hamiltoniano o las multiplicaciones de matrices. En el espacio recíproco sólo se pueden investigar redes de tamaño infinito y periódicos. Uno de los objetivos principales de esta tesis fue desarrollar métodos en espacio real capaz de estudiar la DOS, transmitancia eléctrica y el coeficiente de Lyapunov para cadenas aperiódicas de tamaño finito (~ 3 átomos) hasta macroscópico sin tener que invertir la matriz o hacer millones de multiplicaciones de matrices. Los detalles del método son presentados en los apéndices.

Las cadenas aperiódicas que consideramos en la tesis fueron la secuencia de Fibonacci, la de Thue Morse y la de doble período. Para cada una de estas secuencias abordamos tres problemas que fueron el de enlaces, el de sitios y el mixto, a continuación se detallara cada una de las cadenas.

Cadenas de Fibonacci

El estudio de los cuasicristales en Física del Estado Sólido tiene un origen muy reciente, a partir del descubrimiento del primer cuasicristal en 1984. El efecto de cuasiperiodicidad en el espectro electrónico puede ser estudiado en la estructura cuasiperiódica más simple que es una cadena de Fibonacci.

Para construir la cadena de Fibonacci se consideran dos bloques A y B, los cuales se acomodan mediante la siguiente regla de recursión

$$F_n = F_{n-1} \oplus F_{n-2} \quad (3-1)$$

donde $F_1 = A$ y $F_2 = AB$. Por ejemplo para la generación $n=6$ la secuencia es

$$ABAABABAABAAB.$$

Este no es la única forma de generarla, existen otros métodos tales como el de corte y proyección y el de inflación.

La Fig. 3-1 muestra un segmento de las cadenas, para el problema de enlaces donde las energías de sitio son iguales y sólo varían las integrales de salto t_A y t_B . Para el problema de sitios las integrales de salto son iguales y las que varían son las energías de sitio ε_A y ε_B . Finalmente, en el problema mixto varían tanto las integrales de salto como las energías de sitio.

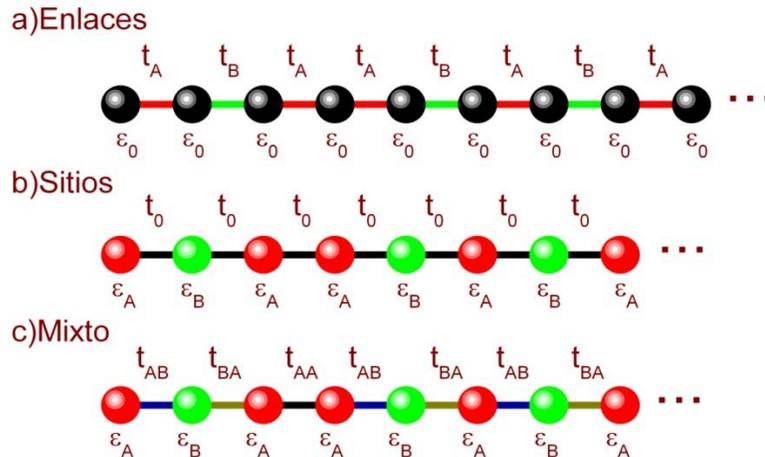


Figura 3-1. Segmentos de cadenas de Fibonacci para el problema de enlaces, sitios y mixto.

Densidad de estados

La densidad de estados (DOS) en un sistema físico caracteriza el número existente de estados por cada intervalo de energía. En esta sección analizaremos la DOS para los tres problemas por medio de los métodos de renormalización que se encuentran en los apéndices A y D. La Fig. 3-2 muestra los espectros de la DOS en función de la energía (E) para los problemas de a) enlaces donde las energías de sitio son nulas y las integrales de salto $t_A=0.8t$ y $t_B=t$, b) sitios con energías $\varepsilon_A=-\varepsilon_B=0.3t$ y las integrales de salto $t_A=t_B=t$, c) mixto donde los valores de las energías de sitio son $\varepsilon_A=0.5t$, $\varepsilon_B=0$ y las integrales de salto $t_{AA}=0.8t$ y $t_{AB}=t_{BA}=t$. El número de átomos en todas las cadenas es 433494438 (generación $n=42$), se escogió esta generación porque tiene aproximadamente 10^8 átomos lo equivalente a tener 1 cm de un material y la parte imaginaria de la energía es de $10^{-5}t$. Todos los sistemas están conectados a dos saturadores semi-infinitos con energías de sitio nulas e integrales de salto t .

La densidad de estados por el método de renormalización la podemos escribir como:

$$DOS(\varepsilon, n) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[A(n)G_{L,L} + B(n)G_{R,R} + C(n)G_{L,R} + D(n)]$$

Los coeficientes obtenidos por el método de renormalización para la cadena de Fibonacci en el problema de enlaces fueron

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

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

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

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

Estos coeficientes se encuentran desarrollados en el apéndice A.

Ahora los coeficientes para las cadenas de Fibonacci en los problemas de sitios y mixto fueron

$$A(n) = A(n-1) + \phi_1(n)[\phi_1(n)B(n-1) + C(n-1)] + \phi^2(n)t_c^2(n)t(n-1)^2 A(n-2)$$

$$B(n) = B(n-2) + \phi_2(n)[\phi_2(n)A(n-2) + C(n-2)] + \phi^2(n)t_c^2(n)t(n-2)^2 B(n-1)$$

$$C(n) = 2.0\phi(n)t_c(n)t(n-2)t(n-1)[\bar{\phi}_1(n)B(n-1) + \bar{\phi}_2(n)A(n-2)] + \phi(n)t_c(n)[t(n-2)C(n-1) + t(n-1)C(n-2)]$$

$$D(n) = \bar{\phi}_1(n)B(n-1) + \bar{\phi}_2(n)A(n-2) + D(n-1) + D(n-2).$$

Los cuales se encuentran en el apéndice D.

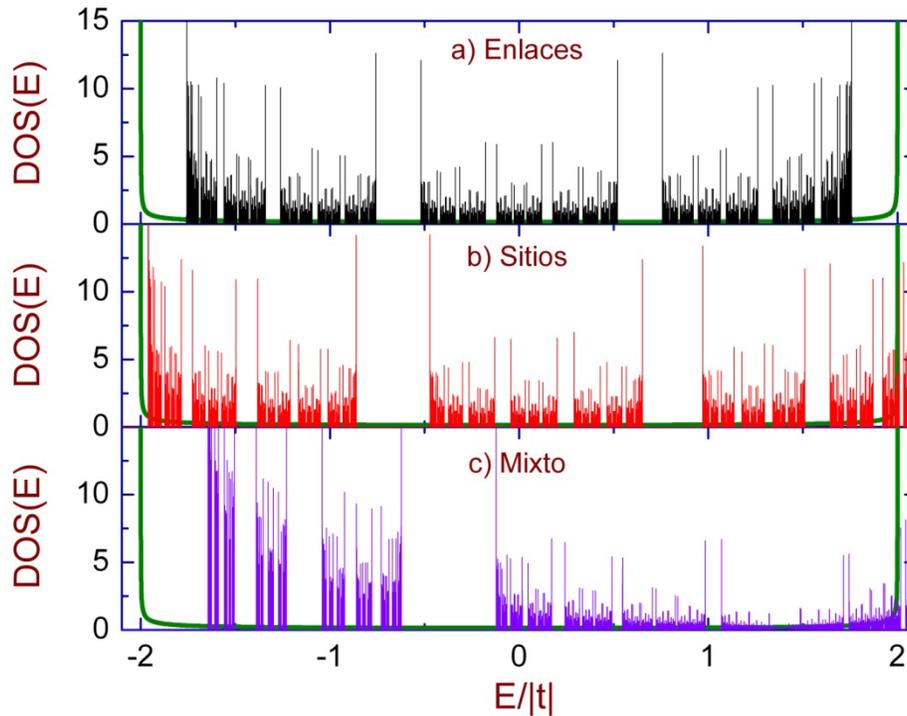


Figura 3-2. Densidad de estados versus la energía de Fermi para el problema de a) enlaces, b) sitios y c) mixto.

Obsérvese que el espectro de a) presenta simetría con respecto a energía cero, esto es debido a que es una red bipartita. Los gap en b) y c) son más anchos con respecto a) porque la cuasiperiódicidad es mayor en energías de sitio e integrales de salto. Además, los espectros de b) y c) no son simétricos alrededor de la energía cero porque tenemos energías de sitio.

Transmitancia

Los espectros de transmitancia eléctrica los obtuvimos mediante el método de renormalización desarrollado en los apéndices *G* y *J*. En la Fig. 3-3 presentamos los espectros de transmitancia (*T*) en función de la energía (*E*) para los mismos sistemas que la Fig. 3-2.

La ecuación de transmitancia es:

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

donde los coeficientes de la matriz de transferencia ($\tau_{i,j}$) son obtenidos por el método de renormalización y se encuentran desarrollados en los apéndices *G* y *J*.

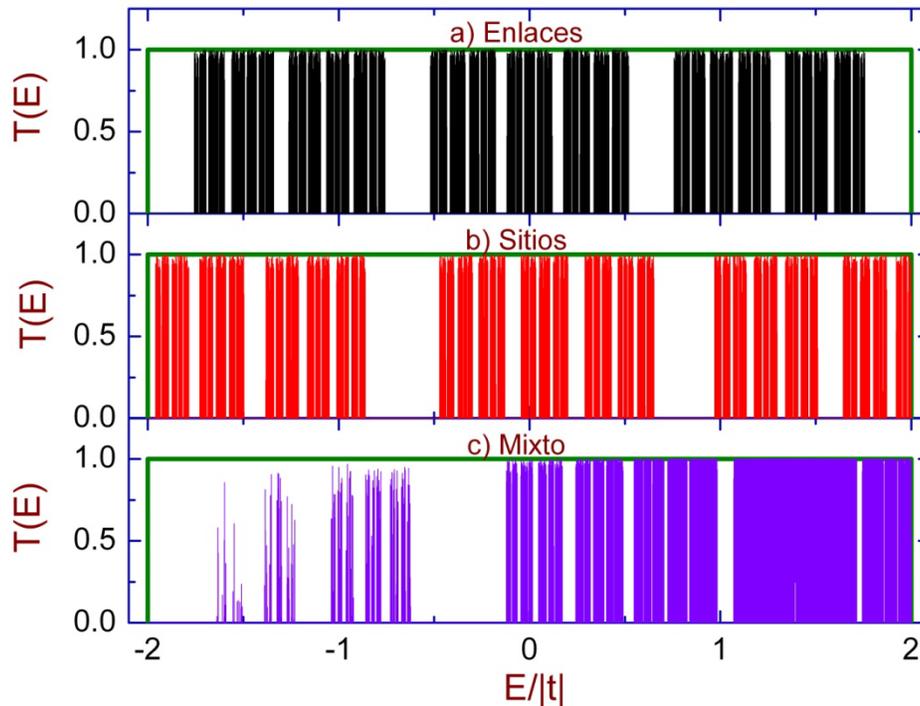


Figura 3-3. Transmitancia versus energía para los mismos sistemas que la Fig. 3-2.

Nótese que el espectro de transmitancia sigue siendo simétrico en a), para el b) y c) se tienen estados de conductividad fuera del ancho de banda porque al tener energías de sitio diferentes es como si se tuviera un gran número de impurezas en las cadenas. Además, el ancho del gap en los tres espectros depende de la cuasiperiodicidad de las cadenas. Todos muestran estados de alta conductividad pero no todos son balísticos (transmitancia uno), sólo se demostraron dos, los cuales se analizarán en la sección de estados transparentes.

Coeficiente de Lyapunov

El coeficiente de Lyapunov es una herramienta para analizar la localización de los estados, el cual fue obtenido por medio de la Ec. (2-52) y la matriz de transferencia se obtuvo por el método de renormalización empleado para la transmitancia. En la Fig. 3-4 se muestra los espectros de Lyapunov (γ^{-1}) en función de la energía (*E*) para los mismos sistemas que la Fig. 3-2. Obsérvese la similitud de los espectros con respecto a los de transmitancia, lo cual es de

esperarse debido a que los dos son una buena medida para localización de los estados.

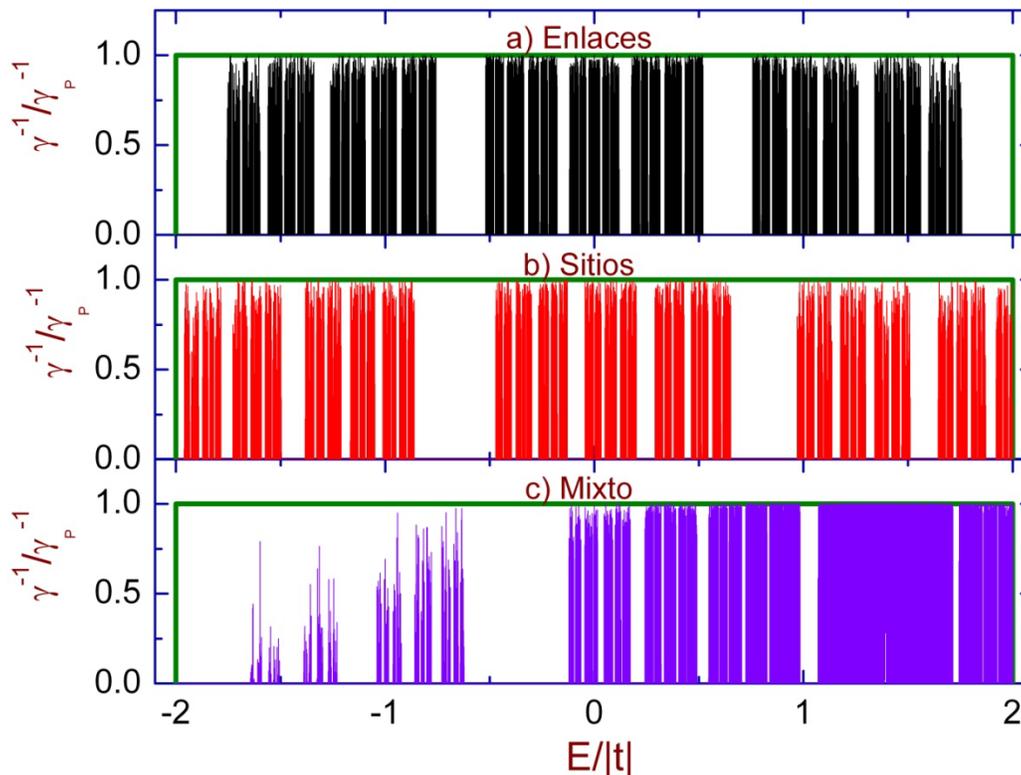


Figura 3-4. Coeficiente de Lyapunov versus la energía para los mismos sistemas que la Fig. 3-2.

Las redes de Fibonacci para los tres problemas no tienen ninguna simetría de crecimiento en cambio las cadenas de Thue Morse tienen simetría de espejo o anti-espejo dependiendo de la generación.

Cadenas de Thue Morse

El estudio de las propiedades de escalamiento de los espectros de excitación (espectro de excitaciones electrónicas y magnéticas) de una cadena de Thue-Morse (TM), está motivada por el hecho de que esta estructura determinista es más "desordenada" que una cuasiperiódica, debido a que en los sistemas de Thue Morse su espectro de difracción no presenta puntos definidos. En otras palabras, este sistema tiene un grado de aperiodicidad intermedia entre la de los sistemas cuasiperiódicos y los desordenados al azar.

Este sistema puede ser generado mediante el método de inflación, considerando sólo dos bloques A y B, donde $A \rightarrow AB$ y $B \rightarrow BA$. Las primeras generaciones son de la forma:

1) A, 2) AB, 3) ABBA, 4) ABBABAAB, 5) ABBABAABBAABABBA, 6) ABBABAABBAABABBABAABABBAABBABAAB, ...

Como podemos observar cuando las generaciones son pares tienen simetría anti-espejo y si las generaciones son impares tienen simetría de espejo. En la Fig. 3-5 se muestran segmentos de las cadenas de Thue Morse para los tres problemas estudiados en esta tesis.

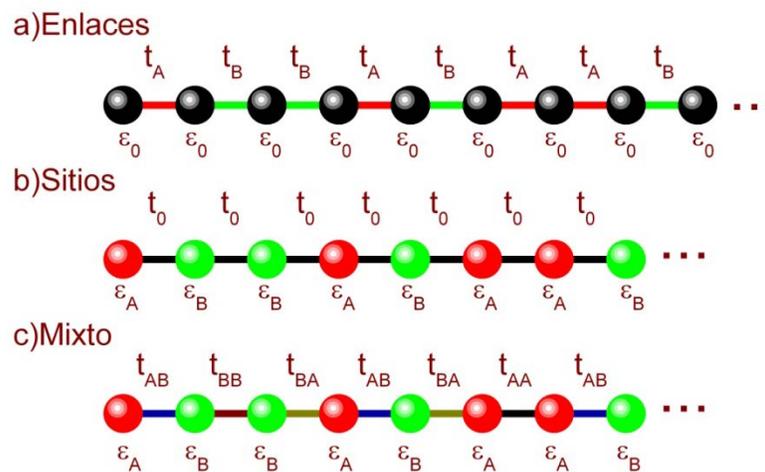


Figura 3-5. Segmentos de cadenas de Thue Morse para el problema de enlaces, sitios y mixto.

Densidad de estados

El cálculo de la densidad de estados para las cadenas de Thue Morse fueron llevados a cabo por los métodos de renormalización que desarrollamos en los apéndices B y E. La Fig. 3-6 nos presenta el espectro de la densidad de estados versus la energía para el problema de a) y d) enlaces donde consideramos que las energías de sitio son cero y las integrales de salto $t_A=0.8t$ y $t_B=t$, b) y e) sitios donde varían las energías de sitio, es decir, $\varepsilon_A=-\varepsilon_B=0.3t$ y $\varepsilon_A=0.6t$, $\varepsilon_B=0$ respectivamente, las integrales de salto son $t_A=t_B=t$ en los dos casos. Finalmente, c) y f) mixto los valores de las energías de sitio son $\varepsilon_A=-\varepsilon_B=0.3t$ y $\varepsilon_A=0.6t$, $\varepsilon_B=0$ respectivamente, las integrales de salto $t_{AA}=0.8t$ y $t_{AB}=t_{BA}=t$ en los dos casos. El número de átomos considerados en los sistemas fue de 536870912 ($n=30$), se escogió esta generación ya que representa 10^8 átomos que es lo

equivalente a tener 1 cm de un material y la parte imaginaria de la energía es de $10^{-5}t$. Al igual que en el sistema de Fibonacci todos los sistemas están conectados a dos saturadores semi-infinitos con energías de sitio nulas e integrales de salto t .

La densidad de estados por el método de renormalización la podemos escribir como:

$$DOS(\varepsilon, n) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[A(n)G_{L,L} + B(n)G_{R,R} + C(n)G_{L,R} + D(n)]$$

Los coeficientes obtenidos por el método de renormalización para la cadena de Thue Morse en el problema de enlaces fueron

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

$$B(n) = B^*(n-1) + [A^*(n-1) + B(n-1) - 1.0]\mu_2^2(n) + C^*(n-1)\mu_2(n)$$

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

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

Los coeficientes anteriores se encuentran en el apéndice B.

Ahora, para el problema de sitios y mixto fueron

$$A(n) = A(n-1) + \phi_1(n)[\phi_1(n)B(n-1) + C(n-1)] + \phi_3^2(n)A^*(n-1)$$

$$B(n) = B^*(n-1) + \phi_2(n)[\phi_2(n)A^*(n-1) + C^*(n-1)] + \phi_4^2(n)B(n-1)$$

$$C(n) = 2.0\phi_1(n)\phi_4(n)B(n-1) + 2.0\phi_2(n)\phi_3(n)A^*(n-1) + \phi_4(n)C(n-1) + \phi_3(n)C^*(n-1)]$$

$$D(n) = \mu_1(n)B(n-1) + \mu_2(n)A^*(n-1) + D(n-1) + D^*(n-1).$$

Se encuentran desarrollados en el apéndice E.

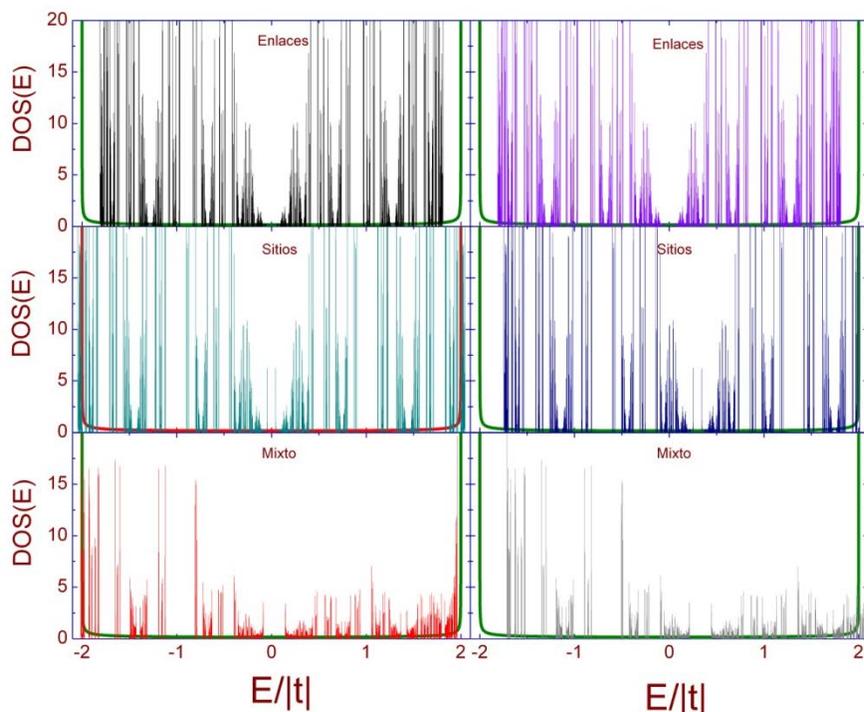


Figura 3-6. Densidad de estados en función de la energía para el problema de a) y d) enlaces, b) y e) sitios y c) y f) mixto.

Nótese que en problema de enlaces el espectro sigue siendo simétrico con respecto al cero en la energía. Además, esta simetría se conserva en el problema de sitios [inciso b)] cuando las energías de sitio son $\varepsilon_A = -\varepsilon_B = 0.3t$, porque el ordenamiento de los átomos para este problema conserva la simetría de anti-espejo para esta generación. En cambio para el espectro en e) sólo se recorre el centro de simetría, en este caso es $E = 0.3|t|$. Para los espectros de c) y f) ya no son simétricos porque se pierde la propiedad de anti-espejo en las integrales de salto.

Transmitancia

La Fig. 3-7 muestra los espectros de transmitancia versus la energía para las cadenas que siguen un ordenamiento atómico tipo Thue Morse, en los problemas de a) y d) enlaces, b) y e) sitios, y c) y f) mixto. Tomando los mismos parámetros que la Fig. 3-6. Los cálculos se realizaron iterando los coeficientes de renormalización que se obtuvieron para la matriz de transferencia y se sustituyeron en la Ec. (2-47). Este proceso de renormalización se encuentra en los apéndices *H* y *K*.

La ecuación de transmitancia es:

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

donde los coeficientes de la matriz de transferencia ($\tau_{i,j}$) son obtenidos por el método de renormalización y se encuentran desarrollados en los apéndices *H* y *K*.

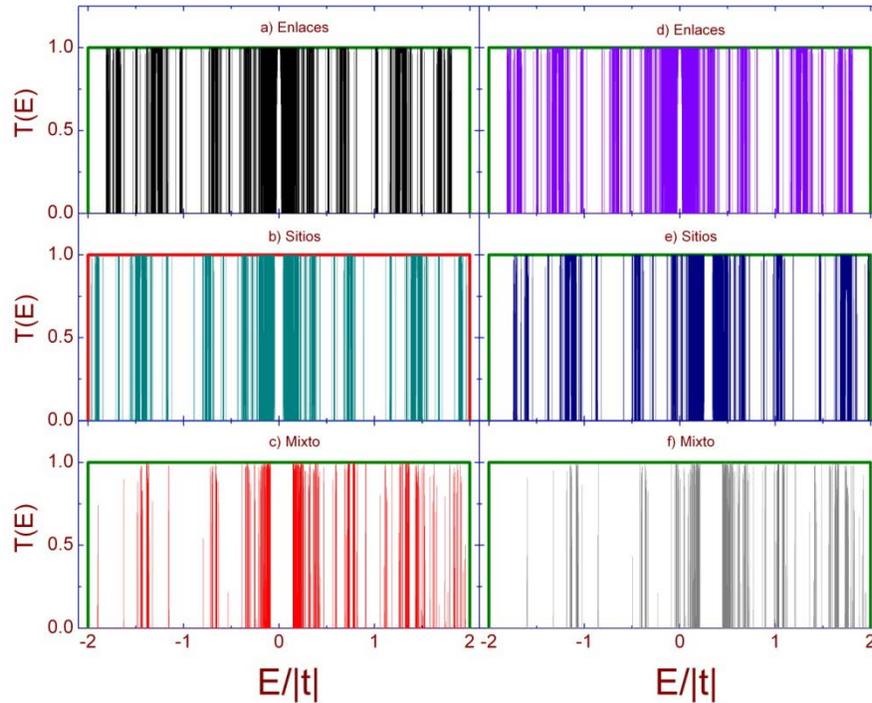


Figura 3-7. Transmitancia (*T*) en función de la energía (*E*) para los mismos sistemas que la Fig. 3-6.

Como puede verse los espectros en a) y d) tienen estados de alta transmitancia alrededor de energía cero, en cambio en b) y c) tienen un gap en ese intervalo de energía. Aquí también los espectros presentan las mismas simetrías que en los espectros de DOS [incisos a), b) y d)]. Además, los gap en los espectros b), c), e) y f) son más anchos comparados con el espectro de a) ya que en esos cuatro espectros su aperiodicidad es mayor y el caso mixto tiene muy pocos estados de transmitancia cercanos a uno, la transmitancia se destruye más rápidamente.

Coeficiente de Lyapunov

En la Fig. 3-8 se encuentran los espectros del coeficiente de Lyapunov contra la energía para los mismos sistemas que la Fig. 3-7. Como podemos observar es igualmente útil analizar la transmitancia que el coeficiente de Lyapunov ya que sus espectros son similares, debido a que los dos son obtenidos del producto de las matrices de transferencia.

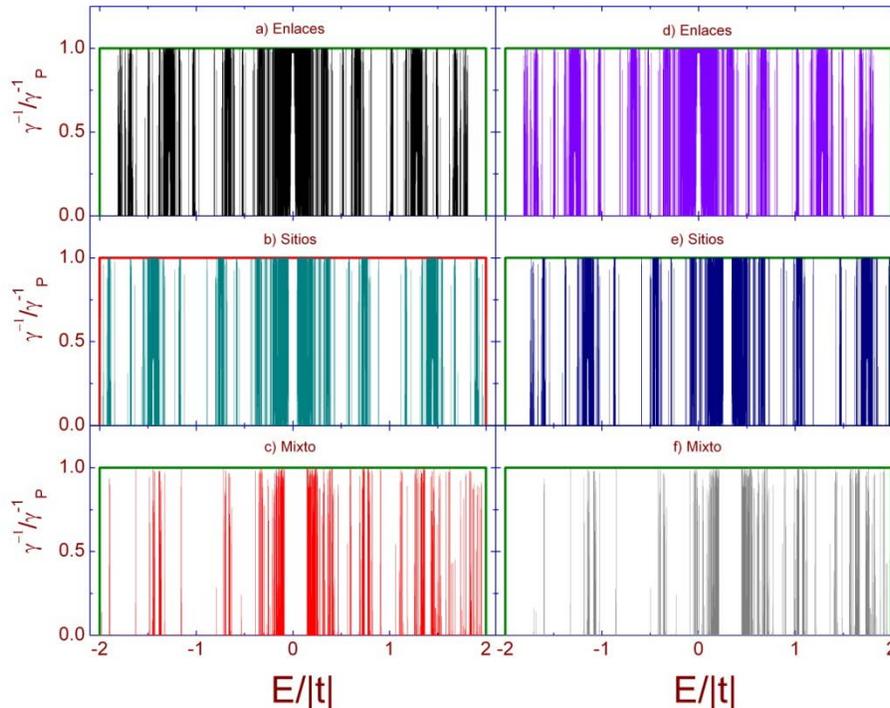


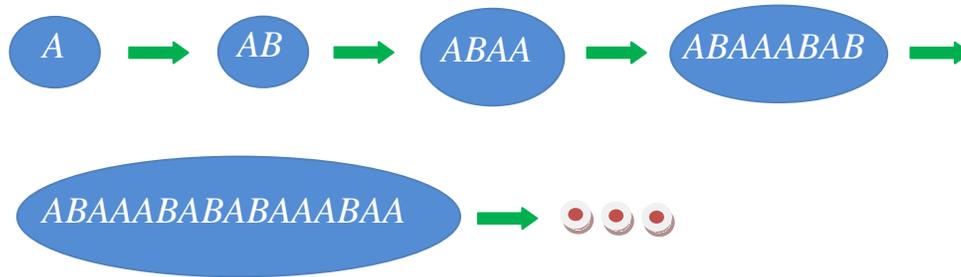
Figura 3-8. Coeficiente de Lyapunov versus energía para los mismos sistemas que la Fig. 3-6.

A continuación analizaremos una secuencia que es aperiódica pero no presenta simetría de espejo o anti-espejo.

Cadenas de doble período

La cadena la podemos generar por el método de adición o de inflación, es decir, Método de adición: $f_n = f_{n-1} \oplus f_{n-2} \oplus f_{n-2}$ donde $f_1 = A$ y $f_2 = AB$, por ejemplo para la generación 5 tenemos $ABAAABABABAAABAA$.

Método de inflación: $A \rightarrow B$ y $B \rightarrow AA$, la cadena crece de la forma:



La Fig 3-9 nos muestra un segmento de la cadena con ordenamiento de los átomos que siguen la secuencia de doble período para los tres problemas abordados en esta tesis.

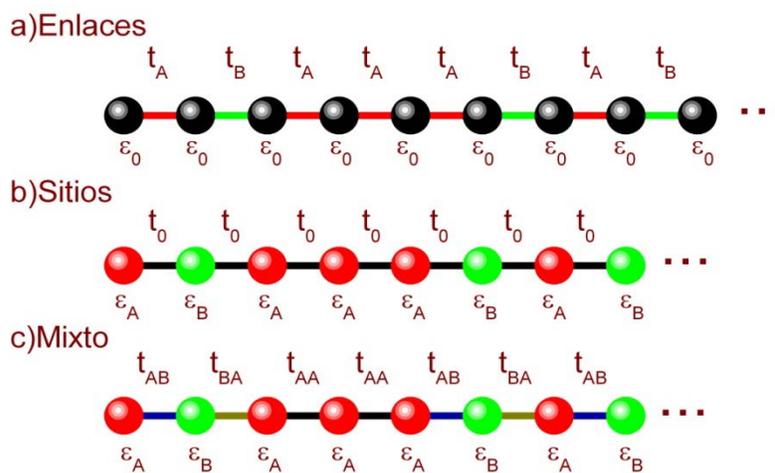


Figura 3-9. Segmentos de cadenas de doble período para el problema de enlaces, sitios y mixto.

Densidad de estados

En esta sección analizaremos la densidad de estados para las cadenas de tipo doble período por medio del método de renormalización que obtuvimos para la Ec. (2-27) y el desarrollo de los coeficientes de este método se encuentran en los apéndices *C* y *F*. La Fig. 3-10 presenta el espectro de la DOS versus la energía para un ordenamiento de átomos tipo doble período, para los problemas a) enlace, donde cambian las energías de salto $t_A=0.8t$, $t_B=t$ y las energías de sitio son nulas. b) Sitios aquí sólo varían las energías de sitio $\epsilon_A=-\epsilon_B=0.3t$ y las integrales de salto son constantes $t_A=t_B=t$ y el c) mixto donde las energías de sitio son $\epsilon_A=0.5t$, $\epsilon_B=0$ y las integrales de salto $t_{AA}=0.8t$ y $t_{AB}=t_{BA}=t$. El número de átomos considerados en los tres sistemas fue de 536870912 ($n=30$) y la parte imaginaria de la energía es de $10^{-5}t$. Al igual que en los sistema anteriores estas

cadena también están conectados a dos saturadores semi-infinitos con energías de sitio nulas e integrales de salto t .

La densidad de estados por el método de renormalización la podemos escribir como:

$$DOS(\varepsilon, n) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[A(n)G_{L,L} + B(n)G_{R,R} + C(n)G_{L,R} + D(n)]$$

Los coeficientes obtenidos por el método de renormalización para la cadena de doble período en el problema de enlaces fueron

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

$$B(n) = B^*(n-1) + [A^*(n-1) + B(n-1) - 1.0]\mu_2^2(n) + C^*(n-1)\mu_2(n)$$

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

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

Los coeficientes se encuentran en el apéndice D.

Continuamos para el problema de sitios y mixto, estos coeficientes fueron:

$$A(n) = A(n-1) + \phi_1(n)[\phi_1(n)B(n-1) + C(n-1)] + \phi_3^2(n)A^*(n-1)$$

$$B(n) = B^*(n-1) + \phi_2(n)[\phi_2(n)A^*(n-1) + C^*(n-1)] + \phi_4^2(n)B(n-1)$$

$$C(n) = 2.0\phi_1(n)\phi_4(n)B(n-1) + 2.0\phi_2(n)\phi_3(n)A^*(n-1) + \phi_4(n)C(n-1) + \phi_3(n)C^*(n-1)$$

$$D(n) = \mu_1(n)B(n-1) + \mu_2(n)A^*(n-1) + D(n-1) + D^*(n-1).$$

Los cuales se encuentran desarrollados en el apéndice F.

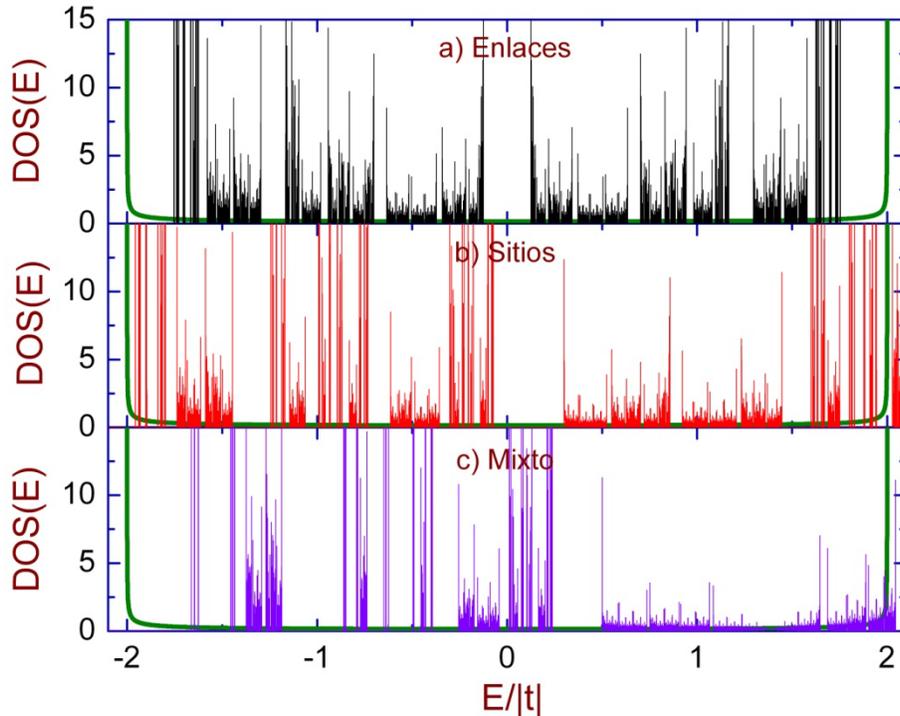


Figura 3-10. Densidad de estados (DOS) versus energía (E) para cadenas que siguen un ordenamiento atómico tipo doble periodo en los problemas de a) enlaces, b) sitios y c) mixto.

Obsérvese que en el problema de enlace existe un gap en energía cero, el ancho de este gap depende de la diferencia de las integrales de salto, por lo que entre más aperiódica es la secuencia el ancho es más grande. Más aun, el problema de sitios ya no tiene simetría con respecto a la energía cero como se presentó para la cadena con ordenamiento tipo Thue Morse, debido a que no tenemos simetría de espejo o anti-espejo en esta secuencia de doble período. Los gap en b) y c) son más anchos con respecto a a) porque su aperiodicidad es mayor en estos dos espectros.

Transmitancia

La Fig. 3-11 nos muestra el espectro de transmitancia versus la energía para las mismas cadenas que la Fig. 3-10. Estos espectros se obtuvieron por medio del método de renormalización que desarrollamos para esta propiedad, el cual se encuentra en los apéndices *I* y *L*.

La ecuación de transmitancia es:

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

donde los coeficientes de la matriz de transferencia ($\tau_{i,j}$) son obtenidos por el método de renormalización y se encuentran desarrollados en los apéndices I y L.

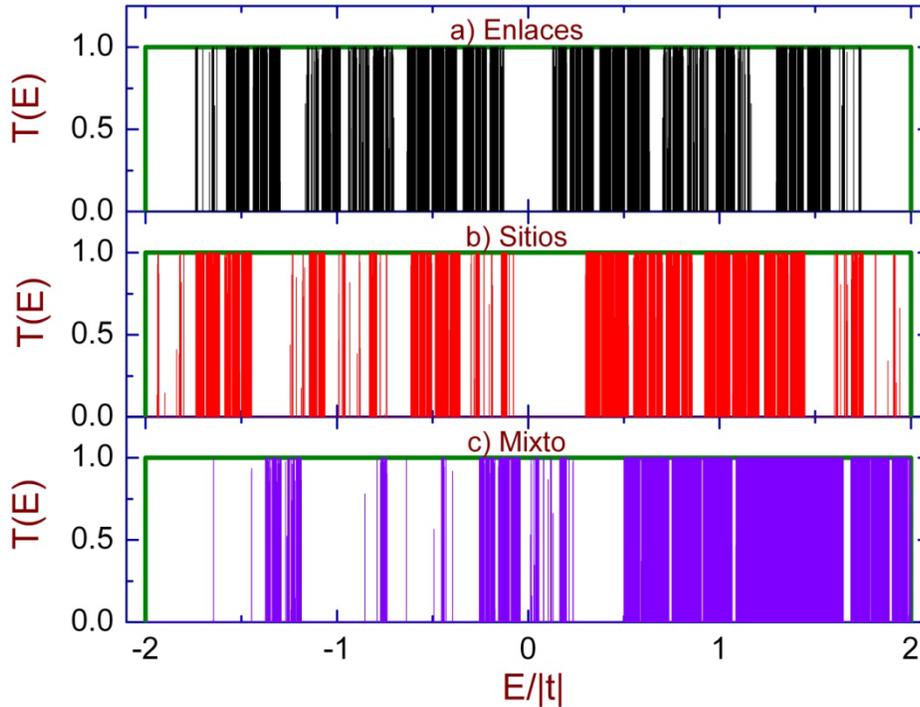


Figura 3-10. Transmitancia en función de la energía para las cadenas que tienen un ordenamiento atómico tipo doble período en los problemas a) enlaces, b) sitios y c) mixto.

Nótese que sólo el espectro del problema de enlaces tiene simetría y el gap centrado en energía cero. También aquí los espectros de b) y c) sus gap son de mayor anchura, pero el espectro c) presenta un mayor número de estados de transmitancia cercana a uno en el intervalo de energía de $1|t|$ a $2|t|$. En la sección de estados transparentes vamos a ver cuál de todos esos estados de alta conductividad eléctrica *dc* es balístico.

Coefficiente de Lyapunov

En la Fig. 3-11 se muestra el espectro del coeficiente de Lyapunov versus la energía para cuando el ordenamiento de los átomos sigue la secuencia de doble período. Los problemas abordados fueron a) enlaces, b) sitios y c) mixto tomando los mismos parámetros que la Fig. 3-10. Aquí volvemos a mostrar como la transmitancia y el coeficiente son un buen parámetro para estudiar la localización de los sistemas aperiódicos, debido a que sus espectros son muy semejantes.

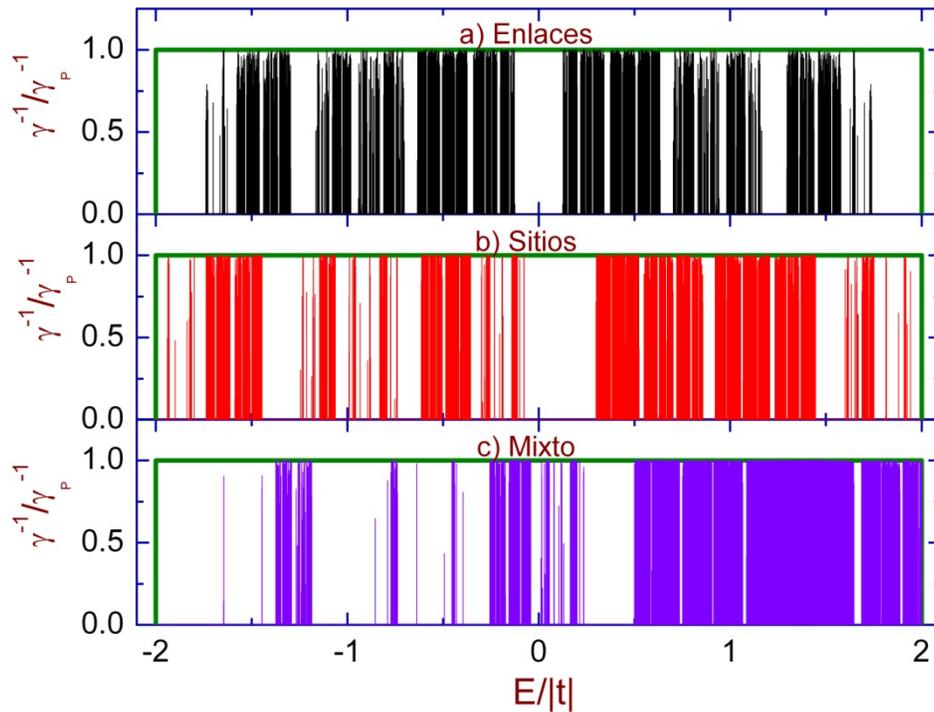


Figura 3-11. Coeficiente de Lyapunov versus la energía para cadenas tipo doble período en los problemas de a) enlaces, b) sitios y c) mixto. Los parámetros son los mismos que la Fig. 3-10.

Todos los espectros de transmitancia que hemos presentado muestran estados que parecen ser extendidos, es decir, transmisión perfecta. En la siguiente sección vamos a ver cuántas o cuales energías sí presentan conducción balística.

Estados transparentes

En los últimos años, ha habido un gran interés en el problema de “Impurezas correlacionadas” dentro de una cadena periódica, comenzando con el trabajo pionero de Dunlap *et al.* [Dunlap, 1990], que trató el caso de impurezas correlacionadas como dímeros. Resultando que a ciertas energías los dímeros se vuelven transparentes a un electrón que pasa, lo cual tiene importantes consecuencias sobre las propiedades de transporte de esas cadenas. Una de estas consecuencias es la presencia de estados extendidos en cadenas con desorden correlacionado, es decir, tenemos conductividad balística.

En esta sección vamos a mostrar en qué energías la transmitancia es uno – estados transparentes- para los nueve sistemas que abordamos en este trabajo. Empezaremos con el caso en el que el ordenamiento de los átomos sigue la secuencia de Fibonacci para el problema de enlaces, aquí encontramos que el estado transparente no depende de la cuasiperiodicidad, sólo de la generación porque se presenta cada seis generaciones en energía igual a cero. Esto se encuentra ilustrado en la Fig. 3-12 para dos integrales de salto $t_A=0.7t$ (círculos rojos) y $t_A=0.5t$.

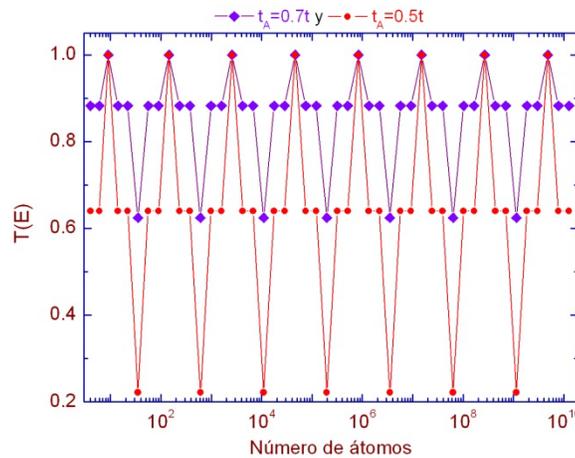


Figura 3-12. Estados transparentes versus generación de la cadena de Fibonacci.

El estudio analítico de este estado se reportó en Sánchez et al. 2004 [Sánchez, 2004] y se obtiene una expresión analítica de la Ec. (2-47), donde al evaluar la transmitancia en energía cero la expresión queda

$$T(E=0) = \frac{4}{[\tau_{21} - \tau_{12}]^2 + (\tau_{22} + \tau_{11})^2},$$

donde $\tau_{i,j}$ son los elementos de la matriz de transferencia descrita en el capítulo 2, con $i = 1, 2$, $j = 1, 2$. Entonces los elementos de la matriz de transferencia en esta energía los podemos escribir como:

$$\tau_{i,j} = kf(i+j) \left[\left(\frac{1-(-1)^k}{2} \right) \theta(n) \gamma^{(1+\theta(n))\theta(i)} - f(k) \gamma^{\theta(i)} \right] - \left(1 - \left\lfloor \frac{k}{2} \right\rfloor \right) (j-i) \theta(n) \gamma^{\theta(n)(j-i)},$$

donde $\gamma = t_A/t_B$, $f(k) = [1 + (-1)^k]/2$ y los números enteros $k = n - 2 \bmod(3) \in [0, 2]$ y $\theta(i) = -(-1)^i$. Por lo tanto, la transmitancia es

$$T = \frac{4}{\left[f(k)(\gamma + \gamma^{-1})^2 + (1 - (-1)^k)(\gamma^{1+\theta(n)} + \gamma^{-(1+\theta(n))})^2 / 2 \right]}.$$

Observe que la transmitancia es igual a uno cuando $k = 1$, es decir, hay un estado transparente en $E=0$ en el problema de enlaces para las generaciones $n = 6b$, siendo $b = 1, 2, \dots$. En el modelo de sitios y mixto no se logro encontrar estados transparentes, ya que haciendo una amplificación en las zonas de estados de mayor conductividad sólo obtuvimos algunas energías donde la transmitancia era de ~ 0.999999999999 pero nunca llegaba a ser uno.

Ahora cuando el ordenamiento sigue la secuencia de Thue Morse encontramos que para el problema de enlaces tiene un estado transparente en energía cero. Esto se muestra en la Fig. 3-13 donde se tomaron dos integrales de salto $t_A=0.7t$ (círculos negros) y $t_A=0.5t$ (círculos rojos).

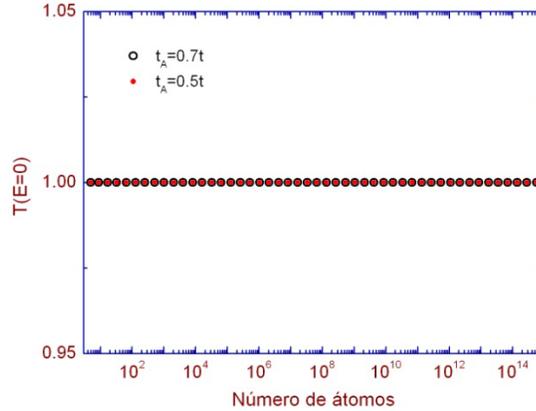


Figura 3-13. Estados transparentes en energía cero.

Obsérvese que el estado transparente no depende de la generación ni de la aperiodicidad del sistema. La ecuación analítica para la matriz de transferencia que encontramos después de multiplicar las matrices de transferencia de cada sitio fue:

$$\tau_{i,j} = (j - i), \text{ donde } i \text{ y } j \text{ son } 1 \text{ o } 2.$$

La sustituimos en la Ec. (3-1) y obtenemos que la transmitancia es $T(E=0)=1$. En el problema de enlaces para la secuencia de Thue Morse se presentan más estados transparentes pero las energías ya no son enteras y no encontramos una expresión analítica para la matriz de transferencia ya que en las entradas de la matriz el exponente de la energía crece conforme crece el número de átomos.

Para el problema de sitios encontramos dos estados transparentes de forma tanto numérica como analítica, estos estados están representados en la Fig. 3-14. Las energías de sitio que tomamos fueron $\varepsilon_A = -\varepsilon_B = 0.5t$, las integrales de salto son t y las energías donde se presenta son $E = \pm 1.5t$.

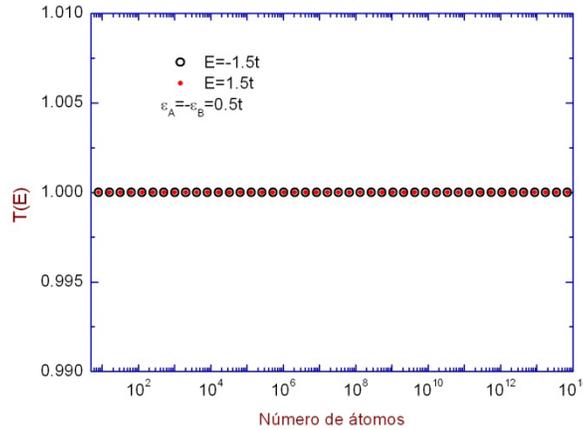


Figura 3-14. Estados transparentes para el problema de sitios donde el ordenamiento de los átomos sigue la secuencia de Thue Morse.

Nótese que también aquí el estado transparente no depende del número de átomos, pero sí depende de la aperiodicidad del sistema. Más aún, esta energía puede ser positiva o negativa porque la secuencia tiene simetría de espejo o anti-espejo. Pero para cualquier otro conjunto de energías de sitio diferente ya no presenta estado transparente. La ecuación analítica que describe este comportamiento se obtuvo de la multiplicación de las matrices de transferencia de cada átomo y encontramos que al evaluarla esta matriz es:

$$\tau_{i,j} = \frac{1 + (-1)^{i+j}}{2},$$

Sustituimos estos valores de la matriz de transferencia y la energía en la Ec. (2-47), obteniendo que la transmitancia es uno para generaciones mayores o iguales a 4.

Para el problema mixto también encontramos dos estados transparentes con energías de sitio $\varepsilon_A=0.5t$ y $\varepsilon_B=0$, las integrales de salto $t_{AA}=0.8t$, $t_{AB}=t_{BA}=t_{BB}=t$ y las energías donde $T(E)$ es uno son $E=0.53118697998519385075t$ y $E=-0.86463961823489318348t$. Aquí los estados transparentes dependen del número de átomos y de la aperiodicidad del sistema.

En el ordenamiento de los átomos que sigue la secuencia de doble período encontramos estados transparentes sólo para el problema de enlaces donde las energías de sitio son nulas y las integrales de salto $t_A=0.8t$ y $t_B=t$, las energías donde la transmitancia es uno fueron $E=-0.62472262267554003407t$ y $E=-1.2970268498878768388829t$. En este caso los estados transparentes dependen de la generación y de la aperiodicidad del sistema. Para los otros dos problemas sitios y mixto no encontramos ningún estado con transmitancia uno. A continuación vamos analizar los espectros de transmitancia alrededor de las energías de estado transparente.

Para el problema de enlaces obtuvimos estados transparentes para las tres formas de ordenamiento de los átomos, Fibonacci, Thue Morse y doble período. Amplificamos el espectro de transmitancia alrededor de esta energía y observamos que tienen estados de alta conductividad pero no son balísticos como se ver en la Fig. 3-15.

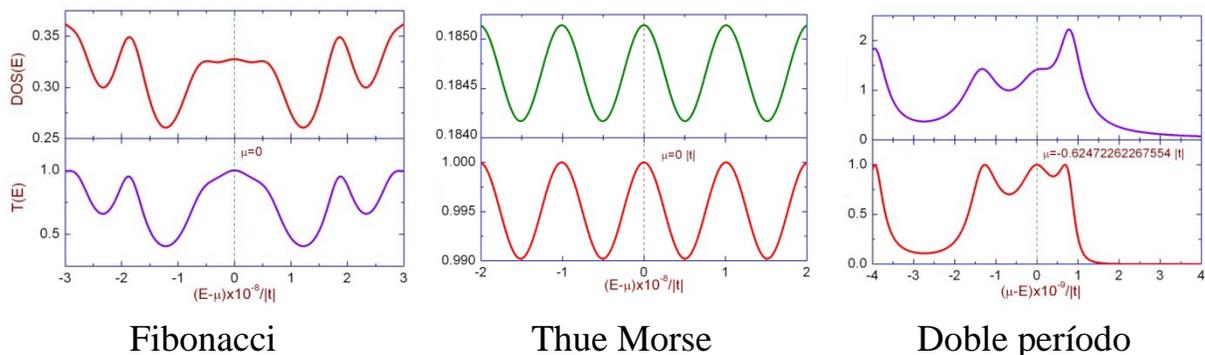


Figura 3-15. Amplificación de la transmitancia alrededor de la energía de estados transparentes para el problema de enlaces en los tres sistemas.

Nótese que el espectro de Thue Morse oscila de forma periódica teniendo un mayor número de estados de alta conductividad a diferencia de los demás espectros, además el espectro es simétrico con respecto a la energía del estado transparente. Este mismo comportamiento lo encontramos para el problema de sitios de Thue Morse (Fig 3-17), esto debe a que la secuencia tiene simetría de espejo o anti-espejo para el problema de sitios.

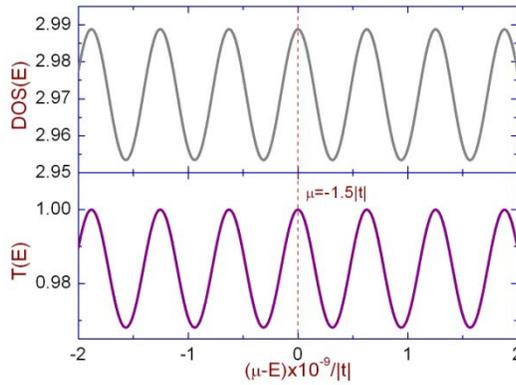


Figura 3-16. Amplificación del espectro de transmitancia alrededor del estado transparente para el problema de sitios de Thue Morse.

Podemos concluir que estos estados son más robustos en comparación con los de los sistemas de Fibonacci y doble período. Además, los espectros de transmitancia dependen generalmente de la aperiodicidad del sistema, por lo que es interesante estudiar el comportamiento de las eigen-energías variando los distintos parámetros dependiendo del problema. Así podremos obtener las regiones de energía donde es posible encontrar estados de alta conductividad. A continuación se presenta en la Fig 3-17 un barrido de las eigen-energías como función de la intensidad de la cuasiperiodicidad, para el problema de enlaces varía t_A , para el de sitios varía $\varepsilon_A = -\varepsilon_B$ y para el mixto tenemos dos casos donde varía t_{AA} o ε_A . El número de átomos de los sistemas es 6766, las energías permitidas fueron obtenidas a partir de la densidad de estados sin saturadores registrándose si DOS es mayor que 0.5.

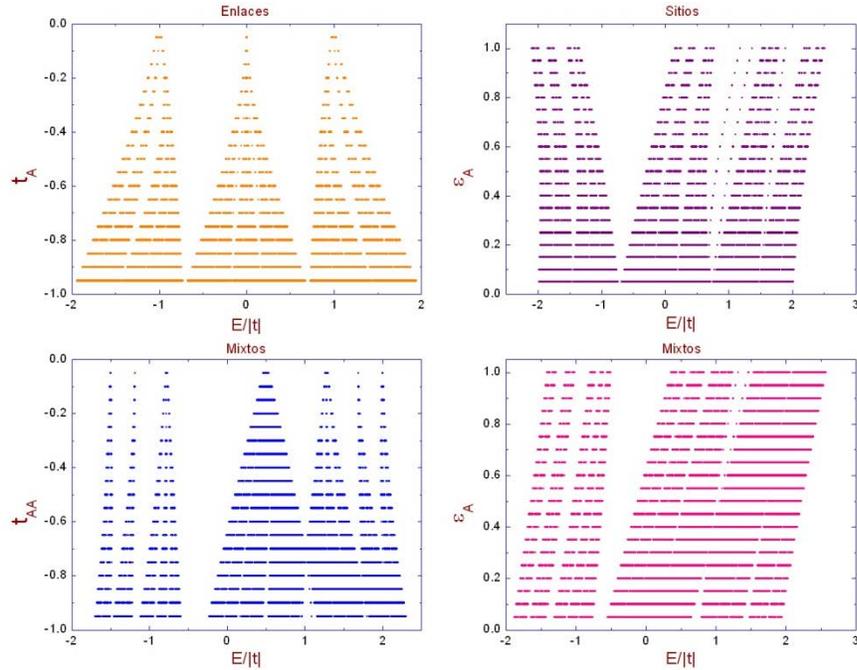


Figura 3-17. Eigen-energías para la secuencia de Fibonacci variando en el problema de enlaces la integral de salto t_A , en el problema de sitios la energías de sitio son $\varepsilon_A = -\varepsilon_B$, en el problema mixto primero se varía la integral de salto t_{AA} y $\varepsilon_A = 0.5t$, en el segundo se varían las energías de sitio ε_A . El número de átomos que se utilizaron fueron 6766.

Obsérvese que en el caso límite, es decir, $t_A = t_B = t$ y $\varepsilon_A = -\varepsilon_B = 0$, las eigen-energías serían un continuo en cualquiera de los problemas. Para el problema de enlaces en $t_A = 0$ no tendríamos eigen-energías. También, se observa que existe una ramificación en las energías permitidas teniendo una complejidad intrínseca debido a la cuasiperiodicidad.

En la Fig. 3-18 se muestran las eigen-energías versus los parámetros de aperiodicidad de la cadena de Thue Morse para los problemas de enlaces variando t_A , para el de sitios variando $\varepsilon_A = -\varepsilon_B$ y para el mixto tenemos dos casos donde varían t_{AA} o ε_A . El número de átomos de esta cadena es 8193, los demás parámetros se tomaron de acuerdo a la Fig. 3-6. La presentación de resultados numéricos tiene la limitación de que las funciones delta alrededor de las eigen-energías en la DOS tienen un semi-ancho de la parte imaginaria en la energía y el muestreo de energías es siempre un número finito.

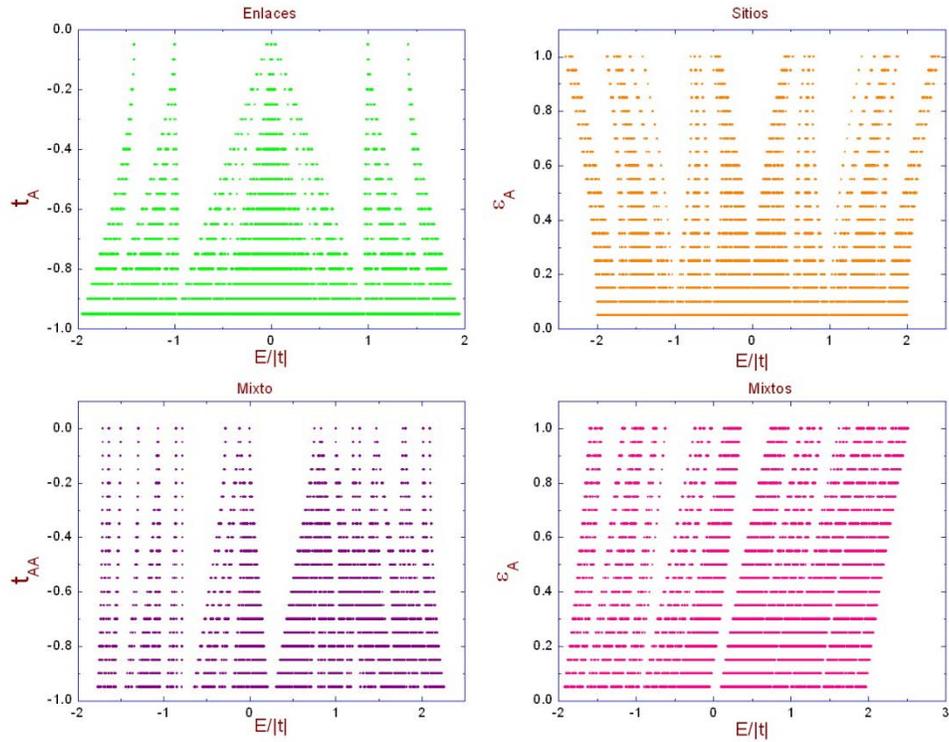


Figura 3-18. Representación gráfica de eigen-energías (E) en función de los parámetros de aperiodicidad de la cadena de Thue Morse para el problema de enlaces, de sitios y mixto. El número de átomos que se utilizaron fueron 8193.

Nótese que volvemos a tener un espectro ramificado similar al de la figura anterior, el cambio se encuentra en el problema de sitios ya que en esta cadena el espectro es simétrico y en la cadena de Fibonacci no presenta esta simetría, esto es debido a la simetría de espejo que tiene la cadena de Thue Morse. Además los gaps son menos anchos que la anterior figura.

La Fig. 3-19 presenta los espectros de eigen-energías versus la aperiodicidad del sistema tipo doble período para los problemas de enlaces variando t_A , para el de sitios variando $\varepsilon_A = -\varepsilon_B$ y para el mixto tenemos dos casos donde varían t_{AA} o ε_A . El número de átomos de esta cadena es 8193, los demás parámetros se tomaron de acuerdo a la Fig. 3-10.

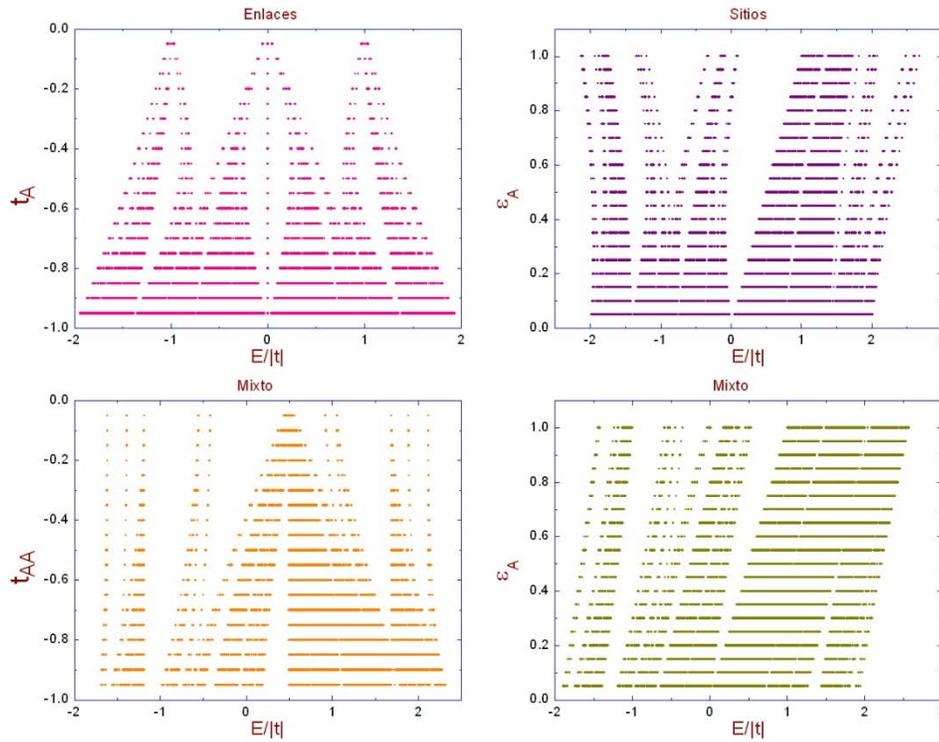


Figura 3-19. Eigen-energías versus los parámetros de aperiodicidad para la cadena de doble período en los problemas de enlaces, de sitios y mixto. El número de átomos que se utilizaron fueron 8193.

Obsérvese que las brechas son más angostas en comparación con las de Fibonacci, ya sólo el problema de enlaces presenta simetría los demás como ya no son redes bipartitas ya no la presentan. El ancho de banda en el problema de sitios y mixto depende del valor de las energías de sitio de cada problema.

Entonces podemos concluir que las simetrías que tienen las cadenas están estrechamente relacionadas con el número de estados transparentes que se presentan. Además, ya hemos visto cómo afecta la aperiodicidad a las propiedades del transporte, donde encontramos estados extendidos y estados localizados. A continuación haremos un análisis de los efectos que causan la aperiodicidad y el número de átomos de la cadena en los espectros de transmitancia.

Localización

La localización de los estados electrónicos en modelos desordenados y su relación con las propiedades de transporte, fue estudiada inicialmente por Anderson [Anderson, 1958]. Posteriormente, se probó que en sistemas desordenados unidimensionales todos los estados son localizados, por muy pequeño que sea el desorden [Abrahams, 1979], siempre que no exista correlación en el desorden. En los últimos años se ha demostrado la presencia de estados extendidos en sistemas desordenados unidimensionales con correlación en el desorden [Flores, 1989, Dunlap, 1990], y varios de estos resultados han sido recientemente confirmados en forma experimental [Bellani, 1999, Kuhl, 2000]. La aparición de estados extendidos en sistemas desordenados al azar, pero diluidos por distribuciones periódicas de energías por sitio ha sido motivo de interés en el último tiempo [Hilke, 1997, Onell, 2002].

En los sistemas periódicos, es decir, en sistemas sin ningún tipo de desorden, todas las funciones de onda son extendidas o deslocalizadas. En cambio, en los sistemas desordenados, la existencia de correlación de corto o largo alcance en el desorden puede generar estados extendidos, los cuales pueden llegar a formar bandas (correlación de largo alcance) o formar un conjunto discreto de estados extendidos (correlación de corto alcance). En resumen, el mecanismo responsable de la aparición de estados extendidos es la presencia de correlación en el desorden.

Para obtener la localización del transporte electrónico en redes aperiódicas utilizamos el promedio espectral de la transmitancia definido como

$$\langle T \rangle = \frac{\int T(E) \text{DOS}(E) dE}{\int \text{DOS}(E) dE}$$

El primer sistema analizado es el de Fibonacci para el problema de enlaces, el cual se encuentra en la Fig. 3-20. Las energías de salto (t_A) consideradas fueron desde uno hasta $0.8t$, con energías de salto son nulas. Obsérvese que para este problema el promedio espectral de la transmitancia presenta un decaimiento como ley de potencias en función del tamaño del sistema como se reporto en la literatura [Hui-Fen, 2006], sólo que aquí toman las amplitudes de las funciones de onda y el numero de átomos del sistemas es muy pequeño.

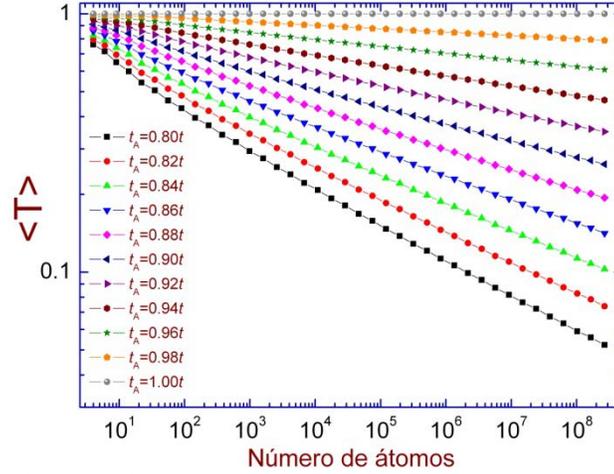


Figura 3-20. Promedio espectral de la transmitancia versus el número de átomos del sistema para diferentes integrales de salto.

Este comportamiento se puede modelar de forma analítica por medio de la ecuación

$$\langle T \rangle = N^{-C},$$

donde $C = 0.7238 \left[1 - \left(\frac{t_A}{t_B} \right) \right]$. Por lo que entre más cuasiperiódica sea la cadena tenemos menos estados que conducen.

Para el problema de sitios en Fibonacci, el promedio espectral de la transmitancia versus el número de átomos de la cadena se presenta en la Fig. 3-21. La cuasiperiodicidad en este problema se representa por medio de la variación de las energías de sitio $\varepsilon_A = -\varepsilon_B$ y las integrales de salto se mantienen constantes.

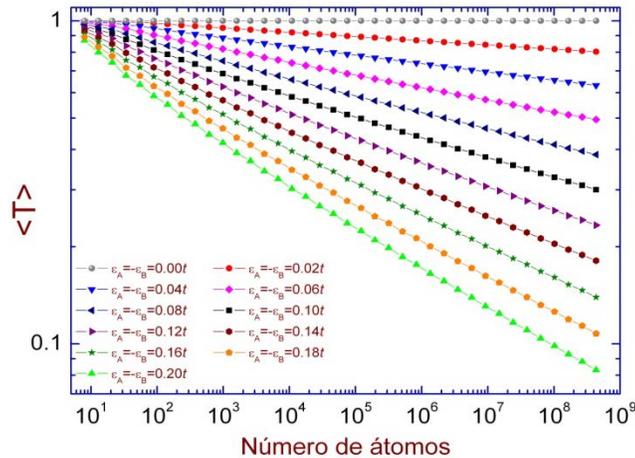


Figura 3-21. Promedio espectral de la transmitancia en función del número de átomos de la cadena para el problema de sitios en Fibonacci.

Como es una red cuasiperiódica el promedio espectral de la transmitancia nuevamente decae como una ley de potencias en función del tamaño del sistema. Este comportamiento puede ser modelado mediante la siguiente relación:

$$\langle T \rangle = N^{-C},$$

donde $C = 0.76195 \left(\frac{\varepsilon_A}{t_B} \right)$, al considerar $\varepsilon_A=0$ recuperamos el promedio espectral de la cadena periódica.

Este promedio espectral de la transmitancia también lo realizamos en las cadenas de Thue Morse para los problemas de enlaces y sitios. En la Fig. 3-22 muestra este promedio en función del número de átomos para el problema de enlaces donde el parámetro de aperiodicidad es la variación de las integrales de salto (t_A), las energías de sitio son nulas.

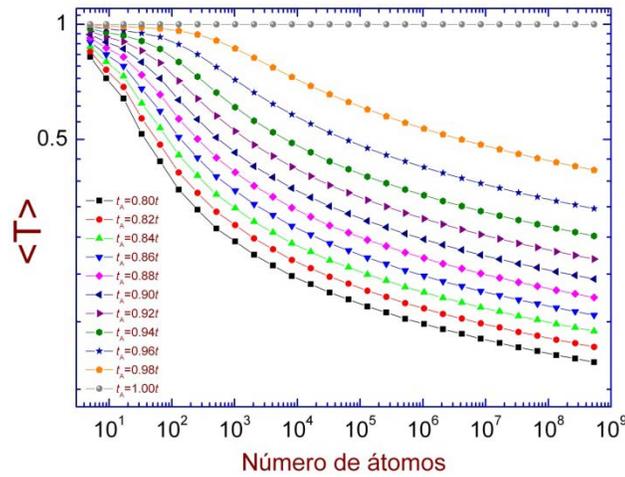


Figura 3-22. Promedio espectral de la transmitancia en función del número de átomos de la cadena de Thue Morse para el problema de enlaces.

Obsérvese que este promedio decae más rápido en comparación con el promedio de las cadenas de Fibonacci. La ecuación que modela este comportamiento es de la forma

$$\langle T \rangle = N^{-b_1} + N^{-b_2},$$

donde b_1 y b_2 dependen de la aperiodicidad del sistema y b_2 es mucho mayor que b_1 .

La Fig. 3-23 presenta el promedio espectral de la transmitancia en función del número de átomos de la cadena de Thue Morse para el problema de sitios.

Las integrales de salto las consideramos constantes y las que varían son las energías de sitio $\varepsilon_A = -\varepsilon_B$.

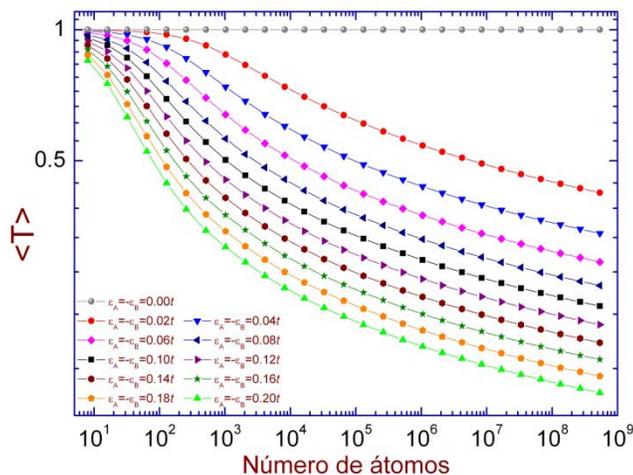


Figura 3-23. Promedio espectral de la transmitancia versus el número de átomos de la cadena de Thue Morse para el problema de sitios.

Nótese que este espectro presenta el mismo comportamiento que la figura anterior y es modelado mediante la misma expresión.

Para el ordenamiento de los átomos que sigue la secuencia de doble período en el problema de enlaces. Las integrales de salto las variamos de uno a $0.8t$ y las energías de sitio las tomamos nulas.

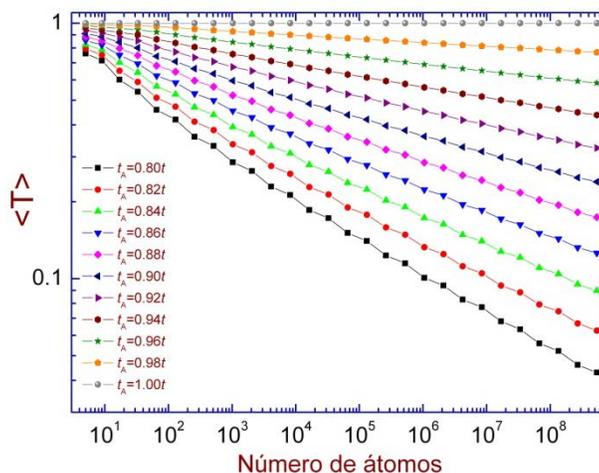


Figura 3.23 Promedio espectral de la transmitancia en función del número de átomos de la cadena de doble período para el problema de enlaces.

Podemos observar que el promedio espectral de la transmitancia en función del tamaño del sistema decae siguiendo una ley de potencias. De manera similar al ordenamiento de átomos tipo Fibonacci, este promedio puede ser modelado mediante la siguiente relación:

$$\langle T \rangle = N^{-C}$$

donde $C = 0.76195 \left[1 - \left(\frac{t_A}{t_B} \right) \right]$. Lo que difieren es en la segunda cifra del coeficiente de C.

Finalmente, se presenta el promedio espectral de la transmitancia versus el tamaño del sistema para el problema de sitios en la secuencia de doble período. Las energías de sitio ($\varepsilon_A = -\varepsilon_B$) las variamos desde cero hasta $0.2t$ y las integrales de salto las tomamos constantes.

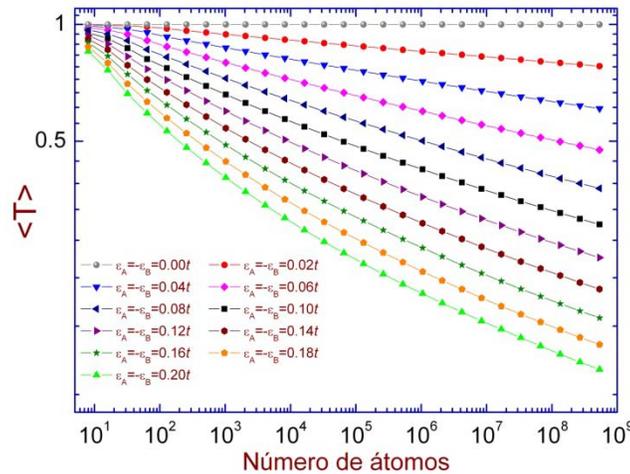


Figura 3-24. Promedio espectral de la transmitancia versus el número de átomos de la cadena de doble período para el problema de sitios.

Aquí también decae como una ley de potencias. Cabe señalar que los últimos promedios deben de ser rectas, sólo que al ser más aperiódicos necesita un mayor número de divisiones en la integral. Este comportamiento puede ser modelado mediante la siguiente expresión

$$\langle T \rangle = N^{-C},$$

donde $C = 0.6564 \left(\frac{\varepsilon_A}{t_B} \right)$.

En conclusión en los sistemas aperiódicos el promedio espectral de la transmitancia decae como una ley de potencias en contraste con el comportamiento constante en las redes periódicas y el comportamiento exponencial para las cadenas aleatoriamente desordenadas.

Conclusiones

En esta tesis hemos estudiado la transmitancia, la densidad de estados y el coeficiente de Lyapunov en cadenas aperiódicas, donde el ordenamiento de sus átomos siguen las secuencias de Fibonacci, Thue Morse y doble período. Para los problemas de enlaces, sitios y mixto dentro del formalismo de amarre fuerte y a temperatura cero. Para dicho estudio hemos extendido los métodos de renormalización para la densidad de estados y la matriz de transferencia en las cadenas de Fibonacci, Thue Morse y doble período. Además, hemos obtenido de forma analítica estados transparentes –transmitancia uno- para algunos de estos sistemas y mostramos que en la cadena de Thue Morse, la cual presenta una simetría de espejo y anti-espejo existen una mayor cantidad de estados transparentes por generación contrario al único estado en la cadena de Fibonacci. Las conclusiones principales de esta tesis se pueden resumir:

- Extendimos el método de renormalización para densidad de estados y la matriz de transferencia para las cadenas de Fibonacci, Thue Morse y doble período abordando tres diferentes problemas (enlaces, sitios y mixto). Consideramos que estos métodos son eficientes y *exactos* dentro del formalismo elegido.
- Los espectros de transmitancia y Lyapunov son semejantes, por lo que cualquiera de los dos puede ser usado para investigar la localización de los sistemas aperiódicos.
- Demostramos de forma numérica y analítica la existencia de estados transparentes para la cadena de Thue Morse.
- Observamos que la presencia de una simetría espejo o anti-espejo en las cadenas origina un mayor número de estados transparentes.
- Mostramos la ramificación y ensanchamiento de energías prohibidas en los espectros de eigen-energías en función de la aperiodicidad del sistema.
- Modelamos de forma numérica y analítica el comportamiento del promedio espectral de la transmitancia en función de la longitud de los sistemas aperiódicos, encontrando que decaen siguiendo una ley de potencias.

La conductividad eléctrica del estado transparente en las redes de Fibonacci, Thue Morse y doble período se asemeja a la de los sistemas periódicos revelando el orden de largo alcance, mientras que la transmitancia en los estados no transparentes es similar al de sistemas desordenados debido a la ausencia de la simetría traslacional. Por otro lado, el modelo de amarre fuerte se basa en las funciones de Wannier y puede incluir la aperiodicidad de forma

natural sin requerir de la ayuda del espacio recíproco. Por último, el presente trabajo podría extenderse a sistemas bidimensionales y tridimensionales usando el método de convolución, así como al estudio de otras excitaciones tales como fonones, fotones, etc. aplicando el método del grupo de renormalización en el espacio real. Asimismo, se extendería la investigación al transporte electrónico en sistemas aperiódicos a temperatura finita, incluyendo los efectos de la estadística de Fermi-Dirac.

Apéndice A. Densidad de estados para el problema de enlaces (Fibonacci).

La ecuación de la densidad de estados para la cadena de Fibonacci en el problema de enlaces por el método de renormalización es de la siguiente forma

$$DOS(\varepsilon, n) = DOS(\varepsilon, n-1) + DOS(\varepsilon, n-2),$$

proponiendo una forma general de renormalización

$$DOS(\varepsilon, n) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[A(n)G_{LL} + B(n)G_{RR} + C(n)G_{LR} + D(n)],$$

desarrollando la ecuación tenemos que

$$DOS(\varepsilon, n) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[A(n-1)G_{11} + B(n-1)G_{22} + C(n-1)G_{21} + D(n-1) + A(n-2)G_{22} + B(n-2)G_{33} + C(n-2)G_{23} + D(n-2) - G_{22}].$$

Para obtener las generaciones debemos proporcionar las ecuaciones de recurrencia y posteriormente daremos las condiciones iniciales.

Las ecuaciones de recurrencia se expresan de la siguiente forma:

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

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

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

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

donde

$$\mu_1(n) = \frac{t(n-1)}{\varepsilon - \varepsilon_R(n-1) - \varepsilon_L(n-2)}, \quad \mu_2(n) = \frac{t(n-2)}{\varepsilon - \varepsilon_R(n-1) - \varepsilon_L(n-2)}$$

$$\mu_3(n) = \frac{1.0}{\varepsilon - \varepsilon_R(n-1) - \varepsilon_L(n-2)}.$$

Las ecuaciones de auto-energía y energía de salto cuando el sistema esta renormalizado es:

$$\varepsilon_L(n) = \varepsilon_L(n-1) + \frac{t(n-1)^2}{\varepsilon - \varepsilon_R(n-1) - \varepsilon_L(n-2)}, \quad \varepsilon_R(n) = \varepsilon_R(n-2) + \frac{t(n-2)^2}{\varepsilon - \varepsilon_R(n-1) - \varepsilon_L(n-2)}$$

$$t(n) = \frac{t(n-1)t(n-2)}{\varepsilon - \varepsilon_R(n-1) - \varepsilon_L(n-2)}.$$

Las funciones de Green para el caso sin saturador son:

$$G_{LL} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_R(n)}{[\varepsilon - \varepsilon_L(n)][\varepsilon - \varepsilon_R(n)] - t^2(n)}, \quad G_{LR} = \frac{t(n)}{[\varepsilon - \varepsilon_L(n)][\varepsilon - \varepsilon_R(n)] - t^2(n)}$$

$$G_{RR} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_L(n)}{[\varepsilon - \varepsilon_L(n)][\varepsilon - \varepsilon_R(n)] - t^2(n)}.$$

Las funciones de Green para el caso con saturador son:

$$G_{LL} = \frac{\eta_1}{1.0 - t^2(n)\eta_1\eta_2}, \quad G_{RR} = \frac{\eta_2}{1.0 - t^2(n)\eta_1\eta_2}, \quad G_{LR} = \eta_1 t(n) G_{RR}$$

con

$$\eta_1 = \frac{\varepsilon - \varepsilon^*_L(m)}{[\varepsilon - \varepsilon^*_L(m)][\varepsilon - \varepsilon^*_{M1}(m)] - t^{*2}(n)}, \quad \eta_2 = \frac{\varepsilon - \varepsilon^*_R(m)}{[\varepsilon - \varepsilon^*_R(m)][\varepsilon - \varepsilon^*_{M2}(m)] - t^{*2}(n)}$$

donde

$$\varepsilon^*_{M1} = \varepsilon^*_R(m) + \varepsilon_L(n), \quad \varepsilon^*_{M2} = \varepsilon^*_L(m) + \varepsilon_R(n).$$

Las condiciones iniciales para las ecuaciones de recurrencia son:

$$\varepsilon_0 = 0.0 \quad t(1) = t_A \quad t(2) = \frac{t_A t_B}{\varepsilon - \varepsilon_0},$$

$$\varepsilon_L(1) = 0.0 \quad \varepsilon_R(1) = 0.0 \quad \varepsilon_L(2) = \varepsilon_0 + \frac{t_A^2}{\varepsilon - \varepsilon_0} \quad \varepsilon_R(2) = \varepsilon_0 + \frac{t_B^2}{\varepsilon - \varepsilon_0}$$

$$A(1) = 1.0 \quad B(1) = 1.0 \quad C(1) = 0.0 \quad D(1) = 0.0$$

$$A(2) = 1.0 + \frac{t_A^2}{(\varepsilon - \varepsilon_0)^2} \quad B(2) = 1.0 + \frac{t_B^2}{(\varepsilon - \varepsilon_0)^2} \quad C(2) = \frac{2.0(t_A t_B)}{(\varepsilon - \varepsilon_0)^2} \quad D(2) = \frac{1.0}{(\varepsilon - \varepsilon_0)^2}.$$

Las condiciones iniciales para el saturador están expresadas por:

$$t^*(1) = 0.0 \quad t^*(2) = \frac{t_1^2}{\varepsilon - \varepsilon_0}$$

$$\varepsilon^*_L(1) = 0.0 \quad \varepsilon^*_R(1) = 0.0 \quad \varepsilon^*_L(2) = \varepsilon_0 + \frac{t_1^2}{\varepsilon - \varepsilon_0} \quad \varepsilon^*_R(2) = \varepsilon_0 + \frac{t_1^2}{\varepsilon - \varepsilon_0}.$$

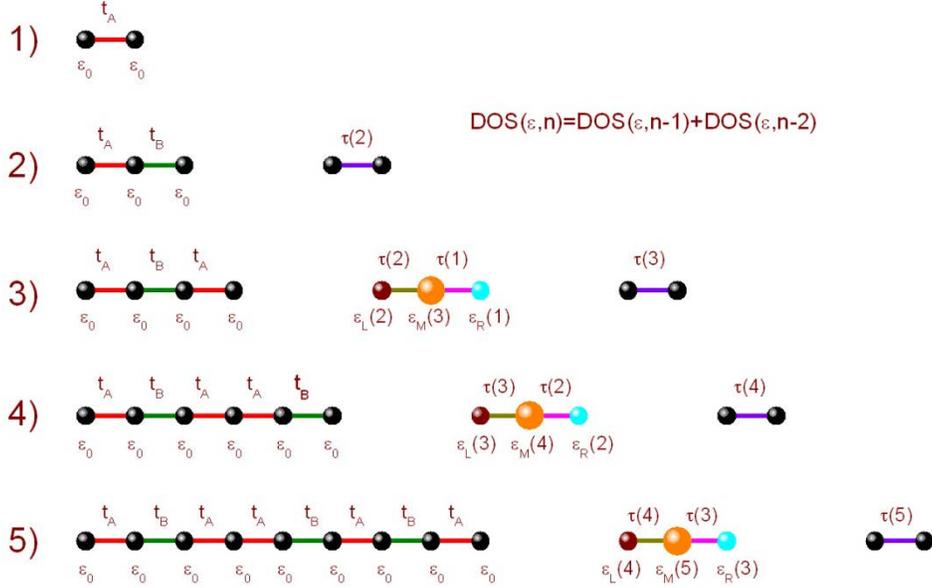


Figura A-1. Método de renormalización para el problema de enlaces.

La Fig. A-1 nos muestra un esquema grafico del método de renormalización para la densidad de estados en el problema de enlaces tipo Fibonacci.

Apéndice B. Densidad de estados para el problema de enlaces (Thue Morse).

La ecuación de la densidad de estados para la cadena de Thue Morse en el problema de enlaces por el método de renormalización es de la siguiente forma

$$DOS(\varepsilon, n) = DOS(\varepsilon, n-1) + DOS^*(\varepsilon, n-1)$$

$$DOS^*(\varepsilon, n) = DOS^*(\varepsilon, n-1) + DOS(\varepsilon, n-1)$$

proponiendo una forma general de renormalización

$$DOS(\varepsilon, n) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[A(n)G_{LL} + B(n)G_{RR} + C(n)G_{LR} + D(n)]$$

desarrollando la ecuación tenemos que

$$DOS(\varepsilon, n) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[A(n-1)G_{11} + B(n-1)G_{22} + C(n-1)G_{21} + D(n-1) + A^*(n-1)G_{22} + B^*(n-1)G_{33} + C^*(n-1)G_{23} + D^*(n-1) - G_{22}].$$

Para obtener las generaciones debemos proporcionar las ecuaciones de recurrencia y posteriormente daremos las condiciones iniciales.

Las ecuaciones de recurrencia se expresan por:

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

$$B(n) = B^*(n-1) + [A^*(n-1) + B(n-1) - 1.0]\mu_2^2(n) + C^*(n-1)\mu_2(n)$$

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

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

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

$$B^*(n) = B^*(n-1) + [A(n-1) + B^*(n-1) - 1.0]\mu_2^{*2}(n) + C(n-1)\mu_2^*(n)$$

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

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

donde

$$\mu_1(n) = \frac{t(n-1)}{\varepsilon - \varepsilon_R(n-1) - \varepsilon_L^*(n-1)}, \quad \mu_2(n) = \frac{t^*(n-1)}{\varepsilon - \varepsilon_R(n-1) - \varepsilon_L^*(n-1)}$$

$$\mu_3(n) = \frac{1.0}{\varepsilon - \varepsilon_R(n-1) - \varepsilon_L^*(n-1)}, \quad \mu_1^*(n) = \frac{t^*(n-1)}{\varepsilon - \varepsilon_R^*(n-1) - \varepsilon_L(n-1)}$$

$$\mu_2^*(n) = \frac{t(n-1)}{\varepsilon - \varepsilon_R^*(n-1) - \varepsilon_L(n-1)}, \quad \mu_3^*(n) = \frac{1.0}{\varepsilon - \varepsilon_R^*(n-1) - \varepsilon_L(n-1)}$$

Las ecuaciones de auto-energía y energía de salto cuando el sistema esta renormalizado son

$$\varepsilon_L(n) = \varepsilon_L(n-1) + \frac{t(n-1)^2}{\varepsilon - \varepsilon_R(n-1) - \varepsilon_L^*(n-1)}, \quad \varepsilon_R(n) = \varepsilon_R^*(n-1) + \frac{t^*(n-1)^2}{\varepsilon - \varepsilon_R(n-1) - \varepsilon_L^*(n-1)}$$

$$\varepsilon_L^*(n) = \varepsilon_L^*(n-1) + \frac{t^*(n-1)^2}{\varepsilon - \varepsilon_R^*(n-1) - \varepsilon_L(n-1)},$$

$$\varepsilon_R^*(n) = \varepsilon_R(n-1) + \frac{t(n-1)^2}{\varepsilon - \varepsilon_R^*(n-1) - \varepsilon_L(n-1)}$$

$$t(n) = \frac{t(n-1)t^*(n-1)}{\varepsilon - \varepsilon_R(n-1) - \varepsilon_L^*(n-1)}, \quad t^*(n) = \frac{t(n-1)t^*(n-1)}{\varepsilon - \varepsilon_R^*(n-1) - \varepsilon_L(n-1)}$$

Las funciones de Green para el caso sin saturador son:

$$G_{LL} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_R(n)}{[\varepsilon - \varepsilon_L(n)][\varepsilon - \varepsilon_R(n)] - t^2(n)}, \quad G_{LR} = \frac{t(n)}{[\varepsilon - \varepsilon_L(n)][\varepsilon - \varepsilon_R(n)] - t^2(n)}$$

$$G_{RR} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_L(n)}{[\varepsilon - \varepsilon_L(n)][\varepsilon - \varepsilon_R(n)] - t^2(n)}$$

Las funciones de Green para el caso con saturador son:

$$G_{LL} = \frac{\eta_1}{1.0 - t^2(n)\eta_1\eta_2}, \quad G_{RR} = \frac{\eta_2}{1.0 - t^2(n)\eta_1\eta_2}, \quad G_{LR} = \eta_1 t(n) G_{RR}$$

con

$$\eta_1 = \frac{\varepsilon - \varepsilon_L^*(m)}{[\varepsilon - \varepsilon_L^*(m)][\varepsilon - \varepsilon_{M1}^*(m)] - t^{*2}(n)}, \quad \eta_2 = \frac{\varepsilon - \varepsilon_R^*(m)}{[\varepsilon - \varepsilon_R^*(m)][\varepsilon - \varepsilon_{M2}^*(m)] - t^{*2}(n)}$$

donde

$$\varepsilon_{M1}^* = \varepsilon_R^*(m) + \varepsilon_L(n), \quad \varepsilon_{M2}^* = \varepsilon_L^*(m) + \varepsilon_R(n)$$

Las condiciones iniciales para las ecuaciones de recurrencia son:

$$\begin{aligned} t(1) &= t_A & t^*(1) &= t_B & \varepsilon_L(1) &= 0.0 & \varepsilon_R(1) &= 0.0 & \varepsilon_L^*(1) &= 0.0 & \varepsilon_R^*(1) &= 0.0 \\ A(1) &= 1.0 & B(1) &= 1.0 & C(1) &= 0.0 & D(1) &= 0.0 \\ A^*(1) &= 1.0 & B^*(1) &= 1.0 & C^*(1) &= 0.0 & D^*(1) &= 0.0 \end{aligned}$$

Las condiciones iniciales para los saturadores están expresadas por:

$$\begin{aligned} t^*(1) &= 0.0 & t^*(2) &= \frac{t_1^2}{\varepsilon - \varepsilon_0} \\ \varepsilon_L^*(1) &= 0.0 & \varepsilon_R^*(1) &= 0.0 & \varepsilon_L^*(2) &= \varepsilon_0 + \frac{t_1^2}{\varepsilon - \varepsilon_0} & \varepsilon_R^*(2) &= \varepsilon_0 + \frac{t_1^2}{\varepsilon - \varepsilon_0} \end{aligned}$$

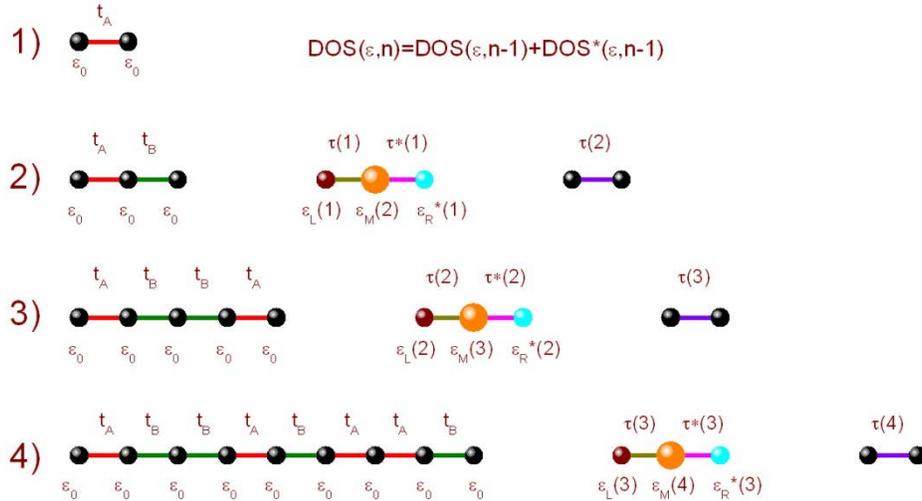


Figura B-1. Método de renormalización para el problema de enlaces (Thue Morse).

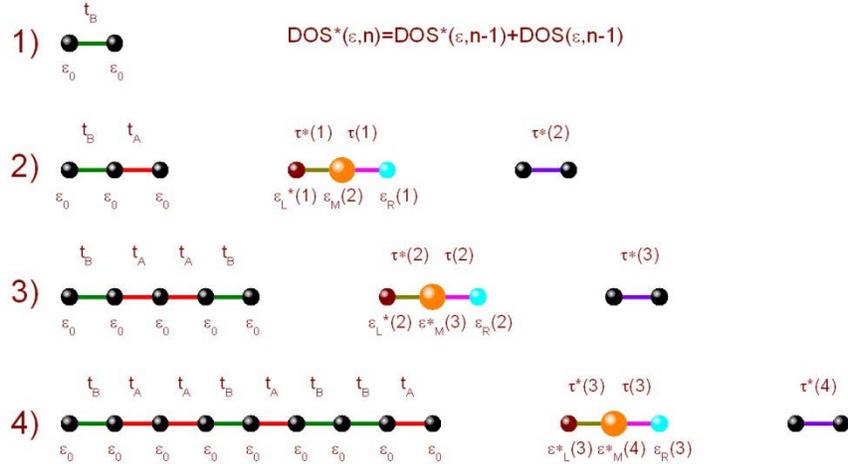


Figura B-2. Método de renormalización para el problema de enlaces (Thue Morse).

Las figuras B-1 y B-2 nos muestran un esquema grafico del método de renormalización para la densidad de estados en el problema de enlaces tipo Thue Morse.

Apéndice C. Densidad de estados para el problema de enlaces (doble período).

La ecuación de la densidad de estados para la cadena de doble período en el problema de enlaces por el método de renormalización es de la siguiente forma

$$DOS(\varepsilon, n) = DOS(\varepsilon, n-1) + DOS^*(\varepsilon, n-1)$$

$$DOS^*(\varepsilon, n) = DOS(\varepsilon, n-1) + DOS(\varepsilon, n-1)$$

proponiendo una forma general de renormalización

$$DOS(\varepsilon, n) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[A(n)G_{LL} + B(n)G_{RR} + C(n)G_{LR} + D(n)]$$

desarrollando la ecuación tenemos que

$$DOS(\varepsilon, n) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[A(n-1)G_{11} + B(n-1)G_{22} + C(n-1)G_{21} + D(n-1) + A^*(n-1)G_{22} + B^*(n-1)G_{33} + C^*(n-1)G_{23} + D^*(n-1) - G_{22}]$$

Para obtener las generaciones debemos proporcionar las ecuaciones recurrentes y posteriormente daremos las condiciones iniciales.

Las ecuaciones de recurrencia se expresan de la forma:

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

$$\begin{aligned}
B(n) &= B^*(n-1) + [A^*(n-1) + B(n-1) - 1.0]\mu_2^2(n) + C^*(n-1)\mu_2(n) \\
C(n) &= (2.0)[A^*(n-1) + B(n-1) - 1.0]\mu_1(n)\mu_2(n) + C(n-1)\mu_2(n) + C^*(n-1)\mu_1(n) \\
D(n) &= [A^*(n-1) + B(n-1) - 1.0]\mu_3(n) + D(n-1) + D^*(n-1) \\
A^*(n) &= A(n-1) + [A(n-1) + B(n-1) - 1.0]\mu_1^{*2}(n) + C(n-1)\mu_1^*(n) \\
B^*(n) &= B(n-1) + [A(n-1) + B(n-1) - 1.0]\mu_1^{*2}(n) + C(n-1)\mu_1^*(n) \\
C^*(n) &= (2.0)[A(n-1) + B(n-1) - 1.0]\mu_1^{*2}(n) + (2.0)C(n-1)\mu_1^*(n) \\
D^*(n) &= [A(n-1) + B(n-1) - 1.0]\mu_2^{*2}(n) + (2.0)D(n-1)
\end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned}
\mu_1(n) &= \frac{t(n-1)}{\varepsilon - \varepsilon_R(n-1) - \varepsilon_L^*(n-1)}, \quad \mu_2(n) = \frac{t^*(n-1)}{\varepsilon - \varepsilon_R(n-1) - \varepsilon_L^*(n-1)} \\
\mu_3(n) &= \frac{1.0}{\varepsilon - \varepsilon_R(n-1) - \varepsilon_L^*(n-1)}, \quad \mu_1^*(n) = \frac{t(n-1)}{\varepsilon - \varepsilon_R(n-1) - \varepsilon_L(n-1)} \\
\mu_2^*(n) &= \frac{1.0}{\varepsilon - \varepsilon_R(n-1) - \varepsilon_L(n-1)}.
\end{aligned}$$

Las ecuaciones de auto-energía y energía de salto cuando el sistema esta renormalizado son:

$$\begin{aligned}
\varepsilon_L(n) &= \varepsilon_L(n-1) + \frac{t(n-1)^2}{\varepsilon - \varepsilon_R(n-1) - \varepsilon_L^*(n-1)}, \quad \varepsilon_R(n) = \varepsilon_R^*(n-1) + \frac{t^*(n-1)^2}{\varepsilon - \varepsilon_R(n-1) - \varepsilon_L^*(n-1)} \\
\varepsilon_L^*(n) &= \varepsilon_L(n-1) + \frac{t(n-1)^2}{\varepsilon - \varepsilon_R(n-1) - \varepsilon_L(n-1)} \\
\varepsilon_R^*(n) &= \varepsilon_R(n-1) + \frac{t(n-1)^2}{\varepsilon - \varepsilon_R(n-1) - \varepsilon_L(n-1)} \\
t(n) &= \frac{t(n-1)t^*(n-1)}{\varepsilon - \varepsilon_R(n-1) - \varepsilon_L^*(n-1)}, \quad t^*(n) = \frac{t(n-1)^2}{\varepsilon - \varepsilon_R(n-1) - \varepsilon_L(n-1)}.
\end{aligned}$$

Las funciones de Green para el caso sin saturador son:

$$\begin{aligned}
G_{LL} &= \frac{\varepsilon - \varepsilon_R(n)}{[\varepsilon - \varepsilon_L(n)][\varepsilon - \varepsilon_R(n)] - t^2(n)}, \quad G_{LR} = \frac{t(n)}{[\varepsilon - \varepsilon_L(n)][\varepsilon - \varepsilon_R(n)] - t^2(n)} \\
G_{RR} &= \frac{\varepsilon - \varepsilon_L(n)}{[\varepsilon - \varepsilon_L(n)][\varepsilon - \varepsilon_R(n)] - t^2(n)}.
\end{aligned}$$

Las funciones de Green para el caso con saturador son:

$$G_{LL} = \frac{\eta_1}{1.0 - t^2(n)\eta_1\eta_2}, \quad G_{RR} = \frac{\eta_2}{1.0 - t^2(n)\eta_1\eta_2}, \quad G_{LR} = \eta_1 t(n) G_{RR}$$

con

$$\eta_1 = \frac{\varepsilon - \varepsilon^*_L(m)}{[\varepsilon - \varepsilon^*_L(m)][\varepsilon - \varepsilon^*_{M1}(m)] - t^{*2}(n)}, \quad \eta_2 = \frac{\varepsilon - \varepsilon^*_R(m)}{[\varepsilon - \varepsilon^*_R(m)][\varepsilon - \varepsilon^*_{M2}(m)] - t^{*2}(n)}$$

donde

$$\varepsilon^*_{M1} = \varepsilon^*_R(m) + \varepsilon_L(n), \quad \varepsilon^*_{M2} = \varepsilon^*_L(m) + \varepsilon_R(n)$$

Las condiciones iniciales para las ecuaciones recurrentes son:

$$\varepsilon_L(1) = 0.0 \quad \varepsilon_R(1) = 0.0 \quad \varepsilon^*_L(1) = 0.0 \quad \varepsilon^*_R(1) = 0.0$$

$$A(1) = 1.0 \quad B(1) = 1.0 \quad C(1) = 0.0 \quad D(1) = 0.0$$

$$A^*(1) = 1.0 \quad B^*(1) = 1.0 \quad C^*(1) = 0.0 \quad D^*(1) = 0.0$$

$$t(1) = t_A \quad t^*(1) = t_B$$

Las condiciones iniciales para el saturador están expresadas de la siguiente manera:

$$t^*(1) = 0.0 \quad t^*(2) = \frac{t_1^2}{\varepsilon - \varepsilon_0}$$

$$\varepsilon^*_L(1) = 0.0 \quad \varepsilon^*_R(1) = 0.0 \quad \varepsilon^*_L(2) = \varepsilon_0 + \frac{t_1^2}{\varepsilon - \varepsilon_0} \quad \varepsilon^*_R(2) = \varepsilon_0 + \frac{t_1^2}{\varepsilon - \varepsilon_0}$$

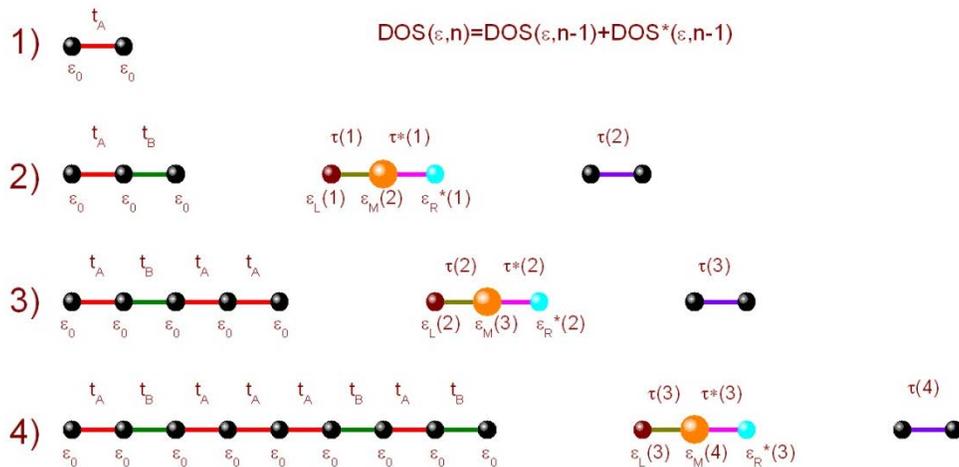


Figura C-1. Método de renormalización para el problema de enlaces (doble período).

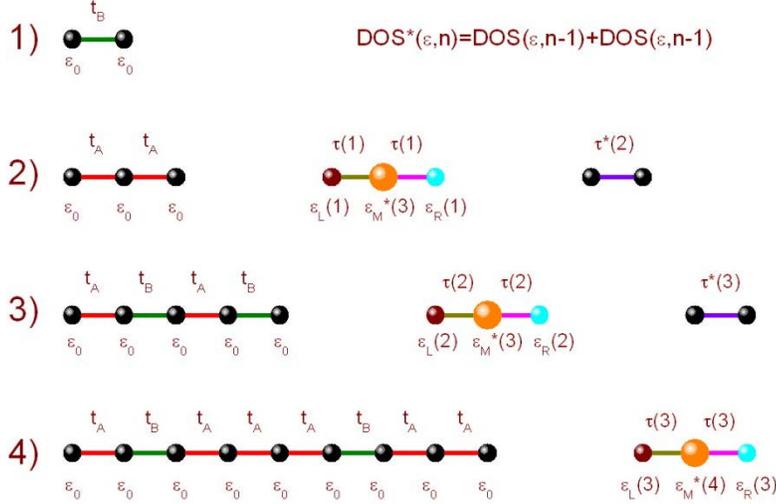


Figura C-2. Método de renormalización para el problema de enlaces (doble período).

Las figuras C-1 y C-2 nos muestran un esquema grafico del método de renormalización para la densidad de estados en el problema de enlaces tipo doble período.

Apéndice D. Densidad de estados para el problema de mixtos (Fibonacci).

La ecuación de la densidad de estados para la cadena Fibonacci en el problema de mixto por el método de renormalización es de la siguiente forma

$$DOS(\varepsilon, n) = DOS(\varepsilon, n-1) + DOS(\varepsilon, n-2)$$

proponiendo una forma general de renormalización

$$DOS(\varepsilon, n) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[A(n)G_{LL} + B(n)G_{RR} + C(n)G_{LR} + D(n)]$$

desarrollando la ecuación tenemos que

$$DOS(\varepsilon, n) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[A(n-1)G_{11} + B(n-1)G_{22} + C(n-1)G_{21} + D(n-1) + A(n-2)G_{22} + B(n-2)G_{33} + C(n-2)G_{23} + D(n-2)].$$

Para obtener las generaciones debemos proporcionar las ecuaciones de recurrencia y posteriormente daremos las condiciones iniciales.

Las ecuaciones de recurrencia se expresan de la forma:

$$A(n) = A(n-1) + \phi_1(n)[\phi_1(n)B(n-1) + C(n-1)] + \phi^2(n)t_C^2(n)t(n-1)^2 A(n-2)$$

$$B(n) = B(n-2) + \phi_2(n)[\phi_2(n)A(n-2) + C(n-2)] + \phi^2(n)t_C^2(n)t(n-2)^2 B(n-1)$$

$$C(n) = 2.0\phi(n)t_c(n)t(n-2)t(n-1)[\bar{\phi}_1(n)B(n-1) + \bar{\phi}_2(n)A(n-2)] + \\ + \phi(n)t_c(n)[t(n-2)C(n-1) + t(n-1)C(n-2)]$$

$$D(n) = \bar{\phi}_1(n)B(n-1) + \bar{\phi}_2(n)A(n-2) + D(n-1) + D(n-2)$$

donde

$$t_c(n) = \frac{[1+(-1)^n]}{2}t_{AA} + \frac{[1-(-1)^n]}{2}t_{BA}, \quad \phi(n) = \frac{1.0}{[\varepsilon - \varepsilon_R(n-1)][\varepsilon - \varepsilon_L(n-2)] - t_c^2(n)}$$

$$\bar{\phi}_1(n) = \phi(n)[\varepsilon - \varepsilon_L(n-2)], \quad \bar{\phi}_2(n) = \phi(n)[\varepsilon - \varepsilon_R(n-1)], \quad \phi_1(n) = \bar{\phi}_2(n)t(n-2)$$

$$\phi_2(n) = \bar{\phi}_1(n)t(n-1)$$

Las ecuaciones de auto-energía y energía de salto cuando el sistema esta renormalizado son

$$\varepsilon_L(n) = \varepsilon_L(n-1) + \phi(n)[\varepsilon - \varepsilon_L(n-2)]t^2(n-1),$$

$$\varepsilon_R(n) = \varepsilon_R(n-2) + \phi(n)[\varepsilon - \varepsilon_R(n-1)]t^2(n-2), \quad t(n) = \phi(n)t(n-1)t(n-2)t_c(n)$$

Las funciones de Green para el caso sin saturador son:

$$G_{LL} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_R(n)}{[\varepsilon - \varepsilon_L(n)][\varepsilon - \varepsilon_R(n)] - t^2(n)}, \quad G_{LR} = \frac{t(n)}{[\varepsilon - \varepsilon_L(n)][\varepsilon - \varepsilon_R(n)] - t^2(n)}$$

$$G_{RR} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_L(n)}{[\varepsilon - \varepsilon_L(n)][\varepsilon - \varepsilon_R(n)] - t^2(n)}$$

Las funciones de Green para el caso con saturador son:

$$G_{LL} = \frac{1.0}{\varepsilon - \varepsilon_L(n) - \frac{\xi_2(n)t^2(n)}{[\varepsilon - \varepsilon_R(n)]\xi_2(n) - t_1^2(n)} - \frac{t_1^2(n)}{\xi_1(n)}}$$

$$G_{RR} = \frac{1.0}{\varepsilon - \varepsilon_R(n) - \frac{\xi_1(n)t^2(n)}{[\varepsilon - \varepsilon_L(n)]\xi_1(n) - t_1^2(n)} - \frac{t_1^2(n)}{\xi_2(n)}}$$

$$G_{LR} = \frac{\xi_1 t(n) G_{RR}}{[\varepsilon - \varepsilon_L(n)]\xi_1 - t_1^2(n)}$$

donde

$$\xi_1 = \varepsilon - \varepsilon_{SR}(m) - \frac{t_S^2(m)}{[\varepsilon - \varepsilon_{SL}(m)]}, \quad \xi_2 = \varepsilon - \varepsilon_{SL}(m) - \frac{t_S^2(m)}{[\varepsilon - \varepsilon_{SR}(m)]}$$

Las condiciones iniciales para las ecuaciones de recurrencia son:

$$t(2) = t_{AB} \quad t(3) = \frac{t_{AB}t_{BA}}{\varepsilon - \varepsilon_B}$$

$$\varepsilon_L(2) = \varepsilon_A \quad \varepsilon_R(2) = \varepsilon_B \quad \varepsilon_L(3) = \varepsilon_A + \frac{t_{AB}^2}{\varepsilon - \varepsilon_B} \quad \varepsilon_R(3) = \varepsilon_A + \frac{t_{BA}^2}{\varepsilon - \varepsilon_B}$$

$$A(2) = 1.0 \quad B(2) = 1.0 \quad C(2) = 0.0 \quad D(2) = 0.0$$

$$A(3) = 1.0 + \frac{t_{AB}^2}{(\varepsilon - \varepsilon_B)^2} \quad B(3) = 1.0 + \frac{t_{BA}^2}{(\varepsilon - \varepsilon_B)^2} \quad C(3) = \frac{2.0 t_{AB} t_{BA}}{(\varepsilon - \varepsilon_B)^2} \quad D(3) = \frac{1.0}{(\varepsilon - \varepsilon_B)}$$

Las condiciones iniciales para los saturadores están expresadas de la siguiente manera:

$$t_S(2) = t_1 \quad t_S(3) = \frac{t_1^2}{\varepsilon} \quad \varepsilon_{SL}(2) = 0.0 \quad \varepsilon_{SR}(2) = 0.0 \quad \varepsilon_{SL}(3) = \frac{t_1^2}{\varepsilon} \quad \varepsilon_{SR}(3) = \frac{t_1^2}{\varepsilon}$$

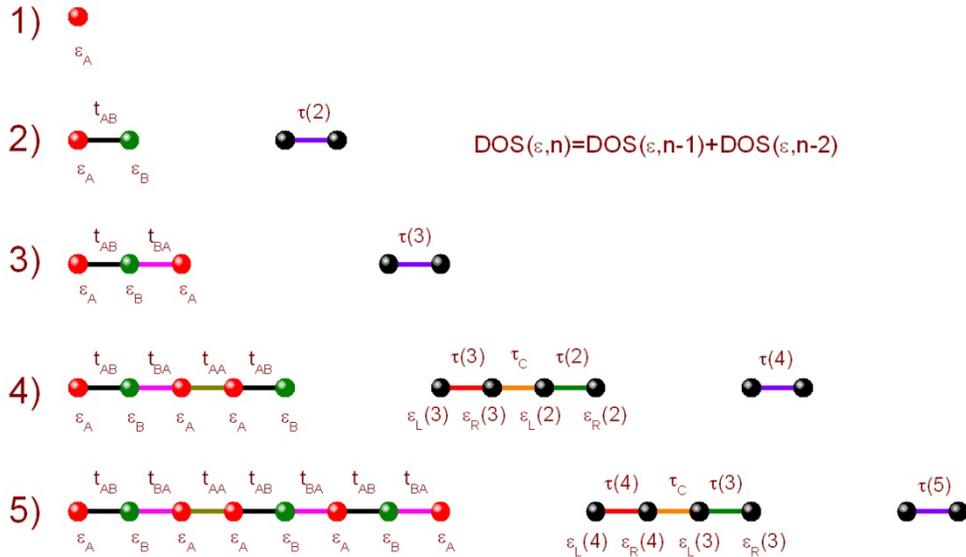


Figura D-1. Método de renormalización para el problema mixto (Fibonacci).

La Fig. D-1 nos muestra un esquema grafico del método de renormalización para la densidad de estados en el problema de mixtos tipo Fibonacci.

Apéndice E. Densidad de estados para el problema de mixtos (Thue Morse).

La ecuación de la densidad de estados para la cadena de Thue Morse en el problema de mixto por el método de renormalización es de la siguiente forma

$$DOS(\varepsilon, n) = DOS(\varepsilon, n-1) + DOS^*(\varepsilon, n-1)$$

$$DOS^*(\varepsilon, n) = DOS^*(\varepsilon, n-1) + DOS(\varepsilon, n-1)$$

proponiendo una forma general de renormalización

$$DOS(\varepsilon, n) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[A(n)G_{LL} + B(n)G_{RR} + C(n)G_{LR} + D(n)]$$

desarrollando la ecuación tenemos que

$$DOS(\varepsilon, n) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[A(n-1)G_{11} + B(n-1)G_{22} + C(n-1)G_{21} + D(n-1) + \\ + A^*(n-1)G_{33} + B^*(n-1)G_{44} + C^*(n-1)G_{43} + D^*(n-1)]$$

Para obtener las generaciones debemos proporcionar las ecuaciones de recurrencia y posteriormente daremos las condiciones iniciales.

Las ecuaciones de recurrencia se expresan de la siguiente forma:

$$A(n) = A(n-1) + \phi_1(n)[\phi_1(n)B(n-1) + C(n-1)] + \phi_3^2(n)A^*(n-1)$$

$$B(n) = B^*(n-1) + \phi_2(n)[\phi_2(n)A^*(n-1) + C'(n-1)] + \phi_4^2(n)B(n-1)$$

$$C(n) = 2.0\phi_1(n)\phi_4(n)B(n-1) + 2.0\phi_2(n)\phi_3(n)A^*(n-1) + \phi_4(n)C(n-1) + \phi_3(n)C^*(n-1)]$$

$$D(n) = \mu_1(n)B(n-1) + \mu_2(n)A^*(n-1) + D(n-1) + D^*(n-1)$$

$$A^*(n) = A^*(n-1) + \phi_1^*(n)[\phi_1^*(n)B^*(n-1) + C^*(n-1)] + \phi_3^{*2}(n)A(n-1)$$

$$B^*(n) = B(n-1) + \phi_2^*(n)[\phi_2^*(n)A(n-1) + C(n-1)] + \phi_4^{*2}(n)B^*(n-1)$$

$$C^*(n) = 2.0\phi_1^*(n)\phi_4^*(n)B^*(n-1) + 2.0\phi_2^*(n)\phi_3^*(n)A(n-1) + \\ + \phi_4^*(n)C'(n-1) + \phi_3^*(n)C(n-1)]$$

$$D^*(n) = \mu_1^*(n)B^*(n-1) + \mu_2^*(n)A(n-1) + D(n-1) + D^*(n-1)$$

donde

$$t_C(n) = \frac{[1+(-1)^n]}{2}t_{AB} + \frac{[1-(-1)^n]}{2}t_{BB}, \quad t_C^*(n) = \frac{[1+(-1)^n]}{2}t_{BA} + \frac{[1-(-1)^n]}{2}t_{AA}$$

$$\phi(n) = \frac{1.0}{[\varepsilon - \varepsilon_R(n-1)][\varepsilon - \varepsilon_L^*(n-1)] - t_C^2(n)},$$

$$\phi^*(n) = \frac{1.0}{[\varepsilon - \varepsilon_R^*(n-1)][\varepsilon - \varepsilon_L(n-1)] - t_C^{*2}(n)}$$

$$\phi_1(n) = \phi(n)[\varepsilon - \varepsilon_L^*(n-1)]t(n-1), \quad \phi_2(n) = \phi(n)[\varepsilon - \varepsilon_R(n-1)]t^*(n-1)$$

$$\phi_3(n) = \phi(n)t(n-1)t_C(n), \quad \phi_4(n) = \phi(n)t^*(n-1)t_C(n)$$

$$\mu_1(n) = \phi(n)[\varepsilon - \varepsilon_L^*(n-1)], \quad \mu_2(n) = \phi(n)[\varepsilon - \varepsilon_R(n-1)]$$

$$\phi_1^*(n) = \phi^*(n)[\varepsilon - \varepsilon_L(n-1)]t^*(n-1), \quad \phi_2^*(n) = \phi^*(n)[\varepsilon - \varepsilon_R^*(n-1)]t(n-1)$$

$$\phi_3^*(n) = \phi^*(n)t^*(n-1)t_C^*(n), \quad \phi_4^*(n) = \phi^*(n)t(n-1)t_C^*(n)$$

$$\mu^*_1(n) = \phi^*(n)[\varepsilon - \varepsilon_L(n-1)], \quad \mu^*_2(n) = \phi^*(n)[\varepsilon - \varepsilon^*_R(n-1)]$$

Las ecuaciones de auto-energía y energía de salto cuando el sistema esta renormalizado son

$$\varepsilon_L(n) = \varepsilon_L(n-1) + \phi(n)[\varepsilon - \varepsilon^*_L(n-1)]t^2(n-1)$$

$$\varepsilon_R(n) = \varepsilon^*_R(n-1) + \phi(n)[\varepsilon - \varepsilon_R(n-1)]t^{*2}(n-1)$$

$$\varepsilon^*_L(n) = \varepsilon^*_L(n-1) + \phi^*(n)[\varepsilon - \varepsilon_L(n-1)]t^{*2}(n-1)$$

$$\varepsilon^*_R(n) = \varepsilon_R(n-1) + \phi^*(n)[\varepsilon - \varepsilon^*_R(n-1)]t^2(n-1)$$

$$t(n) = \phi(n)t(n-1)t^*(n-1)t_C(n), \quad t^*(n) = t^*(n)t(n-1)t^*(n-1)t^*_C(n)$$

Las funciones de Green para el caso sin saturador son

$$G_{LL} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_R(n)}{[\varepsilon - \varepsilon_L(n)][\varepsilon - \varepsilon_R(n)] - t^2(n)}, \quad G_{LR} = \frac{t(n)}{[\varepsilon - \varepsilon_L(n)][\varepsilon - \varepsilon_R(n)] - t^2(n)}$$

$$G_{RR} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_L(n)}{[\varepsilon - \varepsilon_L(n)][\varepsilon - \varepsilon_R(n)] - t^2(n)}$$

Las funciones de Green para el caso con saturador son

$$G_{LL} = \frac{1.0}{\varepsilon - \varepsilon_L(n) - \frac{\xi_2(n)t^2(n)}{[\varepsilon - \varepsilon_R(n)]\xi_2(n) - t_1^2(n)} - \frac{t_1^2(n)}{\xi_1(n)}}$$

$$G_{RR} = \frac{1.0}{\varepsilon - \varepsilon_R(n) - \frac{\xi_1(n)t^2(n)}{[\varepsilon - \varepsilon_L(n)]\xi_1(n) - t_1^2(n)} - \frac{t_1^2(n)}{\xi_2(n)}}, \quad G_{LR} = \frac{\xi_1 t(n) G_{RR}}{[\varepsilon - \varepsilon_L(n)]\xi_1 - t_1^2(n)}$$

con

$$\xi_1 = \varepsilon - \varepsilon_{SR}(m) - \frac{t_s^2(m)}{[\varepsilon - \varepsilon_{SL}(m)]}, \quad \xi_2 = \varepsilon - \varepsilon_{SL}(m) - \frac{t_s^2(m)}{[\varepsilon - \varepsilon_{SR}(m)]}$$

Las condiciones iniciales para las ecuaciones de recurrencia son:

$$t(2) = t_{AB} \quad t^*(2) = t_{BA} \quad \varepsilon_L(2) = \varepsilon_A \quad \varepsilon_R(2) = \varepsilon_B \quad \varepsilon^*_L(2) = \varepsilon_B \quad \varepsilon^*_R(2) = \varepsilon_A$$

$$A(2) = 1.0 \quad B(2) = 1.0 \quad C(2) = 0.0 \quad D(2) = 0.0$$

$$A^*(2) = 1.0 \quad B^*(2) = 1.0 \quad C^*(2) = 0.0 \quad D^*(2) = 0.0$$

Las condiciones iniciales para el saturador esta expresado de la siguiente manera:

$$t_S(2) = t_1 \quad t_S(3) = \frac{t_1^2}{\varepsilon}, \quad \varepsilon_{SL}(2) = 0.0 \quad \varepsilon_{SR}(2) = 0.0 \quad \varepsilon_{SL}(3) = \frac{t_1^2}{\varepsilon} \quad \varepsilon_{SR}(3) = \frac{t_1^2}{\varepsilon}$$

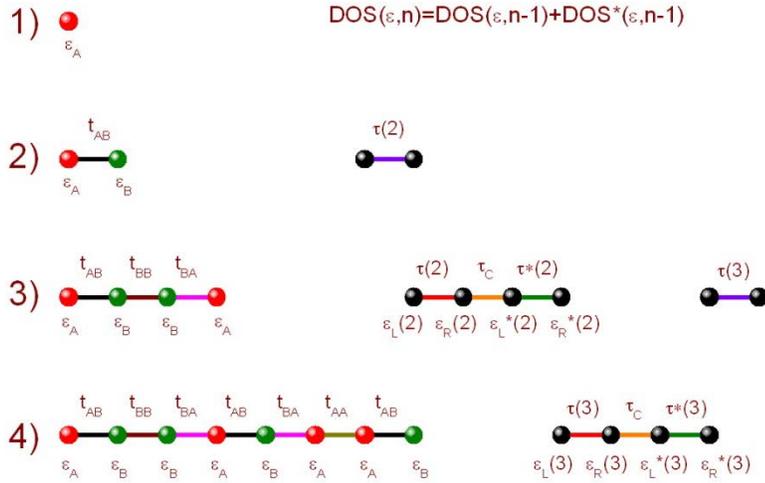


Figura E-1. Método de renormalización para el problema de mixtos (Thue morse).

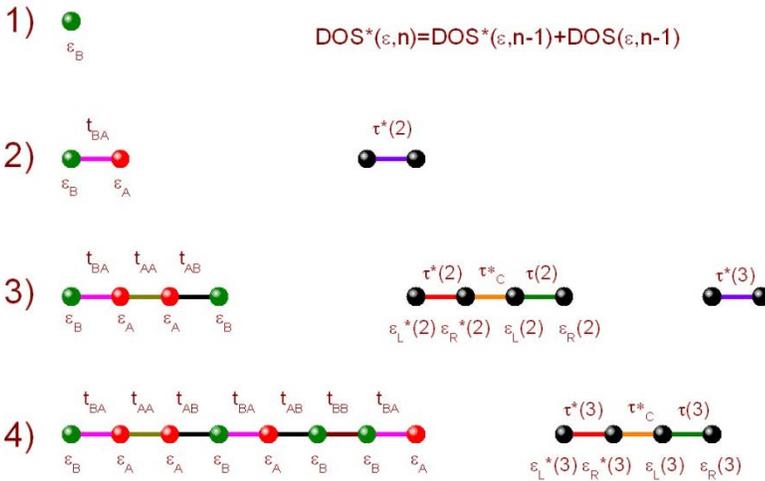


Figura E-2. Método de renormalización para el problema de mixtos (Thue Morse).

Las figuras E-1 y E-2 nos muestra un esquema grafico del método de renormalización para la densidad de estados en el problema de mixtos tipo Thue morse.

Apéndice F. Densidad de estados para el problema de mixtos (doble período).

La ecuación de la densidad de estados para la cadena de doble período en el problema de mixto por el método de renormalización es de la siguiente forma

$$DOS(\epsilon, n) = DOS(\epsilon, n-1) + DOS^*(\epsilon, n-1)$$

$$DOS^*(\epsilon, n) = DOS(\epsilon, n-1) + DOS(\epsilon, n-1)$$

proponiendo una forma general de renormalización

$$DOS(\varepsilon, n) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[A(n)G_{LL} + B(n)G_{RR} + C(n)G_{LR} + D(n)]$$

desarrollando la ecuación tenemos que

$$DOS(\varepsilon, n) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[A(n-1)G_{11} + B(n-1)G_{22} + C(n-1)G_{21} + D(n-1) + A^*(n-1)G_{33} + B^*(n-1)G_{44} + C^*(n-1)G_{43} + D^*(n-1)].$$

Para obtener las generaciones debemos proporcionar las ecuaciones de recurrencia y posteriormente daremos las condiciones iniciales.

Las ecuaciones de recurrencia se expresan de la siguiente forma:

$$A(n) = A(n-1) + \phi_1(n)[\phi_1(n)B(n-1) + C(n-1)] + \phi_3^2(n)A^*(n-1)$$

$$B(n) = B^*(n-1) + \phi_2(n)[\phi_2(n)A^*(n-1) + C^*(n-1)] + \phi_4^2(n)B(n-1)$$

$$C(n) = 2.0\phi_1(n)\phi_4(n)B(n-1) + 2.0\phi_2(n)\phi_3(n)A^*(n-1) + \phi_4(n)C(n-1) + \phi_3(n)C^*(n-1)]$$

$$D(n) = \mu_1(n)B(n-1) + \mu_2(n)A^*(n-1) + D(n-1) + D^*(n-1)$$

$$A^*(n) = [\phi_3^{*2}(n) + 1.0]A(n-1) + \phi_1^*(n)[\phi_1^*(n)B(n-1) + C(n-1)]$$

$$B^*(n) = B(n-1)[1.0 + \phi_3^{*2}(n)] + \phi_2^*(n)[\phi_2^*(n)A(n-1) + C(n-1)]$$

$$C^*(n) = 2.0\phi_1^*(n)\phi_3^*(n)B(n-1) + 2.0\phi_2^*(n)\phi_3^*(n)A(n-1) + 2.0\phi_3^*(n)C(n-1)]$$

$$D^*(n) = \mu_1^*(n)B(n-1) + \mu_2^*(n)A(n-1) + 2.0D(n-1)$$

donde

$$t_C(n) = \frac{[1+(-1)^n]}{2}t_{AA} + \frac{[1-(-1)^n]}{2}t_{BA}, \quad t_C^*(n) = \frac{[1+(-1)^n]}{2}t_{AA} + \frac{[1-(-1)^n]}{2}t_{BA}$$

$$\phi(n) = \frac{1.0}{[\varepsilon - \varepsilon_R(n-1)][\varepsilon - \varepsilon_L^*(n-1)] - t_C^2(n)}$$

$$\phi^*(n) = \frac{1.0}{[\varepsilon - \varepsilon_R(n-1)][\varepsilon - \varepsilon_L(n-1)] - t_C^{*2}(n)}$$

$$\phi_1(n) = \phi(n)[\varepsilon - \varepsilon_L^*(n-1)]t(n-1), \quad \phi_2(n) = \phi(n)[\varepsilon - \varepsilon_R(n-1)]t^*(n-1)$$

$$\phi_3(n) = \phi(n)t(n-1)t_C(n), \quad \phi_4(n) = \phi(n)t^*(n-1)t_C(n)$$

$$\mu_1(n) = \phi(n)[\varepsilon - \varepsilon_L^*(n-1)], \quad \mu_2(n) = \phi(n)[\varepsilon - \varepsilon_R(n-1)]$$

$$\phi_1^*(n) = \phi^*(n)[\varepsilon - \varepsilon_L(n-1)]t(n-1), \quad \phi_2^*(n) = \phi^*(n)[\varepsilon - \varepsilon_R(n-1)]t^*(n-1)$$

$$\phi_3^*(n) = \phi^*(n)t(n-1)t_C^*(n), \quad \mu_1^*(n) = \phi^*(n)[\varepsilon - \varepsilon_L(n-1)]$$

$$\mu^*_2(n) = \phi^*(n)[\varepsilon - \varepsilon_R(n-1)]$$

Las ecuaciones de auto-energía y energía de salto cuando el sistema esta renormalizado son:

$$\varepsilon_L(n) = \varepsilon_L(n-1) + \phi(n)[\varepsilon - \varepsilon^*_L(n-1)]t^2(n-1)$$

$$\varepsilon_R(n) = \varepsilon^*_R(n-1) + \phi(n)[\varepsilon - \varepsilon_R(n-1)]t^{*2}(n-2)$$

$$\varepsilon^*_L(n) = \varepsilon_L(n-1) + \phi^*(n)[\varepsilon - \varepsilon_L(n-1)]t^2(n-1)$$

$$\varepsilon^*_R(n) = \varepsilon_R(n-1) + \phi^*(n)[\varepsilon - \varepsilon_R(n-1)]t^2(n-1)$$

$$t(n) = \phi(n)t(n-1)t^*(n-1)t_C(n), \quad t^*(n) = \phi^*(n)t^2(n-1)t^*_C(n).$$

Las funciones de Green para el caso sin saturador son

$$G_{LL} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_R(n)}{[\varepsilon - \varepsilon_L(n)][\varepsilon - \varepsilon_R(n)] - t^2(n)}, \quad G_{LR} = \frac{t(n)}{[\varepsilon - \varepsilon_L(n)][\varepsilon - \varepsilon_R(n)] - t^2(n)}$$

$$G_{RR} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_L(n)}{[\varepsilon - \varepsilon_L(n)][\varepsilon - \varepsilon_R(n)] - t^2(n)}.$$

Las funciones de Green para el caso con saturador son

$$G_{LL} = \frac{1.0}{\varepsilon - \varepsilon_L(n) - \frac{\xi_2(n)t^2(n)}{[\varepsilon - \varepsilon_R(n)]\xi_2(n) - t_1^2(n)} - \frac{t_1^2(n)}{\xi_1(n)}}$$

$$G_{RR} = \frac{1.0}{\varepsilon - \varepsilon_R(n) - \frac{\xi_1(n)t^2(n)}{[\varepsilon - \varepsilon_L(n)]\xi_1(n) - t_1^2(n)} - \frac{t_1^2(n)}{\xi_2(n)}}, \quad G_{LR} = \frac{\xi_1 t(n) G_{RR}}{[\varepsilon - \varepsilon_L(n)]\xi_1 - t_1^2(n)}$$

donde

$$\xi_1 = \varepsilon - \varepsilon_{SR}(m) - \frac{t_S^2(m)}{[\varepsilon - \varepsilon_{SL}(m)]}, \quad \xi_2 = \varepsilon - \varepsilon_{SL}(m) - \frac{t_S^2(m)}{[\varepsilon - \varepsilon_{SR}(m)]}$$

Las condiciones iniciales para las ecuaciones de recurrencia son:

$$t(2) = t_{AB} \quad t^*(2) = t_{AA} \quad \varepsilon_L(2) = \varepsilon_A \quad \varepsilon_R(2) = \varepsilon_B \quad \varepsilon^*_L(2) = \varepsilon_A \quad \varepsilon^*_R(2) = \varepsilon_A$$

$$A(2) = 1.0 \quad B(2) = 1.0 \quad C(2) = 0.0 \quad D(2) = 0.0$$

$$A^*(2) = 1.0 \quad B^*(2) = 1.0 \quad C^*(2) = 0.0 \quad D^*(2) = 0.0$$

Las condiciones iniciales para los saturadores se expresan de la siguiente manera:

$$t_S(2) = t_1 \quad t_S(3) = \frac{t_1^2}{\varepsilon} \quad \varepsilon_{SL}(2) = 0.0 \quad \varepsilon_{SR}(2) = 0.0 \quad \varepsilon_{SL}(3) = \frac{t_1^2}{\varepsilon} \quad \varepsilon_{SR}(3) = \frac{t_1^2}{\varepsilon}$$

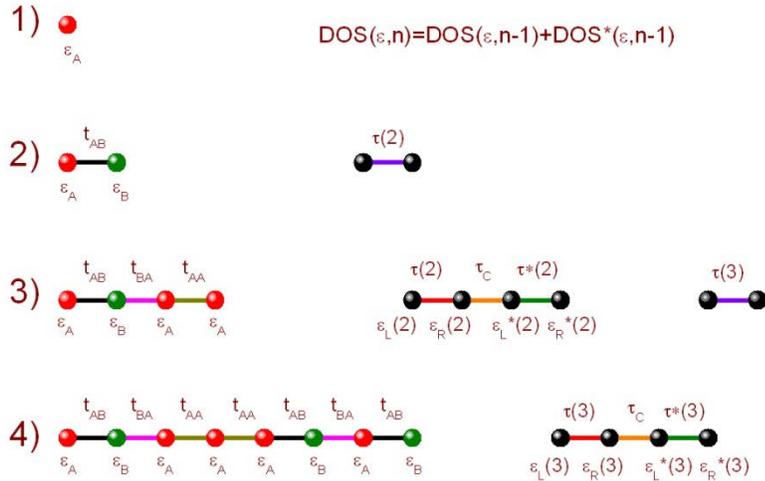


Figura F-1. Método de renormalización para el problema de mixtos (doble período).

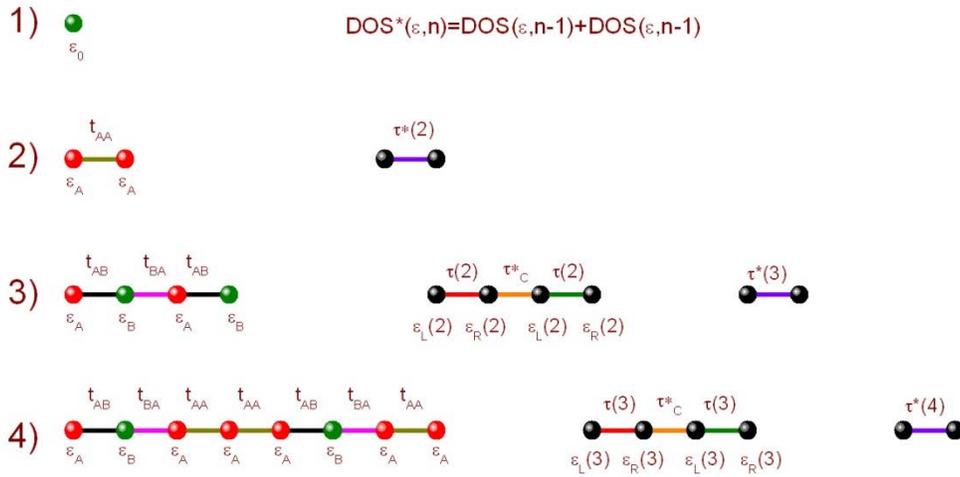


Figura F-2. Método de renormalización para el problema de Mixtos (doble período).

Las figuras F-1 y F-2 nos muestran un esquema grafico del método de renormalización para la densidad de estados en el problema de mixtos tipo doble período.

Apéndice G. Transmitancia para el problema de enlaces (Fibonacci).

La matriz de transferencia del sistema en el j -esimo átomo, está definido de la siguiente manera

$$\tau(n) = \begin{pmatrix} C_{j+1} \\ C_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_j}{t_{j+1}} & -t_{j-1} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_j \\ C_{j-1} \end{pmatrix}$$

Para describir al sistema con la matriz de transferencia total, esta matriz se puede obtener como el producto de tres matrices las cuales definiremos como matriz inicial, matriz final y una matriz media. La matriz inicial es la misma para cualquier generación, en cambio la matriz final al igual que la matriz media depende de la generación en la cual se esta trabajando, además, la matriz media a su vez se puede describir como la multiplicación de tres matrices recurrentes, las cuales dos de ellas están en función de las generaciones anteriores a la generación que se estudia y la tercera depende de la unión de los átomos que hay en esta generación.

$$\tau(n) = \begin{pmatrix} F_{11}(n) & F_{12}(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{11}(n) & M_{12}(n) \\ M_{21}(n) & M_{22}(n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_{11}(n) & I_{12}(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix}$$

La matriz inicial queda definida de la siguiente forma

$$I(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{t_A} & \frac{-t}{t_A} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix}$$

La matriz final queda expresada de la siguiente manera

$$F(n) = \begin{cases} F(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{t} & \frac{-t_B}{t} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ par} \\ F(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{t} & \frac{-t_A}{t} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ impar} \end{cases}$$

La matriz media queda definida de la siguiente manera

$$M_{11}(n) = M_{11}(n-1)[M_{11}(n-2)U_{11}(n) + M_{12}(n-2)U_{21}(n)] + \\ + M_{21}(n-1)[M_{11}(n-2)U_{12}(n) + M_{12}(n-2)U_{22}(n)]$$

$$M_{12}(n) = M_{12}(n-1)[M_{11}(n-2)U_{11}(n) + M_{12}(n-2)U_{21}(n)] + \\ + M_{22}(n-1)[M_{11}(n-2)U_{12}(n) + M_{12}(n-2)U_{22}(n)]$$

$$M_{21}(n) = M_{11}(n-1)[M_{21}(n-2)U_{11}(n) + M_{22}(n-2)U_{21}(n)] + \\ + M_{21}(n-1)[M_{21}(n-2)U_{12}(n) + M_{22}(n-2)U_{22}(n)]$$

$$M_{22}(n) = M_{12}(n-1)[M_{21}(n-2)U_{11}(n) + M_{22}(n-2)U_{21}(n)] + \\ + M_{22}(n-1)[M_{21}(n-2)U_{12}(n) + M_{22}(n-2)U_{22}(n)]$$

Las matriz de unión se define como

$$U(n) = \begin{cases} U(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{t_A} & -1.0 \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ par} \\ U(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{t} & \frac{-t_B}{t_A} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ impar} \end{cases}$$

Las condiciones iniciales para la matriz media son de la forma

$$M(2) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{t_B} & \frac{-t_A}{t_B} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} \quad M(3) = \begin{pmatrix} \frac{(\varepsilon - \varepsilon_0)^2}{t_A t_B} - \frac{t_B}{t_A} & \frac{-(\varepsilon - \varepsilon_0)}{t_B} \\ \frac{(\varepsilon - \varepsilon_0)}{t_B} & \frac{-t_A}{t_B} \end{pmatrix}$$

entonces la matriz de transferencia es

$$\tau(n) = F(n)M(n)I(n)$$

$$\tau(n) = \begin{pmatrix} F_{11}(n) & F_{12}(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{11}(n) & M_{12}(n) \\ M_{21}(n) & M_{22}(n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_{11}(n) & I_{12}(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix}$$

$$\tau_{11}(n) = I_{11}(n)[F_{11}(n)M_{11}(n) + F_{12}(n)M_{21}(n)] + F_{11}(n)M_{12}(n) + F_{12}(n)M_{22}(n)$$

$$\tau_{12}(n) = I_{12}(n)[F_{11}(n)M_{11}(n) + F_{12}(n)M_{21}(n)]$$

$$\tau_{21}(n) = I_{11}(n)M_{11}(n) + M_{21}(n)$$

$$\tau_{22}(n) = I_{12}(n)M_{11}(n)$$

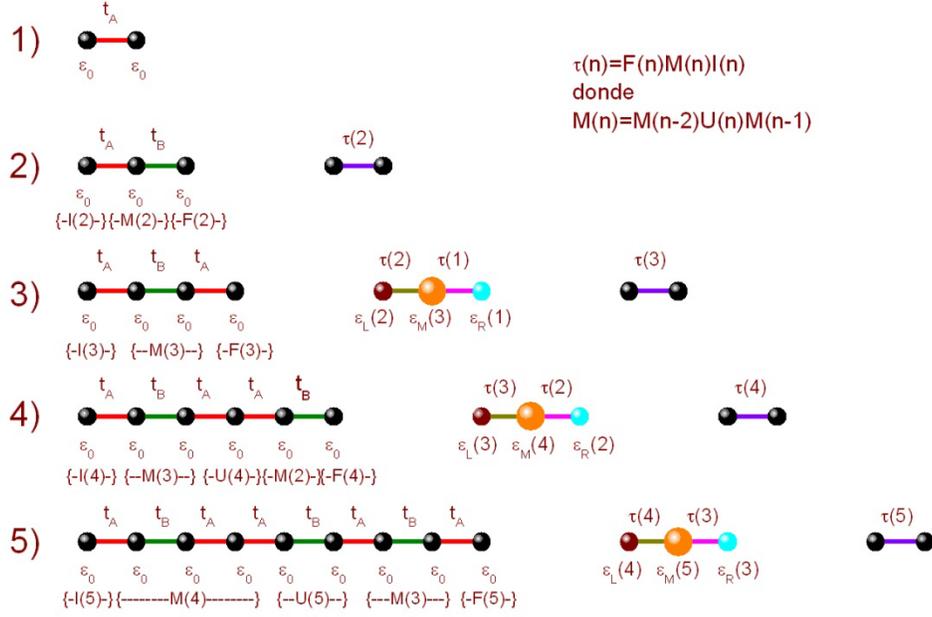


Figura G-1. Método de renormalización para la transmitancia en el problema de enlaces (Fibonacci).

En la Fig. G-1 se describe el método de renormalización para obtener la matriz de transferencia y así poder obtener la transmitancia en el sistema de Fibonacci para el problema de enlaces.

Apéndice H. Transmitancia para el problema de enlaces (Thue Morse).

La matriz de transferencia del sistema en el j -ésimo átomo, está definido de la siguiente manera

$$\tau(n) = \begin{pmatrix} C_{j+1} \\ C_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\epsilon - \epsilon_j}{t_{j+1}} & \frac{-t_{j-1}}{t_{j+1}} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_j \\ C_{j-1} \end{pmatrix}$$

Para obtener la matriz de transferencia el procedimiento es similar al apéndice G.

$$\tau(n) = \begin{pmatrix} F_{11}(n) & F_{12}(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{11}(n) & M_{12}(n) \\ M_{21}(n) & M_{22}(n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_{11}(n) & I_{12}(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix}$$

La matriz inicial queda definida de la siguiente forma

$$I(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{t_A} & \frac{-t}{t_A} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} \quad I^*(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{t_B} & \frac{-t}{t_B} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

La matriz final queda expresada por

$$F(n) = \begin{cases} F(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{t} & \frac{-t_B}{t} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ par} \\ F(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{t} & \frac{-t_A}{t} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ impar} \end{cases}$$

$$F^*(n) = \begin{cases} F^*(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{t} & \frac{-t_A}{t} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ par} \\ F^*(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{t} & \frac{-t_B}{t} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ impar} \end{cases}$$

La matriz media queda definida por

$$M_{11}(n) = M_{11}(n-1)[M^*_{11}(n-1)U_{11}(n) + M^*_{12}(n-1)U_{21}(n)] + \\ + M_{21}(n-1)[M^*_{11}(n-1)U_{12}(n) + M^*_{12}(n-1)U_{22}(n)]$$

$$M_{12}(n) = M_{12}(n-1)[M^*_{11}(n-1)U_{11}(n) + M^*_{12}(n-1)U_{21}(n)] + \\ + M_{22}(n-1)[M^*_{11}(n-1)U_{12}(n) + M^*_{12}(n-1)U_{22}(n)]$$

$$M_{21}(n) = M_{11}(n-1)[M^*_{21}(n-1)U_{11}(n) + M^*_{22}(n-1)U_{21}(n)] + \\ + M_{21}(n-1)[M'_{21}(n-1)U_{12}(n) + M'_{22}(n-1)U_{22}(n)]$$

$$M_{22}(n) = M_{12}(n-1)[M^*_{21}(n-1)U_{11}(n) + M^*_{22}(n-1)U_{21}(n)] + \\ + M_{22}(n-1)[M^*_{21}(n-1)U_{12}(n) + M^*_{22}(n-1)U_{22}(n)]$$

$$M^*_{11}(n) = M_{11}(n-1)[M_{11}(n-1)U^*_{11}(n) + M_{12}(n-1)U^*_{21}(n)] + \\ + M_{21}(n-1)[M_{11}(n-1)U^*_{12}(n) + M_{12}(n-1)U^*_{22}(n)]$$

$$M^*_{12}(n) = M_{12}(n-1)[M_{11}(n-1)U^*_{11}(n) + M_{12}(n-1)U^*_{21}(n)] +$$

$$+M_{22}(n-1)[M_{11}(n-1)U_{12}^*(n)+M_{12}(n-1)U_{22}^*(n)]$$

$$M_{21}^*(n) = M_{11}(n-1)[M_{21}(n-1)U_{11}^*(n)+M_{22}(n-1)U_{21}^*(n)] + \\ +M_{21}(n-1)[M_{21}(n-1)U_{12}^*(n)+M_{22}(n-1)U_{22}^*(n)]$$

$$M_{22}^*(n) = M_{12}(n-1)[M_{21}(n-1)U_{11}^*(n)+M_{22}(n-1)U_{21}^*(n)] + \\ +M_{22}(n-1)[M_{21}(n-1)U_{12}^*(n)+M_{22}(n-1)U_{22}^*(n)]$$

Las matriz de unión es

$$U(n) = \begin{cases} U(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{t_B} & \frac{-t_A}{t_B} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ par} \\ U(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{t_B} & -1.0 \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ impar} \end{cases}$$

$$U^*(n) = \begin{cases} U^*(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{t_A} & \frac{-t_B}{t_A} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ par} \\ U^*(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{t_A} & -1.0 \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ impar} \end{cases}$$

Las condiciones iniciales para la matriz media son

$$M(2) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{t_B} & \frac{-t_A}{t_B} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} \quad M^*(2) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{t_A} & \frac{-t_B}{t_A} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix}$$

Por lo que la matriz de transferencia es

$$\tau(n) = F(n)M(n)I(n)$$

$$\tau(n) = \begin{pmatrix} F_{11}(n) & F_{12}(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{11}(n) & M_{12}(n) \\ M_{21}(n) & M_{22}(n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_{11}(n) & I_{12}(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix}$$

$$\tau_{11}(n) = I_{11}(n)[F_{11}(n)M_{11}(n) + F_{12}(n)M_{21}(n)] + F_{11}(n)M_{12}(n) + F_{12}(n)M_{22}(n)$$

$$\tau_{12}(n) = I_{12}(n)[F_{11}(n)M_{11}(n) + F_{12}(n)M_{21}(n)]$$

$$\tau_{21}(n) = I_{11}(n)M_{11}(n) + M_{21}(n)$$

$$\tau_{22}(n) = I_{12}(n)M_{11}(n)$$

Y para la cadena conjugada la matriz de transferencia es

$$\tau^*(n) = F^*(n)M^*(n)I^*(n)$$

$$\tau^*(n) = \begin{pmatrix} F_{11}^*(n) & F_{12}^*(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{11}^*(n) & M_{12}^*(n) \\ M_{21}^*(n) & M_{22}^*(n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_{11}^*(n) & I_{12}^*(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix}$$

$$\tau_{11}^*(n) = I_{11}'(n)[F_{11}'(n)M_{11}'(n) + F_{12}'(n)M_{21}'(n)] + F_{11}'(n)M_{12}'(n) + F_{12}'(n)M_{22}'(n)$$

$$\tau_{12}^*(n) = I_{12}'(n)[F_{11}'(n)M_{11}'(n) + F_{12}'(n)M_{21}'(n)]$$

$$\tau_{21}^*(n) = I_{11}'(n)M_{11}'(n) + M_{21}'(n)$$

$$\tau_{22}^*(n) = I_{12}'(n)M_{11}'(n)$$

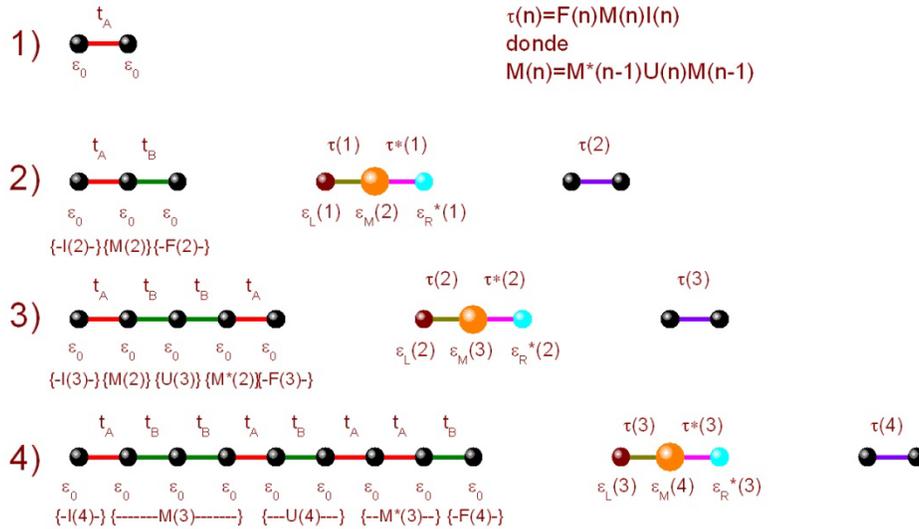


Figura H-1. Método de renormalización para la transmitancia en el problema de enlaces (Thue Morse).

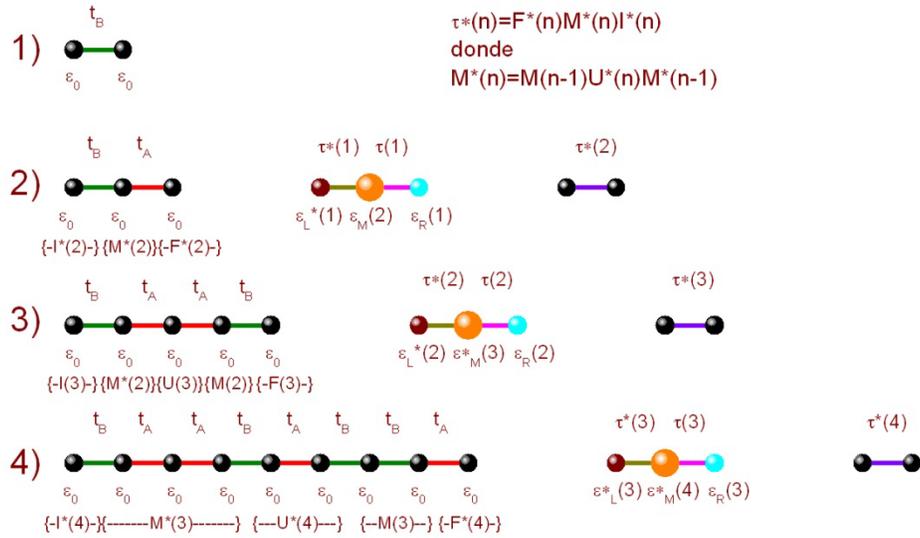


Figura H-2. Método de renormalización para la transmitancia en el problema de enlaces (Thue Morse) de la cadena conjugada.

En la figuras H-1y H-2 se describe el método de renormalización para obtener la matriz de transferencia del sistema de Thue Morse para el problema de enlaces.

Apéndice I. Transmitancia para el problema de enlaces (doble período).

La matriz de transferencia del sistema en el j -ésimo átomo, está definido de la siguiente manera

$$\tau(n) = \begin{pmatrix} C_{j+1} \\ C_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\epsilon - \epsilon_j}{t_{j+1}} & \frac{-t_{j-1}}{t_{j+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_j \\ C_{j-1} \end{pmatrix}$$

Utiliza el mismo procedimiento que en la cadena de Fibonacci

$$\tau(n) = \begin{pmatrix} F_{11}(n) & F_{12}(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{11}(n) & M_{12}(n) \\ M_{21}(n) & M_{22}(n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_{11}(n) & I_{12}(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix}$$

La matriz inicial queda definida por

$$I(n) = \begin{pmatrix} \frac{\epsilon - \epsilon_0}{t_A} & \frac{-t}{t_A} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix}$$

La matriz final queda expresada de la siguiente manera

$$F(n) = \begin{cases} F(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{t} & \frac{-t_B}{t} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ par} \\ F(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{t} & \frac{-t_A}{t} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ impar} \end{cases}$$

$$F^*(n) = \begin{cases} F^*(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{t} & \frac{-t_A}{t} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ par} \\ F^*(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{t} & \frac{-t_B}{t} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ impar} \end{cases}$$

La matriz media queda definida por

$$M_{11}(n) = M_{11}(n-1)[M_{11}^*(n-1)U_{11}(n) + M_{12}^*(n-1)U_{21}(n)] + \\ + M_{21}(n-1)[M_{11}^*(n-1)U_{12}(n) + M_{12}^*(n-1)U_{22}(n)]$$

$$M_{12}(n) = M_{12}(n-1)[M_{11}^*(n-1)U_{11}(n) + M_{12}^*(n-1)U_{21}(n)] + \\ + M_{22}(n-1)[M_{11}^*(n-1)U_{12}(n) + M_{12}^*(n-1)U_{22}(n)]$$

$$M_{21}(n) = M_{11}(n-1)[M_{21}^*(n-1)U_{11}(n) + M_{22}^*(n-1)U_{21}(n)] + \\ + M_{21}(n-1)[M_{21}^*(n-1)U_{12}(n) + M_{22}^*(n-1)U_{22}(n)]$$

$$M_{22}(n) = M_{12}(n-1)[M_{21}^*(n-1)U_{11}(n) + M_{22}^*(n-1)U_{21}(n)] + \\ + M_{22}(n-1)[M_{21}^*(n-1)U_{12}(n) + M_{22}^*(n-1)U_{22}(n)]$$

$$M_{11}^*(n) = M_{11}(n-1)[M_{11}(n-1)U_{11}(n) + M_{12}(n-1)U_{21}(n)] + \\ + M_{21}(n-1)[M_{11}(n-1)U_{12}(n) + M_{12}(n-1)U_{22}(n)]$$

$$M_{12}^*(n) = M_{12}(n-1)[M_{11}(n-1)U_{11}(n) + M_{12}(n-1)U_{21}(n)] + \\ + M_{22}(n-1)[M_{11}(n-1)U_{12}(n) + M_{12}(n-1)U_{22}(n)]$$

$$M_{21}^*(n) = M_{11}(n-1)[M_{21}(n-1)U_{11}(n) + M_{22}(n-1)U_{21}(n)] + \\ + M_{21}(n-1)[M_{21}(n-1)U_{12}(n) + M_{22}(n-1)U_{22}(n)]$$

$$M_{22}^*(n) = M_{12}(n-1)[M_{21}(n-1)U_{11}(n) + M_{22}(n-1)U_{21}(n)] + \\ + M_{22}(n-1)[M_{21}(n-1)U_{12}(n) + M_{22}(n-1)U_{22}(n)]$$

Las matriz de unión se define como

$$U(n) = \begin{cases} U(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{t_A} & -1.0 \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ par} \\ U(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{t_A} & \frac{-t_B}{t_A} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ impar} \end{cases}$$

Las condiciones iniciales para la matriz media son de la forma

$$M(2) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{t_B} & \frac{-t_A}{t_B} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} \quad M^*(2) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{t_A} & -1.0 \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix}$$

la matriz de transferencia es

$$\tau(n) = F(n)M(n)I(n)$$

$$\tau(n) = \begin{pmatrix} F_{11}(n) & F_{12}(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{11}(n) & M_{12}(n) \\ M_{21}(n) & M_{22}(n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_{11}(n) & I_{12}(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix}$$

$$\tau_{11}(n) = I_{11}(n)[F_{11}(n)M_{11}(n) + F_{12}(n)M_{21}(n)] + F_{11}(n)M_{12}(n) + F_{12}(n)M_{22}(n)$$

$$\tau_{12}(n) = I_{12}(n)[F_{11}(n)M_{11}(n) + F_{12}(n)M_{21}(n)]$$

$$\tau_{21}(n) = I_{11}(n)M_{11}(n) + M_{21}(n)$$

$$\tau_{22}(n) = I_{12}(n)M_{11}(n)$$

la matriz de transferencia para la cadena conjugada es

$$\tau^*(n) = F^*(n)M^*(n)I(n)$$

$$\tau^*(n) = \begin{pmatrix} F^*_{11}(n) & F^*_{12}(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M^*_{11}(n) & M^*_{12}(n) \\ M^*_{21}(n) & M^*_{22}(n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_{11}(n) & I_{12}(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix}$$

$$\tau^*_{11}(n) = I_{11}(n)[F^*_{11}(n)M^*_{11}(n) + F^*_{12}(n)M^*_{21}(n)] + F^*_{11}(n)M^*_{12}(n) + F^*_{12}(n)M^*_{22}(n)$$

$$\tau^*_{12}(n) = I_{12}(n)[F^*_{11}(n)M^*_{11}(n) + F^*_{12}(n)M^*_{21}(n)]$$

$$\tau^*_{21}(n) = I_{11}(n)M^*_{11}(n) + M^*_{21}(n)$$

$$\tau^*_{22}(n) = I_{12}(n)M^*_{11}(n)$$

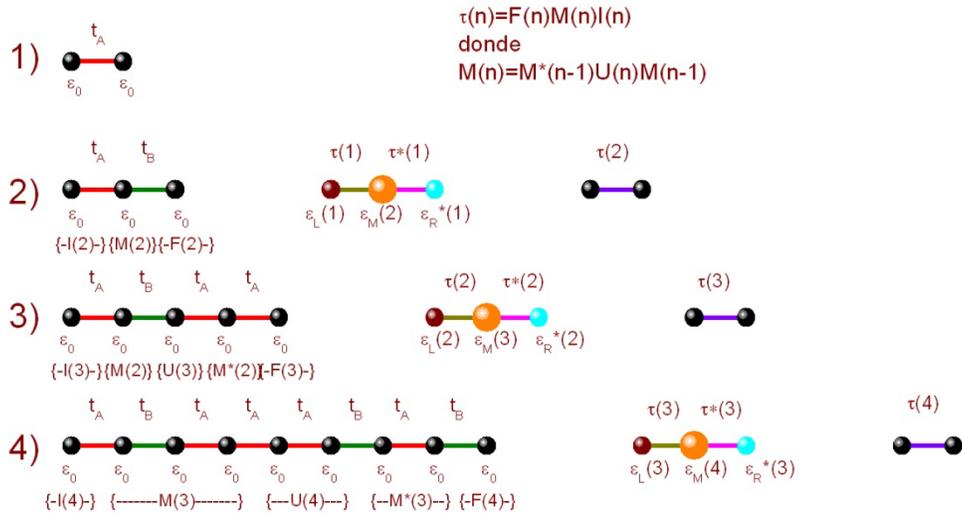


Figura I-1. Método de renormalización para la matriz de transferencia en el problema de enlaces (doble período).

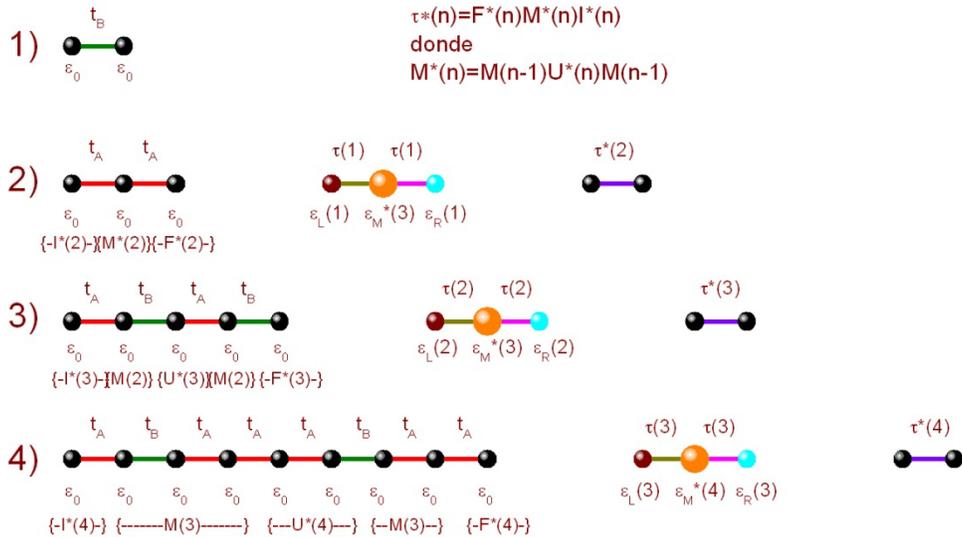


Figura I-2. Método de renormalización para la matriz de transferencia en el problema de enlaces (doble período) de la cadena conjugada.

En las figuras I-1 y I-2 se describe el método de renormalización para la matriz de transferencia en el sistema de doble período para el problema de enlaces.

Apéndice J. Transmitancia para el problema de mixtos (Fibonacci).

La matriz de transferencia del sistema en el j -ésimo átomo, está definido de la siguiente manera

$$\tau(n) = \begin{pmatrix} C_{j+1} \\ C_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_j}{t_{j+1}} & \frac{-t_{j-1}}{t_{j+1}} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_j \\ C_{j-1} \end{pmatrix}$$

El procedimiento es similar al definido con anterioridad

$$\tau(n) = \begin{pmatrix} F_{11}(n) & F_{12}(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{11}(n) & M_{12}(n) \\ M_{21}(n) & M_{22}(n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_{11}(n) & I_{12}(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix}$$

La matriz inicial queda definida por

$$I(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_A}{t_{AB}} & \frac{-t}{t_{AB}} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix}$$

La matriz final queda expresada

$$F(n) = \begin{cases} F(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_B}{t} & \frac{-t_{AB}}{t} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ par} \\ F(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_A}{t} & \frac{-t_{BA}}{t} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ impar} \end{cases}$$

La matriz media queda definida por

$$M_{11}(n) = M_{11}(n-1)[M_{11}(n-2)U_{11}(n) + M_{12}(n-2)U_{21}(n)] + \\ + M_{21}(n-1)[M_{11}(n-2)U_{12}(n) + M_{12}(n-2)U_{22}(n)]$$

$$M_{12}(n) = M_{12}(n-1)[M_{11}(n-2)U_{11}(n) + M_{12}(n-2)U_{21}(n)] + \\ + M_{22}(n-1)[M_{11}(n-2)U_{12}(n) + M_{12}(n-2)U_{22}(n)]$$

$$M_{21}(n) = M_{11}(n-1)[M_{21}(n-2)U_{11}(n) + M_{22}(n-2)U_{21}(n)] + \\ + M_{21}(n-1)[M_{21}(n-2)U_{12}(n) + M_{22}(n-2)U_{22}(n)]$$

$$M_{22}(n) = M_{12}(n-1)[M_{21}(n-2)U_{11}(n) + M_{22}(n-2)U_{21}(n)] +$$

$$+M_{22}(n-1)[M_{21}(n-2)U_{12}(n)+M_{22}(n-2)U_{22}(n)]$$

Las matriz de unión se define como

$$U(n) = \begin{cases} U(n) = \begin{pmatrix} \frac{(\varepsilon - \varepsilon_A)^2}{t_{AB}t_{AA}} - \frac{t_{AA}}{t_{AB}} & -\frac{t_{BA}}{t_{AA}}(\varepsilon - \varepsilon_A) \\ \frac{(\varepsilon - \varepsilon_A)}{t_{AA}} & -\frac{t_{BA}}{t_{AA}} \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ par} \\ U(n) = \begin{pmatrix} \frac{(\varepsilon - \varepsilon_A)(\varepsilon - \varepsilon_B)}{t_{AB}t_{BA}} - \frac{t_{BA}}{t_{AB}} & -\frac{(\varepsilon - \varepsilon_A)}{t_{BA}} \\ \frac{(\varepsilon - \varepsilon_A)}{t_{AA}} & -\frac{t_{BA}}{t_{AA}} \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ impar} \end{cases}$$

Las condiciones iniciales para la matriz media son

$$M(3) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_B}{t_{BA}} & -\frac{t_{AB}}{t_{BA}} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix}$$

$$M(4) = \begin{pmatrix} \frac{(\varepsilon - \varepsilon_B)}{t_{BA}} \left[\frac{(\varepsilon - \varepsilon_A)^2}{t_{AB}t_{AA}} - \frac{t_{AA}}{t_{AB}} \right] + \frac{(-t_{BA})}{t_{AA}} \frac{(\varepsilon - \varepsilon_A)}{t_{AB}} & \frac{(-t_{AB})}{t_{BA}} \left[\frac{(\varepsilon - \varepsilon_A)^2}{t_{AB}t_{AA}} - \frac{t_{AA}}{t_{AB}} \right] \\ \left[\frac{(\varepsilon - \varepsilon_B)(\varepsilon - \varepsilon_A)}{t_{BA}t_{AA}} - \frac{t_{AA}}{t_{AB}} \right] & \frac{(-t_{AB})}{t_{BA}} \frac{(\varepsilon - \varepsilon_A)}{t_{AA}} \end{pmatrix}$$

la matriz de transferencia es

$$\tau(n) = F(n)M(n)I(n)$$

$$\tau(n) = \begin{pmatrix} F_{11}(n) & F_{12}(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{11}(n) & M_{12}(n) \\ M_{21}(n) & M_{22}(n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_{11}(n) & I_{12}(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix}$$

$$\tau_{11}(n) = I_{11}(n)[F_{11}(n)M_{11}(n) + F_{12}(n)M_{21}(n)] + F_{11}(n)M_{12}(n) + F_{12}(n)M_{22}(n)$$

$$\tau_{12}(n) = I_{12}(n)[F_{11}(n)M_{11}(n) + F_{12}(n)M_{21}(n)]$$

$$\tau_{21}(n) = I_{11}(n)M_{11}(n) + M_{21}(n)$$

$$\tau_{22}(n) = I_{12}(n)M_{11}(n)$$

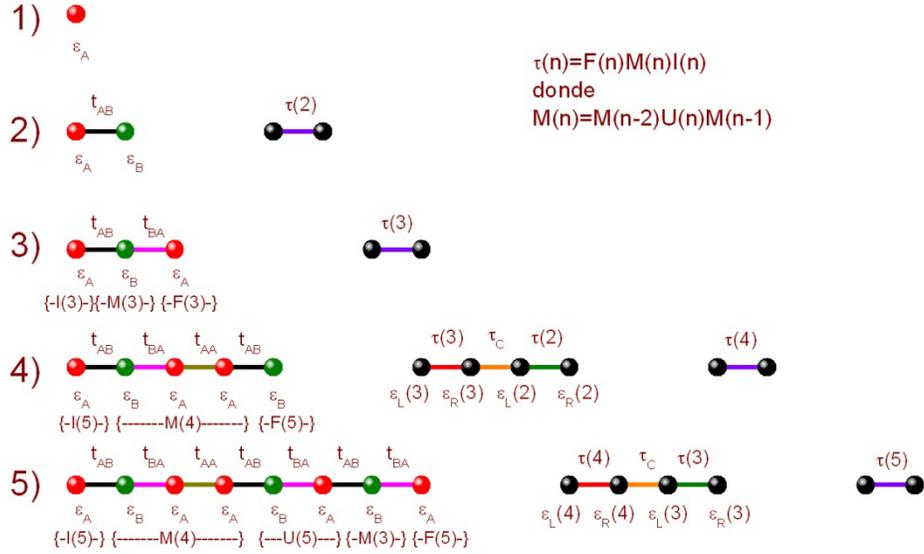


Figura J-1. Método de renormalización para la matriz de transferencia en el problema mixto (Fibonacci).

En la Fig. J-1 se describe el método de renormalización para la matriz de transferencia en el problema mixto (Fibonacci).

Apéndice K. Transmitancia para el problema de mixtos (Thue Morse).

La matriz de transferencia del sistema en el j -ésimo átomo, está definido de la siguiente manera

$$\tau(n) = \begin{pmatrix} C_{j+1} \\ C_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\epsilon - \epsilon_j}{t_{j+1}} & \frac{-t_{j-1}}{t_{j+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_j \\ C_{j-1} \end{pmatrix}$$

El procedimiento es similar al utilizado anteriormente

$$\tau(n) = \begin{pmatrix} F_{11}(n) & F_{12}(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{11}(n) & M_{12}(n) \\ M_{21}(n) & M_{22}(n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_{11}(n) & I_{12}(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix}$$

La matriz inicial queda definida por

$$I(n) = \begin{pmatrix} \frac{\epsilon - \epsilon_A}{t_{AB}} & \frac{-t}{t_{AB}} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} \quad I^*(n) = \begin{pmatrix} \frac{\epsilon - \epsilon_B}{t_{BA}} & \frac{-t}{t_{BA}} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix}$$

La matriz final queda expresada

$$F(n) = \begin{cases} F(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_B}{t} & \frac{-t_{AB}}{t} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ par} \\ F(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_A}{t} & \frac{-t_{BA}}{t} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ impar} \end{cases}$$

$$F^*(n) = \begin{cases} F^*(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_A}{t} & \frac{-t_{BA}}{t} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ par} \\ F^*(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_B}{t} & \frac{-t_{AB}}{t} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ impar} \end{cases}$$

La matriz media queda definida por

$$M_{11}(n) = M_{11}(n-1)[M_{11}^*(n-1)U_{11}(n) + M_{12}^*(n-1)U_{21}(n)] +$$

$$+ M_{21}(n-1)[M_{11}^*(n-1)U_{12}(n) + M_{12}^*(n-1)U_{22}(n)]$$

$$M_{12}(n) = M_{12}(n-1)[M_{11}^*(n-1)U_{11}(n) + M_{12}^*(n-1)U_{21}(n)] +$$

$$+ M_{22}(n-1)[M_{11}^*(n-1)U_{12}(n) + M_{12}^*(n-1)U_{22}(n)]$$

$$M_{21}(n) = M_{11}(n-1)[M_{21}^*(n-1)U_{11}(n) + M_{22}^*(n-1)U_{21}(n)] +$$

$$+ M_{21}(n-1)[M_{21}^*(n-1)U_{12}(n) + M_{22}^*(n-1)U_{22}(n)]$$

$$M_{22}(n) = M_{12}(n-1)[M_{21}^*(n-1)U_{11}(n) + M_{22}^*(n-1)U_{21}(n)] +$$

$$+ M_{22}(n-1)[M_{21}^*(n-1)U_{12}(n) + M_{22}^*(n-1)U_{22}(n)]$$

$$M_{11}^*(n) = M_{11}(n-1)[M_{11}(n-1)U_{11}^*(n) + M_{12}(n-1)U_{21}^*(n)] +$$

$$+ M_{21}(n-1)[M_{11}(n-1)U_{12}^*(n) + M_{12}(n-1)U_{22}^*(n)]$$

$$M_{12}^*(n) = M_{12}(n-1)[M_{11}(n-1)U_{11}^*(n) + M_{12}(n-1)U_{21}^*(n)] +$$

$$+ M_{22}(n-1)[M_{11}(n-1)U_{12}^*(n) + M_{12}(n-1)U_{22}^*(n)]$$

$$M_{21}^*(n) = M_{11}(n-1)[M_{21}(n-1)U_{11}^*(n) + M_{22}(n-1)U_{21}^*(n)] +$$

$$+ M_{21}(n-1)[M_{21}(n-1)U_{12}^*(n) + M_{22}(n-1)U_{22}^*(n)]$$

$$M_{22}^*(n) = M_{12}(n-1)[M_{21}(n-1)U_{11}^*(n) + M_{22}(n-1)U_{21}^*(n)] +$$

$$+ M_{22}(n-1)[M_{21}(n-1)U_{12}^*(n) + M_{22}(n-1)U_{22}^*(n)]$$

Las matriz de unión se define como

$$U(n) = \begin{cases} \begin{pmatrix} \frac{(\varepsilon - \varepsilon_B)(\varepsilon - \varepsilon_A)}{t_{BA}t_{AB}} - \frac{t_{AB}}{t_{BA}} & \frac{-t_{BA}}{t_{AB}} \frac{(\varepsilon - \varepsilon_B)}{t_{BA}} \\ \frac{(\varepsilon - \varepsilon_A)}{t_{AB}} & \frac{-t_{BA}}{t_{AB}} \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ par} \\ \\ \begin{pmatrix} \frac{(\varepsilon - \varepsilon_B)^2}{t_{BB}t_{BA}} - \frac{t_{BB}}{t_{BA}} & \frac{-t_{AB}}{t_{BB}} \frac{(\varepsilon - \varepsilon_B)}{t_{BA}} \\ \frac{(\varepsilon - \varepsilon_B)}{t_{BB}} & \frac{-t_{BA}}{t_{BB}} \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ impar} \end{cases}$$

$$U^*(n) = \begin{cases} \begin{pmatrix} \frac{(\varepsilon - \varepsilon_B)(\varepsilon - \varepsilon_A)}{t_{BA}t_{AB}} - \frac{t_{BA}}{t_{AB}} & \frac{-t_{AB}}{t_{BA}} \frac{(\varepsilon - \varepsilon_A)}{t_{AB}} \\ \frac{(\varepsilon - \varepsilon_B)}{t_{BA}} & \frac{-t_{AB}}{t_{BA}} \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ par} \\ \\ \begin{pmatrix} \frac{(\varepsilon - \varepsilon_A)^2}{t_{AA}t_{AB}} - \frac{t_{AA}}{t_{AB}} & \frac{-t_{BA}}{t_{AA}} \frac{(\varepsilon - \varepsilon_A)}{t_{AB}} \\ \frac{(\varepsilon - \varepsilon_A)}{t_{AA}} & \frac{-t_{BA}}{t_{AA}} \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ impar} \end{cases}$$

Las condiciones iniciales para la matriz media son

$$M(3) = \begin{pmatrix} \frac{(\varepsilon - \varepsilon_B)^2}{t_{BA}t_{BB}} - \frac{t_{BB}}{t_{BA}} & \frac{-t_{AB}}{t_{BB}} \frac{(\varepsilon - \varepsilon_B)}{t_{BA}} \\ \frac{(\varepsilon - \varepsilon_B)}{t_{BB}} & \frac{-t_{AB}}{t_{BB}} \end{pmatrix}$$

$$M^*(3) = \begin{pmatrix} \frac{(\varepsilon - \varepsilon_A)^2}{t_{AB}t_{AA}} - \frac{t_{AA}}{t_{AB}} & \frac{-t_{BA}}{t_{AA}} \frac{(\varepsilon - \varepsilon_A)}{t_{AB}} \\ \frac{(\varepsilon - \varepsilon_A)}{t_{AA}} & \frac{-t_{BA}}{t_{AA}} \end{pmatrix}$$

la matriz de transferencia está dada por

$$\tau(n) = F(n)M(n)I(n)$$

$$\tau(n) = \begin{pmatrix} F_{11}(n) & F_{12}(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{11}(n) & M_{12}(n) \\ M_{21}(n) & M_{22}(n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_{11}(n) & I_{12}(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix}$$

$$\tau_{11}(n) = I_{11}(n)[F_{11}(n)M_{11}(n) + F_{12}(n)M_{21}(n)] + F_{11}(n)M_{12}(n) + F_{12}(n)M_{22}(n)$$

$$\tau_{12}(n) = I_{12}(n)[F_{11}(n)M_{11}(n) + F_{12}(n)M_{21}(n)]$$

$$\tau_{21}(n) = I_{11}(n)M_{11}(n) + M_{21}(n)$$

$$\tau_{22}(n) = I_{12}(n)M_{11}(n)$$

la matriz de transferencia para la cadena conjugada es

$$\tau^*(n) = F^*(n)M^*(n)I^*(n)$$

$$\tau(n) = \begin{pmatrix} F^*_{11}(n) & F^*_{12}(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M^*_{11}(n) & M^*_{12}(n) \\ M^*_{21}(n) & M^*_{22}(n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I^*_{11}(n) & I^*_{12}(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix}$$

$$\tau^*_{11}(n) = I^*_{11}(n)[F^*_{11}(n)M^*_{11}(n) + F^*_{12}(n)M^*_{21}(n)] + F^*_{11}(n)M^*_{12}(n) + F^*_{12}(n)M^*_{22}(n)$$

$$\tau^*_{12}(n) = I^*_{12}(n)[F^*_{11}(n)M^*_{11}(n) + F^*_{12}(n)M^*_{21}(n)]$$

$$\tau^*_{21}(n) = I^*_{11}(n)M^*_{11}(n) + M^*_{21}(n)$$

$$\tau^*_{22}(n) = I^*_{12}(n)M^*_{11}(n)$$

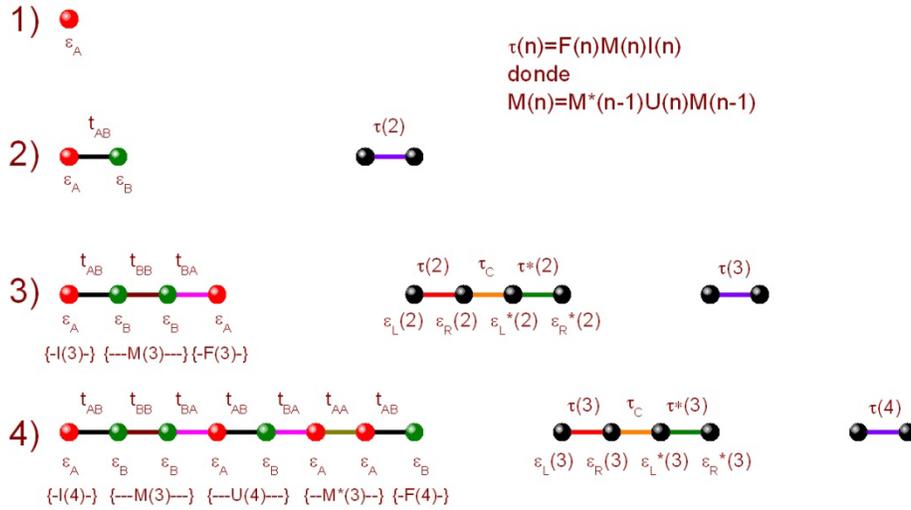


Figura K-1. Método de renormalización para la matriz de transferencia en el problema mixto (Thue Morse).

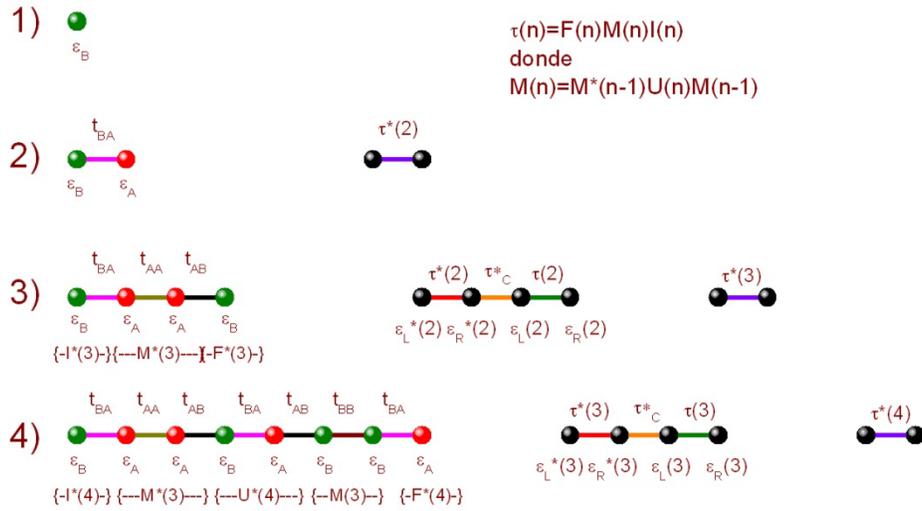


Figura K-2. Método de renormalización para la matriz de transferencia en el problema mixto (Thue Morse) de la cadena conjugada.

En la figuras K-1 y K-2 se describe el método de renormalización para la matriz de transferencia en el problema mixto (Thue Morse).

Apéndice L. Transmitancia para el problema de mixtos (Doble periodo).

La matriz de transferencia del sistema en el j -ésimo átomo, está definido de la siguiente manera

$$\tau(n) = \begin{pmatrix} C_{j+1} \\ C_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_j}{t_{j+1}} & -t_{j-1} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_j \\ C_{j-1} \end{pmatrix}$$

Se emplea el mismo procedimiento que en los apéndices anteriores

$$\tau(n) = \begin{pmatrix} F_{11}(n) & F_{12}(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{11}(n) & M_{12}(n) \\ M_{21}(n) & M_{22}(n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_{11}(n) & I_{12}(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix}$$

La matriz inicial queda definida por

$$I(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_A}{t_{AB}} & -t \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix}$$

La matriz final queda expresada por

$$F(n) = \begin{cases} F(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_B}{t} & \frac{-t_{AB}}{t} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ par} \\ F(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_A}{t} & \frac{-t_{AA}}{t} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ impar} \end{cases}$$

$$F^*(n) = \begin{cases} F^*(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_A}{t} & \frac{-t_{AA}}{t} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ par} \\ F(n) = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon - \varepsilon_B}{t} & \frac{-t_{AB}}{t} \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ impar} \end{cases}$$

La matriz media queda definida por

$$M_{11}(n) = M_{11}(n-1)[M^*_{11}(n-1)U_{11}(n) + M^*_{12}(n-1)U_{21}(n)] + \\ + M_{21}(n-1)[M^*_{11}(n-1)U_{12}(n) + M^*_{12}(n-1)U_{22}(n)]$$

$$M_{12}(n) = M_{12}(n-1)[M^*_{11}(n-1)U_{11}(n) + M^*_{12}(n-1)U_{21}(n)] + \\ + M_{22}(n-1)[M^*_{11}(n-1)U_{12}(n) + M^*_{12}(n-1)U_{22}(n)]$$

$$M_{21}(n) = M_{11}(n-1)[M^*_{21}(n-1)U_{11}(n) + M^*_{22}(n-1)U_{21}(n)] + \\ + M_{21}(n-1)[M^*_{21}(n-1)U_{12}(n) + M^*_{22}(n-1)U_{22}(n)]$$

$$M_{22}(n) = M_{12}(n-1)[M^*_{21}(n-1)U_{11}(n) + M^*_{22}(n-1)U_{21}(n)] + \\ + M_{22}(n-1)[M^*_{21}(n-1)U_{12}(n) + M^*_{22}(n-1)U_{22}(n)]$$

$$M^*_{11}(n) = M_{11}(n-1)[M_{11}(n-1)U_{11}(n) + M_{12}(n-1)U_{21}(n)] + \\ + M_{21}(n-1)[M_{11}(n-1)U_{12}(n) + M_{12}(n-1)U_{22}(n)]$$

$$M^*_{12}(n) = M_{12}(n-1)[M_{11}(n-1)U_{11}(n) + M_{12}(n-1)U_{21}(n)] + \\ + M_{22}(n-1)[M_{11}(n-1)U_{12}(n) + M_{12}(n-1)U_{22}(n)]$$

$$M^*_{21}(n) = M_{11}(n-1)[M_{21}(n-1)U_{11}(n) + M_{22}(n-1)U_{21}(n)] + \\ + M_{21}(n-1)[M_{21}(n-1)U_{12}(n) + M_{22}(n-1)U_{22}(n)]$$

$$M^*_{22}(n) = M_{12}(n-1)[M_{21}(n-1)U_{11}(n) + M_{22}(n-1)U_{21}(n)] + \\ + M_{22}(n-1)[M_{21}(n-1)U_{12}(n) + M_{22}(n-1)U_{22}(n)]$$

Las matriz de unión se define como

$$U(n) = \begin{cases} U(n) = \begin{pmatrix} \frac{(\varepsilon - \varepsilon_A)^2}{t_{AB}t_{AA}} - \frac{t_{AA}}{t_{AB}} & -\frac{(\varepsilon - \varepsilon_A)}{t_{AB}} \\ \frac{(\varepsilon - \varepsilon_A)}{t_{AA}} & -1.0 \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ par} \\ U(n) = \begin{pmatrix} \frac{(\varepsilon - \varepsilon_A)(\varepsilon - \varepsilon_B)}{t_{AB}t_{BA}} - \frac{t_{BA}}{t_{AB}} & -\frac{(\varepsilon - \varepsilon_A)}{t_{BA}} \\ \frac{(\varepsilon - \varepsilon_B)}{t_{BA}} & -\frac{t_{AB}}{t_{BA}} \end{pmatrix} & \text{para } n \text{ impar} \end{cases}$$

Las condiciones iniciales para la matriz media son

$$M(3) = \begin{pmatrix} \frac{(\varepsilon - \varepsilon_B)(\varepsilon - \varepsilon_B)}{t_{AA}t_{BA}} - \frac{t_{BA}}{t_{AA}} & -\frac{t_{AB}}{t_{BA}} \frac{(\varepsilon - \varepsilon_A)}{t_{AA}} \\ \frac{(\varepsilon - \varepsilon_B)}{t_{BA}} & -\frac{t_{AB}}{t_{BA}} \end{pmatrix}$$

$$M^*(3) = \begin{pmatrix} \frac{(\varepsilon - \varepsilon_B)(\varepsilon - \varepsilon_B)}{t_{AB}t_{BA}} - \frac{t_{BA}}{t_{AB}} & -\frac{t_{AB}}{t_{BA}} \frac{(\varepsilon - \varepsilon_A)}{t_{AB}} \\ \frac{(\varepsilon - \varepsilon_B)}{t_{BA}} & -\frac{t_{AB}}{t_{BA}} \end{pmatrix}$$

la matriz de transferencia es

$$\tau(n) = F(n)M(n)I(n)$$

$$\tau(n) = \begin{pmatrix} F_{11}(n) & F_{12}(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{11}(n) & M_{12}(n) \\ M_{21}(n) & M_{22}(n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_{11}(n) & I_{12}(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix}$$

$$\tau_{11}(n) = I_{11}(n)[F_{11}(n)M_{11}(n) + F_{12}(n)M_{21}(n)] + F_{11}(n)M_{12}(n) + F_{12}(n)M_{22}(n)$$

$$\tau_{12}(n) = I_{12}(n)[F_{11}(n)M_{11}(n) + F_{12}(n)M_{21}(n)]$$

$$\tau_{21}(n) = I_{11}(n)M_{11}(n) + M_{21}(n)$$

$$\tau_{22}(n) = I_{12}(n)M_{11}(n)$$

la matriz de transferencia para la cadena conjugada es

$$\tau^*(n) = F^*(n)M^*(n)I(n)$$

$$\tau^*(n) = \begin{pmatrix} F^*_{11}(n) & F^*_{12}(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M^*_{11}(n) & M^*_{12}(n) \\ M^*_{21}(n) & M^*_{22}(n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_{11}(n) & I_{12}(n) \\ 1.0 & 0.0 \end{pmatrix}$$

$$\tau_{11}^*(n) = I_{11}(n)[F_{11}^*(n)M_{11}^*(n) + F_{12}^*(n)M_{21}^*(n)] + F_{11}^*(n)M_{12}^*(n) + F_{12}^*(n)M_{22}^*(n)$$

$$\tau_{12}^*(n) = I_{12}(n)[F_{11}^*(n)M_{11}^*(n) + F_{12}^*(n)M_{21}^*(n)]$$

$$\tau_{21}^*(n) = I_{11}(n)M_{11}^*(n) + M_{21}^*(n)$$

$$\tau_{22}^*(n) = I_{12}(n)M_{11}^*(n)$$

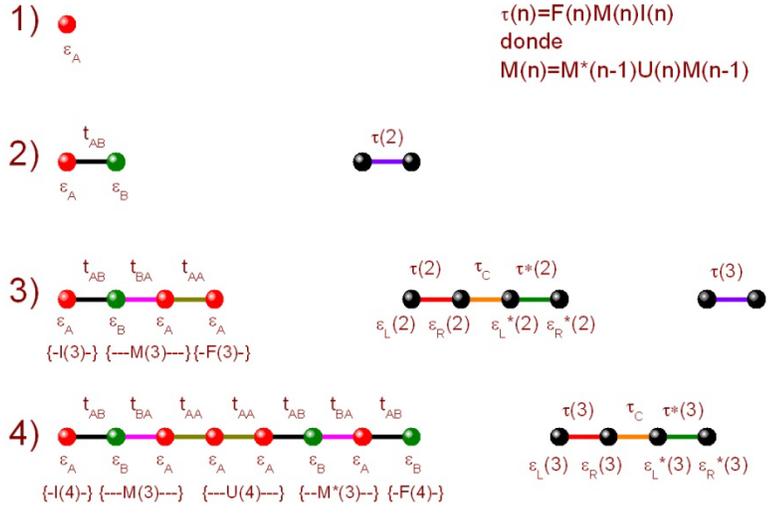


Figura L-1. Método de renormalización para la matriz de transferencia en el problema mixto (doble período).

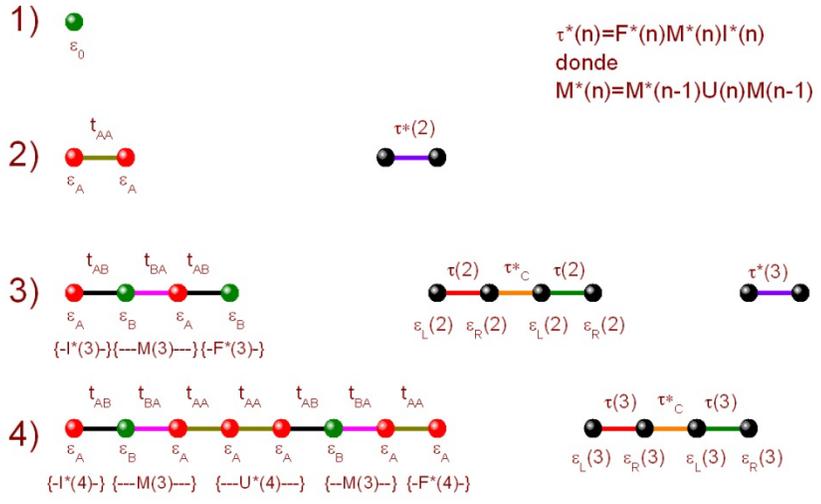


Figura L-2. Método de renormalización para la matriz de transferencia en el problema mixto (doble período) de la cadena conjugada.

En las figuras L-1 y L-2 se describe el método de renormalización para la matriz de transferencia en el problema mixto (doble período).