



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

---

ESCUELA NACIONAL DE ESTUDIOS SUPERIORES  
UNIDAD MORELIA

ESTUDIO DE LA FUNCIÓN DE ONDA EN  
SISTEMAS CUASIPERIÓDICOS

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

LICENCIADO EN CIENCIA DE MATERIALES  
SUSTENTABLES

P R E S E N T A:

ERNESTO HUIPE DOMRATCHEVA

DIRECTOR DE TESIS:

DR. ORACIO NAVARRO CHÁVEZ

Morelia, Michoacán

Octubre, 2020



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

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

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



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
ESCUELA NACIONAL DE ESTUDIOS SUPERIORES, UNIDAD MORELIA  
SECRETARÍA GENERAL  
SERVICIOS ESCOLARES

**MTRA. IVONNE RAMÍREZ WENCE:**

DIRECTORA

DIRECCIÓN GENERAL DE ADMINISTRACIÓN ESCOLAR

**PRESENTE**

Por medio de la presente me permito informar a usted que en la **sesión ordinaria 08** del **H. Consejo Técnico** de la Escuela Nacional de Estudios Superiores (ENES) Unidad Morelia celebrada el día **09 de septiembre del 2020**, acordó poner a su consideración el siguiente jurado para la presentación del Trabajo Profesional del alumno (a) **Ernesto Huipe Domratcheva** de la Licenciatura en Ciencia de Materiales Sustentables, con número de cuenta **415010320** con la tesis titulada: "Estudio de la Función de Onda en Sistemas Cuasiperiódicos" *bajo* la dirección como **tutor** del Dr. Oracio Navarro Chávez.

El jurado queda integrado de la siguiente manera:

<b>Presidente:</b>	Dra. Bertha Oliva Aguilar Reyes
<b>Vocal:</b>	Dr. Daniele Colosi
<b>Secretario:</b>	Dr. Oracio Navarro Chávez
<b>Suplente 1:</b>	Dr. Joaquín de la Torres Medina
<b>Suplente 2:</b>	Dr. Alberto Beltrán Morales

Sin otro particular, quedo de usted.

Atentamente  
"POR MI RAZA HABLARA EL ESPIRITU"  
Morelia, Michoacán a 17 de septiembre del 2020.

**DRA. YESENIA ARREDONDO LEÓN**  
**SECRETARIA GENERAL**

---

**CAMPUS MORELIA**

Antigua Carretera a Pátzcuaro N° 8701, Col. Ex Hacienda de San José de la Huerta  
58190, Morelia, Michoacán, México. Tel: (443)689.3500 y (55)56.23.73.00, Extensión Red UNAM: 80614  
[www.enesmorelia.unam.mx](http://www.enesmorelia.unam.mx)

# Agradecimientos institucionales

Agradezco a la UNAM por formarme de manera crítica con los mejores profesores y por las oportunidades de crecer a nivel académico y cultural, asimismo a las E. N. E. S. Unidad Morelia por permitirme estudiar en sus instalaciones con su personal siempre dispuesto a ayudar y a la Licenciatura en Ciencia de Materiales Sustentables por la formación sólida que me ha proporcionado. Agradezco también a la Unidad Morelia del Instituto de Investigación de Materiales, por el equipo de cómputo proporcionado para la realización de este trabajo.

Agradezco a mis sinodales, al Dr. Oracio Navarro, a la Dra. Bertha Aguilar, al Dr. Alberto Beltrán, al Dr. Joaquín de la Torre y al Dr. Daniele Colosi por sus comentarios a mi tesis y sus observaciones.

Agradezco con creces al departamento de Servicios Escolares de la E. N. E. S. Morelia por su atención, paciencia, y guía en todos los trámites de titulación, en particular al Lic. Alejandro Rebollar y al Lic. Agustín Martínez Morales, quienes siempre me atendían en mis no programadas apariciones.

Finalmente, agradezco a todos mis profesores de la licenciatura, en especial a la Dra. Santiago de la Cruz y al Dr. Orlando Hernández, por su paciencia, atención y apoyo durante las últimas etapas dentro de la licenciatura.

# Agradecimientos personales

Agradezco al Dr. Oracio Navarro, por ofrecer el t3pico de esta tesis, por sus ense~anzas en la f3sica del estado s3lido, y por las discusiones en su c3biculo sobre garabatos que hac3amos en papel. 3sto hizo que mi comprensi3n de la mec3nica cu3ntica aumentara, as3 como mi inter3s por ella. Agradezco tambi3n al Dr. Christian Schubert, gracias a 3l, empec3 a estudiar la mec3nica cu3ntica de manera seria, que como consecuencia, cambi3 el paradigma que tengo sobre 3ste mundo. Durante la escritura de 3sta tesis, he conocido a muchas personas con las cuales he discutido de manera muy amena, como el Dr. Jovani Guzm3n con pl3ticas interminables de 5 dimensiones, los sistemas cuasiperi3dicos, discusi3n sobre la manera de escribir art3culos, y como compa~ero en los convivios a los cuales asist3amos; a la Dra. Bertha Aguilar por su perspectiva como qu3mica, cuyos comentarios hicieron que esta tesis no s3lo sea de inter3s para los f3sicos, si no tambi3n para cualquiera que se dedique a la ciencia de materiales, y decida saber un poco mas sobre los sistemas cuasicristalinos. Tambi3n quiero agradecer a mis sinodales, el Dr. Alberto Beltr3n, el Dr. Daniele Colosi, y al Dr. Joaqu3n de la Torre. Sus observaciones y comentarios hicieron de este escrito algo mucho mejor de lo que yo esperaba, gracias a ellos (junto con la Dra. Aquilar y el Dr. Navarro como parte del jurado) me siento m3s satisfecho con el escrito final. Agradezco tambi3n al Dr. Francisco Estrada Ch3vez por las conversaciones en congresos, comidas y encuentros en los pasillos del Instituto de Investigaciones en Materiales. Fuera de la academia, quiero agradecer a Aketzalli por los interminables momentos zalameros y su apoyo durante el periodo de escritura de esta tesis. Tambi3n quiero agradecer a mi familia, por su apoyo y paciencia durante mi formaci3n; tambi3n no se pueden quedar atr3s Alejandro, Ana Brenda, Alejandra Triana, Meteoro, y todos los que han compartido su tiempo conmigo y han dejado huella en m3.

Agradezco tambi3n ShareL<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X por el tutorial sobre c3mo escribir una tesis en L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X as3 como tambi3n a las comunidades de Physics StackExchange, Stack overflow y Quora Forums.

# Resumen

Los sistemas cuasiperiódicos han cambiado la percepción que se tiene de los materiales cristalinos, al presentar simetrías rotacionales que se pensaban prohibidas, por ejemplo la simetría rotacional de orden cinco. Desde su descubrimiento se han investigado ampliamente sus propiedades, tanto electrónicas como fonónicas, siempre en la búsqueda de alguna aplicación de igual importancia e inusual como su simetría. Sin embargo hasta ahora su mayor interés ha sido fundamentalmente en la propiedad de superficie antiadherente. En esta tesis, se hace un repaso de los conceptos básicos de la física del estado sólido necesarias para poder explicar y entender el comportamiento de la función de onda electrónica en este tipo de sistemas. Se estudia también el crecimiento de la red de Penrose por medio de deflación a partir de varias semillas iniciales y se calcula la función de onda electrónica a manera de entender el comportamiento electrónico en éstos sistemas. Se encuentra la presencia de dos estado separados por una pseudo brecha energética en el nivel de Fermi que tienen comportamientos distintos, en donde, en los estados por debajo del nivel de Fermi se presentan estados críticos en donde los electrones prefieren sitios con un mayor número de coordinación. En el caso de los estados por encima del nivel de Fermi se encuentran los estados frustrados, en donde ya no se presenta un comportamiento crítico. Se muestra la forma de la función de onda para distintas semillas y energías del espectro, se añade además una explicación intuitiva del comportamiento característico de los sistemas cuasiperiódicos. Los cálculos para llevar a cabo el estudio de los sistemas cuasiperiódicos se hicieron de manera numérica en el lenguaje de programación Python3. En el apéndice A se explican algunas secciones del código escrito para llevar a cabo los cálculos y la graficación de la amplitud de las funciones de onda electrónica, mientras que en el apéndice B se agrega el diagrama de flujo de los programas construídos para llevar a cabo los cálculos.

# Abstract

Quasiperiodic systems changed the view that the crystalline materials have, presenting fold symmetries that were considered forbidden, like five fold symmetry. Since the discovery of these materials, their properties have been in constant research, like the phononic and electronic ones, always with the goal to find an application equal in importance and strangeness as their symmetry. However, until now the interest on these materials is the non-stick surface property. In this thesis, we review the basic concepts of solid state physics needed to explain and understand the behaviour of the electronic wave function of these systems. We also study the growth of the Penrose lattice with the deflation method applied to various initial seeds and calculate the electronic wave function with the aim to understand the electronic behaviour of these systems. The presence of two different behavioural states detached by an energy pseudo gap at the Fermi level is found, where the states below the Fermi level have critical behaviour in which the electrons prefer the sites with a greater coordination number. In the states above the Fermi level, frustrated states are found, where the critical behaviour is absent. The amplitude of the electronic wave function is plotted for different seeds and energies, also an intuitive explanation of the characteristic behaviour of the quasiperiodic systems is added. The calculations to do the study of the quasiperiodic systems were made numerically in the Python3 programming language. In appendix A some build functions of the written program are commented, while in appendix B the flowchart of the written programs is added.

# Dedicación

Lo dedico a....

G. A. Domrachev.

# Declaración

Yo declaro que...

This Figure, that thou here seest put,  
It was for gentle Shakespeare cut:  
Wherein the Grauer had a strife  
with Nature, to out-doo the life:  
O, could he but haue dravvne his vvit  
As vvell in brasse, as he hath hit  
His face; the Print vvould then surpasse  
All, that vvas euer vvrit in brasse.  
But, since he cannot, Reader, looke  
Not on his picture, but his Booke.

Ben Jonson y William Shakespeare, *First Folio*, Londres, 1623.

# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. Conceptos básicos de la física del estado sólido</b>	<b>4</b>
2.1. Geometría de los sólidos . . . . .	4
2.1.1. Sólidos cristalinos . . . . .	4
2.1.1.1. Función de densidad . . . . .	6
2.1.1.2. Traslación e invarianza . . . . .	7
2.1.1.3. Condiciones de Born-von Karman . . . . .	8
2.1.2. Sólidos amorfos . . . . .	9
2.1.3. Sólidos cuasicristalinos . . . . .	10
2.2. Modelo de amarre fuerte . . . . .	10
2.2.1. Relación de dispersión . . . . .	13
2.2.2. Teorema de Bloch . . . . .	14
2.3. Densidad de estados . . . . .	15
2.3.1. Densidad de estados en el espacio $k$ . . . . .	15
2.3.2. Densidad de estados en el espacio real . . . . .	15
2.4. Distorsión de Peierls . . . . .	19
<b>3. Sistemas Cuasiperiódicos</b>	<b>25</b>
3.1. Crecimiento de una cadena de Fibonacci . . . . .	25
3.2. Crecimiento de una red de Penrose . . . . .	27
3.3. Relación entre la cadena de Fibonacci y la red de Penrose . . . . .	35
3.3.1. Definiciones básicas . . . . .	35
<b>4. Resultados y discusión</b>	<b>39</b>
4.1. Función de onda y densidad de estados en la cadena de Fibonacci . . . . .	40
4.2. Función de onda y densidad de estados en la red de Penrose . . . . .	46
<b>5. Conclusiones</b>	<b>71</b>
<b>A. Funciones en Python3</b>	<b>76</b>
<b>B. Diagramas de flujo</b>	<b>82</b>

# Capítulo 1

## Introducción

Los cuasicristales, desde su descubrimiento por D. Schechtman *et al.* [1], causaron un cambio de paradigma en la definición de lo que es un cristal. Originalmente, una clasificación de la materia en función de su orden sólo consistía en dos fases, amorfa y cristalina [2, 3, 4, 5]. Con el descubrimiento y aceptación de la nueva fase cuasicristalina en la comunidad científica, la Union Internacional de Cristalografía (IUCr, International Union of Crystallography) se vio obligada a cambiar sus definiciones [6]. El artículo de Shechtman reporta la existencia de una fase icosaedral en una aleación monocristalina de Al y Mn enfriada rápidamente (en la jerga metalúrgica denominada como *I*-Al-Mn). Ésta fase es inconsistente con traslaciones en la red a corto alcance [2, 5], pero existente a largo alcance. La nitidez del patrón de difracción indica una alta coherencia en la interferencia espacial comparada a la que uno puede encontrar en los cristales. Una primera explicación sobre la forma de esta red propone que la simetría de los cristales de varios icosaedros en una celda unitaria tiene distintas orientaciones y les permite estar distorsionados, dejando al cristal en general consistente con los grupos puntuales y espaciales de la cristalografía [1]. Una segunda explicación propuesta por Linus Pauling [7, 8], menciona que el resultado del patrón de difracción se genera al encontrarse 5 planos de redes cúbicas emparejadas. La explicación aceptada actualmente propuesta por Paul Steinhardt consiste en un arreglo que presenta orientación de enlace con simetría icosaedral, presente a largo alcance pero con simetría traslacional de corto alcance [9]. La tesselación de Penrose es un arreglo en 2 dimensiones que presenta estas características. No todos los sitios dentro de la red presentan simetría icosaedral, de hecho, existen sitios con distintos números de coordinación alrededor de los sitios icosaedrales que pueden romper la simetría orientacional, sin embargo, se ve que estos sitios están ordenados de manera que se cumple la orientación de enlace con simetría icosaedral [9]. La cristalografía elemental muestra que la simetría rotacional de orden 5 es inconsistente con el orden traslacional [5].

Se ha reportado también que los materiales cuasicristalinos no sólo se pueden encontrar en los laboratorios. Luca Bindi y colaboradores reportaron que éstos existen en la naturaleza [10] en muestras cuya formación data el triásico. Se ha encontrado que el cuasicristal natural es una aleación de Al, Cu, y Fe, que se presenta en granos de escala micrométrica [10]. Se ve también que en la naturaleza, las fases cuasicristalinas formadas bajo condiciones geológicas presentan perfecta estructura, lo cual tiene severas implicaciones para la geología y la física de materia condensada.

Recientemente, Steinhardt y colaboradores han reportado en varios artículos sobre la existencia de cuasicristales de origen natural provenientes del espacio [11, 12, 13, 14, 15].

Aunado a su poca convencionalidad, en los materiales cuasiperiódicos están las propiedades de antiadherencia, baja conductividad térmica, alta resistividad eléctrica, fragilidad, y muchas propiedades que pueden ser contrarias a los elementos que conforman a estos materiales [16, 17, 18].

Mucho se ha hablado acerca de la estructura de los cuasicristales, pero poco sobre la estructura electrónica [19]. En lo referente a la estructura electrónica, se ha reportado que existe una pseudo brecha energética en el nivel de Fermi [20], así como la coexistencia de 3 tipos de funciones de onda, el extendido, el crítico y el localizado [21], además hay un conjunto de estados degenerados separados de los demás por la pseudo brecha energética [22, 21], estados que, debido a la naturaleza degenerada de éstos, cualquier combinación lineal de éstos estados es también un eigenestado [23].

En esta tesis nos centraremos a los materiales cuasicristalinos metálicos, sin embargo, Domrachev y colaboradores han encontrado y sintetizado fases cuasicristalinas en materiales organometálicos [24]. Éstos materiales cuasicristalinos organometálicos pueden no presentar la misma naturaleza que los aquí estudiados, debido al tipo de enlace presente en éstos compuestos y a la estructura molecular de las mismas. Aún así, se puede utilizar como referencia lo contenido en la presente tesis a manera introductoria en el estudio de la estructura electrónica de los materiales cuasicristalinos organometálicos haciendo las consideraciones pertinentes.

El contenido de esta tesis hará honor al título de la misma. Con la palabra “estudio” nos referimos a una colección de técnicas teóricas útiles para “caracterizar” y entender la función de onda electrónica en los arreglos cuasicristalinos, con la esperanza de comparar y entender los resultados experimentales de distintos materiales cuasicristalinos metálicos, y comentar las correcciones necesarias a nuestros modelos. Dado lo anterior y la introducción a éstos materiales en este capítulo, lo natural en ésta tesis es continuar en el capítulo dos con los conceptos fundamentales utilizados en la física del estado sólido para determinar la estructura electrónica de los materiales cristalinos, haciendo especial énfasis en el arreglo espacial de los átomos, además de presentar varios ejemplos en una y dos dimensiones a manera ilustrativa. En el capítulo tres, nos sambullimos en el mundo de los sistemas cuasiperiódicos, concentrándonos especialmente en los arreglos de Fibonacci en una dimensión, y la teselación de Penrose en dos dimensiones. Éste capítulo tiene la finalidad de familiarizarnos con el lenguaje utilizado en éstos sistemas, responder el porqué se considera una fase intermedia entre los sistemas cristalinos y amorfos, y el mecanismo de crecimiento de los arreglos cuasiperiódicos.

En el capítulo 4, se aplican los conceptos vistos en el capítulo 2 en los sistemas cuasiperiódicos vistos en el capítulo 3, se discute la implementación de los métodos de estudio de la estructura electrónica, así como las precauciones que uno tiene que tener al hacerlo. Veremos y compararemos resultados numéricos y analíticos reportados en

la literatura, haciendo comentarios puntuales a varios métodos de solución presentes en la literatura, y cómo entra esto dentro de la física del estado sólido. Terminamos con las conclusiones haciendo críticas a nuestro trabajo y mencionando lo que falta por hacer.

# Capítulo 2

## Conceptos básicos de la física del estado sólido

### 2.1. Geometría de los sólidos

Algo que puede definir las características de un sólido es el acomodo de los átomos que lo constituyen, un ejemplo claro de esto son las formas alotrópicas del carbono. El carbono, se puede encontrar en forma de grafeno, fulerenos, diamante, y nanotubos de carbono [25], las propiedades que cambian en estos ejemplos pueden ser la conductividad eléctrica, el color, la dureza, etc. Por lo anterior, es importante antes que nada, saber reconocer la geometría presente (o ausente) en los sólidos.

Hay varias maneras de clasificar a los sólidos en función del ordenamiento de los átomos [26, 27], sin embargo, en ésta tesis nos centraremos en una clasificación. Esta clasificación divide a los sólidos en tres grupos, que son *crystalinos*, *amorfos* y *cuasicristalinos*. A continuación se explica cada una de estas categorías.

#### 2.1.1. Sólidos cristalinos

Por solido entendemos una substancia que muestra cierta resistencia al corte bajo algún esfuerzo. Generalmente tales substancias tienen una estructura cristalina. La materia sólida está constituida por una gran cantidad de átomos, los cuales, al enlazarse regularmente entre ellos forman arreglos o redes. Dado lo anterior, tenemos la siguiente definición:

**Definición 1:** Una red es un conjunto infinito de puntos definidos por una suma entera de un conjunto de vectores primitivos de la red linealmente independientes. Simbólicamente, los puntos de la red pueden expresarse como:

$$\mathbf{R}_{[n_1, n_2]} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2, \quad \forall n_1, n_2 \in Z, \quad (2.1)$$

en donde  $\mathbf{a}_1$  y  $\mathbf{a}_2$  son los vectores primitivos linealmente independientes. En tres dimensiones, ésta expresión toma la forma:

$$\mathbf{R}_{[n_1, n_2, n_3]} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3, \quad \forall n_1, n_2, n_3 \in Z, \quad (2.2)$$

y en un espacio  $N$  dimensional se tiene la forma general:

$$\mathbf{R}_{[n_1, n_2, \dots, n_N]} = \sum_i^N n_i \mathbf{a}_i, \quad \forall n_i \in \mathbb{Z}. \quad (2.3)$$

De la definición anterior se puede decir que una red es también un conjunto infinito de vectores, tal que la suma de cualesquiera dos vectores de éste conjunto, da como resultado otro vector perteneciente al conjunto. Si nos quedamos con la definición que concierne a los puntos, podemos decir que una red es un conjunto de puntos en donde el ambiente de un punto es equivalente al ambiente de cualquier otro punto. Así podemos inferir que cualquier estructura periódica puede ser representada como una red de motivos repetidos. Sin embargo, uno tiene que ser cauteloso considerando la definición anterior, ya que no todos los arreglos de puntos son periódicos. Un ejemplo de esto es la red hexagonal. Dado el ejemplo de la red hexagonal y a arreglos mas complejos de puntos, nos vemos obligados a recitar la siguiente definición:

**Definición 2:** Una celda unitaria es una región del espacio tal que al repetirse y acomodarse, llena el espacio y construye una estructura.

De la definición anterior vemos que la celda unitaria es el motivo repetido que constituye el bloque elemental de construcción de una estructura periódica. Hay veces en que uno quiere trabajar con la celda unitaria más pequeña, y es aquí donde introducimos la siguiente definición:

**Definición 3:** Una celda unitaria primitiva para un cristal periódico es una celda unitaria que contiene exactamente un punto de la red.

Sin embargo, hay veces en las que es conveniente una celda unitaria no primitiva con el objetivo de hacer mas fácil el trabajo de los cálculos, un ejemplo de esto lo veremos en las distorsiones de Peierls. Otro tipo de celda fundamental que se utiliza mucho en la física del estado sólido es la celda de Wigner-Seitz [2], la cual se define de la siguiente manera:

**Definición 4:** Dado un punto de la red, el conjunto de puntos en el espacio que son mas próximos a ese punto que cualquier otro punto de la red, constituye la celda de Wigner-Seitz.

Hasta ahora, hemos deconstruido en elementos básicos la estructura cristalina de nuestro sólido, pero podemos reconstruirla utilizando la celda como motivo que se repite, mas una base, que se define a continuación:

**Definición 5:** La descripción de los objetos en la celda unitaria respecto al punto de referencia de la red en la celda unitaria se conoce como una base.

Un concepto muy utilizado en la física del estado sólido es “el espacio recíproco”, que es la representación del espacio real en un espacio dual [28] que llamamos recíproco. Recibe éste nombre ya que los vectores de la red están divididos por sus vectores duales del espacio real [27]. Los vectores del espacio recíproco de una red cristalina se pueden calcular mediante las expresiones:

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \quad \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}. \quad (2.4)$$

Por lo tanto, podemos construir una red cristalina en el espacio recíproco mediante la expresión:

$$\mathbf{G}_{[h,k,l]} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3 \quad \forall h, k, l, \in Z, \quad (2.5)$$

$\mathbf{R}$  y  $\mathbf{G}$  cumplen con la relación:

$$e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}} = 1. \quad (2.6)$$

De lo dicho anteriormente, concluimos que toda red que vive en el espacio real, tiene asociada una red recíproca que cumple con la expresión anterior. Como comentario adicional,  $h$ ,  $k$  y  $l$  son los *índices de Miller* que nos permiten describir e identificar un sistema de planos cristalográficos en la red real. Es decir, los vectores de la red en el espacio recíproco nos describen la dirección normal de los planos atómicos en la red real. El método más usado en ciencia de materiales para la determinación de los índices ( $hkl$ ) consiste en identificar en la red real los sitios de intersección de un plano atómico con los ejes coordenados, lo anterior en unidades de las constantes de red  $n_1$ ,  $n_2$  y  $n_3$ . Teniendo estos número, uno calcula su recíproco y luego se obtienen los entero mínimos que cumplen con la razón de los recíprocos (de aquí surge el nombre de red recíproca). Por ejemplo, supongamos que un plano atómico interseca a los ejes en  $x = 2$ ,  $y = 2$  y  $z = 3$ , los recíprocos son  $\frac{1}{2}$ ,  $\frac{1}{2}$  y  $\frac{1}{3}$ , respectivamente. Los enteros más pequeños que tienen estas razones son 3, 2, y 2, respectivamente. Así los índices de Miller para este caso son (322). Finalmente, en caso de que algún plano no intersekte a los ejes, por ejemplo el eje  $z$ , uno hace  $z = \infty$ , por lo que su recíproco será  $\frac{1}{z} = 0$ .

### 2.1.1.1. Función de densidad

Hay situaciones en las que uno tiene que representar los puntos de la red como una función continua, la ventaja de las funciones continuas es la facilidad que se tiene para trabajar con ellas. Debido a lo anterior, definimos la función de densidad que nos describe la densidad de puntos en una red. Ésta función tiene la forma:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{n_1, n_2, n_3} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{[n_1, n_2, n_3]}). \quad (2.7)$$

En las Figuras 2.1 y 2.2 podemos ver las funciones de densidad de una red hexagonal y una red cuadrada. En la red hexagonal las tonalidades verdosas muestran la presencia de un átomo o sitio de la red. La irregularidad presente en dicha figura se debe a errores de precisión que surgen en el computo. En la Figura 2.2 los tonos claros representan la presencia de un átomo o sitio de red.

Si aplicamos una transformada de Fourier a la Ecuación 2.7, obtenemos:

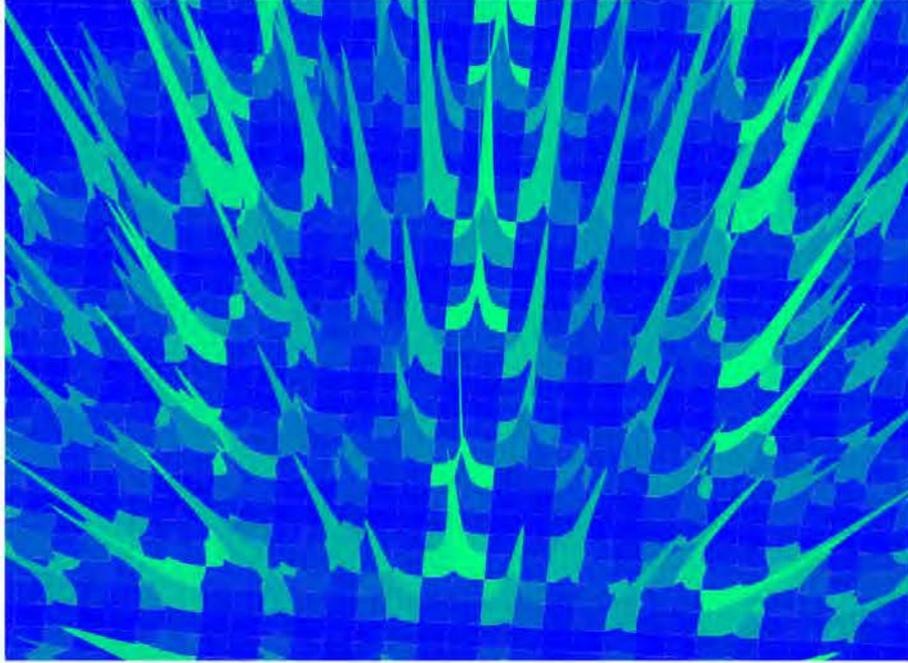


Figura 2.1: Función de densidad de una red hexagonal.

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[\rho(\mathbf{r})] &= \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \rho(\mathbf{r}) = \sum_{n_1, n_2, n_3} \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{[n_1, n_2, n_3]}) = \sum_{n_1, n_2, n_3} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \\ &= \frac{(2\pi)^3}{v} \sum_{h, k, l} \delta^{(3)}(\mathbf{k} - \mathbf{G}), \end{aligned}$$

en donde  $v$  es el volumen de la celda unitaria,  $\mathbf{k}$  es un vector perteneciente al espacio recíproco. Hay que tomar en cuenta que se utilizó la fórmula de resumación de Poisson al expresar la suma de las exponenciales como suma de funciones delta de Dirac. Por lo tanto, obtuvimos la función de densidad para el espacio recíproco.

#### 2.1.1.2. Traslación e invarianza

Una red cristalina  $\mathbf{R}$  se puede construir como la repetición periódica de una celda unitaria, que puede consistir en uno o más átomos. El vector  $\mathbf{r}$  que lleva de un punto de la celda unitaria al punto correspondiente de otra celda unitaria es llamado *vector traslación de la red*, y puede ser representado como una combinación lineal de los coeficientes de los vectores base. El conjunto de vectores de traslación determina un *grupo de traslación* de la red. Todas las redes que tengan el mismo grupo de traslación pueden diferir por tener distintas celdas unitarias. Al hacer una traslación de un red  $\mathbf{R}$  con un vector  $\mathbf{r}$ , obtenemos la misma red, simbólicamente,

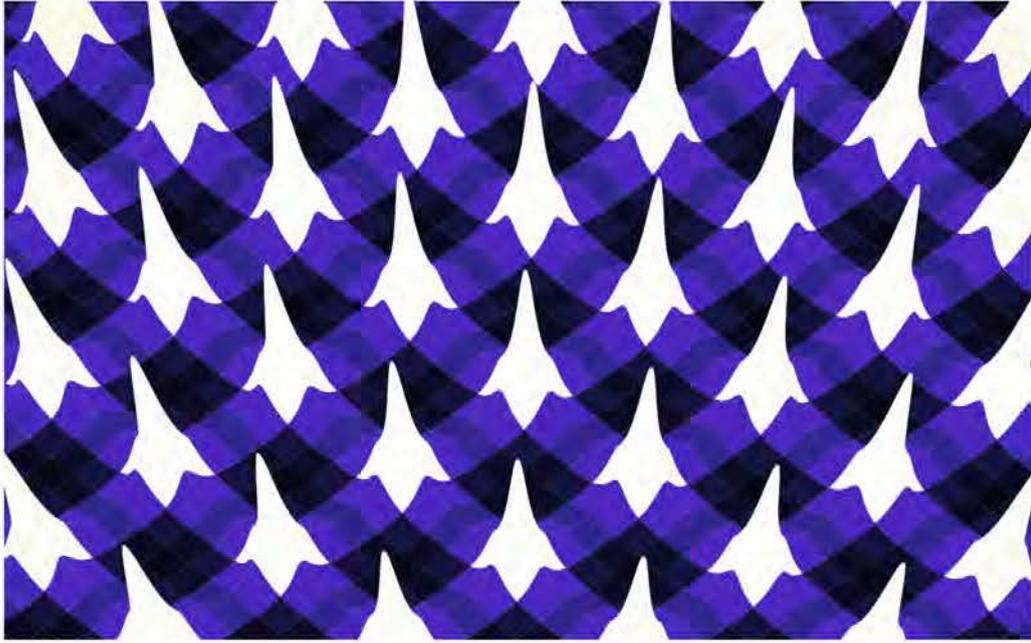


Figura 2.2: Función de densidad de una red cuadrada en 2 dimensiones.

ésto es:

$$\mathbf{R} + \mathbf{r} = \mathbf{R}.$$

En el espacio recíproco se cumple ésta misma característica, con un vector  $\mathbf{k}$  de traslación sobre una red  $\mathbf{G}$ .

### 2.1.1.3. Condiciones de Born-von Karman

Las condiciones de frontera periódicas de Born-von Karman no solo son utilizadas para simplificar los cálculos en cadenas atómicas muy grandes, también permiten ignorar los efectos superficiales que pueda haber en el material a estudiar. Consideremos una cadena de  $n$  átomos en una dimensión de longitud  $L$ , ésta tendrá dos extremos; ahora unimos los dos extremos formando un anillo. Esto significa que cualquier onda plana  $e^{ikr}$  tiene que tener el mismo valor para una posición  $r$  así como para la posición  $r + L$ . Esto restringe los posibles valores de  $k$  a la forma:

$$k = \frac{2\pi n}{L}. \quad (2.8)$$

En el caso de dos dimensiones, a partir del plano de átomos, formamos un toroide que se ilustra en la Figura 2.3, en donde unimos los extremos opuestos del plano de átomos formando un cilindro y luego unimos los extremos del cilindro. De tal manera,  $k$  obtendrá la forma:

$$k = \frac{2\pi}{L}(n_1, n_2),$$

en donde  $n_1$  y  $n_2$  son enteros y representan la cantidad de átomos en las direcciones  $x$  y  $y$  respectivamente. Análogamente, para el caso de tres dimensiones, se forma un hipertoro, y  $k$  tendrá la forma:

$$k = \frac{2\pi}{L}(n_1, n_2, n_3).$$

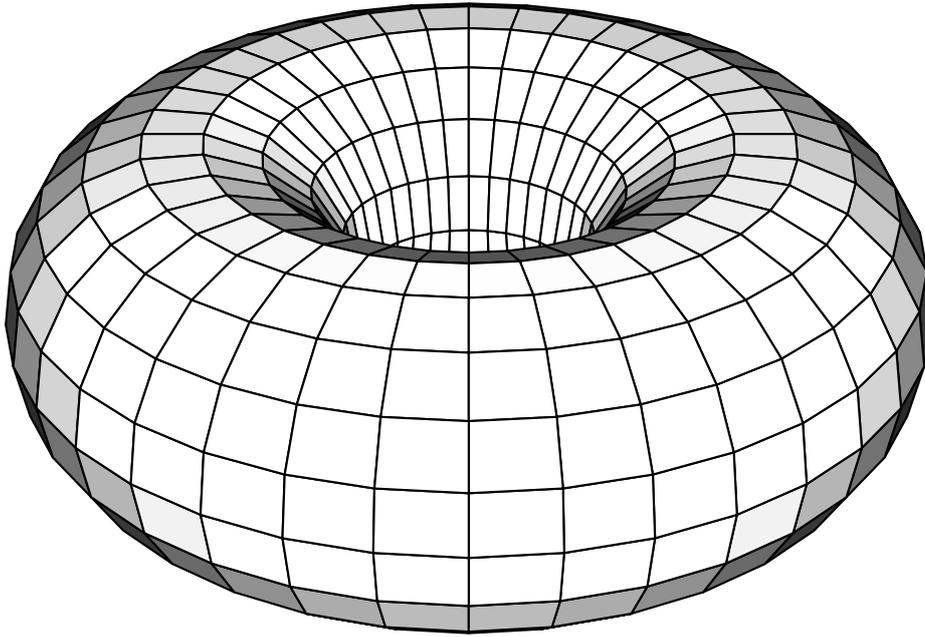


Figura 2.3: Representación de las fronteras de Born-von Karman de una red cuadrada en dos dimensiones.

Uno podría pensar que al formar el hipertoro es algo poco natural considerando un sistema con condiciones de frontera reales. Sin embargo, éstas condiciones de frontera tienden a simplificar los cálculos.

Las condiciones de Born-von Karman nos permite establecer valores para  $k$  en una, dos y tres dimensiones. En párrafos utilizaremos  $k$  para resolver los casos analíticos.

### 2.1.2. Sólidos amorfos

Los sólidos amorfos se consideran aquellos en los que sus átomos no están ordenados en ninguna forma. Puede haber porciones de arreglos atómicos dentro de ellos, pero a muy corto alcance, de tal manera que a escala macroscópica no se ve un cambio de propiedades físicas [26]. Los sólidos amorfos pueden considerarse como líquidos endurecidos, ya que al calentar los sólidos amorfos se obtiene el líquido con la misma densidad y arreglo atómico que en el sólido sólo que blando [4, 29]. Debido a lo anterior, el sólido amorfo no es una fase especial de la materia. Como ejemplo de lo anterior, no son distintas fases el vidrio sólido y el líquido.

En el paso de una fase a otra se produce siempre a una temperatura completamente determinada (a la presión dada), pero en los sólidos amorfos se ve que la transición de sólido a líquido no se produce un salto como en las fases cristalinas, es decir, la transición de fase en los sólidos amorfos (de líquido a sólido y viceversa) sucede de manera continua. La diferencia cuantitativa principal entre estos dos estados es la magnitud de las viscosidades.

Como conclusión de los sólidos amorfos, la distribución desordenada de los átomos o moléculas que la componen acarrea la isotropía de los cuerpos, que es la igualdad de propiedades en todos los sentidos. Así, la principal distinción de los cuerpos amorfos de los cristalinos, es la existencia de isotropía en los primeros y anisotropía en los segundos [4, 29].

### 2.1.3. Sólidos cuasicristalinos

Los sólidos cuasicristalinos son sólidos que pueden presentar simetrías rotacionales prohibidas, y carecen de simetría traslacional. El siguiente capítulo describe la geometría y particularidades de los sistemas cuasiperiódicos.

## 2.2. Modelo de amarre fuerte

Iniciamos esta sección con un comentario importante que se tiene que hacer respecto a la estructura electrónica de los cuasicristales, la modelación con elementos pertenecientes a los grupos 1 y 2 de la tabla periódica, utilizando un hamiltoniano de amarre fuerte; esto quiere decir, que se consideran orbitales  $s$ , mientras que experimentalmente se ha visto que los elementos que conforman a las muestras en fases cuasicristalinas, su configuración electrónica muestra que el enlazamiento sucede con orbitales  $p$  y  $d$ . Cabe destacar también que se han sintetizado materiales organometálicos con fase cuasicristalina [24]. Sin embargo, a pesar de lo anterior, considerar orbitales  $s$  es una buena aproximación para explicar la estructura electrónica de materiales metálicos.

El modelo de amarre fuerte tiene un enfoque mas cuantitativo en lo que se refiere a los orbitales atómicos; como los núcleos son pesados en comparación a los electrones, se fijan las posiciones de los núcleos y resolvemos la ecuación de Schrödinger para los electrones en función de la distancia entre los núcleos. Esto último se conoce como la aproximación de Born-Oppenheimer [26].

Empezaremos por resolver el modelo de amarre fuerte para una cadena en una dimensión de  $N$  átomos, para el caso de dos dimensiones, la solución es similar, sólo hay que considerar que puede haber una mayor cantidad de primeros vecinos. Empezaremos por escribir el hamiltoniano como:

$$H = K + \sum_i V_i, \quad (2.9)$$

con  $K = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$  la energía cinética del electrón y  $V_i = V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$  es la energía de interacción de Coulomb entre el electrón a posición  $\mathbf{r}$  y el núcleo en posición  $\mathbf{R}_i$ .

Asumimos que hay un único orbital en el átomo  $n$  que llamaremos  $|n\rangle$ . Asumimos también que todos los orbitales son ortonormales entre si, esto es

$$\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}. \quad (2.10)$$

Tomemos ahora una función de onda general de la forma

$$|\Psi\rangle = \sum_n \phi_n |n\rangle , \quad (2.11)$$

donde  $\phi_i$  son coeficientes complejos, y los kets  $|n\rangle$  son los orbitales atómicos. Los orbitales que hemos usado pueden ser tomados como la solución del estado base de la ecuación de Schrödinger donde sólo hay un núcleo presente:

$$\begin{aligned} (K + V_1) |1\rangle &= \epsilon_0 |1\rangle , \\ (K + V_2) |2\rangle &= \epsilon_0 |2\rangle , \\ &\vdots \\ (K + V_N) |N\rangle &= \epsilon_0 |N\rangle , \end{aligned}$$

donde  $\epsilon_0$  es la energía del estado base de un sólo átomo, es decir,  $|1\rangle$  es el orbital en el estado base de un electrón enlazado con el núcleo 1,  $|2\rangle$  es el orbital en el estado base de un electrón enlazado con el núcleo 2, y así consecutivamente hasta el átomo  $N$ . Con las definiciones anteriores, obtenemos la siguiente forma de la ecuación de Schrödinger:

$$H |n\rangle = (K + V_n) |n\rangle + \sum_{i \neq n} V_i |n\rangle ,$$

de la expresión anterior, reconocemos a  $K + V_n$  como el hamiltoniano que obtendríamos si tenemos solamente el  $n$ -ésimo núcleo y ningún otro núcleo en el sistema, así, recordando que  $|n\rangle$  son los orbitales atómicos, obtenemos entonces:

$$(K + V_n) |n\rangle = \epsilon_0 |n\rangle$$

donde  $\alpha_0$  es la energía del electrón en el núcleo  $n$  en ausencia de cualquier otro núcleo. Así podemos escribir:

$$H_{m,n} = \langle m | H |n\rangle = \epsilon_0 \delta_{m,n} + \sum_{i \neq n} \langle m | V_i |n\rangle .$$

El último término representa la interacción que hay entre el núcleo  $n$  y el núcleo  $m$ -ésimo, esto es, un electrón puede saltar al núcleo  $n$ -ésimo desde el núcleo  $m$ -ésimo. Generalmente lo anterior puede suceder si  $m$  y  $n$  son muy próximos entre si. Esta representación nos permite ver cómo está compuesto el modelo del hamiltoniano de amarre fuerte, sin embargo, a continuación pasaremos a una representación más amigable en el sentido que ahora trabajaremos con matrices, por lo que la implementación para hacer cálculos numéricos es más directa.

Pasamos a resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para este sistema. La ecuación tendrá la forma

$$H |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle . \quad (2.12)$$

Si introducimos la expresión de la función de onda en la Ecuación 2.12 obtendremos

$$\begin{aligned} H |\Psi\rangle &= E |\Psi\rangle \\ H \sum_n \phi_n |n\rangle &= E \sum_n \phi_n |n\rangle , \end{aligned}$$

si proyectamos esta ecuación sobre algún estado  $|m\rangle$  de la base, obtenemos

$$\begin{aligned} H \sum_n \phi_n |n\rangle &= E \sum_n \phi_n |n\rangle \\ \langle m| H \sum_n \phi_n |n\rangle &= E \sum_n \phi_n \langle m|n\rangle \\ \sum_n \langle m| H |n\rangle \phi_n &= E \sum_n \phi_n \langle m|n\rangle , \end{aligned}$$

recordando la condición de ortonormalidad (Ecuación 2.10), y expresando  $\langle m| H |n\rangle$  como elementos de la matriz en la coordenada  $(m, n)$ , lo escribimos de la forma  $H_{mn}$ ; así obtenemos la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned} \sum_n H_{mn} \phi_n &= E \sum_n \phi_n \delta_{mn} \\ \sum_n H_{mn} \phi_n &= E \phi_m . \end{aligned}$$

Así, la solución a nuestra ecuación de Schrödinger toma la forma de un problema de eigenvalores.  $H_{mn}$  pertenece a una matriz de  $N \times N$ , en donde  $N$  es el número de orbitales atómicos (o sitios de la red). Definimos  $H_{mm}$  como la autoenergía o energía de sitio, que físicamente representa el potencial electrostático del núcleo del átomo y representaremos como  $\alpha$  (consideramos que todos los átomos son iguales).  $H_{mn}$  cuando  $m = n \pm 1$  es la integral de salto a los vecinos mas próximos, esta cantidad la reescribiremos como  $\beta$ . Recordemos que el Hamiltoniano  $H$  es un operador hermitiano, es decir,  $H^\dagger = H$ , esto es  $H_{mn} = H_{nm}^*$ . Podemos expresar las condiciones escritas anteriormente como:

$$H_{mn} = \begin{cases} \alpha & \text{si } m = n , \\ \beta & \text{si } m = n \pm 1 , \\ 0 & \text{cualquier otro caso .} \end{cases}$$

De lo anterior descrito, hay que agregar una discusión referente a la manera en la que se enlazan los metales. Y esto surge principalmente por la distinción entre el número de valencia y el número de coordinación. Al cristalizarse los metales, el número de coordinación de los átomos metálicos viene determinada por los vecinos más próximos a este [30]. Ejemplo de lo anterior lo podemos ver en el hierro (Fe), que tiene valencias 2 y 3, sin embargo, cuando está en la estructura cúbica centrada en el cuerpo (conocido como  $\alpha$ -Fe o ferrita), el átomo de hierro presenta un número de coordinación de 8. Otro ejemplo de lo anterior es el carburo de tántalo (TaC), que tiene una estructura tipo cloruro de sodio (NaCl). El carbono tiene un número máximo de coordinación 4 y el tántalo de 5, sin embargo, en el TaC, cada átomo de Ta tiene 12 átomos de Ta como vecinos. Adicionalmente, los átomos de carbono están en los sitios intersticiales entre los átomos de Ta, lo cual funciona para enlazar a los átomos de Ta. Cada átomo de carbono, está enlazado a 6 átomos de Ta, sin embargo, sabemos que la valencia del carbono es 4, por lo cual, los enlaces de este entran en resonancia entre las seis posiciones permitidas alrededor de los átomos de carbono. Lo anterior, le da un número de coordinación al carbono de 6, y al tántalo también de 6 [30].

La resonancia se puede ver como un fenómeno en donde la distribución geométrica de estructura electrónica empieza a cambiar a distintas configuraciones con la finalidad de mantener la estructura de la molécula. Las distintas estructuras no corresponden a distintas moléculas [30].

Así, el número de veces que aparece el término de la integral de salto  $\beta$  anteriormente mencionado, es directamente proporcional al número de coordinación. Por ejemplo, en  $\alpha - \text{Fe}$ , el número de coordinación es 8, por lo tanto  $\beta$  aparecerá 8 veces en el hamiltoniano de amarre fuerte.

El valor que asignaremos a  $\beta$  no tiene una importancia significativa, ya que teniendo los resultados y comparándolos con los datos experimentales prosigue hacer las correcciones pertinentes a  $\beta$  a manera de que se ajusten a los datos experimentales, como se verá a continuación,  $\beta$  es un parámetro que sale en la relación de dispersión y cuyo ajuste a los datos experimentales se hace de manera simple [31].

### 2.2.1. Relación de dispersión

Para el caso de una cadena periódica en una dimensión con constante de red  $a$ , podemos obtener una expresión para la energía en función del vector de onda. Utilizaremos también las condiciones de frontera de Born-von Karman. Centrémonos en un sitio, por lo tanto, tendremos la siguiente expresión:

$$\beta\phi_{j-1} + \alpha\phi_j + \beta\phi_{j+1} = E\phi_j,$$

en este caso, tenemos  $\beta$  que multiplica a  $\phi_{j-1}$  y a  $\phi_{j+1}$ , es decir, se tiene a los términos de interacción de los sitios vecinos. Introducimos la relación  $x = \frac{E-\alpha}{\beta}$  a la ecuación anterior, obteniendo entonces:

$$\phi_{j-1} - x\phi_j + \phi_{j+1} = 0. \tag{2.13}$$

Proponemos una solución para la ecuación anterior, de la forma  $\phi_j = \frac{e^{ikja}}{\sqrt{N}}$ , en donde  $\sqrt{N}$  es una constante de normalización y  $N$  es el número de sitios de la cadena. Si sustituimos lo anterior en la Ecuación 2.13, obtenemos

$$\frac{e^{ikja}}{\sqrt{N}} (e^{-ika} - x + e^{ika}) = 0,$$

en seguida utilizamos la relación  $e^{-ika} + e^{ika} = 2 \cos ka$ . Reacomodamos la expresión y reingresamos  $\frac{E-\alpha}{\beta}$ , obteniendo finalmente la relación de dispersión

$$E = \alpha + 2\beta \cos ka. \tag{2.14}$$

La relación de dispersión es válida para  $k$  y  $-k$ . En la Figura 2.4 se muestra la relación de dispersión para una cadena lineal en una dimensión, que es el caso descrito en la Ecuación 2.14. Se grafican los eigenvalores  $E$  contra el valor de  $k$ , donde  $k$  viene dado por la Ecuación 2.8.

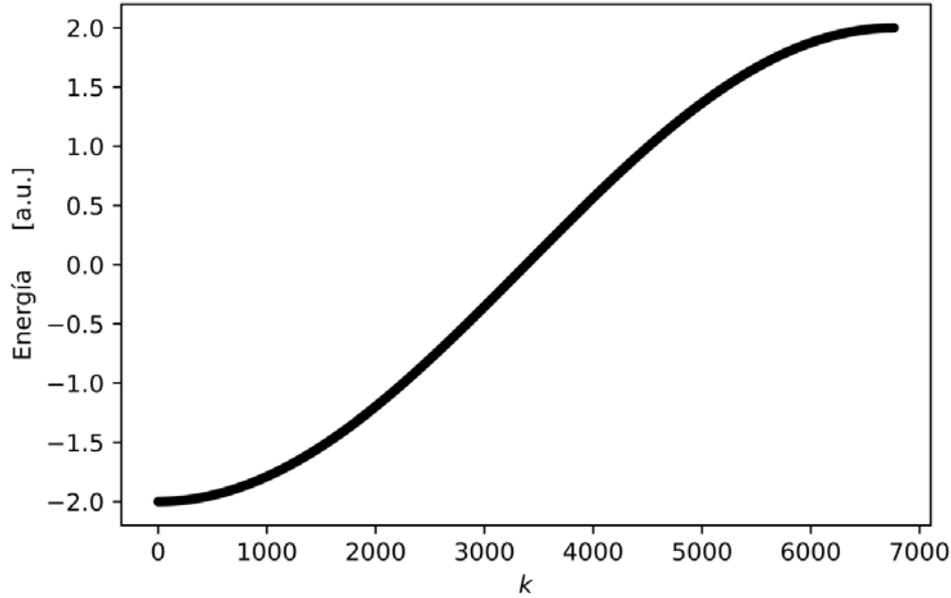


Figura 2.4: Dispersión de la energía. La energía de sitio es cero.

### 2.2.2. Teorema de Bloch

Podemos representar un estado como  $|\Psi\rangle$ , en una dimensión, queremos ver cómo evoluciona este estado con la posición, por lo tanto, tendremos la función de onda de posición  $\Psi(x) = \langle x|\Psi\rangle$ .

Incrementamos el punto en donde evaluaremos  $\Psi(\mathbf{x})$  una cantidad infinitesimal  $\delta(a)$  en la dirección  $\hat{x}$ , por lo cual, podemos escribir:

$$\Psi(x + \delta a) = \Psi(x) + \frac{d\Psi(x)}{dx} \delta a + \dots \quad (2.15)$$

Recordando que el operador de momento es  $\hat{p} = -i\frac{d}{dx}$ , obtenemos:

$$\Psi(x + \delta a) \approx (1 + i\hat{p}\delta a)\Psi(x). \quad (2.16)$$

Decimos que el operador de momento es un **generador** para la traslación del espacio. Para hacer una traslación una distancia  $a$  que es el parámetro de red, podemos trasladar a través de  $\delta a$  un gran número  $N$  de veces, tal que:

$$\begin{aligned} \Psi(x + a) &= \lim_{N \rightarrow \infty} (1 + i\hat{p}\delta a)^N \Psi(x) \\ \Psi(x + a) &= e^{i\hat{p}a} \Psi(x), \end{aligned} \quad (2.17)$$

en donde utilizamos la definición:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} (1 + i\hat{p}\delta a)^N = e^{i\hat{p}a}.$$

Félix Bloch, en 1928 propuso una solución a este tipo de sistemas, en donde se considera un sistema lo suficientemente grande en número de sitios atómicos, de tal modo que se puede considerar que todos los átomos en la red son equivalentes. Lo

anterior implica que si hacemos una traslación  $\mathbf{R}$  sobre la red, *las propiedades serán invariantes ante la traslación*. La probabilidad de encontrar un electrón alrededor de  $\mathbf{r}$  es  $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ , por lo tanto, la simetría traslacional implica que:

$$|\Psi(\mathbf{r})|^2 = |\Psi(\mathbf{r} + \mathbf{R})|^2 . \quad (2.18)$$

Por lo tanto, uno puede calcular la función de onda en la celda unitaria, aplicando las condiciones de frontera de Born-von Karman, con la certeza de que si uno se desplaza por medio de  $\mathbf{r}$ , se encontrará que la función de onda no ha cambiado o, dicho de manera formal, hay una invarianza en la traslación.

## 2.3. Densidad de estados

La densidad de estados nos describe la cantidad de estados presentes en un intervalo de energía. La importancia de lo anterior, tiene una justificación en la física estadística, la cual enuncia que el promedio de todos los estados presentes en un sistema, será el estado que se aproxime al caso termodinámico [32, 33, 34]. La densidad de estados puede ser total o local. La densidad de estados total nos dice la cantidad de estados en el sistema completo. La densidad de estados local nos dice cómo participa ese sitio en cada uno de los estados.

La densidad de estados es un concepto que se estudia mucho en el espacio recíproco. Nuestro caso de interés es el estudio de la densidad de estados en el espacio real.

### 2.3.1. Densidad de estados en el espacio $k$

Hasta ahora, hemos introducido una variable denotada por  $\mathbf{k}$  que hemos dicho que vive en el espacio recíproco. Éste espacio también recibe el nombre de espacio de momentos, y espacio de vectores de onda.  $\mathbf{k}$  está recíprocamente relacionado con el sistema en el espacio real.

### 2.3.2. Densidad de estados en el espacio real

La densidad de estados en el espacio real es crucial en el estudio de sistemas no periódicos y periódicos, ya que permite un estudio de los estados disponibles y cómo la existencia de éstos evoluciona en función de la energía sin la necesidad del espacio recíproco.

La densidad de estados en sistemas finitos se puede ver como un histograma, en donde la altura de la barra describe la cantidad de estados que se encuentran en un intervalo de energía. Para la densidad de estados total, el histograma se puede aproximar a una función continua por medio de suma de funciones delta de Dirac. Esto da la posibilidad de expresar un sistema discreto por medio de una función continua.

Consideremos un eigenestado  $|\Psi_k\rangle$  que está expresado en un conjunto base de estados atómicos ortonormales  $|i\rangle$  y con coeficientes de expansión  $\langle i|\Psi_k\rangle$ :

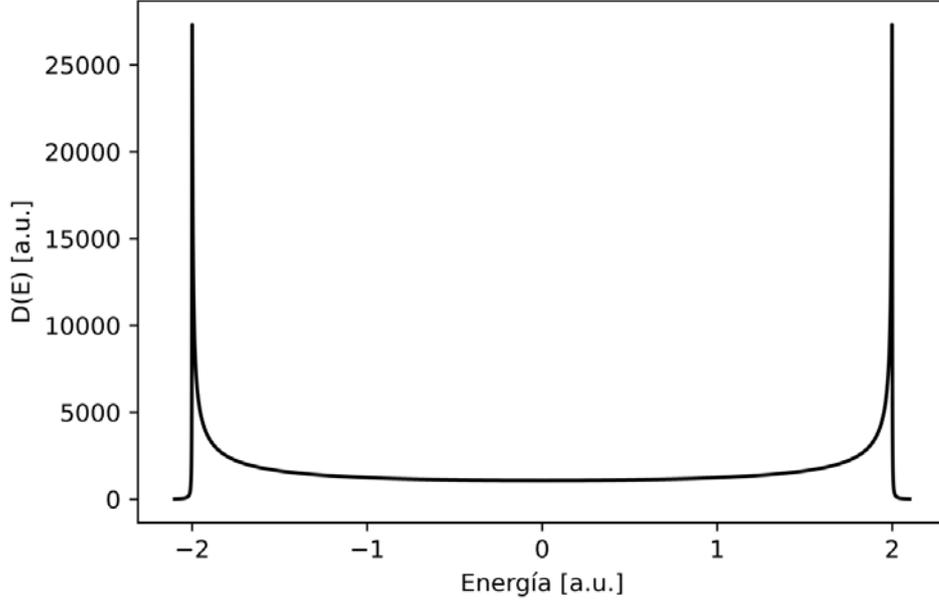


Figura 2.5: Densidad total de una red periódica en una dimensión.

$$|\Psi_k\rangle = \sum_i |i\rangle \langle i|\Psi_k\rangle . \quad (2.19)$$

Todos los átomos cuyo coeficiente de expansión  $\langle i|\Psi_k\rangle \neq 0$  contribuyen a este eigenestado. Para este eigenestado la probabilidad de encontrar un electrón en un estado base particular  $|n\rangle$  es  $|\langle n|\Psi_k\rangle|^2$ . Podemos hablar de  $|\langle n|\Psi_k\rangle|^2$  como el factor que modula la densidad de estados total,  $D(E)$ , del eigenestado  $|\Psi_k\rangle$  en el sitio  $n$ . Sea la energía de éste eigenestado  $E_k$ . Si hay mas de un eigenestado con energía  $E = E_k$  debemos sumar los factores  $|\langle n|\Psi_k\rangle|^2$  de todos ellos para obtener el factor de contribución total a energía  $E$  para la densidad de estados local para el estado de la base  $|n\rangle$ . La expresión para la densidad de estados total es:

$$D(E) = \sum_{\text{Espectro } E_k} \delta(E - E_k) . \quad (2.20)$$

La expresión para la densidad de estados local es:

$$d_n(E) = \sum_{\text{Espectro } E_k} |\langle n|\Psi_k\rangle|^2 \delta(E - E_k) . \quad (2.21)$$

La densidad de estados local vista de ésta manera nos permite describir de manera cualitativa el grado de participación del sitio en cierta energía, es decir, cómo contribuye el sitio a la función de onda en cierto estado energético. Para el caso de una cadena finita unidimensional de átomos podemos ver que su densidad total representada por la Figura 2.5 muestra que hay una gran cantidad de estados en los extremos del espectro. Con la densidad local podemos conseguir mas información, empezando por la Figura 2.6 y utilizando la Ecuación 2.21 podemos decir que el sitio superficial (que está en un extremo de la cadena unidimensional) tiene una

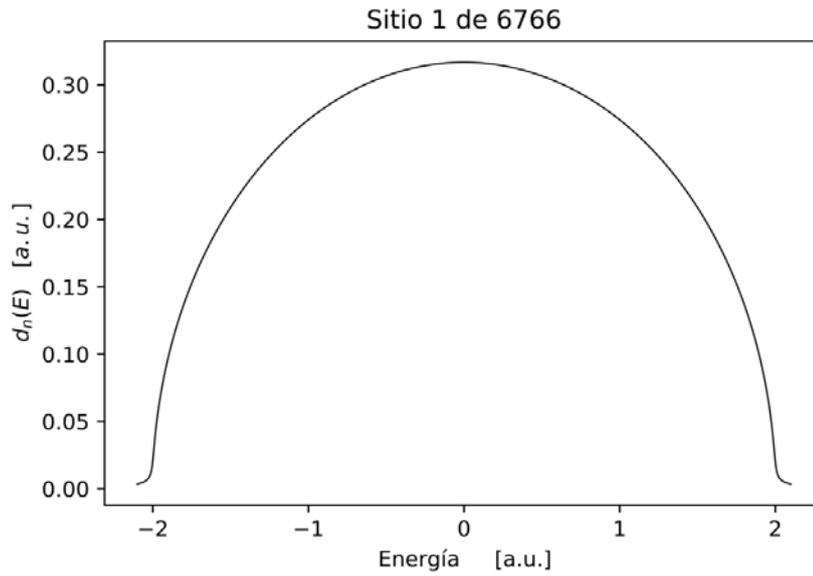


Figura 2.6: Densidad local de un sitio superficial de una cadena periódica de átomos en una dimensión.

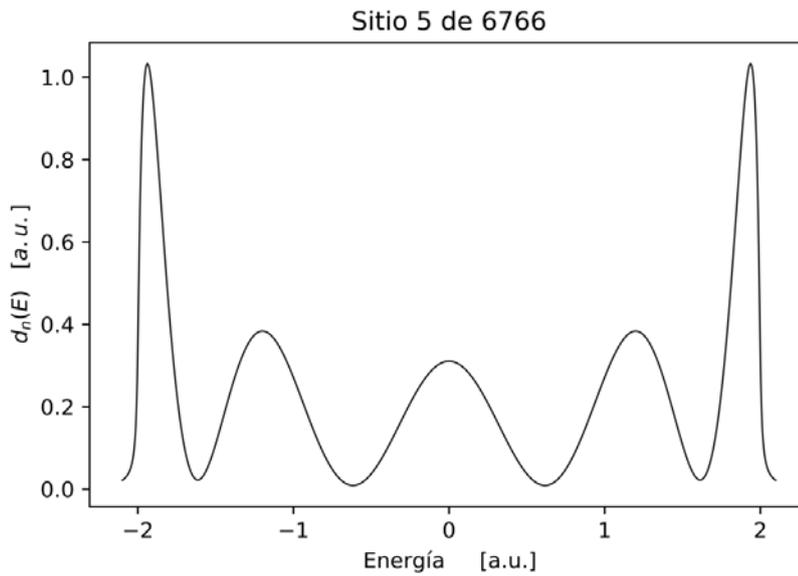


Figura 2.7: Densidad local de un sitio cerca de la superficie de una cadena periódica de átomos en una dimensión.

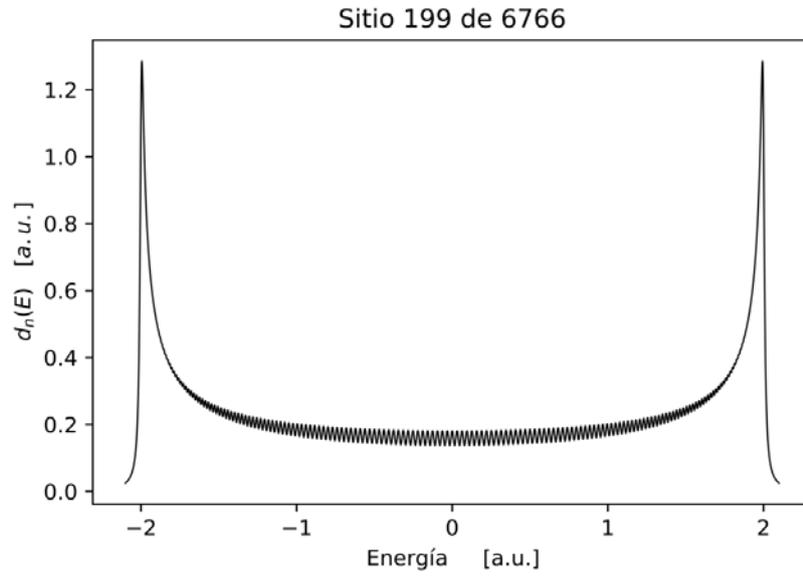


Figura 2.8: Densidad local de un sitio de una cadena periódica de átomos en una dimensión.

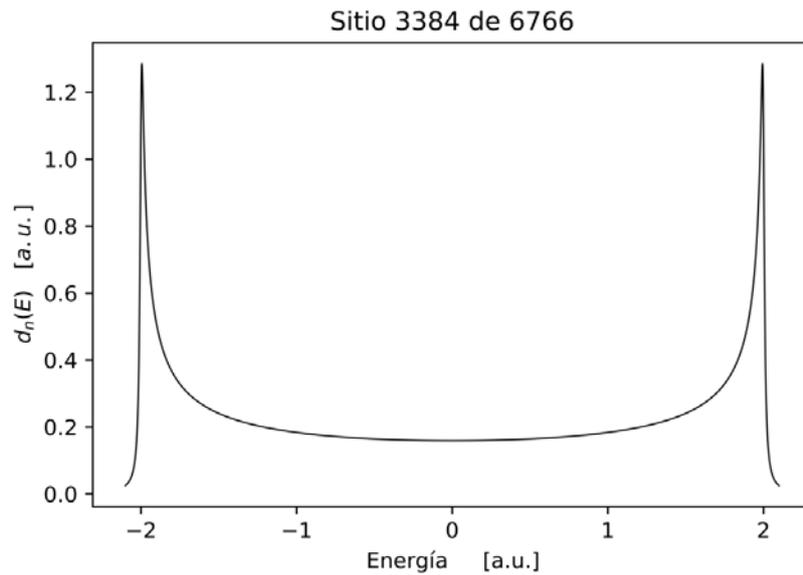


Figura 2.9: Densidad local de un sitio central de una cadena periódica de átomos en una dimensión, vemos que al acercarnos al centro, obtenemos una densidad local que es parecida a la densidad total.

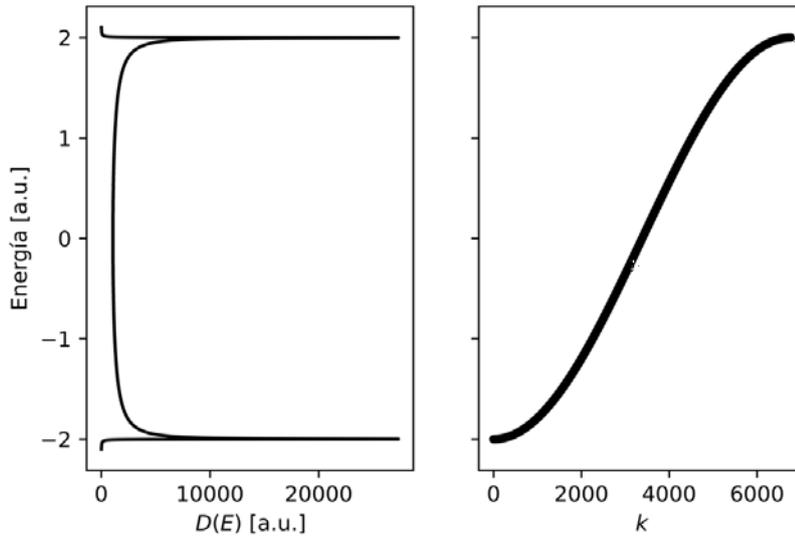


Figura 2.10: Densidad de estados y dispersión de la energía.

baja probabilidad de tener electrones en los extremos del espectro. Esto se deriva del término  $|\langle n|\Psi_k\rangle|^2$  que nos dice la probabilidad de encontrar un electrón en el sitio  $n$  correspondiente a un valor  $E_k$  del espectro, por lo que la contribución es casi nula. Lo anterior se debe a los efectos de frontera, ya que los electrones prefieren un entorno uniforme, y no uno en donde pueda presentarse un cambio de potencial, como lo es la superficie. Lo anterior lo podemos verificar en la densidad local de un sitio a 4 átomos de distancia ilustrado en la Figura 2.7. Vemos que hay una alta densidad de estados en los extremos del espectro, implicando que hay una gran probabilidad de encontrar electrones en ese sitio en el estado de mínima energía.

Al ir acercándonos poco a poco al centro de la cadena, vemos que las densidades locales se empiezan a parecer, como ejemplo están las Figuras 2.8 y 2.9. Al igual que en el párrafo anterior, éstos sitios presentan una gran densidad en los extremos del espectro, debido a la uniformidad de la cadena y a la simetría que se alcanza en el sitio central (Figura 2.9). El hecho de que en los sitios centrales haya una disminución de la densidad de estado en el centro del espectro se debe a los distintos modos de oscilación electrónicos. Como son estados excitados, el electrón empieza a ganar energía y tiene la probabilidad de presentarse en la superficie de la cadena.

Como parte final de esta sección, si comparamos la densidad de estados total y la dispersión de la energía (como se ilustra en la Figura 2.10), nos permite tener un mayor conocimiento sobre el comportamiento de nuestro espectro y la de los estados presentes en nuestro sistema.

## 2.4. Distorsión de Peierls

Consideremos una cadena en una dimensión en donde todos los sitios atómicos son iguales, la distancia interatómica es  $a$ , pero se presentan dos parámetros de sal-

to intercalados  $\beta_1$  y  $\beta_2$ , así como se muestra en la Figura 2.11. Resolveremos este sistema considerando interacciones con primeros vecinos.

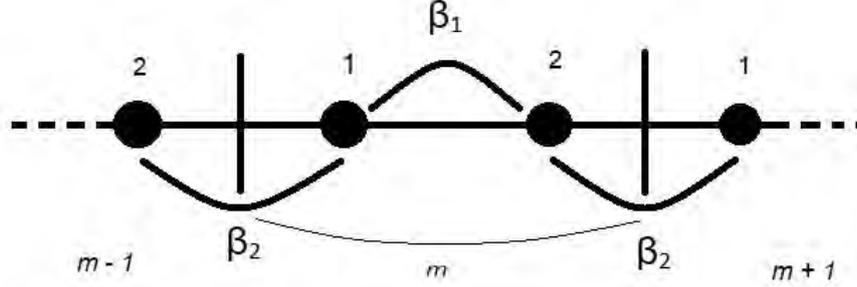


Figura 2.11: Cadena de átomos con integrales de salto intercaladas. Las barras perpendiculares indican los límites de la celda  $m$ -ésima.

Consideremos también las condiciones de frontera de Born-von Karman, es decir, estaremos tratando con un anillo. Para resolver este sistema, notamos que al movernos cada dos átomos, nos encontramos con la misma configuración espacial -en lo que se refiere a los parámetros de salto. Así podemos definir una celda unitaria. Lo anterior provoca que el periodo de la cadena se duplique, y la zona de Brillouin está en el intervalo  $[-\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a}]$ . Denotemos los estados atómicos por  $|m, 1\rangle$  y  $|m, 2\rangle$ , en donde 1 y 2 representan los sitios dentro de la celda  $m$ -ésima. Para resolver la ecuación de Schrödinger, los eigenestados tendrán, utilizando el teorema de Bloch, la siguiente forma:

$$|\Psi_k\rangle = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{ik2ma} \left( c_1^{(n)}(k) |m, 1\rangle + c_2^{(n)}(k) |m, 2\rangle \right). \quad (2.22)$$

$e^{ik2ma} c_1^{(n)}(k)$  y  $e^{ik2ma} c_2^{(n)}(k)$  son los coeficientes de los estados atómicos  $|m, 1\rangle$  y  $|m, 2\rangle$  respectivamente. Insertando la Ecuación 2.22 en la ecuación de Schrödinger  $H |\Psi_k\rangle = E_k |\Psi_k\rangle$ , se resuelve proyectando ámbos lados de la ecuación sobre  $\langle 0, 1|$  y luego sobre  $\langle 0, 2|$ . Empecemos con el primer estado atómico, es decir  $\langle 0, 1| H |\Psi_k\rangle = E_k \langle 0, 1| \Psi_k\rangle$ , resolviendo el miembro que contiene a la energía, se tiene:

$$E_k \langle 0, 1| \Psi_k\rangle = E_k c_1^{(n)}(k),$$

en donde  $m = 0$ , lo cual hace que  $e^{ik2ma} = 1$ . En el miembro izquierdo de la ecuación de Schrödinger se tiene:

$$\langle 0, 1| H |\Psi_k\rangle = \alpha c_1^{(n)}(k) + (\beta_1 + \beta_2 e^{ik2a}) c_2^{(n)}(k),$$

de las ecuaciones anteriores obtenemos:

$$\alpha c_1^{(n)}(k) + (\beta_1 + \beta_2 e^{ik2a}) c_2^{(n)}(k) = E_k c_1^{(n)}(k). \quad (2.23)$$

$\alpha$  es la energía de sitio,  $\beta_1$  es la integral de salto dentro de la celda  $m = 0$ , por lo cual éste término no está acompañado de la exponencial. El caso de  $\beta_2$  se da al correr los valores de  $m$ , en este caso,  $m = +1$ , por lo cual, va acompañado del término exponencial. En el caso  $m = -1$ , el término es cero, ya que se refiere al salto del

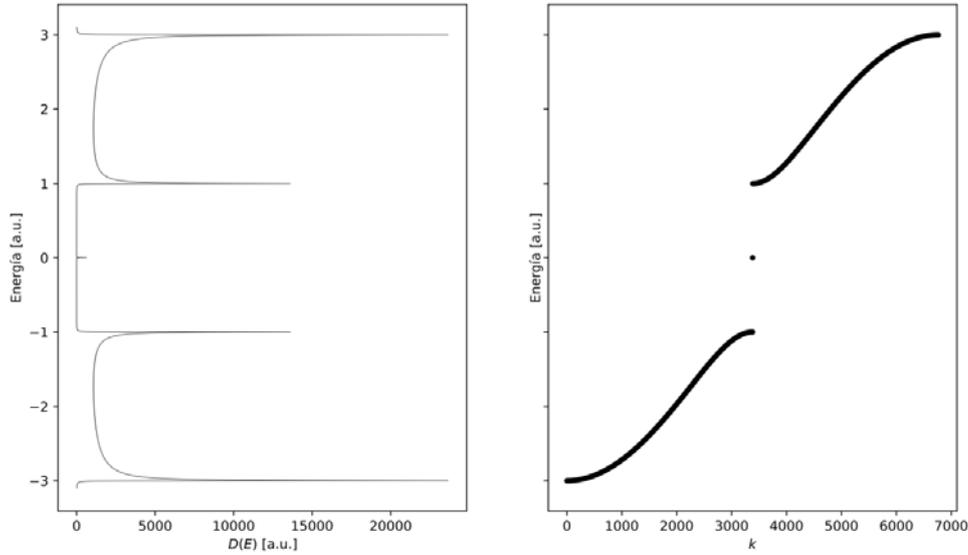


Figura 2.12: Densidad de estados total y dispersión de la energía con dos parámetros de salto.

estado  $|0, 1\rangle$  al  $|-1, 1\rangle$ , es decir, representaría la interacción de segundos vecinos, que en este caso es cero.

Ahora proyectamos  $H |\Psi_k\rangle = E_k |\Psi_k\rangle$  sobre el estado atómico  $|0, 2\rangle$ , el resultado es muy similar a la Ecuación 2.23, el cual es:

$$(\beta_2 e^{-ik2a} + \beta_1) c_1^{(n)}(k) + \alpha c_2^{(n)}(k) = E_k c_2^{(n)}(k). \quad (2.24)$$

De las Ecuaciones 2.23 y 2.24 consideramos  $\alpha = 0$ , recordemos la expresión 2.14, considerando que todos los átomos de nuestra son iguales,  $\alpha$  en este caso actúa como un factor que va a recorrer nuestro espectro, es decir, independiente del valor que tenga  $\alpha$ , la forma del espectro se va a conservar, sólo cambiará la localización energética del espectro. Ahora movemos el término  $E_k$  a la izquierda obteniendo el siguiente sistema de ecuaciones seculares:

$$\left. \begin{aligned} -E_k c_1^{(n)}(k) + (\beta_1 + \beta_2 e^{ik2a}) c_2^{(n)}(k) &= 0 \\ (\beta_2 e^{-ik2a} + \beta_1) c_1^{(n)}(k) - E_k c_2^{(n)}(k) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (2.25)$$

Calculando el determinante del sistema anterior, obtenemos:

$$E_k^2 - (\beta_1 + \beta_2 e^{ik2a}) (\beta_2 e^{-ik2a} + \beta_1) = 0.$$

Recorremos los términos con las integrales de salto al otro lado del igual y desarrollamos el producto:

$$E_k^2 = \beta_1^2 + \beta_2^2 + 2\beta_1\beta_2 \cos(2ka),$$

introducimos el término  $2\beta_1\beta_2$  lo cual nos permite reescribir una parte de la ecuación anterior como  $(\beta_1 - \beta_2)^2$  sin alterar el valor de  $E_k^2$ . Factorizamos los términos que contienen  $2\beta_1\beta_2$  obteniendo:

$$E_k^2 = (\beta_1 - \beta_2)^2 + 2\beta_1\beta_2 (\cos(2ka) + 1) .$$

Recordemos las identidades  $\cos(2\theta) = \cos^2(\theta) - \sin^2(\theta)$  y  $1 = \cos^2(\theta) + \sin^2(\theta)$ , haciendo las manipulaciones algebraicas pertinentes, encontramos que la estructura de la banda, dada por  $E_k$ , tiene la forma:

$$E_k = \pm \left( (\beta_1 - \beta_2)^2 + 4\beta_1\beta_2 \cos^2(ka) \right)^{\frac{1}{2}} . \quad (2.26)$$

En las Figura 2.12 Se ilustra la forma de la dispersión del espectro y la densidad de estados total de una cadena periódica con dos parámetros de salto.

Resolvamos ahora el caso en que nuestra celda contenga tres parámetros de salto  $\beta_1, \beta_2$  y  $\beta_3$ .  $\beta_1$  y  $\beta_2$  son los parámetros que representan los saltos del electrón dentro de la celda, y  $\beta_3$  es el parámetro que permite el salto del electrón fuera de la celda. La función de onda de Bloch para este caso tendrá la forma

$$|\Psi_k\rangle = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{i3kma} \left( c_1^{(n)}(k) |m, 1\rangle + c_2^{(n)}(k) |m, 2\rangle + c_3^{(n)}(k) |m, 3\rangle \right) . \quad (2.27)$$

Como en el caso anterior, resolvemos la ecuación de Schrödinger  $H|\Psi_k\rangle = E_k|\Psi_k\rangle$  haciendo el producto escalar con los estados  $|0, 1\rangle, |0, 2\rangle$  y  $|0, 3\rangle$ . Desarrollando los productos anteriores con sumo cuidado, considerando la energía de sitio  $\alpha = 0$  uno llega al conjunto de ecuaciones seculares siguientes:

$$\left. \begin{aligned} -E_k c_1^{(n)}(k) + \beta_1 c_2^{(n)}(k) + \beta_3 e^{-i3ka} c_3^{(n)}(k) &= 0 \\ \beta_1 c_1^{(n)}(k) - E_k c_2^{(n)}(k) + \beta_2 c_3^{(n)}(k) &= 0 \\ \beta_3 e^{i3ka} c_1^{(n)}(k) + \beta_2 c_2^{(n)}(k) - E_k c_3^{(n)}(k) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (2.28)$$

Calculando el determinante del sistema anterior, obtenemos el siguiente polinomio:

$$E_k^3 - (\beta_1^2 + \beta_2^2 + \beta_3^2) E_k - 2\beta_1\beta_2\beta_3 \cos(3ka) = 0 . \quad (2.29)$$

vemos que la ecuación anterior tiene forma de la ecuación cúbica reducida [35]:

$$x^3 + px + q = 0 , \quad (2.30)$$

en donde  $E = x$ ,  $p = -(\beta_1^2 + \beta_2^2 + \beta_3^2)$  y  $q = -2\beta_1\beta_2\beta_3 \cos(3ka)$ . Para encontrar las raíces del polinomio anterior, se utiliza la fórmula de Cardano [35]. Dada una raíz  $x_0$  de la Ecuación 2.30, ésta será dada por la suma de términos:

$$x_0 = A + B ,$$

en donde

$$A = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}}} , \quad B = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}}} .$$

Queremos conocer las raíces reales del polinomio, por lo tanto, hacemos uso del discriminante, dado por la expresión:

$$D = -4p^3 - 27q^2 = -108 \left( \frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27} \right).$$

El discriminante de la Ecuación 2.29 está dado por:

$$D = -108 \left( 2\beta_1^2\beta_2^2\beta_3^2 \cos^2(3ka) - \frac{(\beta_1^2 + \beta_2^2 + \beta_3^2)^3}{27} \right). \quad (2.31)$$

A partir de la ecuación anterior, podemos obtener 3 casos.

- Si  $D < 0$ , la Ecuación 2.29 tiene una raíz real y dos raíces imaginarias conjugadas.
- Si  $D = 0$ , todas las raíces de la ecuación 2.29 son reales, siendo dos de ellas iguales entre si.
- Si  $D > 0$ , la Ecuación 2.29 tiene tres raíces reales distintas.

En la Figura 2.13 se ilustra la densidad de estados y la dispersión de la energía. En esta figura se puede ver la existencia de brechas energéticas, que se deben a la presencia de 3 parámetros de salto distintos,  $\beta_1$ ,  $\beta_2$  y  $\beta_3$ . Al is incrementando el número de parámetros de salto, la celda unitaria empieza a hacer más grande y empiezan a surgir un mayor número de brechas energéticas.

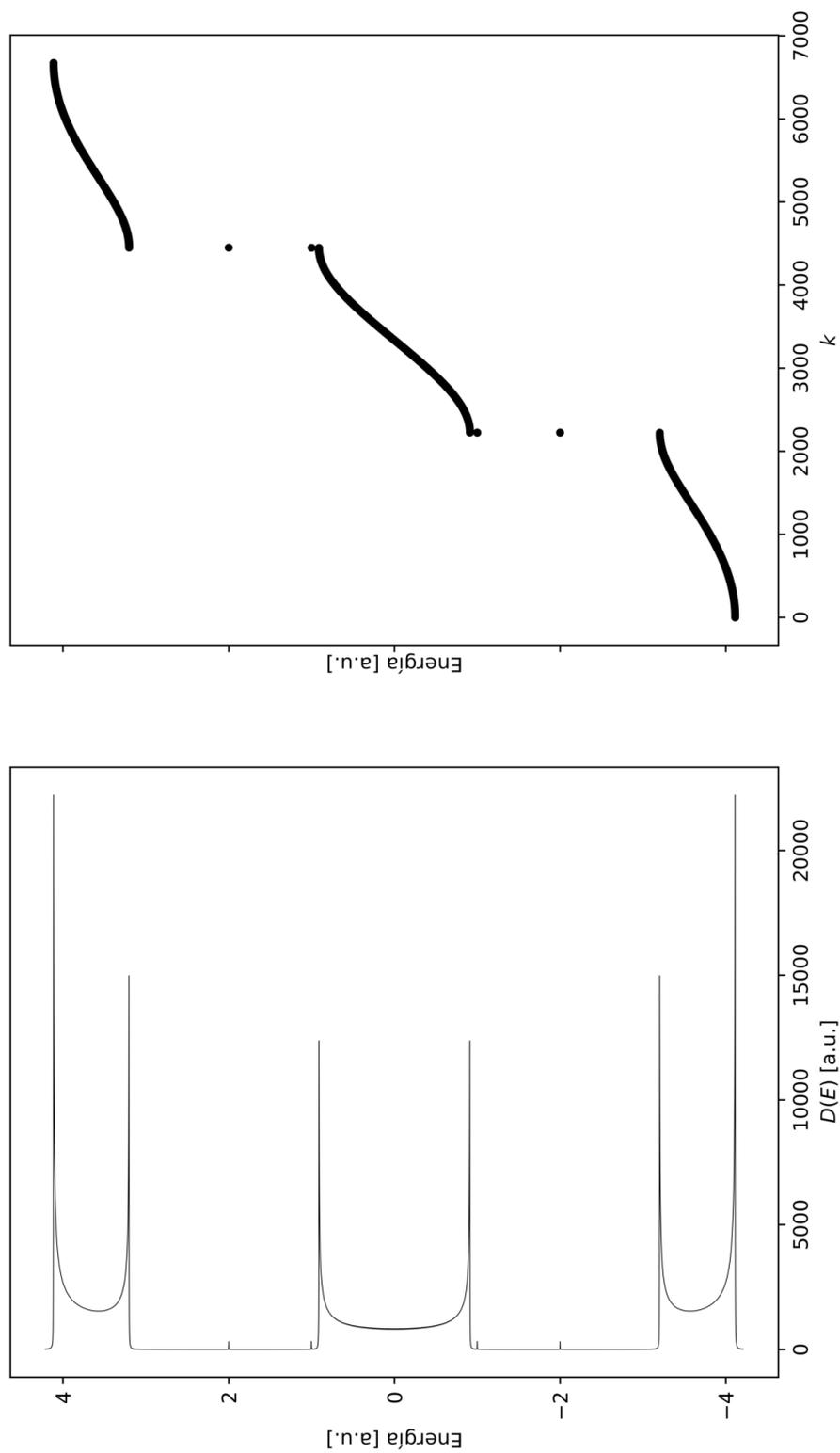


Figura 2.13: Densidad de estados total y dispersión de la energía.

# Capítulo 3

## Sistemas Cuasiperiódicos

Hasta ahora, hemos visto qué son los sistemas periódicos, el comportamiento de la función de onda electrónica en sistemas periódicos, y la densidad de estados en el espacio real; en este capítulo, veremos lo que son los sistemas cuasiperiódicos, y qué comportamiento tienen. Éste capítulo tendrá la función de unir lo visto en el capítulo anterior con los resultados. Veremos la diferencia y similitud de los sistemas cuasiperiódicos los periódicos, y concluiremos con la construcción de dos sistemas cuasiperiódicos. El principal objetivo de éste capítulo es dar una breve introducción a los sistemas cuasiperiódicos en cuestión. Este capítulo no busca ser una referencia completa a los sistemas cuasiperiódicos; en caso de que se quiera un desarrollo mas amplio respecto al tema, la lectura de los trabajos de Paul J. Steinhardt [36, 37] es sumamente recomendada, ya que se hace una descripción detallada de los sistemas cuasiperiódicos en una, dos y tres dimensiones, así como también se demuestra que las estructuras periódicas son el caso trivial de las estructuras cuasiperiódicas. Al final del capítulo se discutirá cómo están conectados la cadena de Fibonacci y la red de Penrose, lo anterior se hará así debido a que -en mi opinión personal- es necesario formar cierta intuición para poder manejar el formalismo para describir las estructuras cuasiperiódicas.

### 3.1. Crecimiento de una cadena de Fibonacci

La cadena de Fibonacci surge indirectamente a partir de la secuencia de números de Fibonacci. Esta función es recursiva y surgió a partir de la descripción de crecimiento de una población de conejos por Leonardo de Pisa (también conocido como Fibonacci) [38].

Supongamos que hay un par de conejos recién nacidos, uno macho y otro hembra, y se les pone en un ambiente controlado de manera que podamos contarlos. Ahora, supongamos que los conejos son capaces de llegar a la edad reproductiva al mes de nacidos (lo cual algunas especies pueden) y que tienen un mes de gestación (lo cual ciertas especies también pueden) [38]. Ahora supongamos que los conejos son míticos y no mueren. La última suposición es que el conejo hembra produce un nuevo par cada mes (uno macho y uno hembra estrictamente) desde el segundo mes. La pregunta que surge es ¿Cuántos conejos hembra habrá al final de  $n$  meses?

Al final del primer mes, habrá una hembra, que llegó a su edad reproductiva. Al

Mes	Hembras
0	1
1	1
2	2
3	3
4	5
5	8
6	13

Cuadro 3.1: Incremento en el número de conejos hembra en función del mes.

segundo mes, seguirá un conejo hembra, (ya que es al inicio del mes 3 que nacerá el nuevo par). Al final del tercer mes, tenemos en total dos conejos hembra, uno llegando a la edad reproductiva y otro a punto de dar a luz a otro par, al final del cuarto mes, tenemos dos conejos hembra en gestación, y otro llegando a la madurez. Siguiendo ésta lógica, obtenemos el Cuadro 3.1.

Notemos que para el mes  $n > 1$ ,  $hembras(n) = hembras(n-1) + hembras(n-2)$ . Lo anterior no es un accidente. Cada hembra que estaba viva en el mes  $n - 1$  seguirá viva en el mes  $n$ . Adicionalmente, cada hembra que estaba viva en el mes  $n - 2$  seguirá viva en el mes  $n$ . Las nuevas hembras pueden añadirse a las ya existentes en el mes  $n - 1$  para obtener el número de hembras en el mes  $n$ . El crecimiento de la población está descrito naturalmente por la función de recurrencia

$$\begin{aligned}
 hembras(0) &= 1, \\
 hembras(1) &= 1, \\
 hembras(2) &= 2, \\
 hembras(3) &= 3, \\
 hembras(4) &= 5, \\
 &\dots \\
 hembras(n) &= hembras(n - 1) + hembras(n - 2).
 \end{aligned}$$

Reacomodando el último renglón de la expresión anterior y cambiando de nombre a la función, obtenemos la función de recurrencia de Fibonacci:

$$F(n) = F(n - 1) + F(n - 2). \tag{3.1}$$

La ecuación anterior nos permite calcular los números de la sucesión de Fibonacci. Sin embargo, podemos aplicar ésta función no solo a números, pero también una cadena de caracteres compuesta por  $L$  y  $S$ . Podemos definir la función de recurrencia

de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
 F(0) &= S, \\
 F(1) &= L, \\
 F(2) &= L + S = LS, \\
 F(3) &= LS + L = LSL, \\
 F(4) &= LSL + LS = LSLLS, \\
 F(5) &= LSLLS + LSL = LSLLSLSL, \\
 &\dots \\
 F(n) &= F(n-1) + F(n-2).
 \end{aligned}$$

Vemos que el número de caracteres en la cadena de Fibonacci está dado por la sucesión numérica de Fibonacci. La razón del número de caracteres  $L$  respecto a  $S$  es un número irracional  $\tau = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$  cuando la cadena tiende a infinito. También se ve que hay tres combinaciones distintas de caracteres que se presentan dentro de la cadena, éstos son  $LL$ ,  $LS$  y  $SL$ .

### 3.2. Crecimiento de una red de Penrose

Los conceptos vistos en el capítulo anterior sobre las redes periódicas serán de gran utilidad aquí. Definiremos una teselación como el embaldosado de una superficie plana utilizando una o mas figuras geométricas. Lo anterior nos recuerda que una red cristalina es la combinación de una red y una base o motivo, por lo tanto, podemos decir que una red cristalina es un tipo de teselación periódica. Si se nos presenta una teselación, podemos verificar que es periódica trazando un contorno, trasladar ese contorno (sin rotar ni reflejar), y ver que la teselación no ha cambiado. Un ejemplo popular de esto son los mosaicos de M.C. Escher [39].

El problema de teselar el plano con figuras es algo que ha inspirado a la humanidad en la arquitectura, las artes, la naturaleza, etc. A lo largo de nuestra historia hemos visto que se puede teselar de manera periódica y no periódica. A partir de lo anterior, ha surgido la pregunta ¿Hay un conjunto mínimo de piezas que teselen no periódicamente? Hubo muchas contribuciones al respecto [28], pero fue hasta el siglo pasado en 1961 que Hao Wang propuso un conjunto de piezas que pueden teselar el espacio aperiódicamente, después de él hubo mas propuestas, hasta que Roger Penrose propuso un conjunto que no solo teselaban el espacio de manera aperiódica, si no que presentaban una simetría rotacional de orden 5 [28, 39]. La propuesta original consistía en 6 piezas, reduciéndose finalmente a dos piezas [39]. Éstas dos piezas consisten en rombos, Un rombo *ancho* con ángulos internos  $\frac{3\pi}{5}$  y  $\frac{2\pi}{5}$ , y otro rombo *delgado* con ángulos internos  $\frac{\pi}{5}$  y  $\frac{4\pi}{5}$ . Por si mismos, éstos rombos pueden teselar periódicamente, por lo que es necesario establecer unas reglas para evitar lo anterior. Siguiendo las reglas de teselación establecidas, uno puede llenar el espacio infinito sin la aparición de huecos.

Algo interesante de esta teselación, es que la proporción entre los tipos de rombos tiene un valor irracional, dado por  $\tau = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ , el mismo que en el caso de la cadena de Fibonacci. La explicación de la relación entre los dos arreglos queda fuera

de los objetivos de esta tesis, sin embargo es recomendable consultar el trabajo de Steinhardt [36]. Si la teselación empieza a convertirse en periódica, la proporción de rombos deja de cumplirse [36]. Dado un arreglo inicial de la teselación, hay dos maneras de teselar. Una llamada *Inflación* y otra *Deflación* (esta última es la utilizada en ésta tesis). Más adelante explicaremos el funcionamiento de la *deflación*, de momento, daremos algunos datos importantes sobre la teselación de Penrose.

La teselación de Penrose sigue una simetría pentagonal o rotacional de orden 5, convirtiendo a la teselación como un candidato ideal que pueda modelar los arreglos cuasiperiódicos encontrados en las aleaciones cuasicristalinas.

Como datos importantes que se han obtenido de la teselación de Penrose es el hecho que de cualquier región finita en una teselación de Penrose, está contenida dentro de otra teselación de Penrose. Esto quiere decir que si empezamos con dos arreglos iniciales de rombos, y empezamos a teselar, encontraremos que hay una región finita dentro de las dos teselaciones que es igual. A esto se le conoce formalmente como el teorema de isomorfismo local [39, 28]. Ahora consideremos una región circular de diámetro  $d$  dentro de la teselación, hay un teorema, llamado *Teorema de Conway*, y dice que la distancia del perímetro de una región circular, al perímetro de otra región nunca sobrepasará  $d\frac{\pi^3}{2}$ . Es decir, es como un caso del teorema de isomorfismo local que se aplica a regiones finitas dentro de la teselación. Cabe mencionar que lo anterior se considera como un límite superior, y no un promedio. A partir de aquí podemos formar un concepto de cuasiperiodicidad, un motivo que se repite, pero no de manera estrictamente periódica.

Ahora, continuamos con el funcionamiento de la *deflación*. Empezaremos por definir dos triángulos isóceles (véase las Figuras 3.1 y 3.2), uno que llamaremos *agudo* en donde el ángulo  $\angle ABC$  es de  $\frac{\pi}{5}$ , y otro que llamaremos *obtuso*, en donde el ángulo en  $\angle ABC$  es de  $\frac{3\pi}{5}$ .

Para formar una red de Penrose hacemos uso de reglas de subdivisión de dividirán nuestros triángulos siguiendo ciertas reglas. Éstas reglas empiezan a generar triángulos dentro de nuestro triángulo con el tamaño a nuestra conveniencia, es decir, si empezamos con un triángulo de cierto tamaño, la red se irá generando dentro de ese triángulo. A la figura sobre la cual aplicaremos las reglas de subdivisión la llamaremos *semilla*.

La red, por cada subdivisión, tendrá una distancia de arista mas corta. Sin embargo, para los fines de estudio en esta tesis, la corta distancia de las aristas no interferirá en nuestros cálculos, ya que sólo tomaremos en cuenta la interacción de un sitio con los otros.

Cada uno de los triángulos tiene reglas de subdivisión bien definidas. Lo conveniente para trabajar con las coordenadas y tipos de triángulos es por medio de tuplas. Las tuplas consistiran en 4 espacios. El primer espacio tendrá un valor binario, 0 para el triángulo *agudo* y 1 para el triángulo *obtuso*; los tres espacios siguientes, contienen las coordenadas del triángulo.

Si empezamos subdividiendo un triángulo *agudo*  $\Delta ABC$ , obtenemos dos triángulos, uno *agudo*  $\Delta CBP$  y otro *obtuso*  $\Delta PCA$  como se vé en la Figura 3.1.

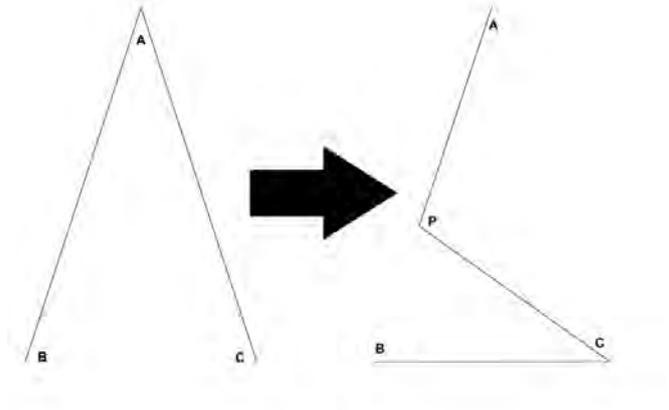


Figura 3.1: Subdivisión del triángulo *agudo*. El triángulo original  $\Delta ABC$  se subdivide en dos triángulos,  $\Delta CPB$  y  $\Delta PCA$ .

Simbólicamente, esto se puede representar como:

$$[(0, A, B, C)] \longrightarrow [(0, C, P, B), (1, P, C, A)].$$

en donde  $P$  está dada por la ecuación:

$$P = A + \frac{B - A}{\tau},$$

$\tau$  siendo la razón dorada, que tiene un valor de  $\tau = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ . Para el caso del triángulo obtuso, éste se subdivide en tres triángulos, uno agudo y dos obtusos (Figura 3.2). Simbólicamente ésto se representa mediante:

$$[(1, A, B, C)] \longrightarrow [(1, R, C, A), (1, Q, R, B), (0, R, Q, A)],$$

en donde el punto  $Q$  está dado por:

$$Q = B + \frac{A - B}{\tau},$$

y  $R$  por:

$$R = B + \frac{C - B}{\tau}.$$

Así, aplicando repetidamente éstas reglas de subdivisión a una semilla, se genera una teselación de Penrose. La velocidad de crecimiento de éstas redes es en función de la semilla. Podemos ver el Cuadro 3.2 y ver el crecimiento de varrias configuraciones iniciales y cómo éstas crecen con cada subdivisión.

Si juntamos dos triángulos *agudos* uniendo sus bases, obtenemos un rombo *delgado*. Si juntamos las bases de dos triángulos *obtusos*, obtenemos un rombo *ancho*.

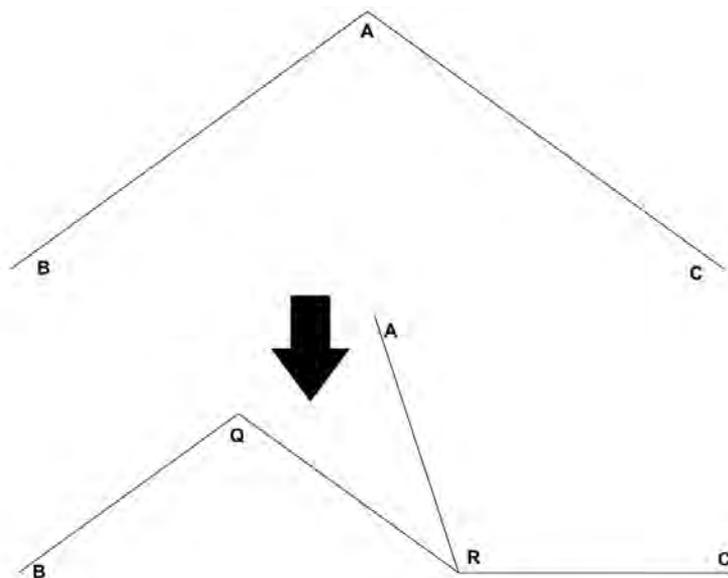
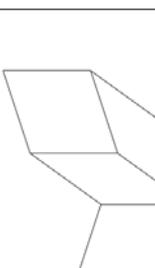
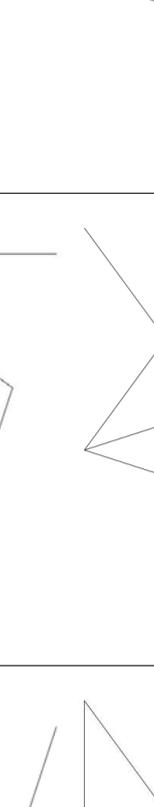
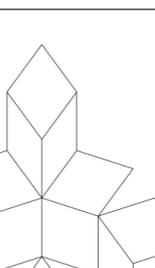
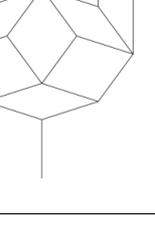
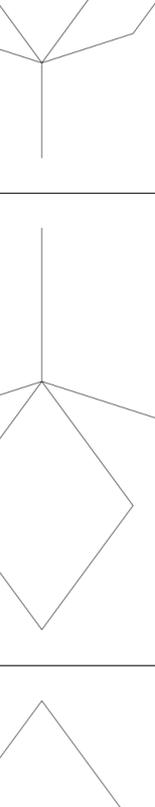


Figura 3.2: Subdivisión del triángulo *obtuso*, en donde el triángulo original  $\triangle ABC$  se subdivide en tres triángulos,  $\triangle QBR$ ,  $\triangle RAQ$  y  $\triangle RAC$ .

En las Figura 3.3 se muestra un rombo delgado después de aplicar 9 subdivisiones que tiene 4311 sitios, y en la Figura 3.4 se muestra un rombo ancho al que se le aplicaron 9 subdivisiones que consiste en 6895 sitios. La diferencia en el número de sitios se debe a la configuración inicial a la que se le aplicó la deflación.

Rombos	Una Subdivisión	Dos Subdivisiones	Tres Subdivisiones
			
			
			
			
			

Cuadro 3.2: Aplicación de deflación sobre los triángulos y rombos que conforman una red de Penrose.

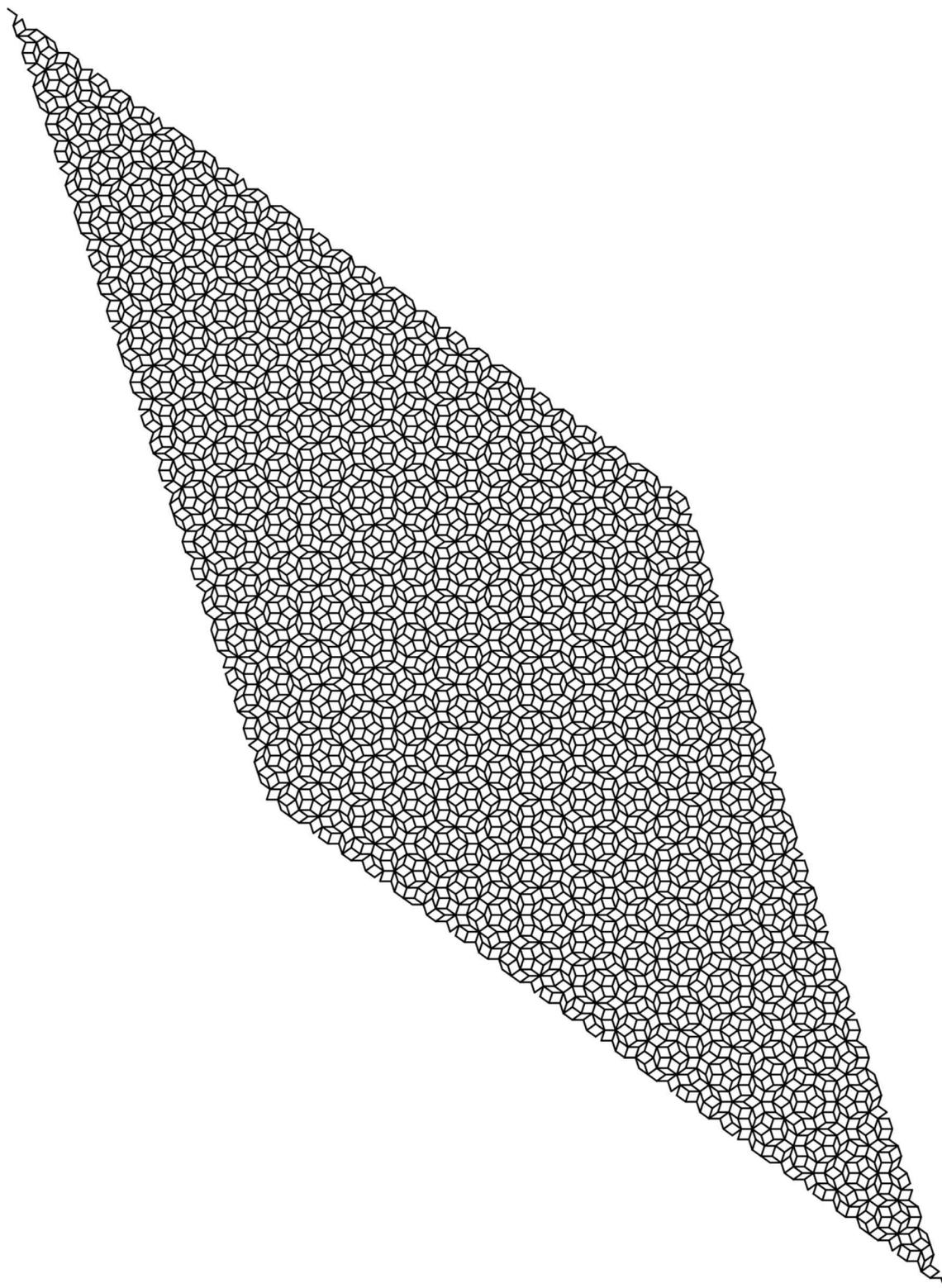


Figura 3.3: Rombo delgado aplicado 9 subdivisiones.

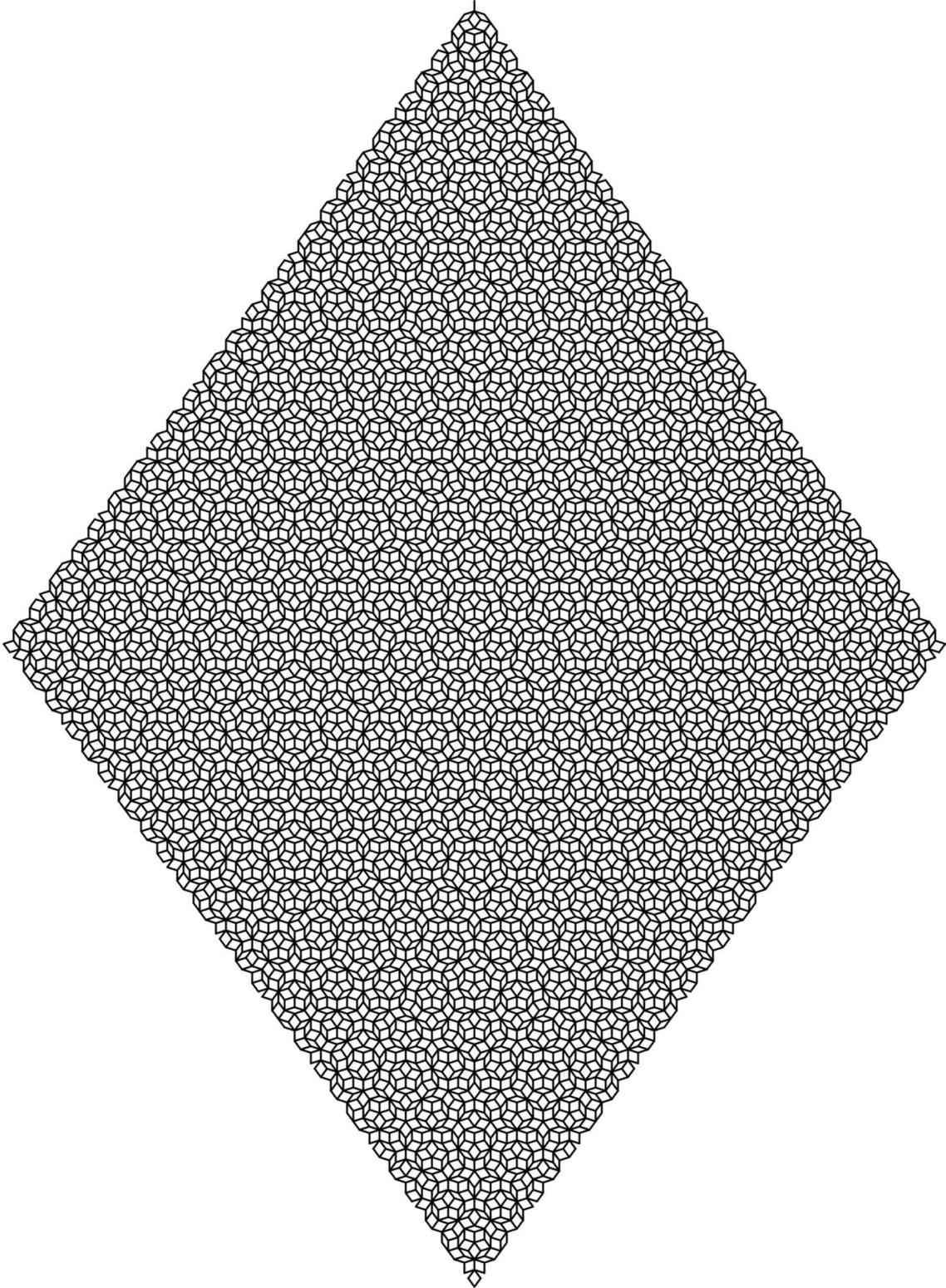


Figura 3.4: Rombo grueso aplicando 9 subdivisiones.

Al aplicar las reglas de subdivisión sobre alguna semilla, veremos que aparecen ciertos arreglos con distintos números de coordinación. Cada uno de éstos sitios ha sido identificado y nombrado [39]. Los nombres de los sitios se pueden ver en el Cuadro 3.3.

Los sitios **S** y **S<sub>5</sub>** consisten en 5 rombos gruesos. Debido a esto, éstos sitios son muy parecidos y a simple vista no hay diferencia, sin embargo, para identificarlos, hay que fijarse en los rombos delgados que rodean a los gruesos, como se ve en el Cuadro 3.3. Como último comentario de los sitios **S** y **S<sub>5</sub>** es que ambos son la subdivisión del otro, es decir, si aplicamos la deflación a un sitio **S<sub>5</sub>**, obtendremos un arreglo que contiene en el centro al sitio **S**, y si empezamos con un arreglo que tiene un sitio **S**, al aplicar la subdivisión, se tendrá un arreglo con un sitio **S<sub>5</sub>** en el centro.

Los nombres de los sitios **S<sub>3</sub>** y **S<sub>4</sub>** refieren a los rombos gruesos que tienen de manera que el eje mayor de los rombos apunta al centro del sitio. Éstos sitios tienen número de coordinación 7 y 6 respectivamente.

El sitio **J** es de interés ya que tiene número de coordinación 5, al igual que los sitios **S** y **S<sub>5</sub>** pero con una distribución geométrica distinta.

Los sitios **D** y **Q** tiene mismo número de coordinación pero se forman de manera distinta. El sitio **D** está conformado por dos rombos gruesos y uno delgado, mientras que el sitio **Q** está formado por dos rombos delgados y uno grueso. Finalmente, tenemos el sitio **K**, que consiste en tres rombos gruesos y uno delgado, y tiene número de coordinación 4.

En la Figura 3.5 se grafica la función de densidad de los vértices pertenecientes a un arreglo que se inició con un sitio **S** al cual se le aplicaron subdivisiones hasta llegar a 1211 sitios, el sitio central ahora es **S<sub>5</sub>**. Se puede apreciar que en la red se forman contornos redondos o soles que a veces se superponen. Ésto significa que en estas regiones existen sitios **K**, **Q** y **J** superpuestos formando un decágono regular en como perímetro.

Finalmente, cabe resaltar que este no es el único método para construir teselaciones de Penrose, uno de los trabajos de Steinhardt[40] reporta una nueva metodología adicional a las ya propuestas por el mismo [36, 37]. Existe la creencia que para construir teselaciones de Penrose extensas hay que saber la forma de la misma a una distancia grande, es decir, saber la forma de la red en una gran región para seguir agregando piezas, sin embargo, se ha reportado que hay una manera más facil en donde sólo se tiene que tener conocimiento de la configuración local [40]. La adición consiste únicamente en si el conjunto de piezas que se va a generar pertenece al conjunto de sitios que hemos descrito, es decir, si el conjunto de piezas que se va a unir formará a alguno de los sitios **S**, **S<sub>5</sub>**, **S<sub>4</sub>**, **S<sub>3</sub>**, **K**, **Q**, **J** o **D**. Éste método se puede extender para explicar la manera en la que se forman los materiales cuasicristalinos perfectos con interacciones atómicas de corto alcance.

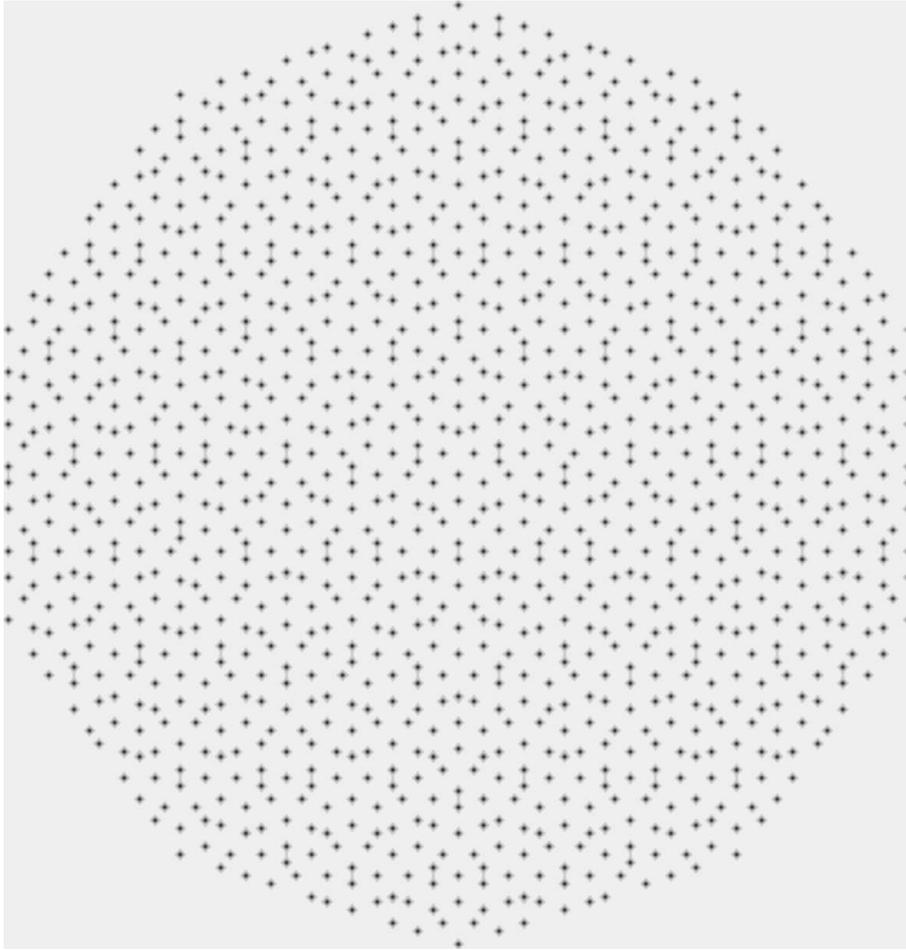


Figura 3.5: Función de densidad de una red de Penrose de 1211 sitios.

### 3.3. Relación entre la cadena de Fibonacci y la red de Penrose

Para concluir este capítulo, daremos unas definiciones básicas sobre los cuasicristales y explicaremos de manera breve el *Método Dual Generalizado* (GDM por sus siglas en inglés). Lo anterior servirá como una explicación de porqué es importante primero comprender el comportamiento de la cadena de Fibonacci, y como a partir de ella, podemos llegar a estudiar la red de Penrose.

#### 3.3.1. Definiciones básicas

Un cuasicristal ideal es construido por la repetición infinita en el espacio de dos o más unidades estructurales distintas (atómicas o moleculares), llamadas *celdas unitarias*. El empaquetado de esta celda unitaria en una red tendrá simetría traslacional cuasiperiódica de largo alcance y simetría rotacional de largo alcance. Por celda unitaria cuasicristalina nos referimos a un motivo, pero a diferencia de los cristales, el motivo no se repite periódicamente. Como recomendación para la lectura de esta sección, es conveniente tener la Figura 3.4 como referencia.

Las propiedades formales de los cuasicristales son las siguientes:

- a.- *Simetría rotacional*: Los ángulos de enlace entre átomos o clusters vecinos (medidos respecto a algún conjunto fijo de ejes) tiene correlaciones de largo alcance y están orientados, en promedio, a lo largo de un conjunto *estrella* de ejes que definen la simetría rotacional. Lo anterior significa que los ángulos de enlace definirán los ejes en los que se orientarán los átomos o clusters. Como ejemplo de lo anterior, podemos ver la Figura 3.4, si nos paramos sobre el sitio **S** central y observamos en las 5 direcciones que apuntan sus aristas centrales, veremos que todas las aristas que conforman a la red están orientados en alguna de estas cinco direcciones, por lo que podemos concluir que se presenta una simetría pentagonal, que es prohibida en la cristalografía.
- b.- *Separación mínima entre sitios atómicos*: Existen distancias  $r$  y  $R$  (ambas mayores que cero) tal que la separación entre cualesquiera dos sitios próximos entre si, está entre  $r$  y  $R$ . Lo anterior también lo podemos ver en la red de Penrose, ya que uno puede identificar dos distancias, la distancia compuesta por el arista que une dos puntos, y la distancia correspondiente al eje menor de un rombo agudo. Lo anterior nos permite distinguir a un cuasicristal de un conjunto de sitios que se obtuvo al superponer dos redes periódicas con una diferencia de periodo irracional, como ejemplo de lo anterior, está el trabajo de Cao y colaboradores [41], en donde encontraron propiedades superconductoras al superponer dos películas de grafeno y girar una respecto a otra un ángulo mágico que es un número irracional.
- c.- *Simetría traslacional cuasiperiódica*: La función de densidad de un cuasicristal es cuasiperiódica. Una función es cuasiperiódica si se puede expresar como una suma de funciones periódicas, en donde algunos de los periodos es irracional. Por ejemplo, la función:

$$f(x) = \cos(x) + \cos(\tau x)$$

es cuasiperiódica. La cuasiperiodicidad es caracterizada por conjuntos especiales de números irracionales. El conjunto de números irracionales está sujeto por la simetría rotacional siempre y cuando esa simetría no sea cristalográfica.

De lo anterior, ya tenemos una manera de clasificar alguna estructura como cuasicristalina o no. Ahora pasaremos al método dual generalizado. Este método nos permitirá ver mas a fondo la relación que hay entre la red de Fibonacci y de Penrose, por lo que tenemos que establecer algunas definiciones antes:

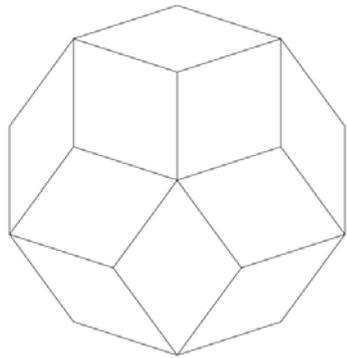
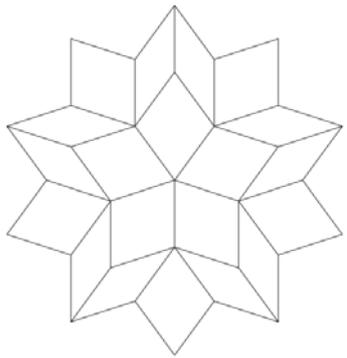
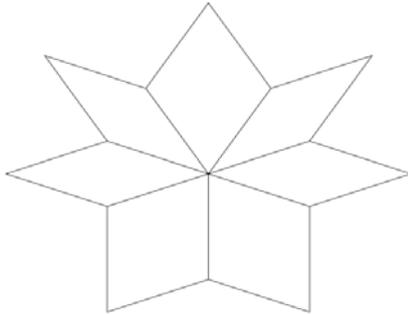
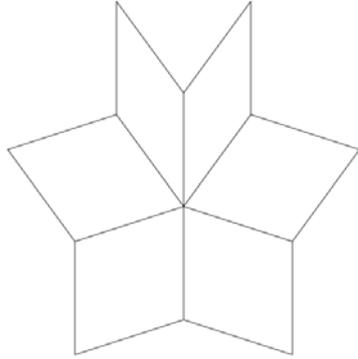
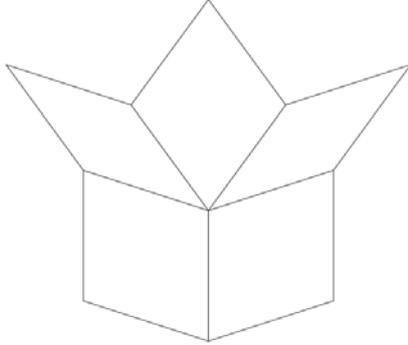
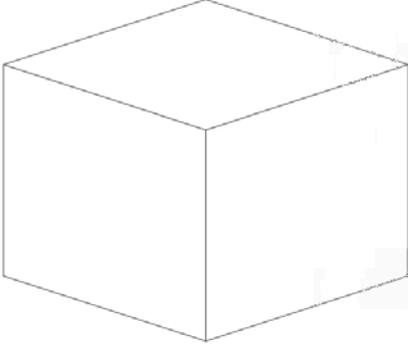
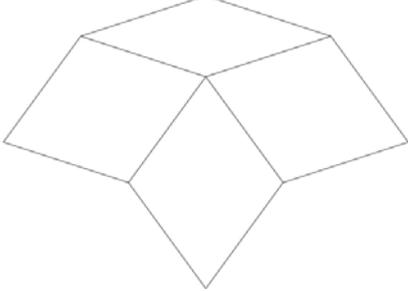
- 1.- Una *reja* es un conjunto infinito y contable de curvas que no se intersectan en dos dimensiones. Una *N-reja* es un conjunto de  $N$  rejas tal que cada curva de la reja  $i$ -ésima intersecta cada curva en la  $j$ -ésima reja en exactamente un punto para cada  $i \neq j$ . Asociado con cada reja hay un vector  $\mathbf{e}_i$ , que indica la dirección de las curvas de la reja.
- 2.- Una *cuasired* es un conjunto de puntos que viven en las intersecciones de una clase especial de *N-rejas* que tienen las siguientes tres propiedades: (a) simetría traslacional cuasiperiódica, (b) simetría rotacional, y (c) un número finito de celdas de Wigner-Seitz.

Finalmente, para obtener la posición de alguna curva de una reja (que puede conformar una  $N$ -reja) será dado por la fórmula:

$$x_N = N + \alpha + \frac{1}{\tau} \left\lfloor \frac{N}{\tau} + \beta \right\rfloor, \quad (3.2)$$

en donde  $\tau$  es la razón dorada;  $\alpha$  y  $\beta$  son número reales arbitrario y donde  $\lfloor \cdot \rfloor$  representa la función piso. El primer término ( $N + \alpha$ ) corresponde al espaciado periódico entre las líneas de una reja con espaciado igual a 1; el segundo término incrementa por  $\tau^{-1}$  cada vez que  $N$  incrementa en  $\tau$ . Como  $\tau$  y 1 son relativamente irracionales, la Ecuación 3.2 describe el espaciado cuasiperiódico de líneas. El espaciado entre cualesquiera dos líneas consecutivas  $x_N - x_{N-1}$  es  $L$  o  $S$ , donde  $L/S = 1 + \frac{1}{\tau}$ , y la secuencia de  $L$  y  $S$  es una cadena de Fibonacci.

Finalmente, hemos llegado a la conexión entre la cadena de Fibonacci y la red de Penrose. Podemos concluir que la red de Penrose es la versión pentadimensional de una cadena de Fibonacci, pero las características de eso se sabrán en otra ocasión.

	
Sitio <b>S</b>	Sitio <b>S<sub>5</sub></b>
	
Sitio <b>S<sub>3</sub></b>	Sitio <b>S<sub>4</sub></b>
	
Sitio <b>J</b>	Sitio <b>D</b>
	
Sitio <b>Q</b>	Sitio <b>K</b>

Cuadro 3.3: Sitios de una red de Penrose.

# Capítulo 4

## Resultados y discusión

Las aleaciones reportadas en las compilaciones hechas por Stadnik y Janot [42, 43] muestran composiciones en donde la valencia de los elementos que conforman la aleación no es mayor a siete, sin embargo, el fenómeno de resonancia hace que podamos meter tantos terminos de integral de salto  $\beta$  como sean necesarios. Esto principalmente se utiliza en el caso de la teselación de Penrose; para el caso de la cadena de Fibonacci, la resonancia tiene que ser selectiva sin modificar la configuración de las integrales de salto en la cadena de Fibonacci. Como habíamos visto en el capítulo anterior, la cadena de Fibonacci está compuesta por 3 combinaciones de caracteres,  $LL$ ,  $LS$  y  $SL$ . En el caso de  $LL$  se puede dar el fenómeno de resonancia sin cambiar la configuración de la cadena, pero si la resonancia actúa sobre  $LS$  obtendremos  $SL$ , lo cual va a modificar la configuración de la cadena. Para ambos casos se considera un hamiltoniano de amarre fuerte con interacción a primeros vecinos de la forma:

$$\hat{H} = \sum_i |i\rangle\langle i| \alpha_i + \sum_{\langle i,j \rangle} \beta_{ij} |i\rangle\langle j| . \quad (4.1)$$

En este caso, consideraremos la energía de sitio  $\alpha = 0$  para todos los sitios lo cual hará que el espectro esté centrado en  $E = 0$ . Así, nuestro hamiltoniano es uno de enlaces, en donde el hamiltoniano sólo tendrá las interacciones entre sitios atómicos. Se calculó la función de onda a distintas energías y la densidad de estados local de los sitios del centro de la red así como la densidad de estados total de cada red.

Se dice que una función de onda es crítica cuando ésta presenta un comportamiento localizado y extendido. Esto significa que la amplitud de la función de onda en un sitio puede ser muy grande, pero en el sitio vecino, ésta amplitud puede disminuir a cero, y en el sitio siguiente a este, la amplitud recobra su valor del sitio en el que se empezó. En un estado extendido, la amplitud de la función de onda no varía tan rápido, mientras que en un estado localizado, la amplitud sigue un comportamiento como una función delta de Dirac. Es decir, la amplitud es cero en todos los sitios, excepto en el lugar donde está centrada la función de onda.

Finalmente, debido a la no periodicidad de éstos sistemas, no es posible aplicar las condiciones de frontera de Born-von Karman. Ya que implicaría la existencia de una celda cuasiperiódica que se repite preiódicamente, por lo que al final se reduciría al caso visto en las distorsiones de Peierls.

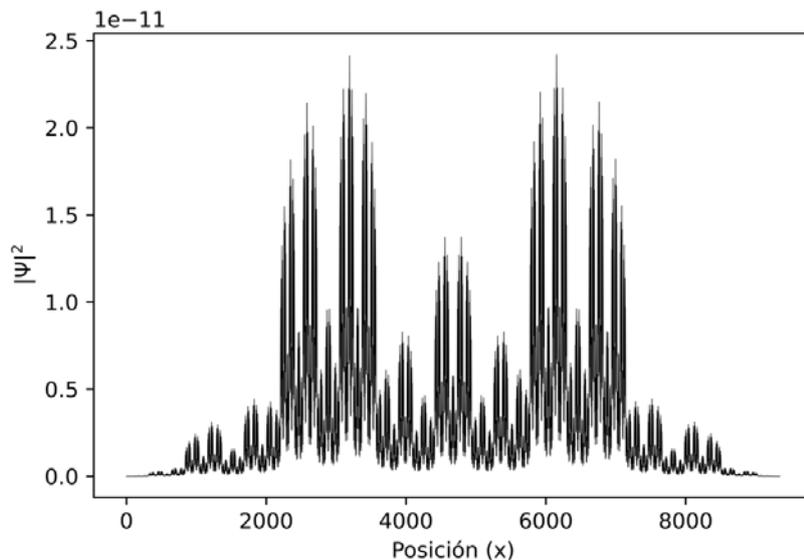


Figura 4.1: Amplitud de la función de onda del estado base de una cadena de Fibonacci en una dimensión.

## 4.1. Función de onda y densidad de estados en la cadena de Fibonacci

En el caso de la cadena de Fibonacci hay que notar que podemos construir una celda unitaria en donde consideramos distintas generaciones de la cadena de Fibonacci y las repetimos de manera que obtenemos una cadena periódica. Notamos que si consideramos una celda unitaria hasta la generación 3 (que consiste en un arreglo *LSL*), obtenemos una cadena periódica correspondiente al primer caso descrito en la distorsión de Peierls. Sin embargo, en la cuarta generación (*LSLLS*), obtenemos ya una celda unitaria que, si se repite, ya no produce un arreglo periódico. Al hacer más grande la celda unitaria, se hace más presente el comportamiento autosimilar y cuasiperiódico de la cadena de Fibonacci. La autosimilaridad se puede definir como la repetición a distintas escalas de un motivo. A este comportamiento también se le conoce como comportamiento fractal.

Para hacer los cálculos de la función de onda, las condiciones de frontera consideradas fueron de un sistema finito sin periodicidad. Esto nos permite estudiar el comportamiento en una celda unitaria, y de los resultados obtenidos, hay que inferirlos para un sistema infinito. Debido a la construcción de una cadena de Fibonacci, considerar las condiciones de Born-von Karman no agrega inconsistencias a la cadena de Fibonacci. Siempre una cadena de Fibonacci empieza con la secuencia *LSLLS...* y puede terminar con un carácter *L* o *S*, recordando la Ecuación 3.1, vemos que es permitido hacer esto. Debido a lo anterior, es que surge un comportamiento autosimilar que se ilustra en la Figura 4.1. En esa cadena, se consideraron integrales de salto  $\beta_L = -1$  &  $\beta_S = -2$ .

Observamos que en las Figuras 4.2 y 4.3 obtenemos los distintos modos de osila-

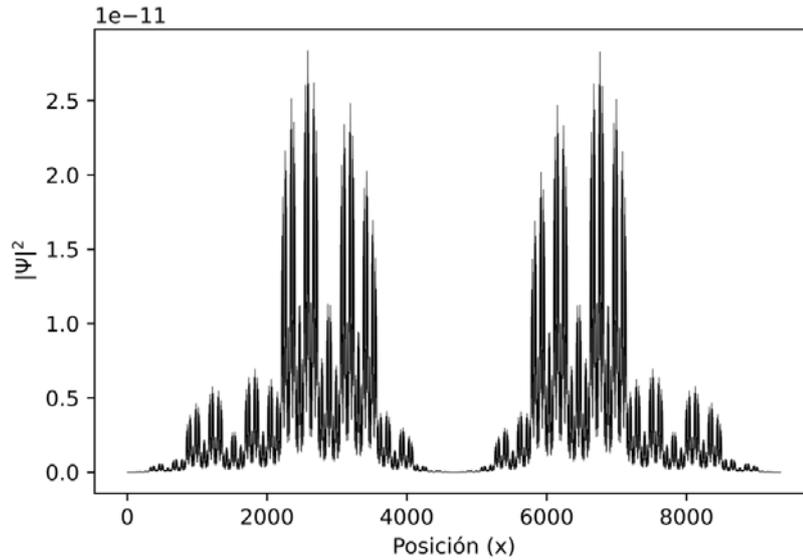


Figura 4.2: Función de onda del primer excitado de una cadena de Fibonacci en una dimensión.

ción de la onda electrónica. Vemos que se conserva el comportamiento autosimilar y crítico; estos estados son muy parecidos a estados que tienen correlación electrónica, reportados por Navarro en [44]. De las Figuras 4.2 y 4.3 hay que recordar el problema de un electrón encerrado en un pozo de potencial infinito, recordando cómo oscila el electrón al aumentar el número cuántico  $n$ , al cambiar  $n$  cambia también el modo normal de oscilación del electrón. También existe otro tipo de funciones de onda, las que son cercanas a  $E = 0$ , representadas por las Figuras 4.4 y 4.5; y el estado perteneciente a  $E = 0$  (reportadas por Belin-Ferré [45]) que se ilustra en la Figura 4.6. Belin-Ferré calcularon éstas funciones de onda exclusivamente para  $E = 0$ .

En lo que respecta a la densidad de estados total podemos explicar su comportamiento a partir de las distorsiones de Peierls. Vimos que al tener dos parámetros de salto distintos, obtenemos una brecha energética en la dispersión de la energía y que se ilustra como un desdoblamiento en la densidad de estados. Es decir, obtenemos dos densidades de estado pertenecientes a cada una de los parámetros de salto  $\beta_i$ , dicho de otra forma, es como si estuviéramos trabajando con dos redes. En la densidad de estados total de una cadena de Fibonacci, obtenemos una densidad de estados con distintas brechas en distintos sitios, y siguiendo un comportamiento autosimilar. Las brechas surgen de la existencia de los parámetros de salto  $\beta_L$  y  $\beta_S$ . Debido al comportamiento de la cadena de Fibonacci, la densidad total es autosimilar, lo cual implica que si nos acercamos al intervalo energético  $-0,6$  a  $0,6$  en la Figura 4.7, vemos que el comportamiento es igual al comportamiento de todo el espectro.

A partir de que la cadena unitaria se va haciendo mas grande, los estados se van concentrando en ciertos intervalos de energía mas pequeños. Se puede decir que

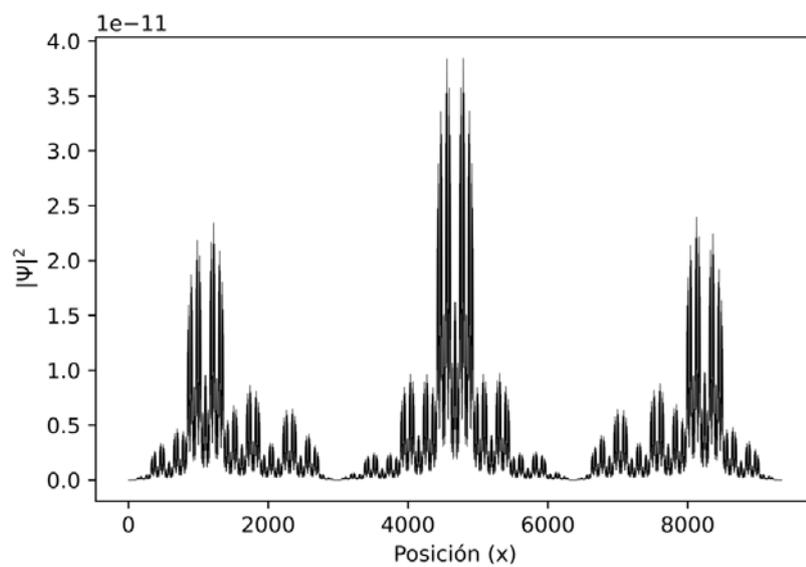


Figura 4.3: Función de onda del segundo estado excitado de una cadena de Fibonacci en una dimensión.

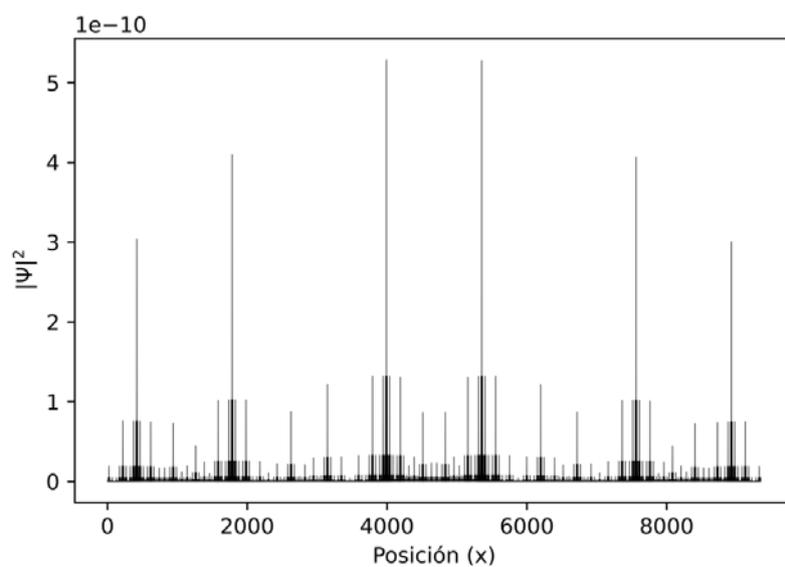


Figura 4.4: Función de onda del estado excitado 3380 de una cadena de Fibonacci en una dimensión.

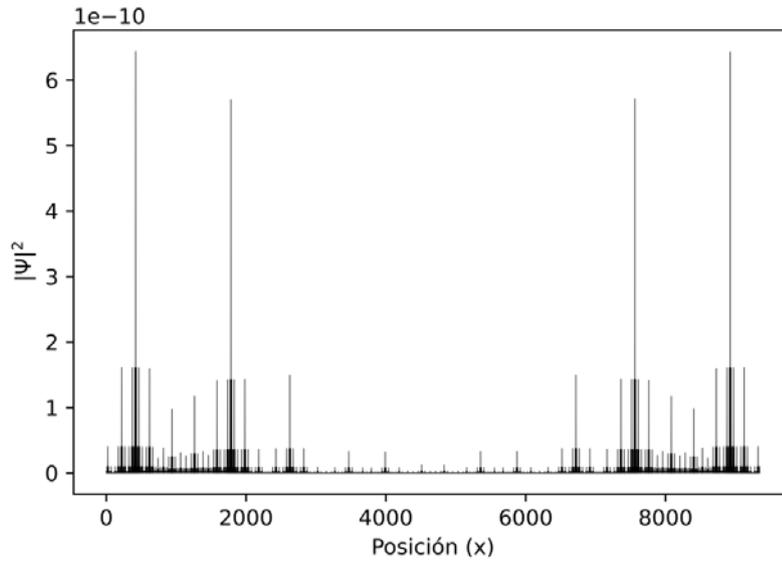


Figura 4.5: Función de onda del estado excitado 3381 de una cadena de Fibonacci en una dimensión.

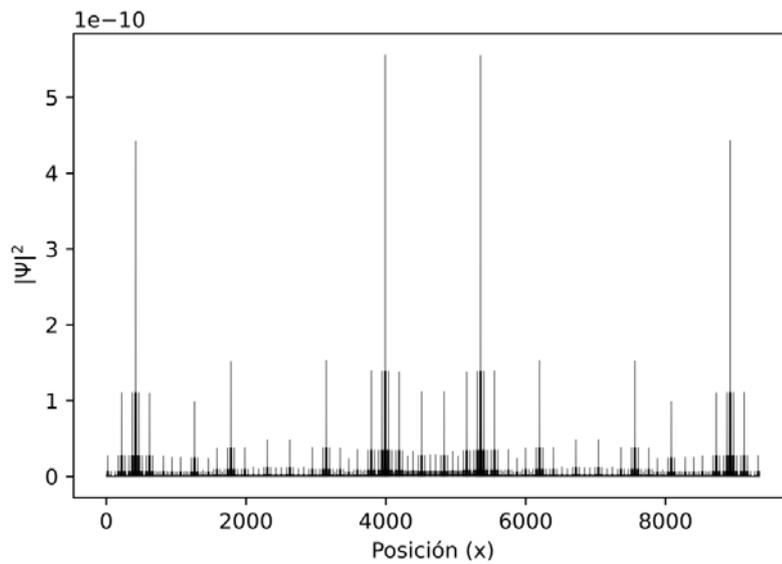


Figura 4.6: Función de onda del estado excitado 3382 de una cadena de Fibonacci en una dimensión, es el estado correspondiente a  $E = 0$ .

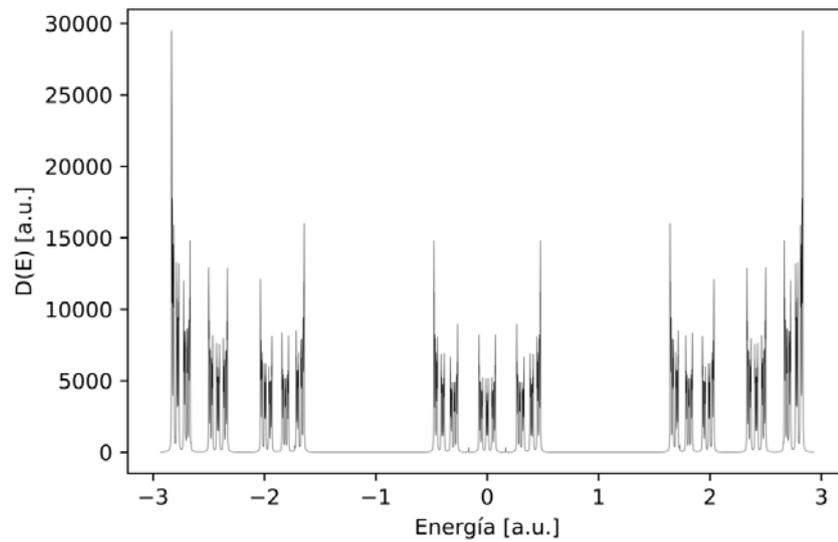


Figura 4.7: Densidad de estados total de una cadena de Fibonacci.

la densidad de estados de una cadena de Fibonacci se puede ver como densidades totales de una cadena periódica con dos parámetros de salto, que se va reproduciendo y concentrando en distintos intervalos de energía, todo bajo un comportamiento autosimilar.

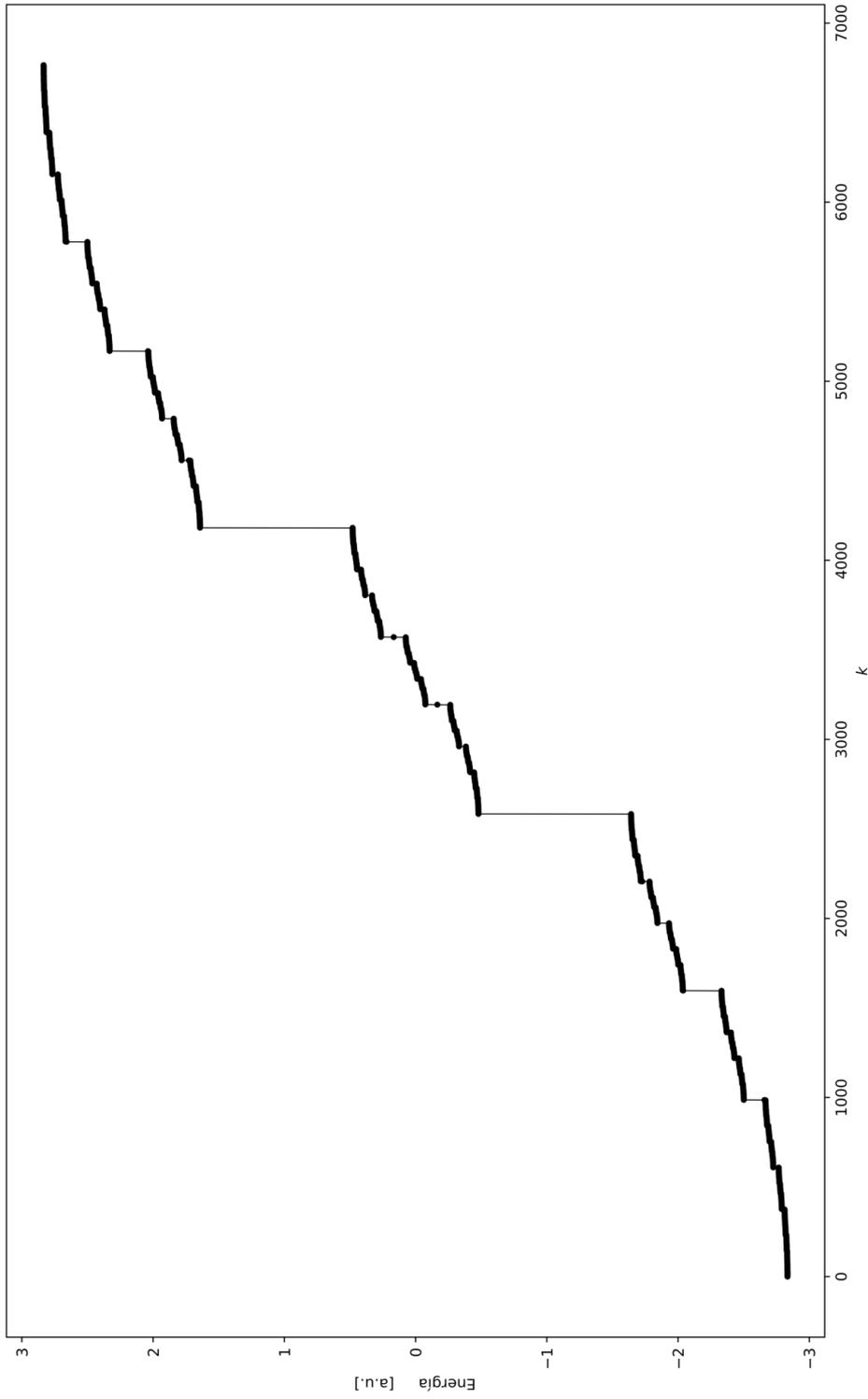


Figura 4.8: Dispersión de la energía en una cadena de Fibonacci con un comportamiento autosimilar

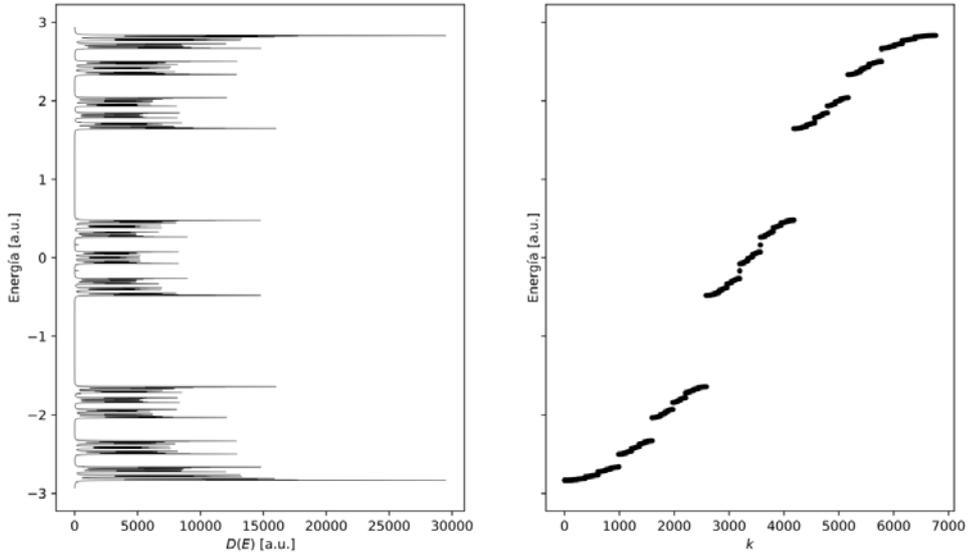


Figura 4.9: Densidad de estado Total y dispersión de la energía.

En lo que se refiere a la dispersión de energía en una cadena de Fibonacci que se ve en la Figura 4.8, se pueden ver una serie de líneas verticales, que si lo comparamos con la Figura 4.7, corresponden a las brechas de energía existentes en la cadena, lo anterior se puede ver con mayor precisión en la Figura 4.9. Se ha reportado que la forma de la dispersión de la energía es un conjunto de Cantor [46, 47] el cual se puede generar removiendo iterativamente un tercio de longitud es decir,  $l_0/3$ , en el medio de un segmento inicial dado de longitud  $l_0$ . Este proceso se repite iterativamente sobre los dos nuevos segmentos obtenidos de longitud  $l_1$ . Si queremos calcular la longitud de los segmentos obtenidos, que en nuestro caso se representarían como la amplitud de las brechas de energía, vemos que en la  $n$ -ésima iteración tenemos la longitud  $l_n = \left(\frac{2}{3}\right)^n$  [48].

Como conclusión, vemos que la densidad de probabilidad (el cuadrado de la función de onda), tiene un comportamiento autosimilar y crítico. La autosimilaridad permite que se puedan hacer cálculos de renormalización [46], en donde uno puede estudiar su modelo a una escala macroscópica. El estado crítico presente es de gran importancia ya que muestra que la función de onda en la cadena de Fibonacci está en función del arreglo atómico, el cual es ordenado pero no periódico.

## 4.2. Función de onda y densidad de estados en la red de Penrose

En la Ecuación (4.1) consideramos que hay interacción ( $\beta_{ij} \neq 0$ ) si dos sitios están conectados por una arista, en este caso, como todas las aristas de la red tienen la misma longitud entonces  $\beta_{ij} = -1$  y consideramos  $\alpha_i = 0$ , así, el Hamiltoniano pasa a ser de la forma:

$$\hat{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} |i\rangle\langle j| . \quad (4.2)$$

Se calculan los eigenvalores de la energía y eigenvectores de manera numérica. Se calcula la densidad de estados local y total de las redes utilizando las ecuaciones (2.21) y (2.20) respectivamente. A continuación, se presentan las densidades totales de cada una de las redes generadas a partir de los sitios presentes en la red de Penrose. También se presenta su densidad total y la densidad local del sitio central. Lo anterior se hizo con la finalidad de ver si había un cambio en la función de onda en correlación con la geometría de la frontera.

Se obtuvieron las densidades totales y locales para los rombos grueso (Figura 4.10 y Figura 4.11) y delgado (Figura 4.14 y Figura 4.15), así como para las semillas pertenecientes a los sitios **D** (Figura 4.18 y Figura 4.19), **K** (Figura 4.22 y Figura 4.23), **Q** (Figura 4.26 y Figura 4.27), **J** (Figura 4.30 y Figura 4.31) y **S** (Figura 4.34 y Figura 4.35). En lo referente a la densidad total, se ve que no hay un cambio significativo, debido a que son muy similares entre si y todas son similares a la densidad total reportada por Barrio y Wang [49], en donde se ve la presencia de una pseudo brecha cerca de  $E = 0$ . Esta pseudo brecha representa que hay una disminución en el número de estados cercano al vecindario energético  $E = 0$ , pero junto en donde la energía es cero, hay un gran número de estados degenerados, cercano al 9% del número total de estados, porcentaje reportado por Naumis [21].

Se consideraron condiciones de frontera abiertas, lo cual permite que el electrón pueda salir a la superficie sin el inconveniente de que este rebote y genere ondas reflejadas [31]. Se calculó la función de onda el estado  $E = 0$  y en el estado base para los rombos grueso (Figura 4.12 y Figura 4.13) y delgado (Figura 4.16 y Figura 4.17), así como para el sitio **D** (Figura 4.20 y Figura 4.21), el sitio **K** (Figura 4.24 y Figura 4.25), el sitio **Q** (Figura 4.28 y Figura 4.29), el sitio **J** (Figura 4.32 y Figura 4.33) y el sitio **S** (Figura 4.36 y Figura 4.37). El estado base se presenta un comportamiento crítico, en donde la amplitud de la función de onda es mayor en sitios con un mayor número de coordinación. Es decir, los sitios preferidos para encontrar un electrón es en **S<sub>4</sub>** y **S<sub>3</sub>**, que presentan número de coordinación 6 y 7 respectivamente. Se puede decir que el sitio **S<sub>5</sub>** es el segundo favorito para la estancia del electrón, sin embargo el sitio **S** no corre con la misma suerte ya que su amplitud es la menor en lo que a los sitios de alto número de coordinación se refiere. Lo anterior se puede ver en la amplitud de la función de onda en el rombo delgado (Figura 4.16), como éstas están restringidas por las condiciones de frontera, la mayor amplitud será en el centro de la red, sin embargo, el centro del rombo delgado es un sitio **S**, y se ve que la amplitud de la función de onda no es tan grande como de los sitios **S<sub>3</sub>** que lo rodean. También se vé que la forma de las condiciones de frontera no afecta el comportamiento de la función de onda.

Haciendo un análisis no muy minucioso, es fácil ver que se cumple el teorema de isomorfismo local y el teorema de Conway en la forma de la función de onda de los estados pertenecientes a  $E = 0$  y al estado base. Para el teorema de Conway, podemos establecer una región de diámetro  $d$ , y encontraremos otra región igual a no mas de  $\frac{\tau^3}{2}d \approx 2,12d$ . En el caso del teorema de isomorfismo local, al teselar desde

distintas semillas, se obtuvo la misma forma de la amplitud de la función de onda en  $E = 0$  y el estado base.

La función de onda en el estado  $E = 0$  se ha reportado por Barrio y Wang [49], en donde se identificaron los sitios con una amplitud de la función de onda igual a cero. En esta tesis, graficamos la amplitud de la función de onda en todos los sitios de nuestras redes. Después de una observación a la función de onda, se ve que esta se puede dividir en distintas secciones pequeñas (análogamente a la teselación de Penrose), que se presentan en las Figuras 4.38, 4.40, 4.39 y 4.41, a estas las llamaremos *piezas* y son prototipos.

Se conjetura que con las 4 piezas descritas, se puede formar la función de onda del estado  $E = 0$  para el caso infinito, siempre y cuando se sigan las reglas descritas por Steinhardt [40] para la adición de rombos de una red de Penrose. Se ve también que estas piezas tiene cinco orientaciones, las respectivas a una simetría rotacional de orden cinco. En las fronteras no se encuentran estas piezas, por lo que también se conjetura que las piezas encontradas sólo se encuentran lejos de la frontera. En la observación de la función de onda para  $E = 0$  se ve que estas piezas tienen ciertas partes que se pueden superponer, lo cual es análogo a lo reportado por Steinhardt[50]. En el artículo mencionado, se propone un prototipo de pieza que al superponerse en distintas partes, se puede hacer una teselación de Penrose.

En las gráficas del cuadrado de la función de onda electrónica que se presentan a continuación, los tonos azules representan una probabilidad cercana a cero; los tonos blancos son probailidades intermedias, y los tonos rojos son los lugares que tienen mayor probabilidad. Como comentario final, en la frontera de las redes se presentan algunos sitios con tonos de un rojo intenso, lo anterior se debe a efectos de las condiciones de frontera.

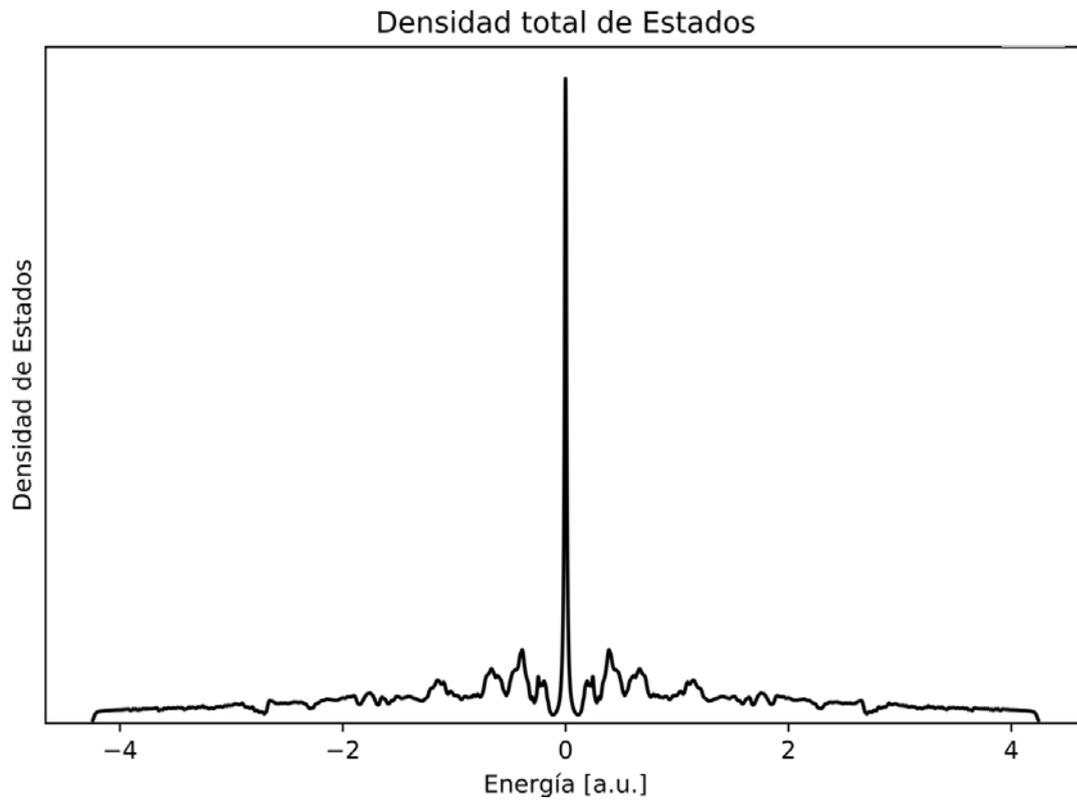


Figura 4.10: Densidad de estados total de un rombo grueso.

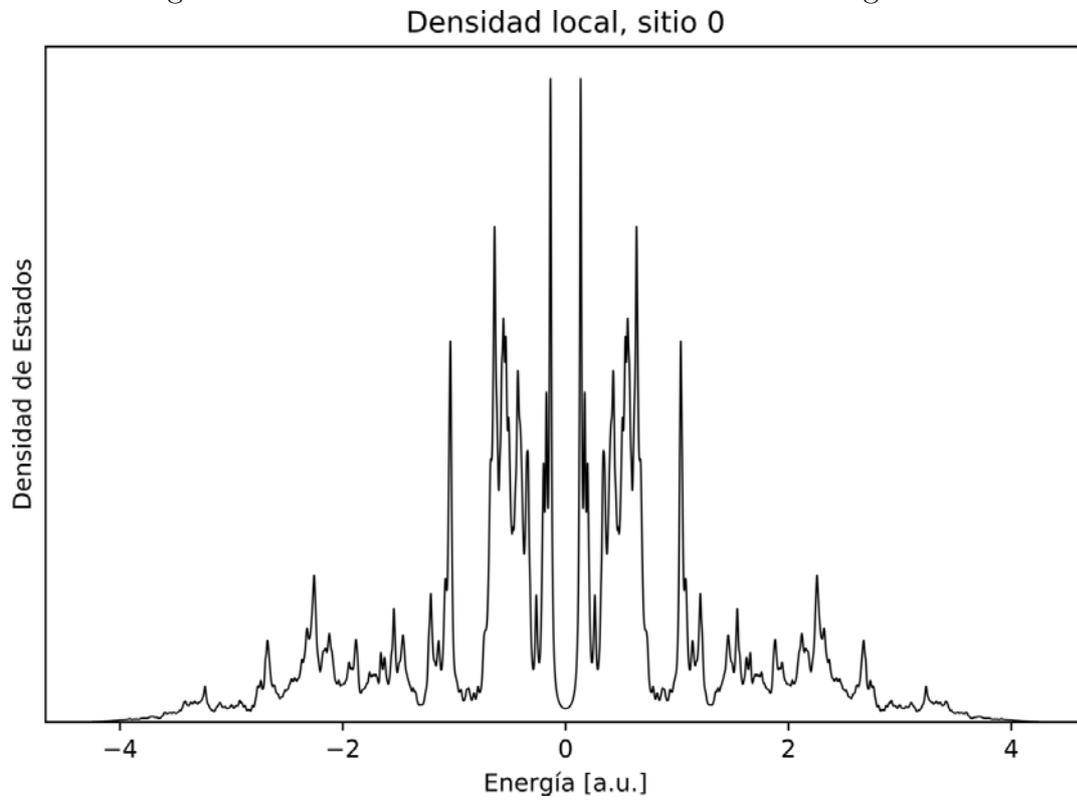


Figura 4.11: Densidad de estados local de un sitio central en un rombo grueso.

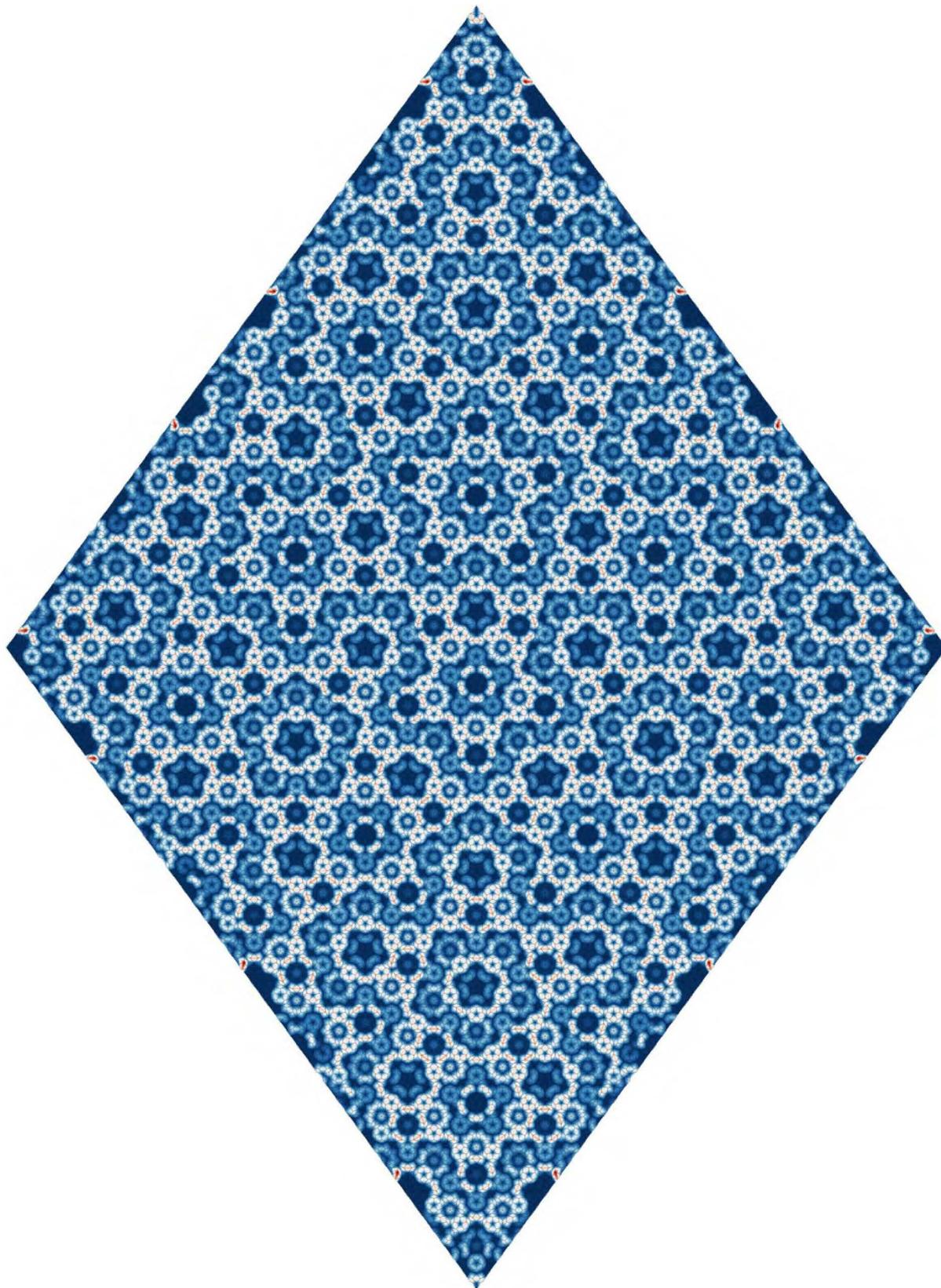


Figura 4.12: Función de onda del estado  $E = 0$  de un rombo grueso.

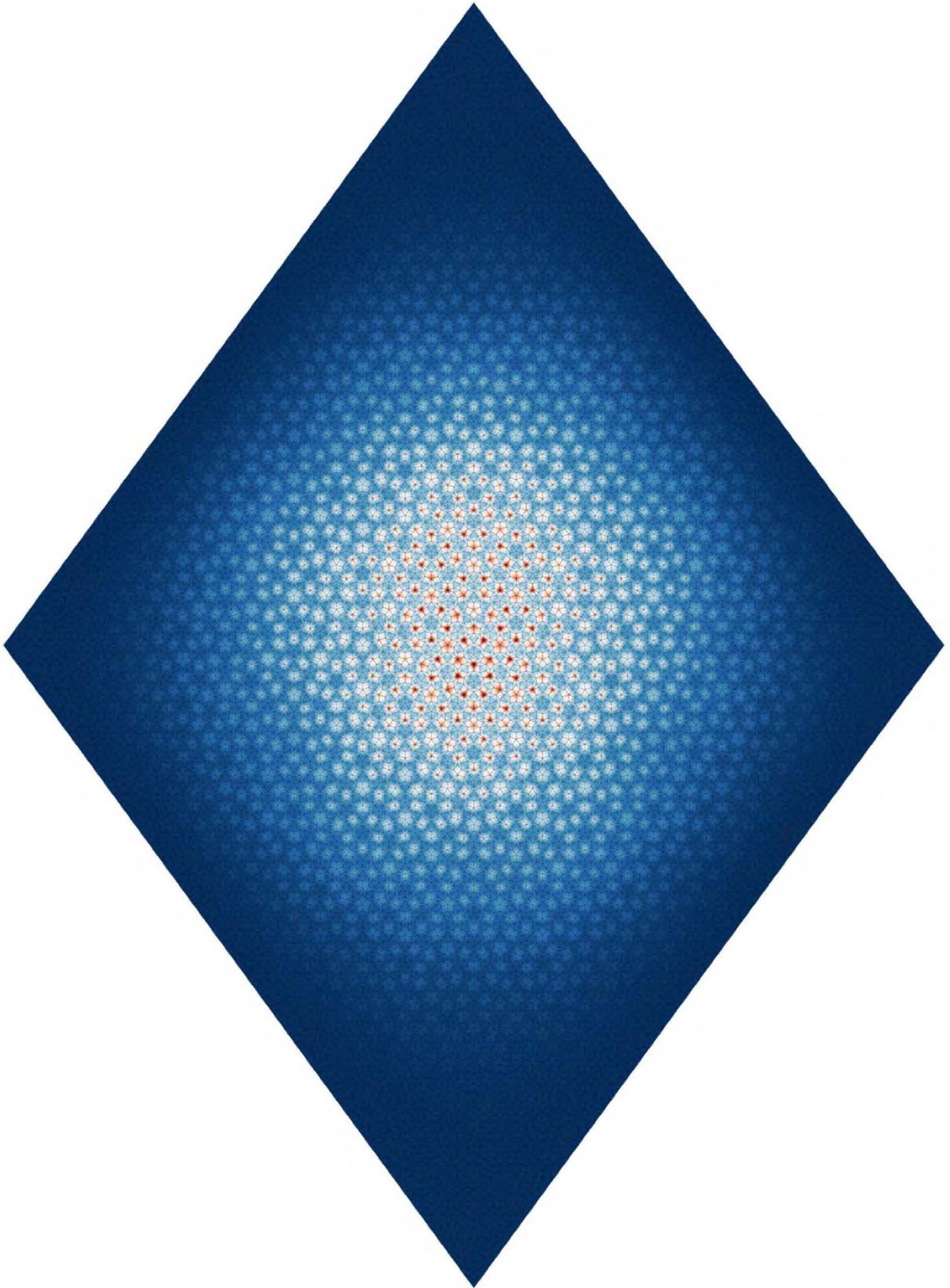


Figura 4.13: Función de onda del estado base de un rombo grueso.

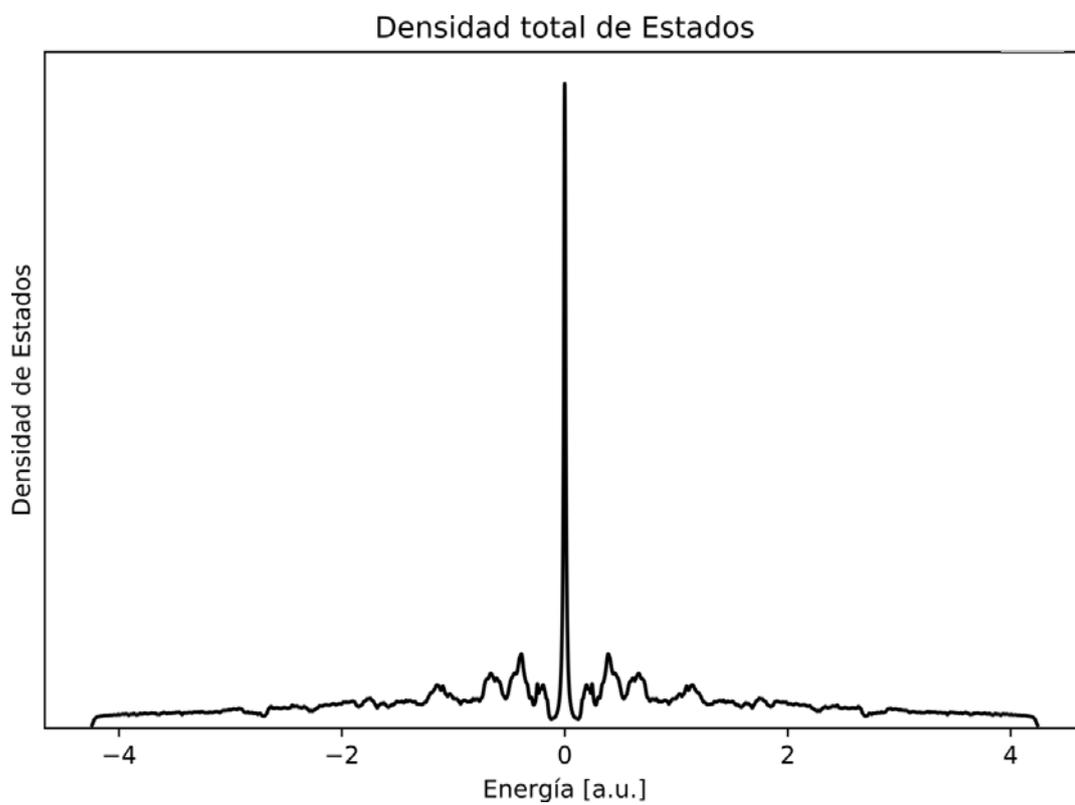


Figura 4.14: Densidad de estados total de un rombo delgado.

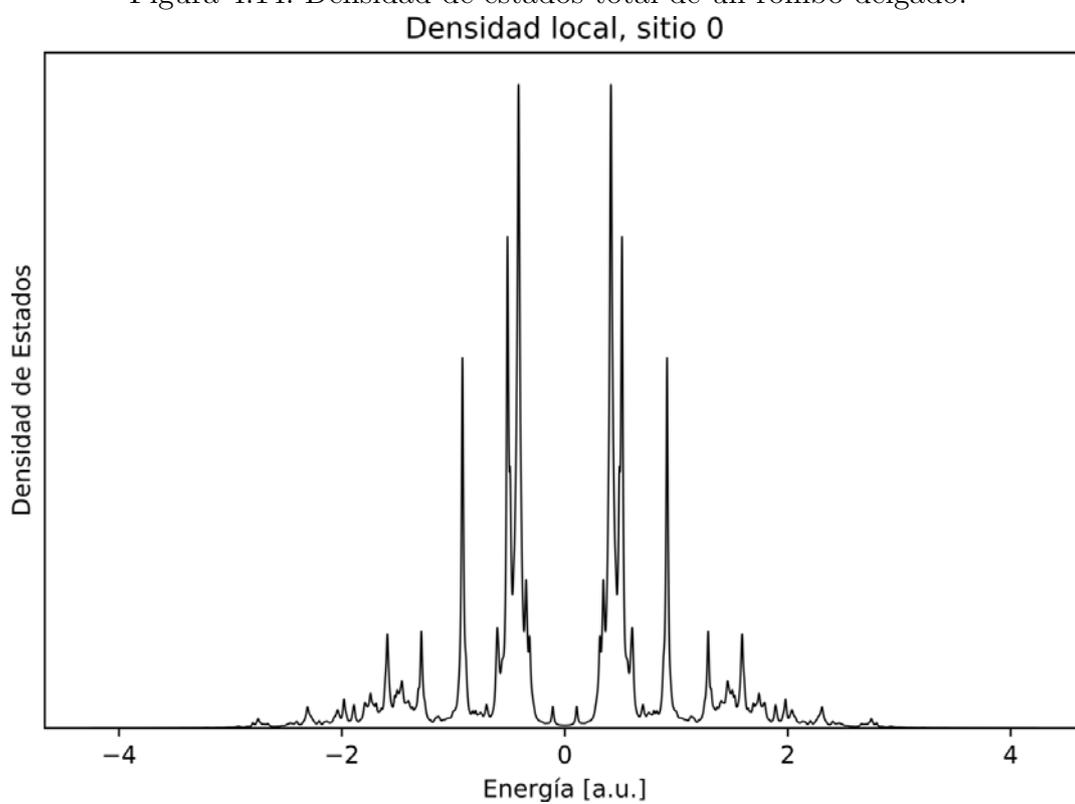


Figura 4.15: Densidad de estados local de un sitio central en un rombo delgado.

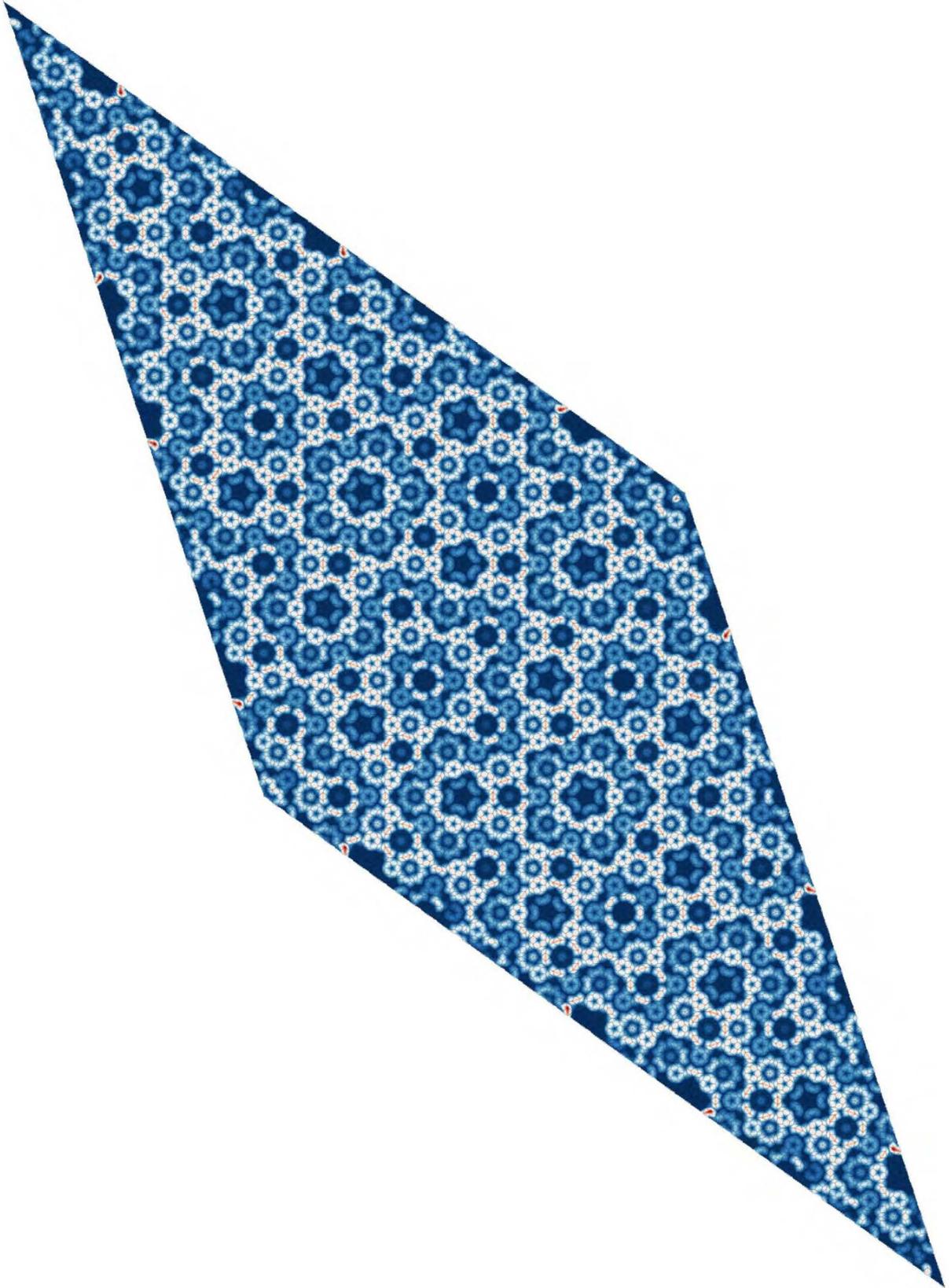


Figura 4.16: Función de onda del estado  $E = 0$  de un rombo delgado.

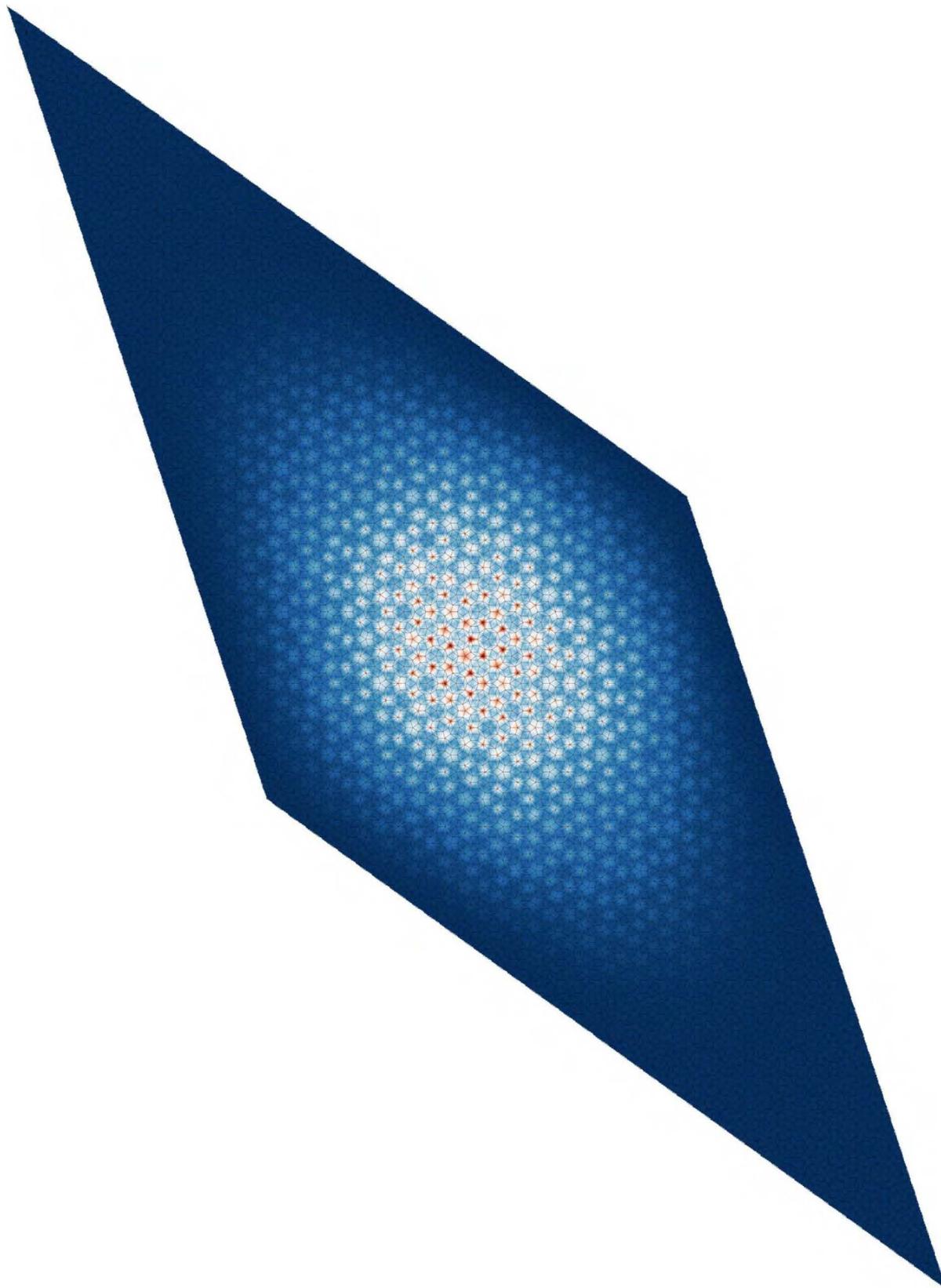


Figura 4.17: Función de onda del estado base de un rombo delgado.

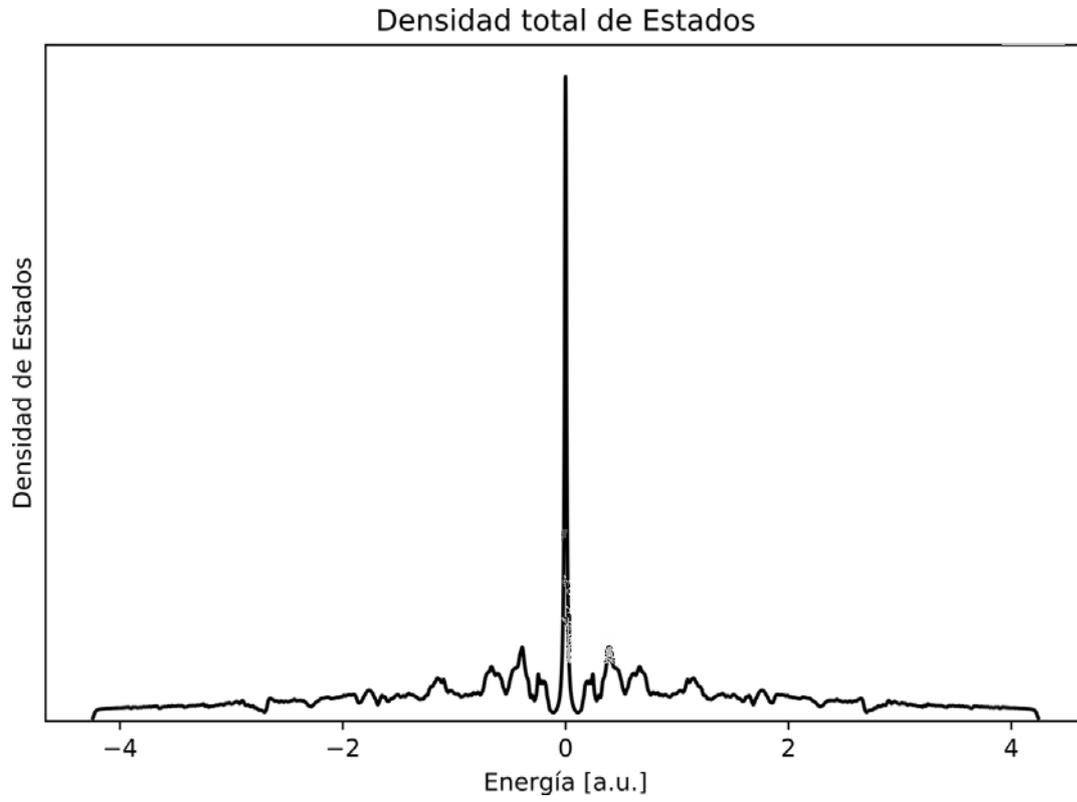


Figura 4.18: Densidad de estados total de una red con semilla tipo sitio **D**.

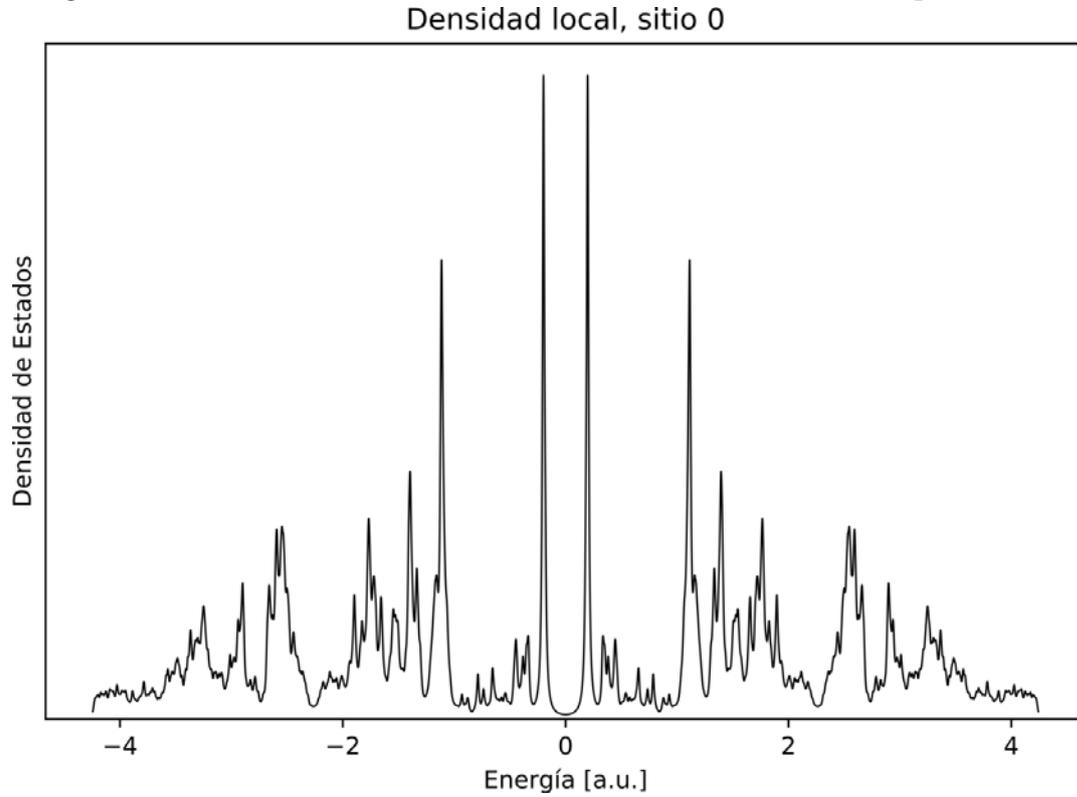


Figura 4.19: Densidad de estados local de un sitio central de una red con semilla **D**.

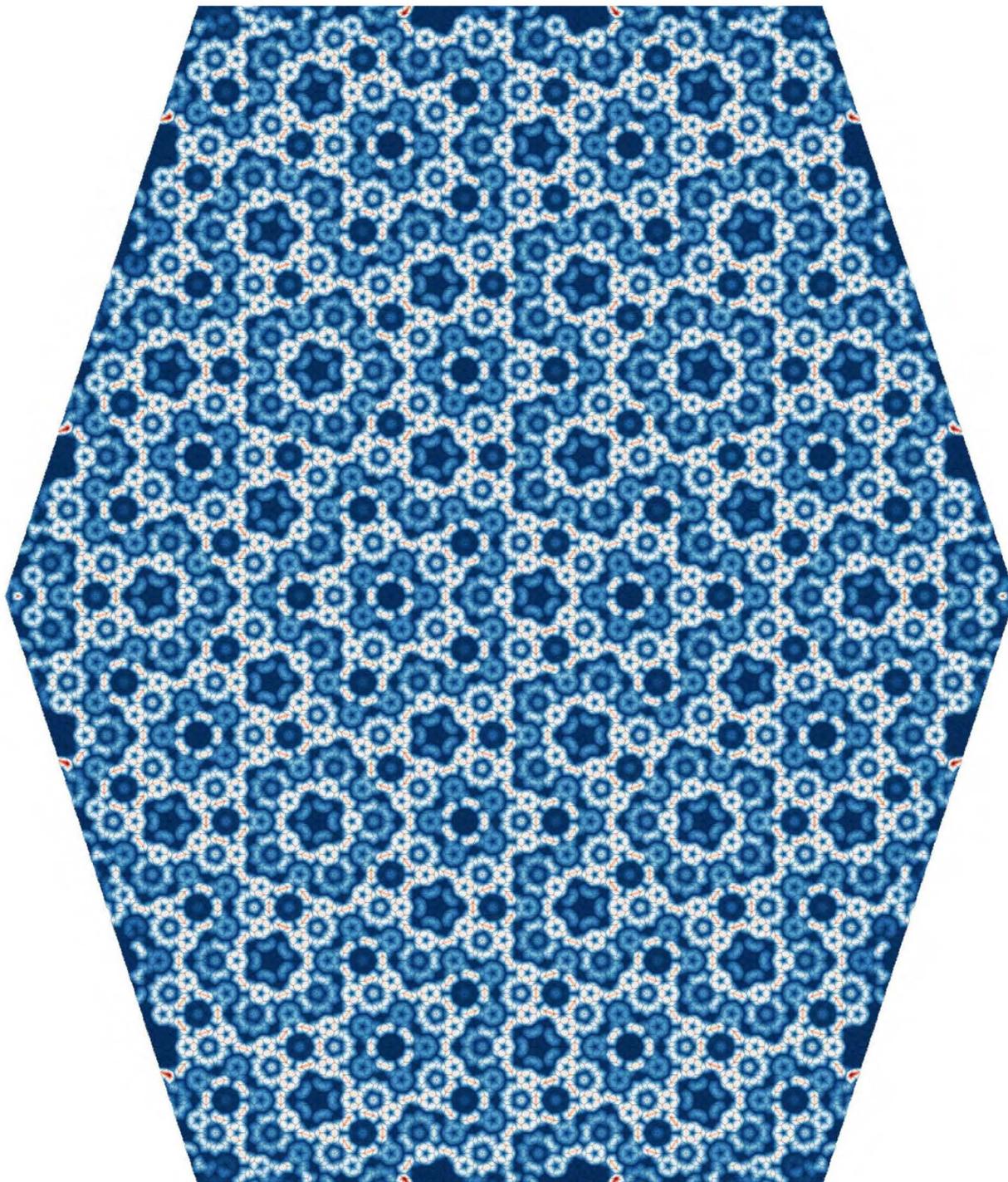


Figura 4.20: Función de onda del estado  $E = 0$  de una red con semilla  $D$ .

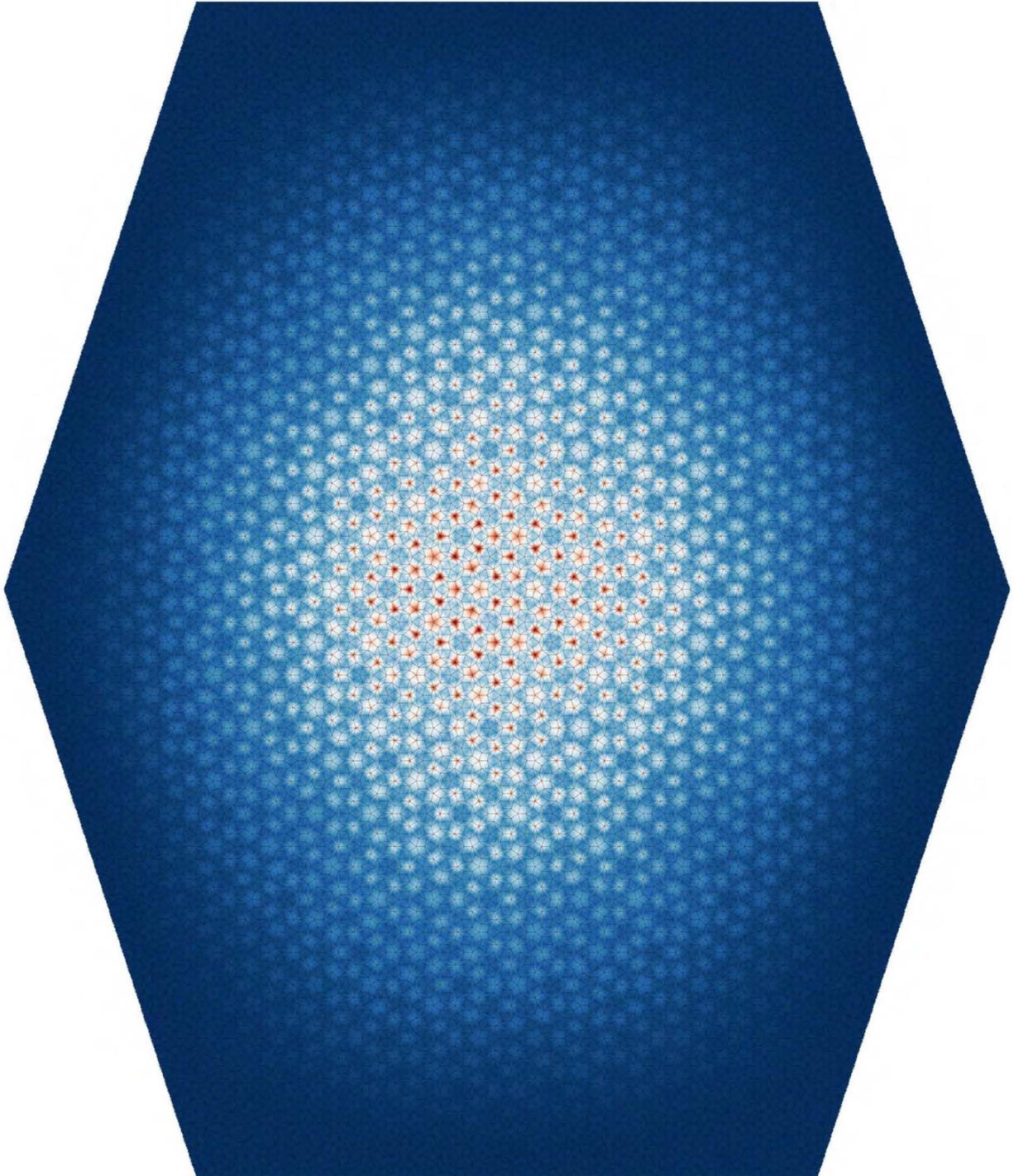


Figura 4.21: Función de onda del estado base de una red con semilla **D**.

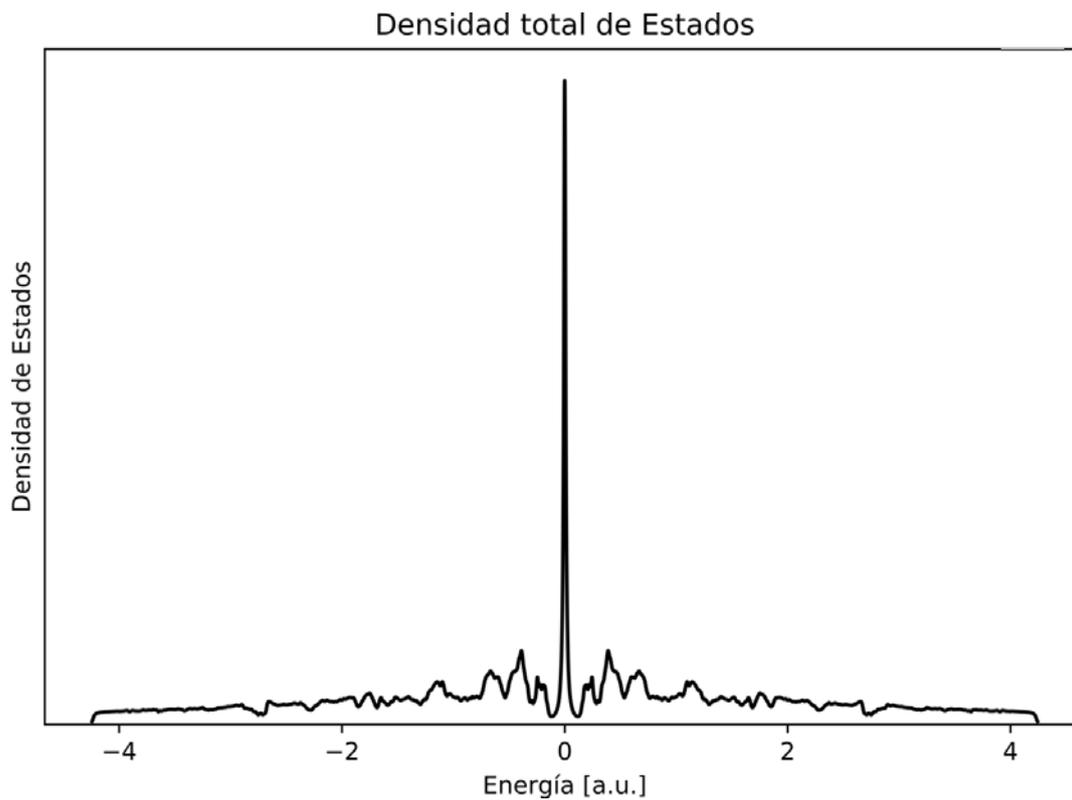


Figura 4.22: Densidad de estados total de una red con semilla  $\mathbf{K}$ .

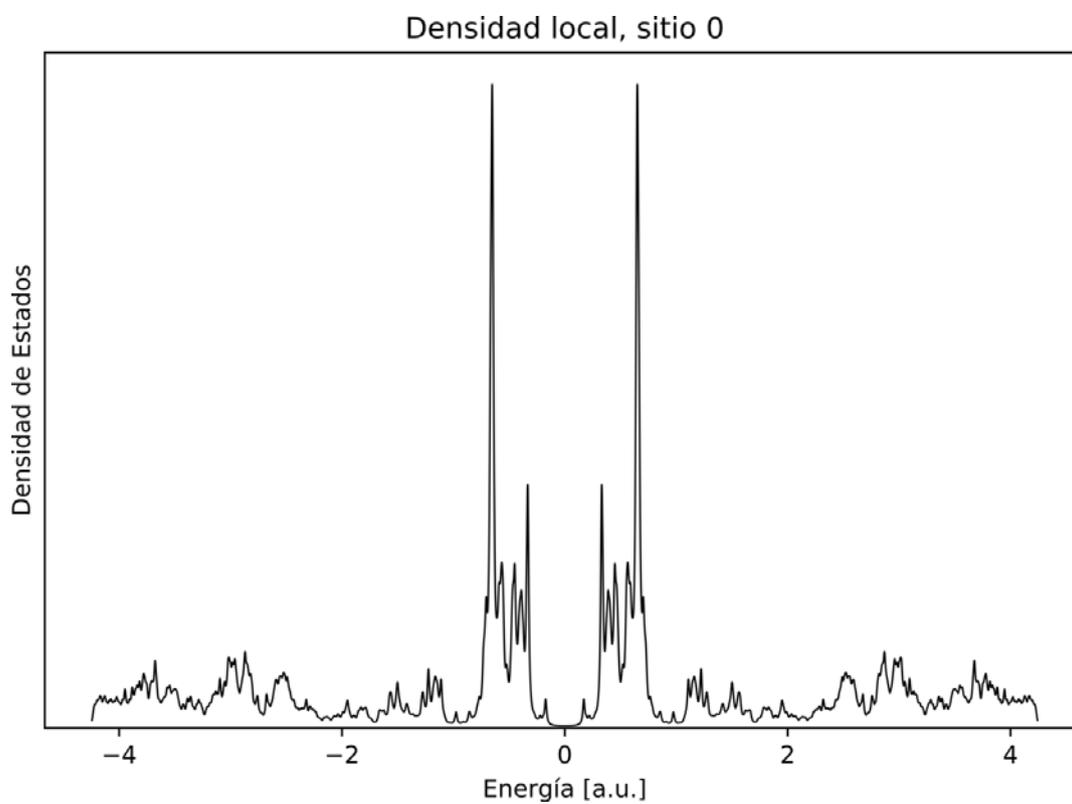


Figura 4.23: Densidad de estados local de un sitio central de una red con semilla  $\mathbf{K}$ .

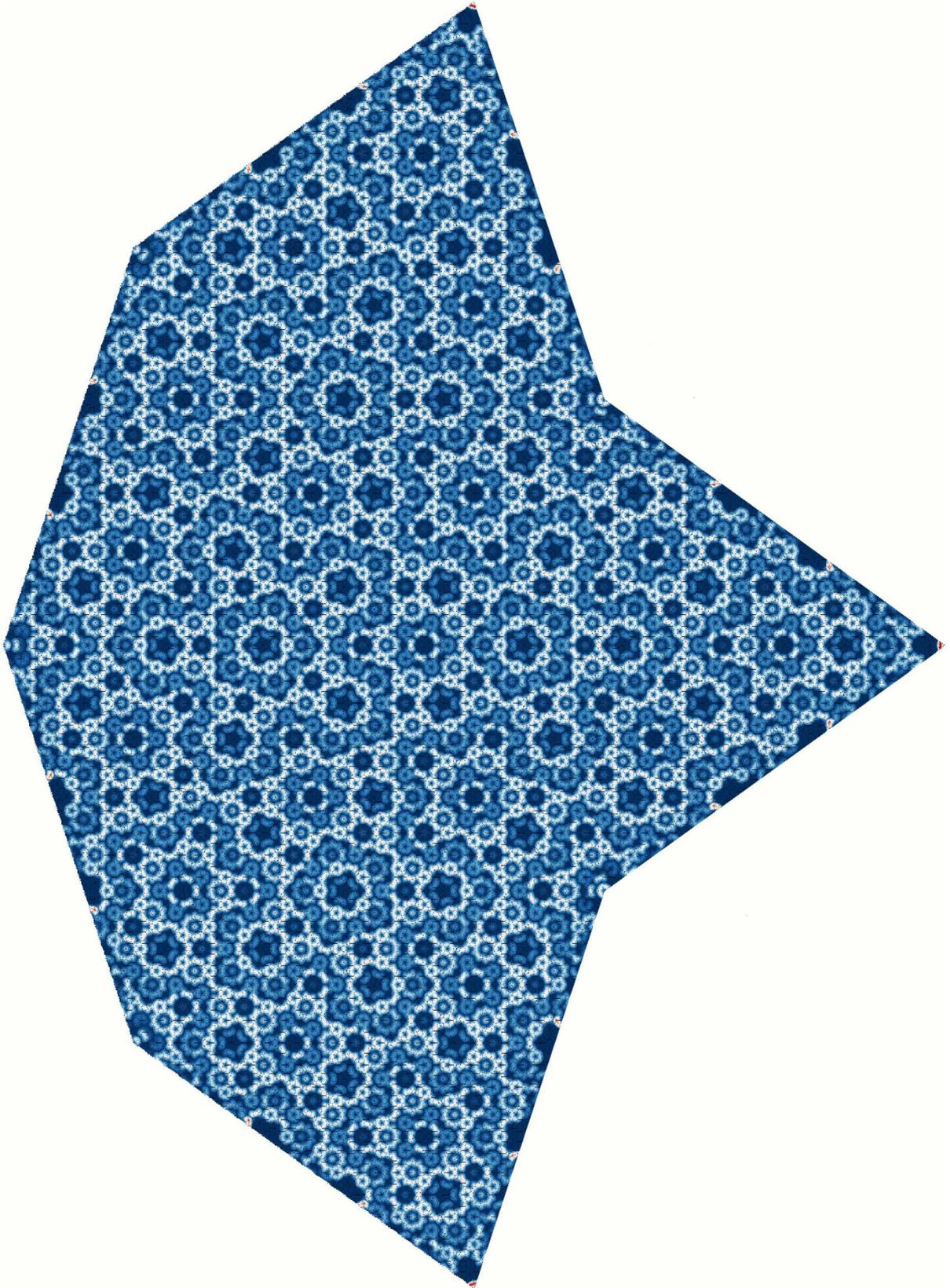


Figura 4.24: Función de onda del estado  $E = 0$  de una red con semilla  $\mathbf{K}$ .

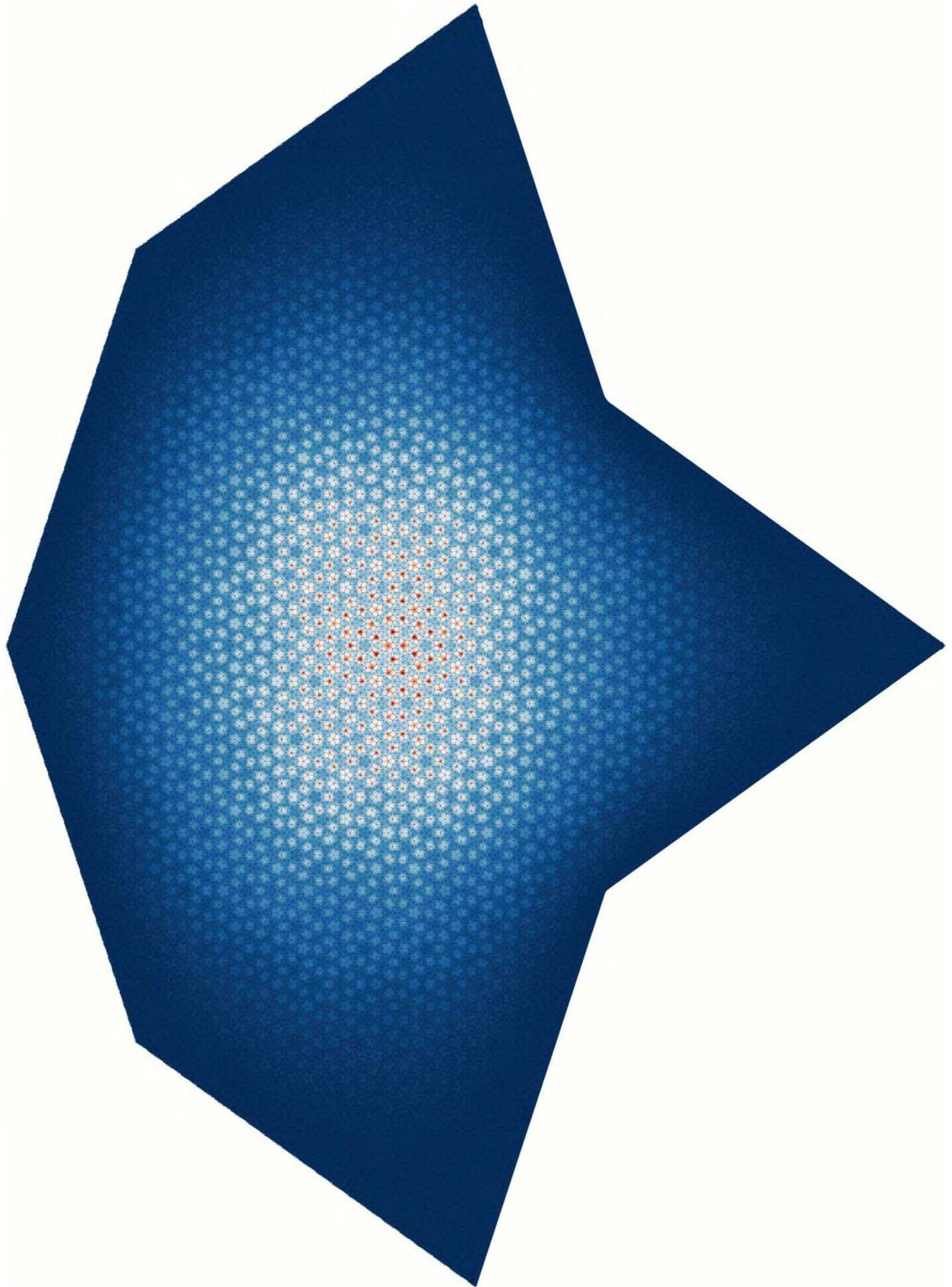


Figura 4.25: Función de onda del estado base de una red con semilla  $\mathbf{K}$ .

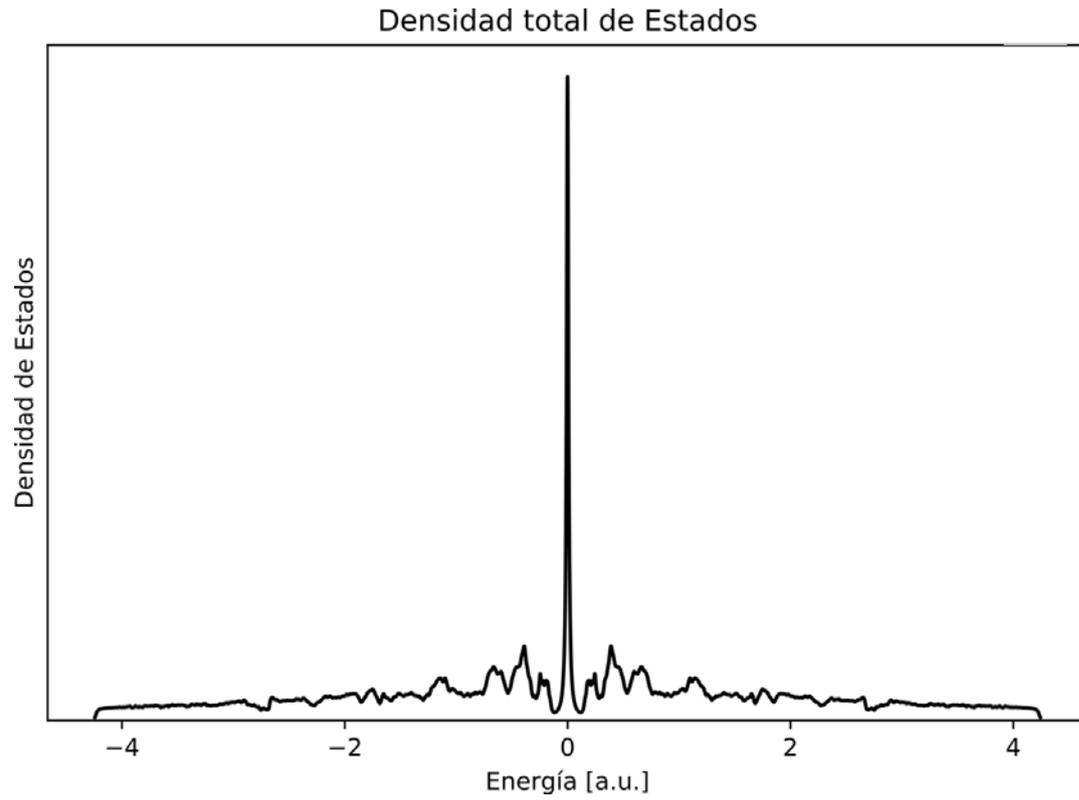


Figura 4.26: Densidad de estados total de una red con semilla  $\mathcal{Q}$ .

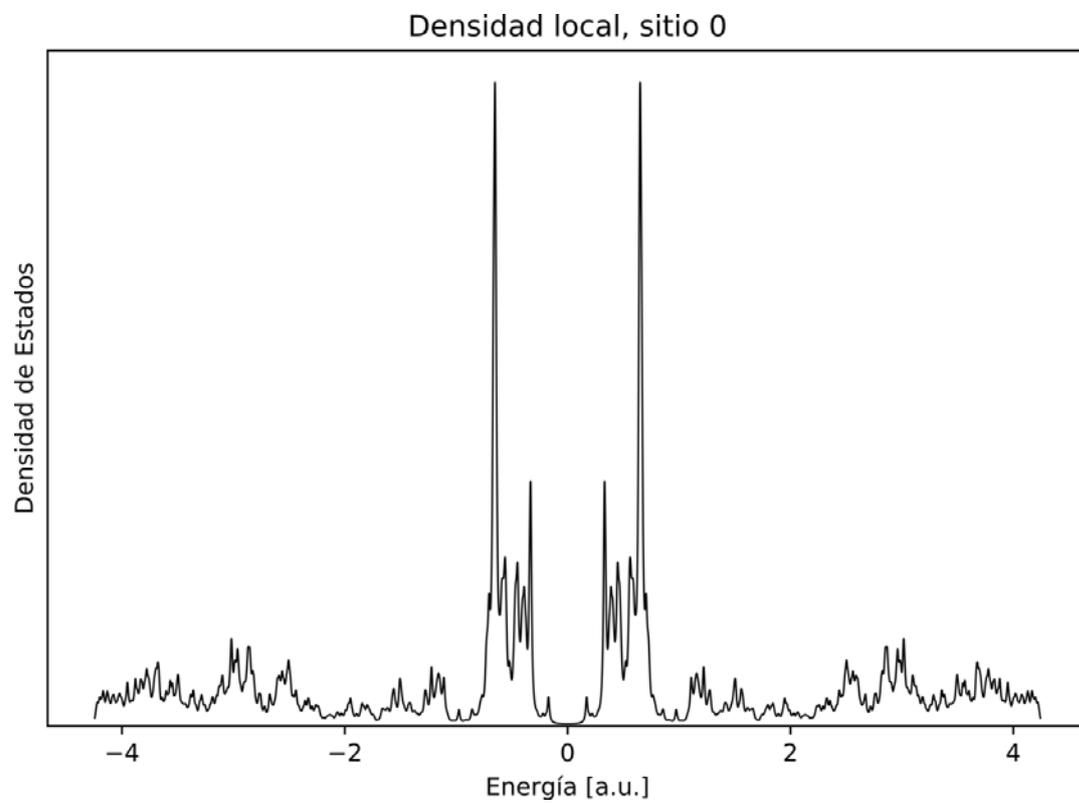


Figura 4.27: Densidad de estados local de un sitio central de una red con semilla  $\mathcal{Q}$ .

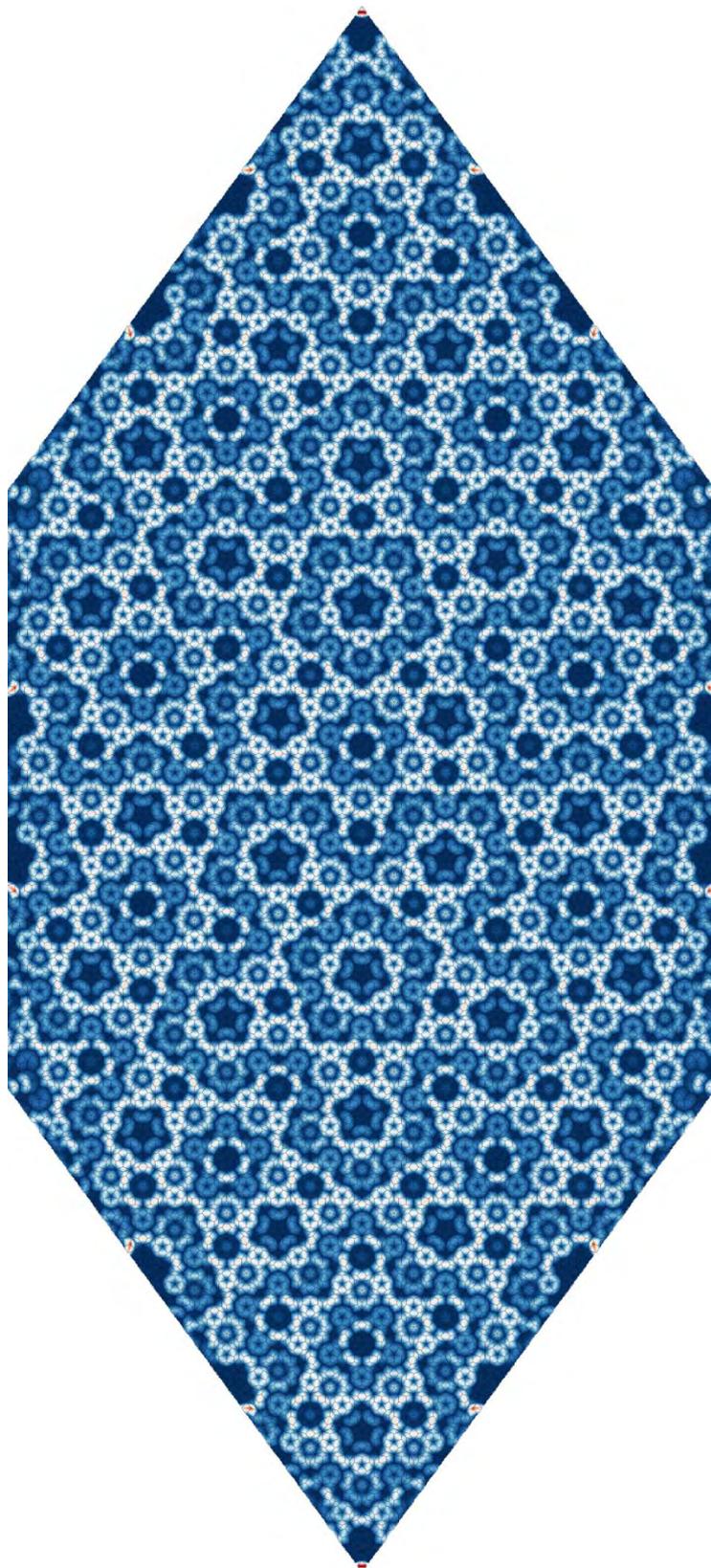


Figura 4.28: Función de onda del estado  $E = 0$  de una red con semilla  $Q$ .

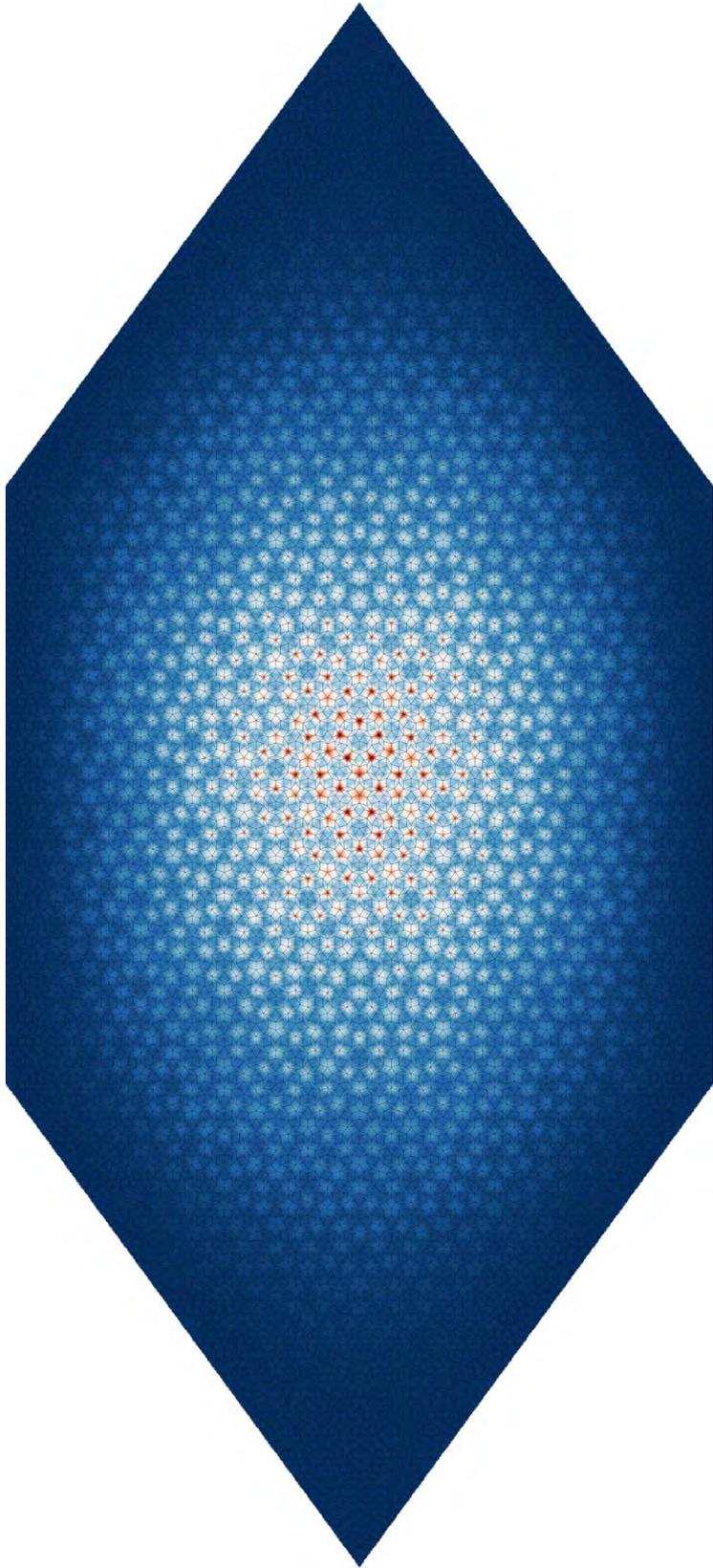


Figura 4.29: Función de onda del estado base de una red con semilla  $\mathbf{Q}$ .

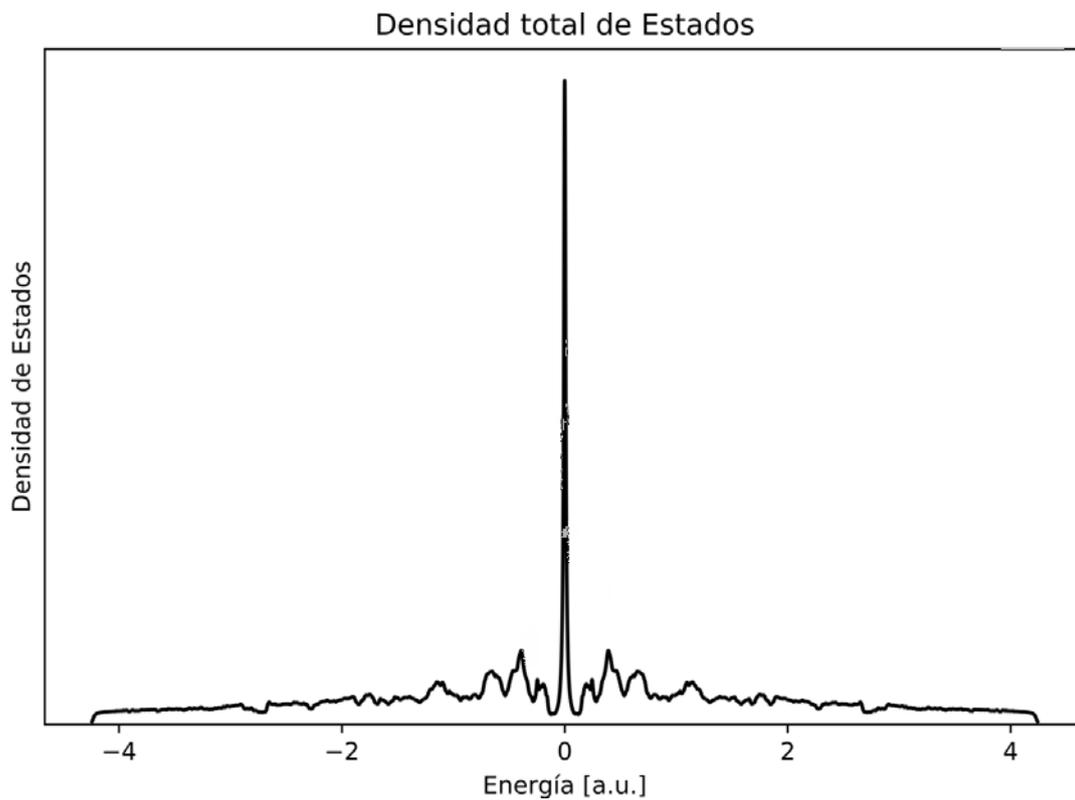


Figura 4.30: Densidad de estados total de una red con semilla **J**.

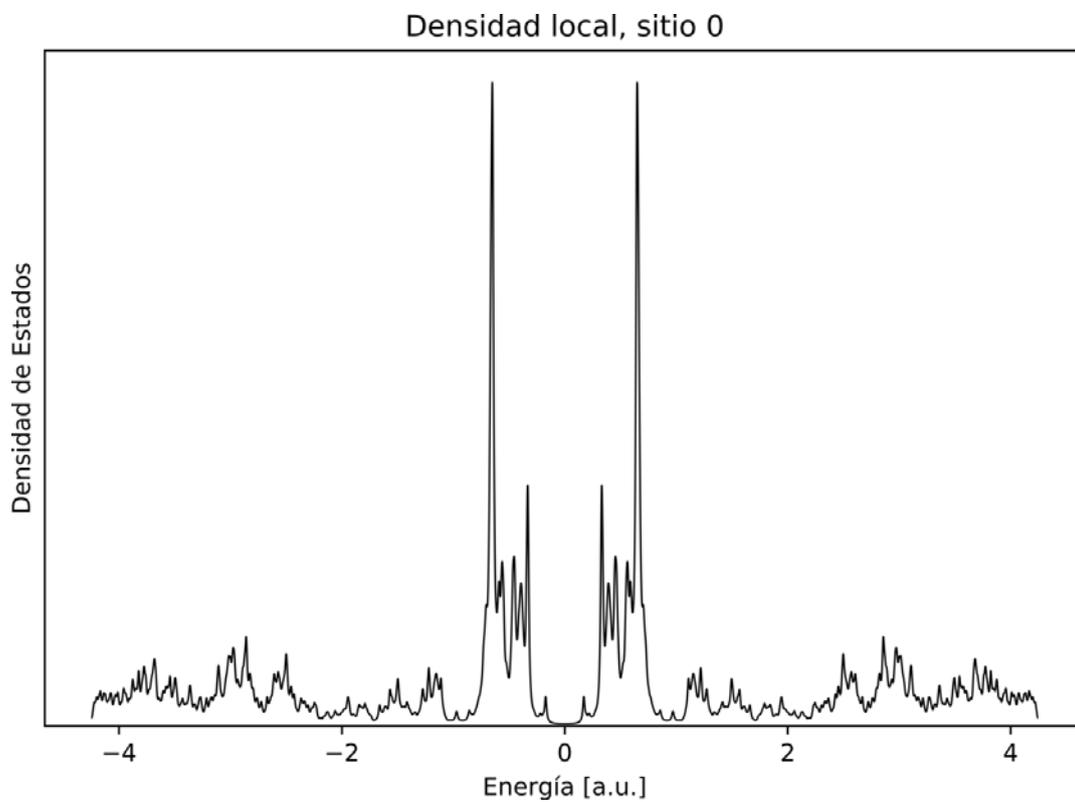


Figura 4.31: Densidad de estados local de un sitio central de una red con semilla **J**.

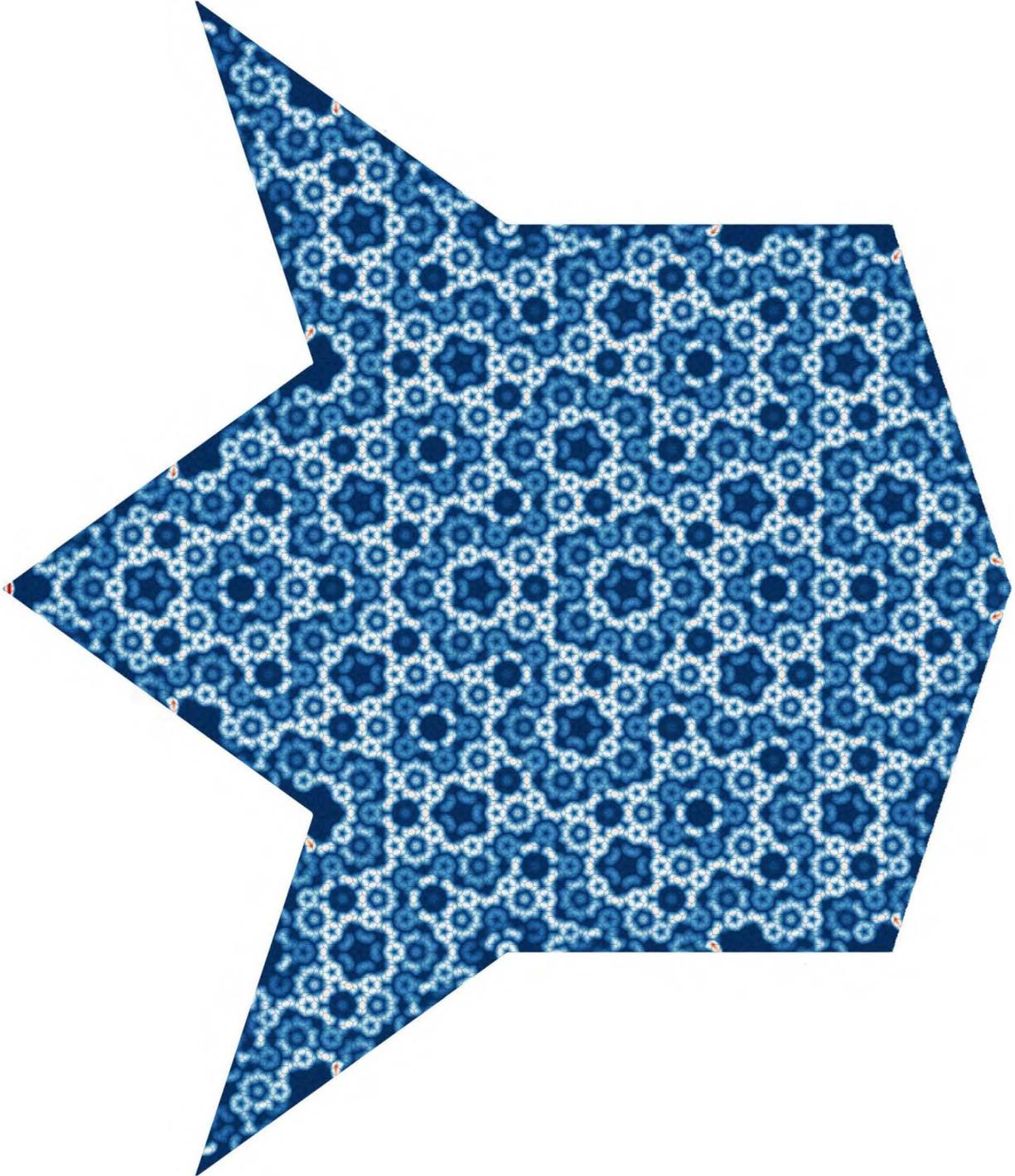


Figura 4.32: Función de onda del estado  $E = 0$  de una red con semilla  $\mathbf{J}$ .

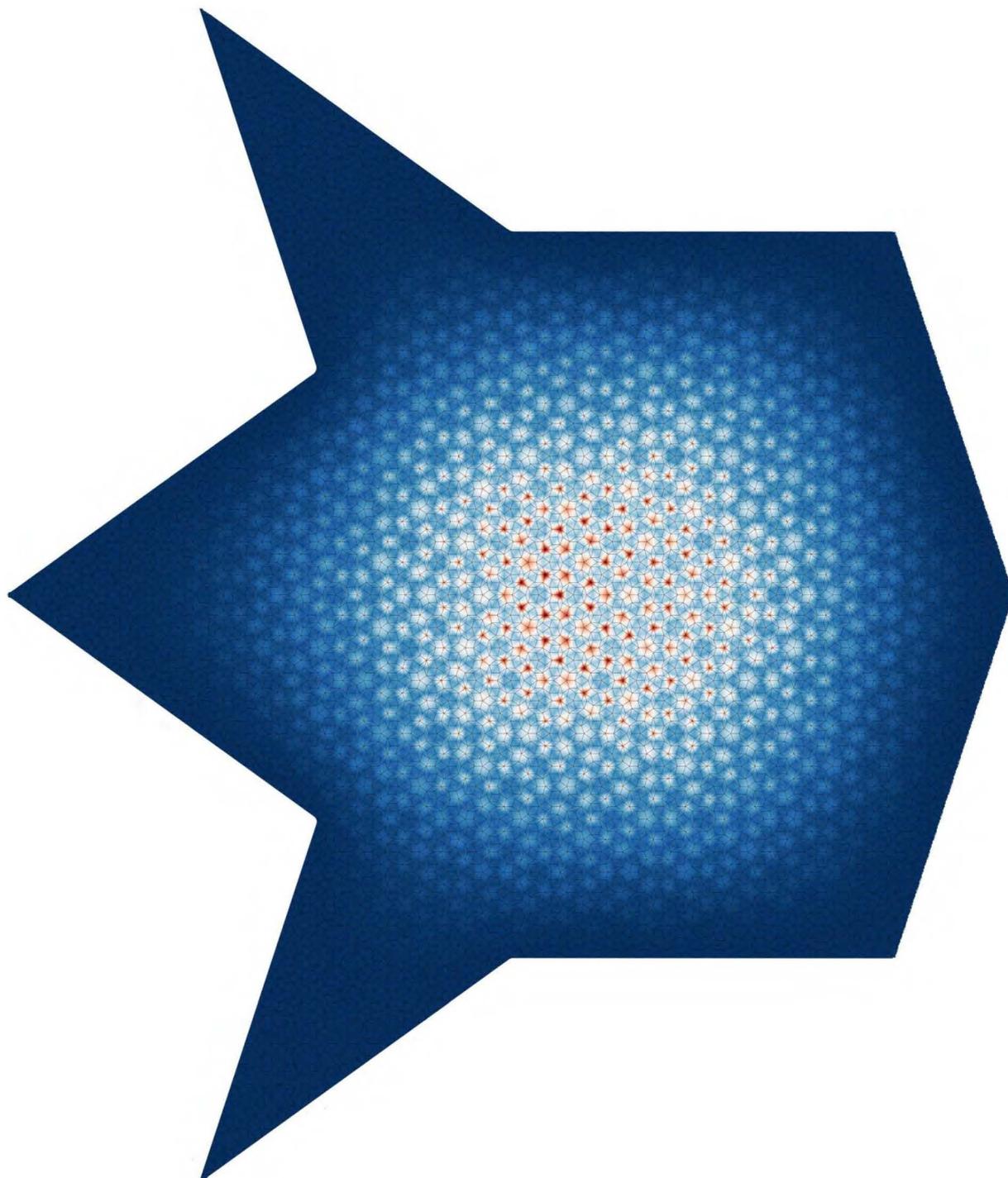


Figura 4.33: Función de onda del estado base de una red con semilla **J**.

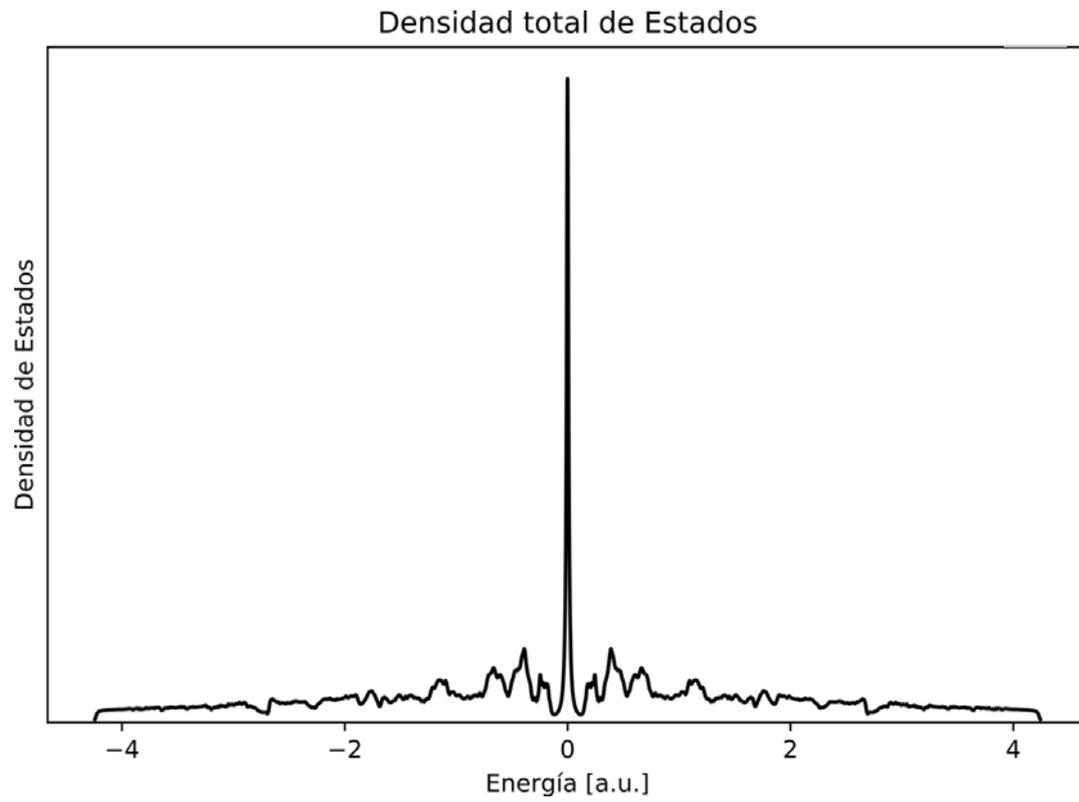


Figura 4.34: Densidad de estados total de una red con semilla **S**.

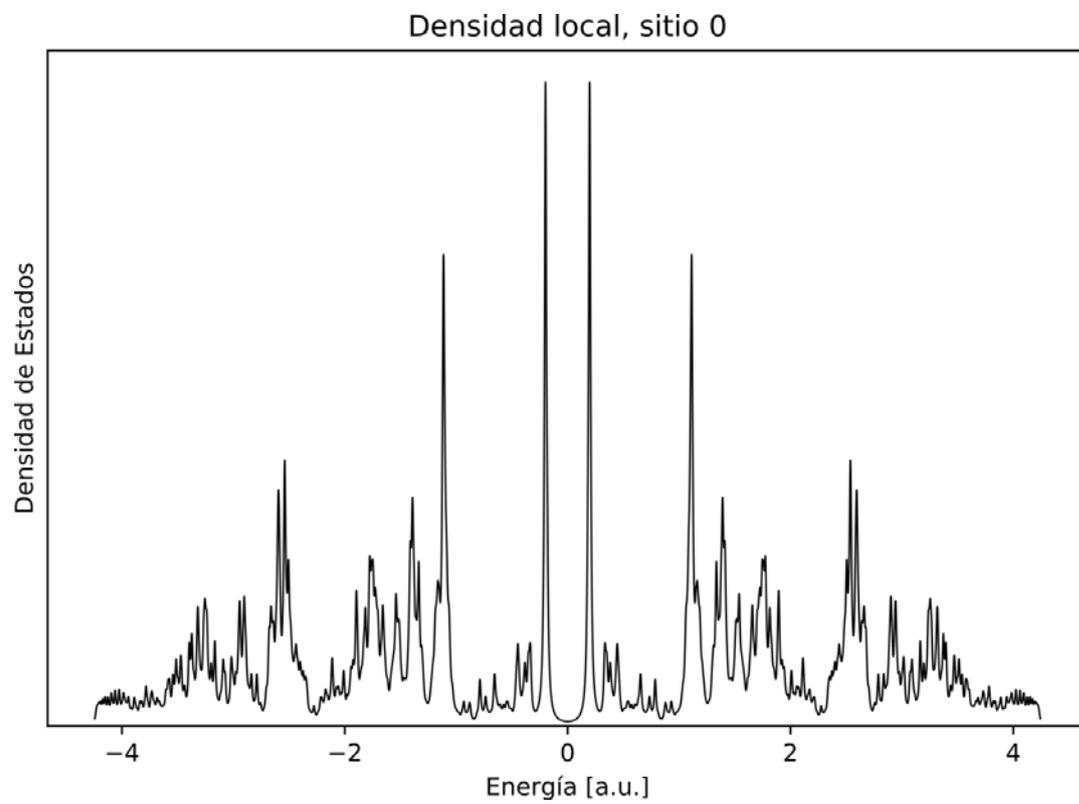


Figura 4.35: Densidad de estados local de un sitio central de una red con semilla **S**.

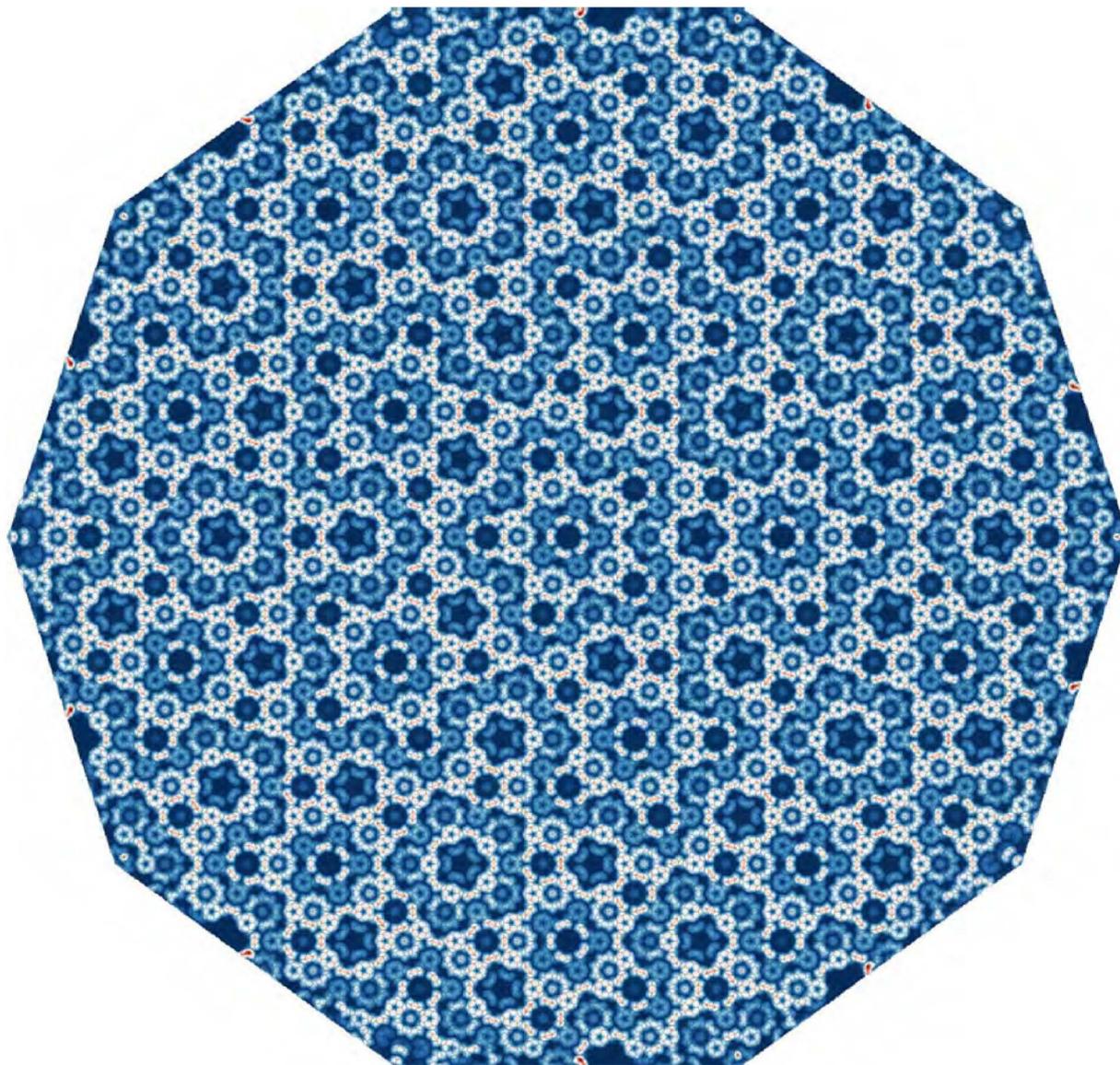


Figura 4.36: Función de onda del estado  $E = 0$  de una red con semilla  $S$ .

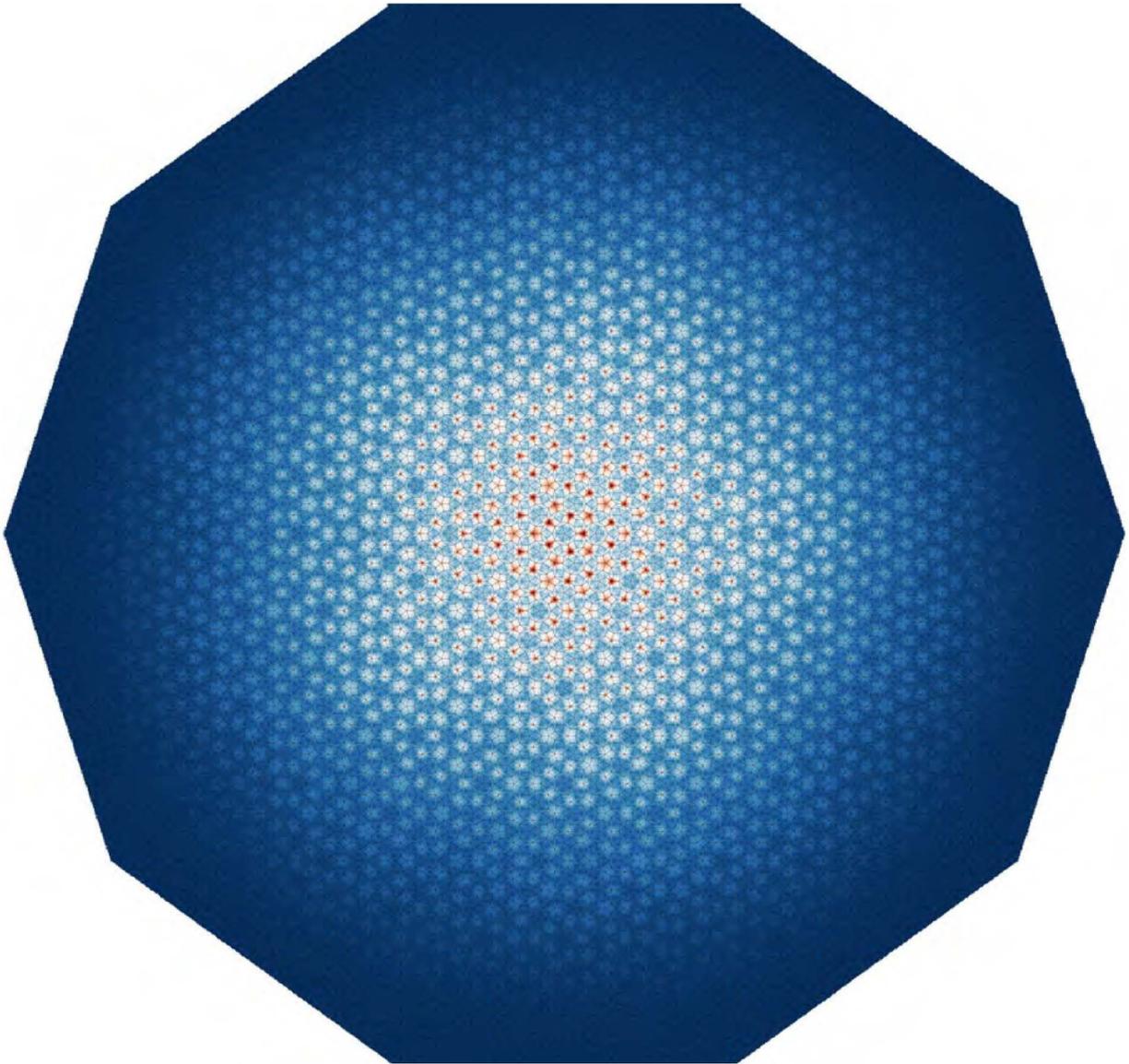


Figura 4.37: Función de onda del estado base de una red con semilla **S**.

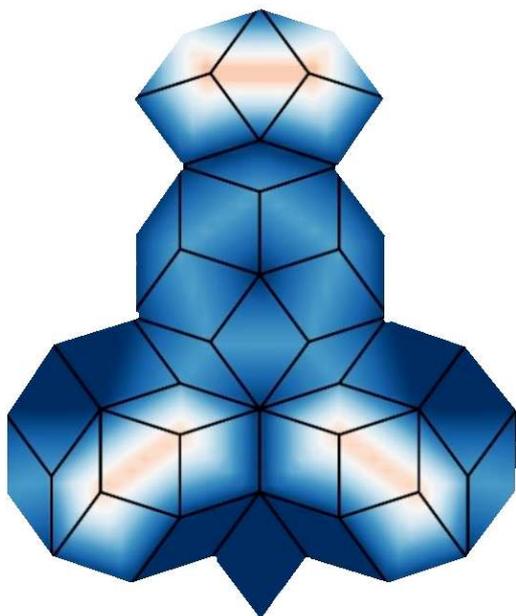


Figura 4.38: Cascanueces.

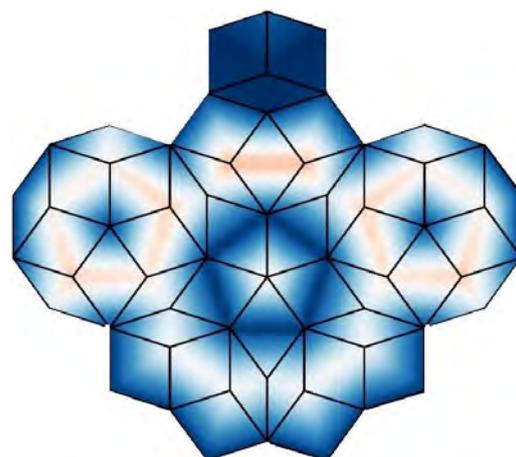


Figura 4.39: Rey ratón.

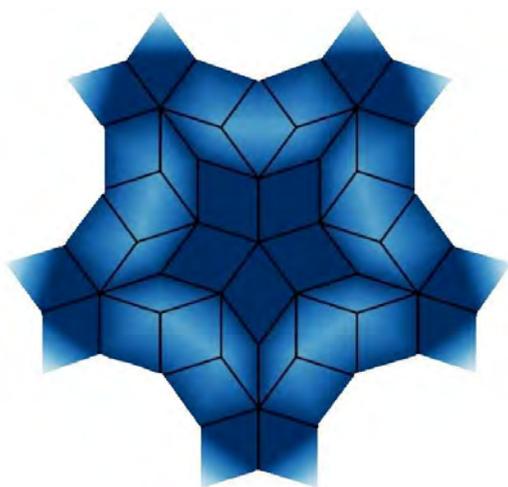


Figura 4.40: Copo de Nieve.

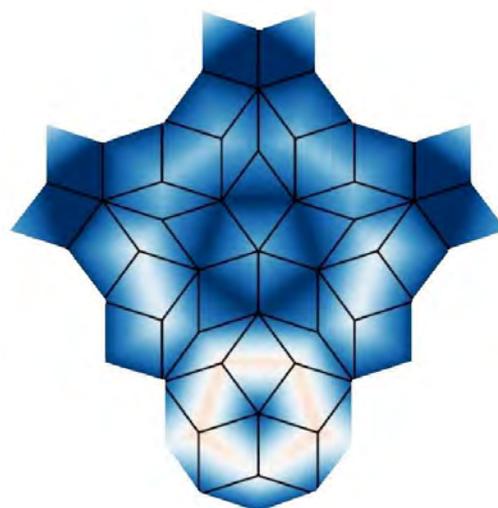


Figura 4.41: Búho.

# Capítulo 5

## Conclusiones

Debido a la sencillez de la función de onda electrónica de la red de Fibonacci en una dimensión, encontrarla, resulta de gran importancia para entender el comportamiento de cuasicristales mas complicados, como es el caso de sistemas cuasicristalinos de mayor dimensión. Lo que se pudo aprender del caso de Fibonacci, es que nos sirve como un primer encuentro de los materiales cuasicristalinos, por ejemplo, el cuadrado de la función de onda electrónica reveló el comportamiento de autosimilaridad. Además, se observa el comportamiento crítico de la función de onda, cosa que no es muy común al estudiar materiales cristalinos o desordenados. Sin embargo, a partir de la cadena de Fibonacci, uno puede inferir que la propiedad de cuasiperiodicidad provoca efectos provenientes de los materiales amorfos y cristalinos. Como ejemplo, la localización electrónica, que es un fenómeno de los materiales amorfos, esto se debe a que el electrón no encuentra un entorno uniforme sobre el cual viajar. Otro fenómeno es la aparición de brechas energéticas en la densidad de estados; como hemos visto con la distorsión de Peierls, la aparición de brechas energéticas se debe a la presencia de múltiples integrales de salto en el caso periódico. En el caso de Fibonacci, la aparición de brechas se debe a la presencia de dos integrales de salto, mas la no periodicidad de la red.

La red de Penrose nos da un poco mas de información sobre lo que sucede en la realidad, ya que se ha visto que es un modelo ideal en dos dimensiones que permite obtener más información lo que hace el caso de dos dimensiones un modelo perfecto para tratar de explicar los resultados experimentales. Como primer punto, se ve que los electrones tienen una preferencia por los sitios  $S_3$ , es decir, se presenta el fenómeno de localización electrónica, propiedad característica de los materiales amorfos. Los electrones tienen preferencia por estos sitios ya que se pueden considerar como sitios de menor energía y que mantiene confinados a los electrones, esto se debe a que las ondas no tienen gran facilidad de viajar en un medio que no sea periódico, es decir, un medio que va cambiando constantemente. La anterior descripción también es compatible para explicar el comportamiento fonónico de los cuasicristales. Como segundo punto, se ha reportado que las propiedades de transporte electrónico se parecen mucho a las de un material semiconductor altamente dopado, es decir, una alta resistividad eléctrica, casi similar a la de un material aislante. Asimismo, al aumentar la temperatura ésta resistencia disminuye, debido a que los electrones dejan de estar en estados localizados y pasan a los estados frustrados, es decir, a los estados que están en  $E = 0$ . La función de onda electrónica de los estados frustra-

dos presenta varias trayectorias de probabilidad, lo cual puede verse como caminos que toman los electrones para el fenómeno de transporte. Estos caminos formados pueden explicar el aumento de conductividad eléctrica que se presenta en los materiales cuasicristalinos, como hay una densidad de probabilidad uniforme en estas trayectorias, el electrón puede viajar en este medio.

Lamentablemente, a esta altura del trabajo no se puede hacer una comparación uno a uno con los datos experimentales, sobre todo porque hay que agregar el factor temperatura. Al agregar la última variable nos permitirá estudiar el fenómeno de conductividad eléctrica de una manera más precisa. En esta tesis nos centramos más en el estudio de la función de onda, y los tipos de funciones de onda que aparecen en los dos arreglos cuasiperiódicos. Teniendo esto como base, uno puede empezar estudiar el transporte electrónico no sólo en el ámbito termodinámico, si no que también habrá que definir si el transporte se hace de manera balística o no. Esto es interesante por el hecho de que uno puede estudiar el transporte electrónico en este tipo de sistemas con el objetivo de buscar aplicación en dispositivos semiconductores. Otra cosa interesante puede ser la presencia de pares de Cooper en sistemas cuasiperiódicos, que nos permitirá buscar la posibilidad de materiales cuasicristalinos superconductores.

# Bibliografía

- [1] D. Schechtman y col. “Metallic Phase with Long-Range Orientational order and No Translational Symmetry”. En: *Physical Review Letters* 53.20 (1984), págs. 1951-1953.
- [2] C. Kittel. *Introducción a la física del estado sólido*. Reverté, 2003.
- [3] N. W. Ashcroft y N. D. Mermin. *Solid State Physics*. Harcourt College Publishers, 1976.
- [4] L. Landau, A. Ajeizer y E. Lifshitz. *Curso de física general*. MIR Moscú, 1979.
- [5] M. Buerger. *Elementary Crystallography: An Introduction to the Fundamental Geometric Features of Crystals*. The MIT Press, 1978.
- [6] “Report of the Executive Committee for 1991”. En: *Acta Crystallographica Section A* 48.6 (nov. de 1992), págs. 922-946.
- [7] L. Pauling. “So-called Icosahedral and Decagonal Quasicrystals Are Twins of an 820-Atom Cubic Crystal”. En: *Physical Review Letters* 58.4 (1987), págs. 365-368.
- [8] L. Pauling. “Apparent icosahedral symmetry is due to directed multiple twinning of cubic crystals”. En: *Nature* 317.10 (1985), págs. 512-514.
- [9] D. Levine y P. J. Steinhardt. “Quasicrystals: A New Class of Ordered Structures”. En: *Physical Review Letters* 53.26 (1984), págs. 2477-2480.
- [10] L. Bindi y col. “Natural Quasicrystals”. En: *Science* 324 (2009), págs. 1306-1309.
- [11] L. Bindi y col. “Natural quasicrystal with decagonal symmetry”. En: *Scientific Reports* 5.9111 (2015).
- [12] L. Bindi y col. “Evidence for the extraterrestrial origin of a natural quasicrystal”. En: *Proceedings of the National Academy of Sciences* 109.5 (2012), págs. 1396-1401. ISSN: 0027-8424.
- [13] L. Bindi y col. “Icosahedrite, Al<sub>63</sub>Cu<sub>24</sub>Fe<sub>13</sub>, the first natural quasicrystal”. En: *American Mineralogist* 96.5-6 (2011), págs. 928-931.
- [14] P. J. Steinhardt y L. Bindi. “In search of natural quasicrystals”. En: *Reports on Progress in Physics* 75.9 (ago. de 2012).
- [15] L. Bindi, J. Pham y P. J. Steinhardt. “Previously unknown quasicrystal periodic approximant found in space”. En: *Scientific Reports* 8.16271 (2018).
- [16] T. Klein y col. “Electronic Properties of Quasicrystals”. En: *Advanced Materials* 4.2 (1992), págs. 111-113.
- [17] P. A. Thiel y J. M. Dubois. “Quasicrystals. Reaching maturity for technological applications”. En: *Materials Today* 2.3 (1999), págs. 3-7.

- [18] J. M. Dubois. *Useful Quasicrystals*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2005.
- [19] W. Steurer. “Quasicrystals: What do we know? What do we want to know? What can we know?” En: *Acta Crystallographica Section A* 74.1 (ene. de 2018), págs. 1-11.
- [20] E. Belin y D. Mayou. “Electronic Properties of Quasicrystals”. En: *Physica Scripta* T49 (1993), págs. 356-359.
- [21] G. G. Naumis. “The density of states and first spectral moments of a quasiperiodic lattice”. En: *Journal of Physics: Condensed Matter* 11 (1999), págs. 7143-7153.
- [22] R. A. Barrio y C. Wang. “Some physical inferences from the quasicrystalline topology of Penrose lattices”. En: *Journal of Non-Crystalline Solids* 153-154 (1993), págs. 375-379.
- [23] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu y F. Laloë. *Quantum Mechanics*. Wiley-VCH, 2005.
- [24] G. A. Domrachev y A. I. Lazarev. “Application of the theory of algebraic systems for creating a hierarchy of solid structures formed under equilibrium and nonequilibrium conditions”. En: *Physics of the solid state* 41.5 (1999), págs. 720-724.
- [25] D. R. Askeland, P. P. Fulay y W. J. Wright. *Ciencia e ingeniería de materiales*. CENGAGE Learning, 2012.
- [26] S. H. Simon. *The Oxford Solid State Basics*. Oxford University Press, 2013.
- [27] R. E. Peierls. *Quantum Theory of Solids*. Oxford University Press, 1955.
- [28] M. Senechal. *Quasicrystals and geometry*. Cambridge University Press, 1996.
- [29] T. Wolkenstein. *Electrons and Crystals*. MIR Publisher, Moscow, 1985.
- [30] L. Pauling. *General Chemistry*. Dover Publications, 1970.
- [31] S. Datta. *Lessons from Nanoelectronics, A New Perspective on Transport*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2012.
- [32] T. L. Hill. *An introduction to Statistical Thermodynamics*. Dover Publications, 1986.
- [33] H. C. Van Ness. *Understanding Thermodynamics*. Dover Publications, 1969.
- [34] E. Fermi. *Thermodynamics*. Dover Publications, 1937.
- [35] A. G. Kurosch. *Curso de Álgebra Superior*. MIR Moscú, 1968.
- [36] D. Levine y P. J. Steinhardt. “Quasicrystals. I. Definitions and structure”. En: *Physical Review B* 34.2 (1986), págs. 596-616.
- [37] J. E. S. Socolar y P. J. Steinhardt. “Quasicrystals. II. Unit-cell configurations”. En: *Physical Review B* 34.2 (1986), págs. 617-647.
- [38] J. V. Guttag. *Introduction to Computation and Programming Using Python: with application to understanding data*. The MIT Press, 2016.
- [39] M. Gardner. *Penrose Tiles to Trapdoor Ciphers... and the return of Dr. Matrix*. The Mathematical Association of America, 1997.

- [40] G. Y. Onoda y col. “Growing Perfect Quasicrystals”. En: *Physical Review Letters* 60.25 (1988), págs. 2653-2656.
- [41] Y. Cao y col. “Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices”. En: *Nature* 556 (2018), págs. 43-50.
- [42] Z. M. Stadnik. *Physical Properties of Quasicrystals*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1999.
- [43] C. Janot. *Quasicrystals: a primer*. Oxford University Press, 1994.
- [44] O. Navarro y col. “Wave function behaviour in a Fibonacci lattice with electronic correlation”. En: *Journal of Non-Crystalline Solids* 353 (2007), págs. 996-998.
- [45] E. Belin-Ferré. “Electronic structure of quasicrystalline compounds”. En: *Journal of Non-Crystalline Solids* 334-335 (2004), págs. 323-330.
- [46] S. Ostlund y R. Pandit. “Renormalization-group analysis of the discrete quasi-periodic Schrödinger equation”. En: *Physical Review B* 29.3 (1984), págs. 1394-1414.
- [47] M. I. Rabinovich, A. B. Ezersky y P. D. Weidman. *The Dynamics of Patterns*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2000.
- [48] M. Barile y E. W. Weissten. *Cantor Set*. URL: <https://mathworld.wolfram.com/CantorSet.html> (visitado 30-03-2020).
- [49] R. A. Barrio y C. Wang. “Some physical inferences from the quasicrystalline topology of Penrose lattices”. En: *Journal of Non-Crystalline Solids* 153-154 (1993), págs. 375-379.
- [50] H. C. Jeong y P. J. Steinhardt. “Constructing Penrose-like tilings from a single prototile and the implications for quasicrystals”. En: *Physical Review B* 55.6 (1997), págs. 3520-3532.

# Apéndice A

## Funciones en Python3

Las funciones aquí mencionadas son las mas importantes del script escrito. Las funciones descritas aquí sirven para teselar un punto inicial de puntos por medio de la deflación; reducir las coordenadas obtenidas a una colección de puntos sin repetición; contrucción del hamiltoniano de amarre fuerte en función de los sitios de red dados, y dos funciones para graficar funciones de onda, uno para los estados críticos, y otro para los estados frustrados.

```
# Función: subdividir
def subdividir( triangulos ):

    """
    Esta función subdivide los triángulos siguiendo las reglas
    para la teselación de Penrose. Subdivide cada uno de los
    triángulos de manera distinta en función de su color. Hay
    dos colores presentes, representados por 1 & 0. "triangulos"
    es una tupla que tiene las coordenadas de los vértices de
    cada uno de los triángulos y el color correspondiente.
    """

    # En esta lista guardaremos las coordenadas.
    resultado = []

    # Iteramos sobre cada uno de los elementos de triangulos.
    for color, A, B, C in triangulos:

        if color == 0:

            # Subdivide el triángulo rojo utilizando una coordenada
            # auxiliar P.
            P = A + ( B - A ) / razon

            # Agregamos los triángulos generados en resultados.
            resultado += [ ( 0, C, P, B ), ( 1, P, C, A ) ]
        else:

            # Subdividimos el triángulo azul utilizando como
```

```
# coordenadas auxiliares Q & R.
Q = B + ( A - B ) / razon
R = B + ( C - B ) / razon

# Guardamos los triángulos generados en resultados.
resultado += [ ( 1, R, C, A ), ( 1, Q, R, B ),
               ( 0, R, Q, A ) ]

# Regresamos las nuevas coordenadas de la teselación.
return resultado

# Función: reduccion
def reduccion( coordenadas ):

    '''
    Esta función recibe como argumento una lista de tuplas que
    contienen las coordenadas de la teselación de Penrose en
    forma de números complejos. Regresa una lista que tiene las
    coordenadas de la teselación de Penrose en forma cartesiana,
    omitiendo las coordenadas repetidas.
    '''

    # Inicializamos una lista vacía que contendrá las coordenadas.
    coord_red = []

    # Iteramos sobre cada una de las tuplas en la lista.
    for tup in coordenadas:

        # Iteramos sobre las coordenadas de los vertices.
        for i in range( 1, 4 ):

            r_x = np.around( tup[ i ].real, decimals = 5 )
            r_y = np.around( tup[ i ].imag, decimals = 5 )

            # Verificamos si la coordenada ya está en coord_red,
            # en caso afirmativo lo ignoramos.
            if ( r_x, r_y ) in coord_red:
                continue

            # En caso de que no esté, lo agregamos a la lista.
            else:
                coord_red.append( ( r_x, r_y ) )

    # Terminado el proceso, retornamos la lista.
    return coord_red

# Función: matriz
def matriz( dimension, coords, autoenergia, interaccion ):
```

```
'''
Esta función tiene como argumentos:
- dimensión que es un número entero que será el tamaño de la
matriz.
- coords que es una lista de tuplas con coordenadas de cada
uno de los puntos de la red.
- autoenergia es la energía que tiene cada uno de los sitios
- interaccion es la interacción dada por el usuario que va a
tener cada uno de los sitios con los otros.

Regresa una matriz cuadrada del tamaño de la dimensión, con
interacciones entre sitio y sitio y la diagonal central con
las autoenergías de cada sitio.
'''

# Establecemos una referencia de distancia
referencia = dist( coords[ 0 ], coords[ 1 ] )

# Generamos una matriz llena de ceros con tamaño dimension**2
mat = np.zeros( ( dimension, dimension ) )

# Ingresamos cada una de las interacciones en la matriz
for i in range( dimension ):

    for j in range( dimension ):

        # Debido a la precisión al generar la red, establecemos
        # que las distancias sean aproximadas.

        # 10e-5 se consiguió experimentando con el programa.
        if abs( referencia - dist( coords[ i ], coords[ j ] ) )
            < 10e-5:

            # Insertamos la interacción en el lugar deseado
            mat[ i ][ j ] = interaccion

x, y = np.indices( mat.shape )
# Insertamos las autoenergías en la diagonal principal
mat[ x == y ] = autoenergia

# Regresamos la matriz
return mat

# Función: f_onda
def f_onda( x1, x2, eigvec, triang ):
    '''
    Esta función recibe como argumento:
```

```
x1, x2 - Son coordenadas en x, y de la posición de los
puntos de la red
eigvec - Son los eigenvectores obtenidos de la matriz de
interacciones
Pregunta al usuario un número entero correspondiente a los
eigenvectores y lo grafica.
'''

# Pedimos al usuario el que función de onda quiere visualizar
k1 =
int( input( 'Ingrese el eigenvector que quiere visualizar: ' ) )

# Inicializamos la figura
figura = plt.figure()

# Pasamos nuestras coordenadas x1 & x2 a tipo array
x1, x2 = np.array( x1 ), np.array( x2 )

# Le damos sentido físico a nuestra función de onda
z = abs( eigvec[ :, k1 ] ) ** 2

# Hacemos un espacio lineal con los límites de mi red
xi, yi = np.linspace( x1.min(), x1.max(), 50 ),
np.linspace( x2.min(), x2.max(), 50 )

# Hacemos la interpolación cúbica
zi = griddata( ( x1, x2 ), z, ( xi[ None, : ], yi[ :, None ] ),
method = 'cubic' )

# Hacemos una malla con la colección de puntos dados
xig, yig = np.meshgrid( xi, yi )

# Graficamos la función de onda.
ax = figura.gca( projection = '3d' )
nom = 'pen_' + str( k1+ 1 ) + '.eps'
ax.plot_wireframe( xig, yig, zi, linewidth = 0.1, color = 'k' )
ax.contour( xi, yi, zi, 50, linewidths = 1, color='k' )
# Graficamos la red debajo de la función de onda
for k in range( len( triang ) ):
    ax.plot( triang[ k ][ 0 ], triang[ k ][ 1 ],
-0.001, 'k' , linewidth = 0.1 )
plt.savefig( nom, dpi = 1200 )
plt.show()

# Función: f_onda_cero
def f_onda_cero( x1, x2, eigvec, evalrs, triang, nombre ):
'''
Esta función recibe como argumento:
```

- Las posiciones de los sitios de la red
- Los eigenvalores obtenidos del hamiltoniano
- Los eigenvectores obtenidos del hamiltoniano
- La red de penrose como triang
- El nombre para guardar la figura, como un string, por ejemplo 'onda1.eps'

Esta función tiene como objetivo graficar la función de onda que estén en el espectro de energías  $E = 0$ .

Analiza los valores de los eigenvalores que estén en el intervalo  $1e-14$ ,  $-1e-14$  y localiza las posiciones de los eigenvectores correspondientes a las energías.

En seguida, esta función suma el cuadrado del valor absoluto de la función de onda del espectro descrito, y lo grafica después de un proceso de interpolación cúbica.

```
'''
```

```
# Inicializamos un contador
```

```
n = 0
```

```
# Inicializamos una lista vacía donde pondremos las posiciones
```

```
posiciones = []
```

```
# Definimos el número de iteraciones
```

```
iteraciones = len( evalrs )
```

```
# Hacemos el primero proceso de aislamiento del espectro
```

```
for i in range( iteraciones ):
```

```
    # +- 1e-14 son los valores mas cercanos a 0 que hay
```

```
    # Este rango se hizo experimentando con el programa.
```

```
        if evalrs[ i ] < 1e-14 and evalrs[ i ] > -1e-14:
```

```
            n += 1
```

```
            posiciones.append( i )
```

```
        else:
```

```
            posiciones.append( 0 )
```

```
# Imprimimos el porcentaje de valores que caen en el espectro
```

```
print( n * 100 / len( evalrs ) )
```

```
# Ahora ubicamos la primera posición
```

```
for pos in posiciones:
```

```
    if pos != 0:
```

```
        break
```

```
# Creamos un array para el valor de la función de onda
```

```
z = np.zeros( len( evalrs ) )
```

```
# Sumamos las funciones de onda en z
```

```
for i in range( n ):
```

```
z += abs( eigenvec[ : , pos + i ] ) ** 2

# Ahora procedemos a graficar las curvas de contorno

# Pasamos nuestras coordenadas x1 & x2 a tipo array
x1, x2 = np.array( x1 ), np.array( x2 )

# Hacemos un espacio lineal con los puntos de la red
xi, yi = np.linspace( x1.min(), x1.max(), 500 ),
          np.linspace( x2.min(), x2.max(), 500 )

# Hacemos la intepolación cúbica
zi = griddata( ( x1, x2 ), z, ( xi[ None, : ],
                               yi[ :, None ] ), method = 'cubic' )

# Hacemos una maya con los puntos dados
xig, yig = np.meshgrid( xi, yi )

# Inicializamos la figura
figura = plt.figure()
# Graficamos la función de onda.
ax = figura.gca( projection = '3d' )

ax.plot_trisurf( xig, yig, zi, linewidth = 0.1, color = 'k' )

plt.show()

plt.contour( xi, yi, zi, 75, linewidths = 0.1, color='k' )
for k in range( len( triang ) ):
    plt.plot( triang[ k ][ 0 ], triang[ k ][ 1 ], 'k' ,
             linewidth = 0.1 )

plt.savefig( nombre, format = 'eps', dpi = 1200 )

# plt.show()
```

# Apéndice B

## Diagramas de flujo

En este segundo apéndice se muestran los diagramas de flujo de los programas utilizados para calcular y graficar la amplitud de la función de onda así como la densidad de estado local y total en cada caso. Es importante mencionar que se hizo primero el programa de la cadena de Fibonacci, y que éste mismo programa funciona para cadenas periódicas, simplemente hay que darle el mismo valor de interacción a  $L$  y a  $S$  por lo que garantizamos que se tiene un arreglo periódico.

Lo anterior es importante ya que nos permite confirmar que nuestro programa está bien construido y que los resultados obtenidos serán los correctos. Esto es importante mencionar ya que, haciendo una analogía con los procedimientos experimentales, lo último nos permite calibrar nuestro programa.

Las Figuras B.1 y B.2 muestran la estructura general de los programas. En compañía con las funciones definidas en el apéndice anterior, el lector puede construir un código que pueda mostrarle las funciones de onda; adicionalmente, como el formalismo del modelo de amarre fuerte es muy utilizado, se puede utilizar estos diagramas como punto de partida para calcular otras propiedades que se puedan derivar del Hamiltoniano de amarre fuerte.

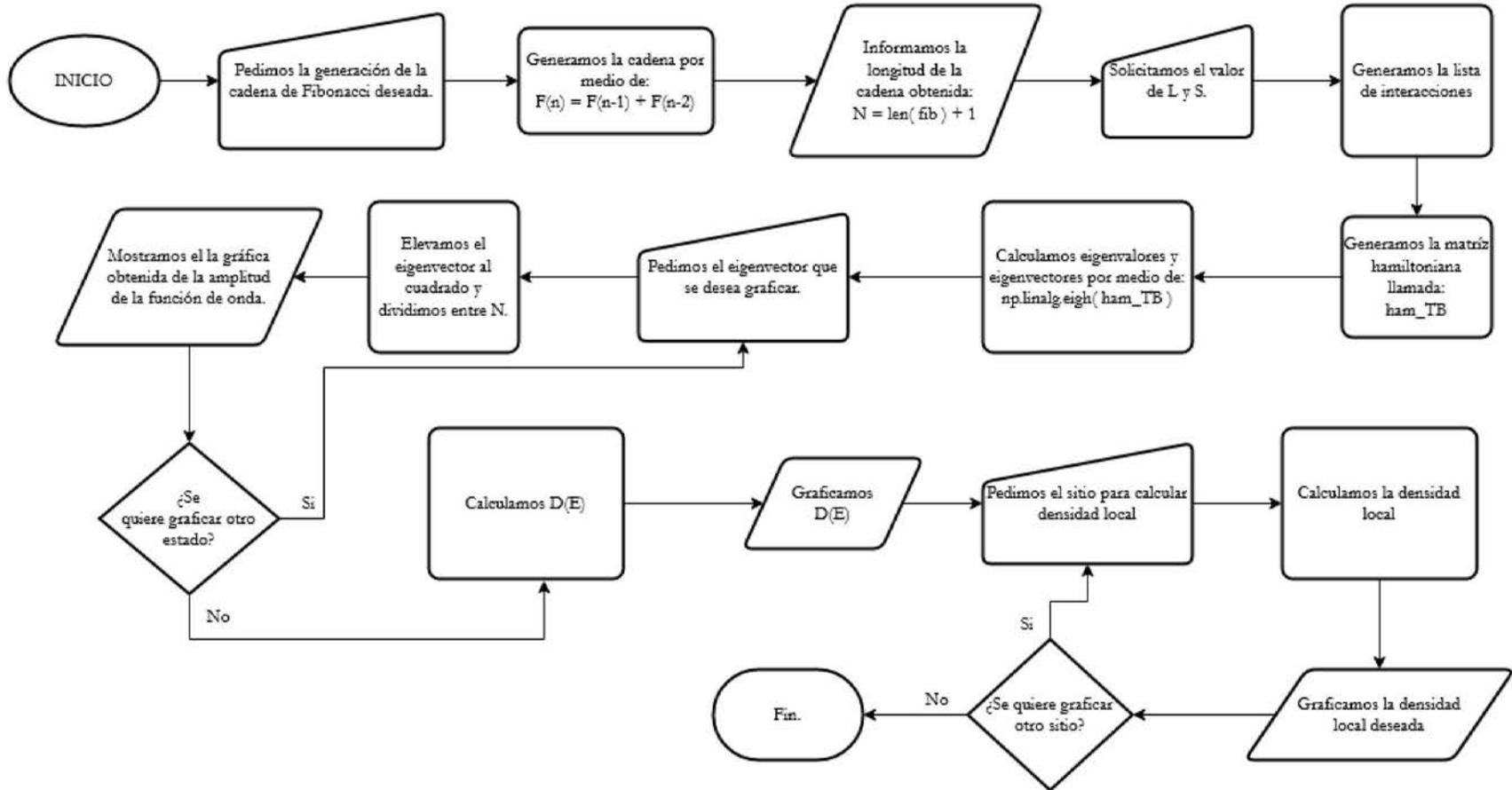


Figura B.1: Diagrama de flujo para el cálculo de la función de onda y densidades de estados para una cadena de Fibonacci en una dimensión.

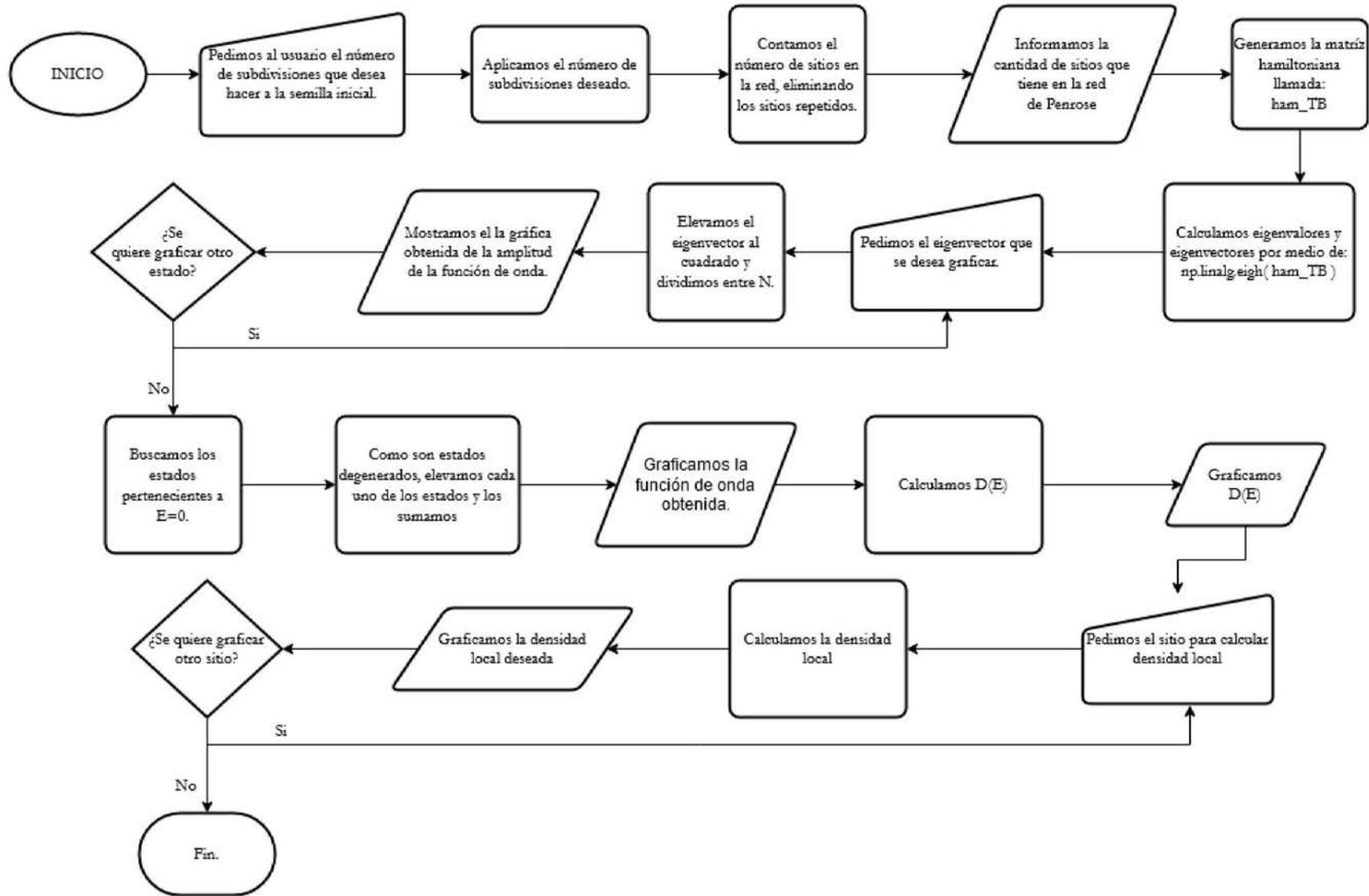


Figura B.2: Diagrama de flujo para el cálculo de la función de onda y densidades de estados para una red de Penrose.