



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**

POSGRADO EN CIENCIA E INGENIERÍA EN MATERIALES  
INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN MATERIALES, UNIDAD MORELIA

ESTRUCTURA ELECTRÓNICA EN SISTEMAS CUASIPERIÓDICOS

**TESIS**

QUE PARA OPTAR EL GRADO DE:  
MAESTRO EN CIENCIA E INGENIERÍA EN MATERIALES

PRESENTA:  
LIC. ERNESTO HUIPE DOMRATCHEVA

TUTOR PRINCIPAL  
DR. ORACIO NAVARRO CHÁVEZ  
INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN MATERIALES, UNIDAD MORELIA

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR  
DRA. BERTHA OLIVA AGUILAR REYES  
INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN MATERIALES, UNIDAD MORELIA,  
UNAM  
DR. GERARDO ANTONIO ROSAS TREJO  
INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN METALURGIA Y MATERIALES, UMSNH

MORELIA, OCTUBRE 2022



Universidad Nacional  
Autónoma de México



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

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

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

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

# Agradecimientos institucionales

Agradezco al Posgrado en Ciencia e Ingeniería en Materiales (PCEIM), UNAM por formarme de manera crítica con los mejores profesores y por las oportunidades de crecer a nivel académico y cultural, asimismo a la Unidad Morelia del Instituto de Investigaciones en Materiales (IIM-Unidad Morelia), por permitirme estudiar en sus instalaciones, utilizar sus laboratorios para mis prácticas de clase y su personal siempre dispuesto a ayudar. Agradezco también a la Dirección General de cómputo y Tecnologías de Información y Comunicación (DGTIC) de la UNAM, por proporcionarme licencias de software que utilicé durante la investigación para este trabajo de tesis.

Agradezco a mi comité tutor, compuesto por el Dr. Oracio Navarro Chávez, a la Dra. Bertha Oliva Aguilar Reyes, al Dr. Gerardo Antonio Rosas Trejo, por sus comentarios a mi tesis y sus observaciones, por acompañarme y guiarme durante mis estudios de maestría y por su atención.

Agradezco a mi jurado, compuesto por el Dr. Chumin Wang Chen, el Dr. Oracio Navarro Chávez, el Dr. Luis Antonio Perez Lopez, el Dr. Miguel Cruz Irisson y la Dra. Vicenta Sánchez Morales por sus comentarios a mi trabajo; estos lograron darle una nueva dimensión a este escrito.

Agradezco al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología - CONACYT, por el apoyo económico brindado bajo el programa de Becas Nacionales 2020-2.

# Agradecimientos personales

Durante el desarrollo de mi trabajo de investigación y la escritura de esta tesis, me han acompañado muchas personas en distintos momentos y situaciones. En primer lugar, quiero agradecer a mis padres, por la educación que me han brindado, y por siempre hacer lo posible para que yo aprenda.

Agradezco a mi asesor, el Dr. Oracio Navarro, por las amplias discusiones en su cubículo, y sus consejos que hicieron de esta investigación más interesante. También agradezco a Uriel Díaz, que acompañaba nuestras discusiones con ideas que no aceptaba en un principio, pero me permitieron tener otra perspectiva sobre mi trabajo.

Agradezco a mis amigos, Jorge, Marlén, Orlando, Jairo, Jordi, Juan, Andrea y Carolina. He compartido muchas noches de juegos, y pláticas con ellos. La variedad de temas sobre los que hablamos es muy variada y me ha permitido aprender cosas nuevas cada vez que los veo.

Durante los años de maestría, hubo personas a las que le tuve que decir adiós, Liudmila E. Lvova y A. Márquez. Han dejado su huella en mí, y son personas que recordaré con mucho cariño siempre.

En estos mismos años, conocí a Elaine, con quien he aprendido mucho y he compartido jornadas nocturnas de trabajo. El apoyo entre nosotros nos ha permitido crecer como jóvenes investigadores.

Finalmente, agradezco a Share $\text{\LaTeX}$  por el tutorial sobre cómo escribir una tesis en  $\text{\LaTeX}$  así como también 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, como 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 2018 se reportó la existencia de superconductividad convencional en muestras de Al-Zn-Mg, lo cual abre un panorama de posibilidades para el estudio de sistemas correlacionados. En esta tesis, se hace un estudio de la estructura electrónica resolviendo el problema de uno y dos cuerpos desde distintos enfoques. Iniciamos con la aproximación de amarre fuerte a dos cadenas acopladas, utilizando estos resultados, se hace un estudio de correlación electrónica utilizando el modelo de Hubbard en dos cadenas periódicas y cuasiperiódicas acopladas. Para resolver el Hamiltoniano de Hubbard, se utiliza un método de proyección mediante la representación del número de ocupación para obtener un sistema efectivo. Después de lo anterior, se procede a encontrar los eigenvalores del sistema efectivo mediante cálculos numéricos y analíticos.

# Abstract

Quasiperiodic systems changed the view that crystalline materials have, presenting orientational 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 2018 the existence of conventional superconductivity in quasicrystals was reported, in Al-Zn-Mg alloy, which broadens the possibilities for the study of correlated systems. In this thesis the electronic structure is approached solving the one and two body problem using tight-binding methodology for two coupled chains, periodic and quasyperiodic. For the two electron problem, we solve the Hubbard Hamiltonian and obtain the Density of States of the correlated and non correlated systems. To solve the Hubbard model, a projection method is used via the occupation number representation to obtain an effective system. Afterwards, the eigenvalues of the effective system are found, using numerical and analytical methods.

# Dedicación

Dedicado a L. E. Lvova.

# 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 surpassse  
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>
1.1. Antecedentes . . . . .	1
1.2. Planteamiento del problema . . . . .	6
1.3. Hipótesis . . . . .	6
1.4. Objetivos . . . . .	6
<b>2. Metodología</b>	<b>8</b>
2.1. Breve introducción a los sistemas cuasiperiódicos . . . . .	8
2.2. Modelo de amarre fuerte . . . . .	9
2.2.1. Cadena periódica infinita . . . . .	10
2.3. Modelo de Hubbard . . . . .	11
2.4. Espacio de estados . . . . .	11
2.5. Densidad de estados . . . . .	12
<b>3. Resultados y discusión</b>	<b>14</b>
3.1. Cadenas acopladas sin correlación . . . . .	14
3.1.1. Límite periódico . . . . .	14
3.1.2. Límite cuasiperiódico . . . . .	15
3.2. Correlación electrónica en cadenas acopladas . . . . .	18
3.2.1. Sistema periódico . . . . .	18
3.2.2. Método de proyección . . . . .	19
3.2.3. Solución de impurezas . . . . .	20
3.2.3.1. Solución antisimétrica . . . . .	23
3.2.3.2. Solución simétrica . . . . .	24
3.2.4. Sistema cuasiperiódico . . . . .	25
<b>4. Conclusiones</b>	<b>27</b>

# Índice de figuras

2.1. Densidad de estados de una cadena lineal (azul) y una red cuadrada (negro). . . . .	13
2.2. Densidad de estados de una cadena de Fibonacci en 1D, con $t_L = 1,3t_S$ . . . . .	13
3.1. Dos cadenas periódicas acopladas con parámetro de tunelamiento $t$ y $t'$ . . . . .	14
3.2. Densidad de estados de dos cadenas periódicas, en el caso cuando $t' = t$ . . . . .	16
3.3. Densidad de estados de dos cadenas cuasiperiódicas acopladas; para el caso cuando $t' = t_S$ y $f = 1,3$ (negro) y para el caso cuando la solución es exacta (azul). . . . .	17
3.4. Representación del espacio de estados. . . . .	20
3.5. Representación esquemática los dos tipos de soluciones. . . . .	23
3.6. Estructura equivalente para encontrar la solución simétrica. . . . .	24
3.7. Solución exacta de la densidad de estados de dos electrones correlacionados en dos cadenas de Fibonacci acopladas (azul), los parámetros usados son $t_L = -1,3$ , $t_S = t = -1$ y $U = -7,0 t $ . Solución analítica aproximada (3.16) para la densidad de estados de dos electrones correlacionados en un sistema de dos cadenas periódicas acopladas (negro), con el parámetro de acoplamiento $t' = t_S = t$ . Densidad de estado de dos electrones correlacionados en dos cadenas de Fibonacci acopladas (rojo), densidad de estados de los dos electrones correlacionados en dos cadenas acopladas de Fibonacci y periódica usando la aproximación descrita por la ecuación (3.16) (azul y negro, respectivamente). Los parámetros de acoplamiento utilizados son $t' = t_S$ . . . . .	26

# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Antecedentes

Dentro de la ciencia de materiales, la década de 1980 representa un periodo de importantes descubrimientos. Entre ellos se destaca el descubrimiento de los cuasicristales, por Dan Schechtman y colaboradores [1], y el descubrimiento de los superconductores de alta temperatura de transición por Bednorz y Müller [2]. Ambos representan un cambio de paradigma en diversas áreas de la ciencia de materiales. El reciente descubrimiento de superconductividad en un cuasicristal de Al-Zn-Mg abre un panorama de posibilidades debido a que presenta una longitud de coherencia electrónica del tipo superconductor convencional [3].

El descubrimiento de los cuasicristales fue acompañado de distintas interpretaciones de los patrones de difracción electrónica. Dan Schechtman y colaboradores propusieron que la simetría rotacional prohibida proviene de icosaedros con distintas orientaciones y la posibilidad de estar distorsionados en una celda unitaria, dejando al cristal en general consistente con los grupos puntuales y espaciales de la cristalografía [1]. Linus Pauling menciona que el resultado del patrón de difracción resulta de encontrarse 5 planos cúbicos, formando una macla [4, 5]. La explicación actualmente aceptada se debe a Levine y Steihardt [6, 7]; el arreglo atómico presenta orientación de enlace con simetría icosaedral de largo alcance y simetría traslacional de corto alcance. La teselación de Penrose es un arreglo en dos dimensiones que presenta estas características. Después del descubrimiento de Schechtman, se reportaron muchas aleaciones cuasicristalinas con mayor estabilidad [8]. Debido a lo anterior, la Unión Internacional de Cristalografía (IUCr) cambió la definición de cristal [9]. Esta definición establece que un cuasicristal, al igual que los cristales convencionales, presentan un patrón de difracción bien definido compuesto por picos de Bragg. Sin embargo, el indexado de los picos necesita un número mayor de vectores en la red recíproca comparado a la dimensión espacial. Lo anterior es el distintivo entre cristales y cuasicristales [10].

Dentro de los materiales cuasicristalinos, se ha encontrado que hay una clase especial en donde se presenta apilamiento periódico de capas cuasicristalinas [11], denominados *cuasicristales decagonales* (Decagonal QuasiCrystal - DQC). La dirección normal en los DQC puede tener varios periodos. Visto desde este punto, un DQC es un ejemplo de un material heteroestructurado [8, 12]. Los DQC pue-

den tener baja dimensionalidad, es decir, puede componerse de un cuasicristal en una dimensión y apilamiento periódico en la dirección normal. A principios de este milenio, se ha reportado la existencia de esta fase en un cuasicristal de Al-Co-Ni [13].

Se ha mencionado la existencia de materiales cuasicristalinos en la naturaleza, en muestras cuya formación data del triásico [14]. Se ha encontrado que el cuasicristal natural es una aleación Al-Cu-Fe, que se presenta en granos de escala micrométrica y los cuasicristales formados en la naturaleza bajo condiciones geológicas presentan estructura perfecta. Se ha encontrado la existencia de cuasicristales en meteoritos, lo cual nos puede dar información sobre los orígenes del sistema solar [15, 16, 17, 18, 19]. Los materiales cuasicristalinos no sólo se han encontrado en aleaciones metálicas; hay reportes de materiales organometálicos en donde se presenta simetría cuasicristalina [20], en reacciones fuera del equilibrio.

Las aplicaciones de los cuasicristales no han sido tan popularizadas como otros materiales [21]. Aún así, se ha encontrado aplicaciones para superficies antiadherentes [22]. También se han usado para la síntesis de carbono tipo cebolla (Onion Like Carbon - OLC), en molinos de alta energía [23], y síntesis de nano alambre de aluminio utilizando un cuasicristal de Al-Cu-Co [24], por mencionar algunos.

En 2018 se reportó la existencia de superconductividad en un cuasicristal de Al-Zn-Mg a 0.05 K [3]. La superconductividad reportada en esta muestra se cree es del tipo convencional, lo cual se puede deber a la longitud de coherencia cuasicristalina. Se hicieron cálculos teóricos utilizando el Hamiltoniano de Hubbard mediante una aproximación de campo medio [25, 26].

La historia de los superconductores inicia con su descubrimiento por Kamerlingh Onnes en 1911, y surgió debido al interés de los físicos de aquel entonces por licuar los gases [27]. Después de licuar por primera vez el Helio, debajo de los 4.22 K, Onnes pudo empezar a estudiar las propiedades de la materia bajo condiciones criogénicas [27]. El objetivo de sus investigaciones era determinar el comportamiento de la resistividad eléctrica. Unos de sus estudiantes de doctorado, Gilles Holst, experimentando con mercurio en un tubo capilar y sumergiéndolo en un baño térmico de He líquido, observó que la resistividad eléctrica de este caía abruptamente al pasar una temperatura crítica  $T_C$ . De lo anterior, Onnes se dio cuenta que tenía en frente un nuevo estado, que denominó *superconductor*. Onnes también encontró que el plomo y el estaño pueden pasar al estado superconductor.

A partir de los descubrimientos hechos por Onnes, surgió una carrera por determinar qué otras propiedades existen en el estado superconductor. Fue en 1933 cuando Meissner y Oschenfeld descubrieron que, en el estaño, para campos magnéticos bajos aplicados al material, el campo magnético en el interior de un material en el estado superconductor es siempre cero. De aquí surge el efecto *Meissner-Oschenfeld*. Fue a partir de este momento en que quedó establecido que la superconductividad es un estado de equilibrio termodinámico [28].

En 1948, Fritz London publicó un artículo donde se explica el mecanismo termodinámico de la superconductividad [29]. La descripción que hizo London fue desde un

punto de vista macroscópico de la electrodinámica y la termodinámica [28]. London menciona que el estado superconductor no se debe a un ordenamiento electrónico de la red, sino a un estado condensado en el espacio de momentos.

En 1950 se publicaron dos artículos en donde se reportan experimentos en donde se encontraban variaciones de la temperatura crítica en distintos isótopos del mercurio [30, 31]. La temperatura crítica varía aproximadamente un 0,9 % en los isótopos  $\text{Hg}^{199}$  y  $\text{Hg}^{203}$ , en donde el primer isótopo presentaba una temperatura crítica mayor. Esto causó gran interés en la comunidad científica debido a que la estructura electrónica en los isótopos es la misma. Como los iones más ligeros pueden oscilar mejor, esto puede dar lugar a una mejor conductividad. Una primera aproximación para explicar microscópicamente el estado superconductor fue dado por J. Bardeen [32] y H. Frölich [33]. En esta aproximación, se estudió la interacción electrón-fonón en los metales, responsable de la interacción atractiva entre los electrones [28]. La distancia de correlación entre los electrones superconductores fue medida por Pippard, quien encontró que es del orden de  $10^{-4}$  cm [34]. Después de lo anterior, Leon N. Cooper mostró que dos electrones colocados por encima del nivel de Fermi con una interacción atractiva entre ellos forman un estado enlazado con energía menor a la de los electrones libres [35]. Al estado enlazado se le llama *Par de Cooper*. A partir del trabajo anterior, con la colaboración de John Robert Schrieffer, y bajo la dirección de John Bardeen, se investigó la posibilidad de que el estado superconductor fuera uno formado por pares de Cooper [36]. De lo anterior surgió la teoría BCS (Bardeen, Cooper y Schrieffer), primera teoría capaz de explicar la transición superconductor en algunos metales [28].

El mecanismo de la superconductividad en BCS surge a partir de la interacción electrón fonón. Dentro de la red cristalina, los átomos tienen la posibilidad de oscilar alrededor de su posición de equilibrio. Debido a esto, el conjunto de todos los átomos de la red cristalina oscilan en conjunto, formando estados vibracionales que tienen momento y frecuencia. La red cristalina puede estar en distintos modos vibracionales. Para pasar de un estado vibracional a otro, se inyecta o absorbe un fonón. Cuando un electrón de conducción pasará cerca de los iones del cristal, este puede deformar la red creando un centro de polarización positiva; un segundo electrón se siente atraído por esta deformación, creando así un par ligado [36] y superando la repulsión de Coulomb.

Para poder obtener información del estado superconductor, Bardeen, Cooper y Schrieffer propusieron que la física esencial del estado superconductor se debe al apareamiento electrónico. Este apareamiento se da entre electrones de espín opuesto. El Hamiltoniano BCS que describe la esencia del estado superconductor tiene la forma:

$$H_{BCS} = \sum_k \epsilon_k (c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} + c_{-k\downarrow}^\dagger c_{-k\downarrow}) - \sum_{k,k'} V_{k,k'} c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k'\downarrow}^\dagger c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow}, \quad (1.1)$$

$c_{k\sigma}$  es un operador que aniquila una partícula con espín  $\sigma$  y momento  $k$ , y es creada mediante  $c_{k\sigma}^\dagger$  con momento  $k$  y espín  $\sigma$ .  $\epsilon_k$  es el término de energía cinética de los electrones libres dependiente del momento, el término  $V_{k,k'}$  incluye la interacción entre iones y electrones así como la repulsión de Coulomb entre los electrones apareados.

Hubo varios intentos por calcular la temperatura crítica de los elementos usando la teoría BCS. En 1958, David Pines publicó un artículo en el que calcula la interacción electrón fonón por métodos aproximados, obteniendo un criterio para la superconductividad que depende de un parámetro  $Z^*$  y  $r_s$ , que representa la valencia del ion y la densidad de electrones, respectivamente [37]. A partir de lo anterior, obtiene que los elementos Sc, Y, Ba y Sr deberían de presentar superconductividad. Elementos como el Al, Be, Zn, Hg y Ru no deberían presentar superconductividad pero si la tienen. Al intentar calcular la  $T_c$ , concluye que los valores para la interacción electrón fonón no son suficientes para hacer estimaciones que coincidan con los resultados experimentales [37].

El trabajo de Pines es uno de los primeros trabajos que anticipan las dificultades que tiene BCS para poder predecir superconductividad u obtener valores de la temperatura crítica. Con el avance de los años, los métodos de cálculo se hicieron cada vez más sofisticados, al grado de que las aproximaciones que hacen los autores se hacen difíciles de entender. Un ejemplo de esto es un artículo publicado por Carbotte y Dynes [38], en donde calcularon la temperatura crítica del Al y encontraron que esta es de 1.17 K, muy cercana al valor obtenido experimentalmente de 1.18 K. El artículo es de dos páginas y no dan muchos detalles. Otros ejemplos en donde se intenta predecir temperaturas críticas se pueden ver en las referencias [39, 40] entre otros. Como la interacción toma en cuenta los modos vibracionales de la red, se consideraba que la temperatura de transición superconductor tenía un máximo de 25 K [41].

En 1986 Bednorz y Müller reportaron un compuesto  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$  tipo perovskita [2] con una temperatura de transición superconductor de 30 K. Esto dió un impulso más al estudio de los superconductores, ya que se empezó a reportar superconductividad en compuestos similares como el  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  [42], que tiene una estructura tipo perovskita. La ventaja de este tipo de compuestos es que ahora se encuentra superconductividad a temperaturas mayores al punto de ebullición del nitrógeno líquido. Se cree que la superconductividad en estos compuestos se debe a la presencia de planos de  $\text{CuO}_2$ , lo cual ha estimulado el estudio de los sistemas de baja dimensionalidad. Años más tarde, se reportó la presencia de superconductividad por encima de 130 K [43].

Una distinción importante entre los superconductores de alta  $T_C$  (tipo II) y los superconductores convencionales (tipo I) es la longitud de coherencia. En el compuesto superconductor  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  se tienen longitudes de coherencia de 15 a 40 Å [28], lo cual es varios órdenes de magnitud menor a las distancias de coherencia en los superconductores tipo I.

Además de los superconductores basados en  $\text{CuO}_2$  (*cupratos*), [44] también existen los superconductores basados en hierro [45] y superconductores basados en níquelatos [46]. En los casos anteriores, se conjetura que la superconductividad se debe a la bidimensionalidad del sistema y su apilamiento, lo cual da origen a un material heteroestructurado.

A partir de la síntesis de grafeno monoatómico por defoliación mecánica [47], se ha impulsado la investigación y síntesis de materiales de baja dimensión. Fue en 2018 que se encontró superconductividad en estos sistemas a 1,7 K, con la particularidad de que se tienen dos capas de grafeno rotadas una respecto a otra [48]. Hay indicios de que existe superconductividad en 3 capas de grafeno rotado [49]. Los sistemas de grafeno rotado no son los únicos que presentan superconductividad bajo esta configuración de patrón de Moiré; también se ha reportado la existencia de superconductividad en bicapas rotadas de dicalcogenuros de metales de transición [50].

Existen diversas aproximaciones para estudiar la estructura electrónica en los materiales. Una aproximación simple pero poderosa es el modelo de amarre fuerte. Este modelo considera la simetría de la red y el tunelamiento electrónico de un sitio de la red a otro [51]. El modelo de amarre fuerte ha permitido explicar el comportamiento electrónico del grafeno y otros materiales [52]. En lenguaje de segunda cuantización, el Hamiltoniano de amarre fuerte tiene la forma:

$$\hat{H} = \sum_{ij} t_{ij} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j, \quad (1.2)$$

cada término de esta suma consiste en un proceso en el cual,  $\hat{c}_j$  aniquila una partícula en el sitio  $j$  y es creada mediante  $\hat{c}_i^\dagger$  en el sitio  $i$  con energía  $t_{ij}$  [53];  $i, j$  son los índices de los sitios atómicos y la suma se realiza sobre los vecinos más cercanos. Así, conociendo la forma de la red, es posible obtener la relación de dispersión de los electrones.

El estudio de los materiales superconductores ha impulsado la investigación del fenómeno de correlación electrónica en sólidos [28]. Así, el estudio de correlación electrónica es relevante para explicar una variedad de propiedades en los materiales como la superconductividad en cerámicos, la conductividad en polímeros, por mencionar algunos casos [28].

El modelo de Hubbard nos permite estudiar la correlación electrónica incluyendo los efectos de todo tipo de interacciones electrónicas mediante diversos parámetros [54]. Su importancia en la física del estado sólido se debe a que captura la física esencial de la competición entre la energía cinética y la potencial. La primera energía deslocaliza los electrones y la segunda los localiza [54, 53]. A pesar de la simplicidad del modelo, no es fácil de resolver [55, 56]. El modelo de Hubbard está basado en el modelo de amarre fuerte (que modela la energía cinética) mas un potencial energético de dos cuerpos (modela la correlación electrónica). La forma del Hamiltoniano de Hubbard es

$$\hat{H} = \sum_{ij} (-t_{ij}) \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow}, \quad (1.3)$$

$\hat{c}_i^\dagger$  ( $\hat{c}_j$ ) es el operador de creación (aniquilación) y  $\hat{n}_{i,\sigma} = \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma}$  es el operador de número [53]. El Hamiltoniano de Hubbard no sólo ha sido utilizado para el estudio de correlación electrónica en materiales. Winkler y colaboradores utilizaron el modelo de Hubbard para explicar los resultados obtenidos al liberar átomos de Rubidio en una red óptica [57]. Las predicciones hechas mediante el modelo de Hubbard se

cumplieron en sus resultados experimentales.

## 1.2. Planteamiento del problema

El cálculo de la relación de dispersión nos permite conocer la estructura de las bandas electrónicas en los materiales. Para el caso periódico se aprovecha la simetría del sistema para simplificar los cálculos. Al introducir la correlación electrónica, aumenta el número de parámetros de los cuales depende el sistema, ya que ahora el objetivo es resolver un problema de dos cuerpos. Para el caso de los sistemas cuasiperiódicos esto se complica, debido a la ausencia de periodicidad. Así, el problema a resolver consiste en encontrar una manera de calcular la energía de correlación electrónica en dos sistemas cuasiperiódicos acoplados. El sistema cuasiperiódico a estudiar es la cadena de Fibonacci.

## 1.3. Hipótesis

El espectro debido a la correlación electrónica en dos cadenas de Fibonacci acopladas y su respectiva función de onda será autosimilar debido a las propiedades de cuasiperiodicidad en las cadenas. La función de correlación conservará la simetría del sistema.

## 1.4. Objetivos

- Modelar un sistema cuasiperiódico compuesto por dos cadenas de Fibonacci en una dimensión, paralelas y separadas por un parámetro de red fijo, a partir del Hamiltoniano de amarre fuerte.
- Modelar un sistema cuasiperiódico compuesto por dos cadenas de Fibonacci en una dimensión, paralelas y separadas por un parámetro de red fijo a partir del Hamiltoniano de Hubbard.
- Comparar los resultados obtenidos con un sistema periódico análogo bajo los mismos modelos, amarre fuerte y Hubbard.
- Obtener expresiones analíticas para las energías de correlación electrónica en los sistemas periódicos.

En esta tesis nos centraremos en explicar la estructura electrónica de dos cadenas de Fibonacci acopladas. Debido a lo anterior, desarrollamos primero el caso límite de dos cadenas periódicas acopladas. El estudio de sólidos de baja dimensión se ha estudiado históricamente por su simplicidad matemática [58]. El hecho de que estén acopladas, nos permite un primer estudio de materiales heteroestructurados en sistemas cuasiperiódicos.

El capítulo 2 se inicia haciendo una breve descripción de los sistemas cuasiperiódicos, lo necesario para entender su naturaleza y obtener las herramientas metodológicas necesarias para su modelado. Continúa una descripción del modelo de

amarre fuerte, que será la base esencial para los temas siguientes. Seguimos con el modelo de Hubbard, que se puede ver como un Hamiltoniano de amarre fuerte en donde se introduce la correlación electrónica. Finalizamos el capítulo describiendo el espacio de estados, en donde se pueden representar los distintos estados que presentan dos electrones en una misma red. En el capítulo 3, utilizamos la teoría desarrollada en el marco teórico a nuestro caso de estudio, que son dos cadenas acopladas, en el límite periódico y cuasiperiódico. Empezamos por el caso sencillo, en donde describimos la estructura electrónica de las cadenas sin correlación electrónica para cada uno de los límites mencionados. Teniendo los resultados anteriores, podemos continuar describiendo la correlación electrónica en los sistemas descritos. En el capítulo 4, concluimos las ideas descritas en los capítulos 2 y 3.

# Capítulo 2

## Metodología

### 2.1. Breve introducción a los sistemas cuasiperiódicos

Los sistemas cuasiperiódicos o cuasicristales son sistemas ordenados pero que no tienen una periodicidad definida [11]. Su descripción matemática puede hacerse similar a la de los cristales convencionales, considerando un conjunto de vectores base, y una red [59], sin embargo, hay que hacer ciertas consideraciones. Los cuasicristales tienen propiedades que los distinguen de los cristales convencionales [7], estas son:

- Orden rotacional: Los ángulos de enlace entre átomos vecinos o clusters tienen correlaciones de largo alcance y están orientados (en promedio) a lo largo de una estrella de ejes que define el orden rotacional. La estrella de ejes es un conjunto de vectores que define la simetría rotacional del cuasicristal [7].
- Separación mínima entre sitios atómicos: Existen distancias  $r, R > 0$  tal que la separación  $l$  entre cualesquiera dos primeros vecinos satisface  $r < l < R$  [7].
- Orden traslacional cuasiperiódico: La función de densidad de un cuasicristal es cuasiperiódica. Una función es cuasiperiódica si puede ser expresada como una suma de funciones periódicas en donde el cociente entre las dos es irracional. Un ejemplo de una función cuasiperiódica es [7]:

$$f(x) = \cos(x) + \cos(\pi x). \quad (2.1)$$

La cuasiperiodicidad es caracterizada por conjuntos especiales de números irracionales. El conjunto de números irracionales está restringido por la simetría rotacional siempre y cuando esa simetría sea no cristalográfica. De lo anterior, es útil describir un cuasicristal a partir de su orden rotacional y cuasiperiodicidad [7]. Las definiciones previas nos ayudan a construir una multitud de sistemas cuasiperiódicos, tomando en cuenta la función cuasiperiódica y la simetría rotacional. El método dual generalizado (*Generalized Dual Method - GDM*) toma en cuenta estos parámetros y permite construir sistemas cuasiperiódicos [60].

A partir de lo anterior, consideremos un cuasicristal que tiene simetría unitaria cuya función cuasiperiódica es [7]:

$$x_N = N + A + \frac{1}{\tau} \left[ \frac{N}{\tau} + B \right]. \quad (2.2)$$

$x_N$  es la posición del  $N$ -ésimo punto de la función cuasiperiódica,  $\tau = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$  es la razón dorada,  $A, B \in \mathbf{R}$  son dos números arbitrarios, y  $\lfloor \cdot \rfloor$  representa la función piso. El término  $N$  corresponde a un espaciado periódico de longitud unitaria. De lo anterior, vemos que  $x_N$  es una función cuasiperiódica ya que el cociente de sus términos es irracional.

El espaciado de cualesquiera dos puntos consecutivos ( $x_N - x_{N-1}$ ) será  $L$  o  $S$ , donde  $L/S = 1 + 1/\tau$ , y la secuencia en la que aparecen las distancias  $L$  y  $S$  es la secuencia de Fibonacci [7]. Esta secuencia se puede formar mediante el algoritmo que genera los números de Fibonacci [61], es decir:

$$F(n) = F(n-1) \oplus F(n-2). \quad (2.3)$$

pero en vez de generar números, obtenemos distancias, en donde el símbolo  $\oplus$  significa concatenación. Si definimos  $F(0) = S$  y  $F(1) = L$  podemos ver cómo esta cadena de distancias crece

$$\begin{aligned} F(2) &= F(1) \oplus F(0) = LS, \\ F(3) &= F(2) \oplus F(1) = LSL, \\ F(4) &= F(3) \oplus F(2) = LSLLS, \\ F(5) &= F(4) \oplus F(3) = LSLLSLSL, \\ F(6) &= F(5) \oplus F(4) = LSLLSLSLLSLS, \\ &\vdots \end{aligned}$$

Sea  $N_L(n)$  el número de veces que aparece la distancia  $L$  y  $N_S(n)$  el número de veces que aparece la distancia  $S$ , el número total de distancias en cierta sucesión de Fibonacci de generación  $n$  será:

$$N(n) = N_L(n) + N_S(n). \quad (2.4)$$

Se puede definir  $N_L(n) = N(n-1)$  y  $N_S(n) = N(n-2)$ , por lo que  $N_L(n)$  y  $N_S(n)$  representan la sucesión numérica de Fibonacci [61]. A partir de lo anterior, se cumple el siguiente cociente

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{N_L(n)}{N_S(n)} = \tau. \quad (2.5)$$

## 2.2. Modelo de amarre fuerte

El modelo de amarre fuerte es una herramienta que nos permite estudiar la estructura de bandas de un material desde un punto de vista cualitativo y cuantitativo. Un ejemplo que ilustra la utilidad y sencillez de este modelo es la molécula diatómica de hidrógeno. Resolviendo la ecuación de Schrödinger para la molécula mediante el modelo de amarre fuerte, se obtiene la energía de enlace de esta, que es menor a la energía que tiene el átomo libre. Este mismo ejercicio se puede aplicar para distintas moléculas diatómicas, obteniendo resultados fiables. La parte clave del modelo de amarre fuerte consiste en construir un eigenestado que es combinación lineal de los orbitales atómicos de los átomos que conforman a la molécula. También se considera la aproximación de Born-Oppenheimer, en donde la posición de los núcleos es fija

respecto a la posición de los electrones.

Para moléculas de mayor tamaño y materiales en el límite termodinámico se utilizan las ideas presentadas en la molécula diatómica de hidrógeno, pero con algunos cambios. Por lo anterior, presentaremos a continuación el modelo de amarre fuerte a una cadena periódica infinita.

### 2.2.1. Cadena periódica infinita

Consideramos una cadena periódica de átomos, que es el equivalente a considerar una cadena periódica de orbitales, con la particularidad de que modelaremos un sólido en una dimensión. Para lo anterior, decimos que hay un orbital en un átomo  $n$  que llamaremos  $|n\rangle$ . Para resolver el caso macroscópico, consideramos que tenemos condiciones de frontera periódicas (o condiciones de frontera de Born-von Karman). Asumimos que los orbitales no se traslapan, por lo que son ortonormales uno respecto a otro, simbólicamente esto se representa como  $\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$ . Ahora consideramos un eigenvector de la forma

$$|\Psi\rangle = \sum_n \phi_n |n\rangle. \quad (2.6)$$

Introducimos este eigenvector a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo  $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ , utilizamos también el operador identidad  $\sum_m |m\rangle\langle m|$  entre  $|\Psi\rangle$  y  $H$ , por lo que obtenemos:

$$\sum_{n,m} H|m\rangle\phi_n\langle m|n\rangle = E\sum_n \phi_n |n\rangle, \quad (2.7)$$

$$\sum_m H|m\rangle\phi_m = E\sum_n \phi_n |n\rangle. \quad (2.8)$$

Proyectando la ecuación anterior sobre un estado  $|n\rangle$  se tiene

$$\sum_m \langle n|H|m\rangle\phi_m = E\sum_n \phi_n \langle n|n\rangle. \quad (2.9)$$

De la expresión anterior, tenemos los elementos de la matriz hamiltoniana  $\langle n|H|m\rangle = H_{mn}$ . Hasta ahora obtuvimos la ecuación de Schrödinger efectiva

$$\sum_m H_{mn}\phi_m = E\phi_n, \quad (2.10)$$

considerando interacción sólo a primeros vecinos  $H_{mn}$  puede tener los siguientes valores

$$H_{mn} = \begin{cases} \alpha, & \text{si } m = n, \\ t, & \text{si } m = n \pm 1. \end{cases}$$

$\alpha$  representa la energía de sitio, que es la energía que tiene el átomo individualmente.  $t$  se conoce como el *parámetro de salto* [62] y tiene como unidad el electron-Volt. También se puede encontrar en la literatura como *elemento de matriz de transferencia* que permite al electrón saltar de un sitio dado a su vecino [63]. Para el caso de una cadena periódica, se propone una solución de la forma

$$\phi_n = \frac{e^{-ikna}}{\sqrt{N}}, \quad (2.11)$$

donde el denominador funciona como una constante de normalización indicando el número de sitios en el sistema.  $a$  es el parámetro de red de la cadena,  $k$  es el vector de onda. Introduciendo (2.11) en (2.10) nos da

$$\sum_m H_{mn} \phi_m = \alpha \frac{e^{-ikna}}{\sqrt{N}} + t \left( \frac{e^{-ik(n+1)a}}{\sqrt{N}} + \frac{e^{-ik(n-1)a}}{\sqrt{N}} \right) = E \frac{e^{-ikna}}{\sqrt{N}} = E \phi_n, \quad (2.12)$$

por lo que obtenemos la relación de dispersión o espectro del sistema

$$E = \alpha + 2t \cos(ka) \quad (2.13)$$

## 2.3. Modelo de Hubbard

El modelo de Hubbard se puede ver como un modelo que introduce correlación electrónica en un modelo de amarre fuerte para un arreglo atómico. El modelo de Hubbard tiene la particularidad de que se escribe en lenguaje de segunda cuantización.

El modelo de Hubbard contiene la información sobre la competencia de la energía cinética (favoreciendo a los electrones a deslocalizarse) y la energía potencial (favoreciendo a los electrones a localizarse). El modelo de Hubbard está basado en un Hamiltoniano de amarre fuerte (que modela la energía cinética) más un término de energía de dos cuerpos (que modela la interacción electrón-electrón). Tomando en cuenta que los electrones tienen espín  $\sigma$  que puede apuntar hacia arriba  $|\uparrow\rangle$  o espín hacia abajo  $|\downarrow\rangle$ , por lo tanto tenemos:

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl\sigma\sigma'} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma'}^\dagger V_{ijkl} \hat{c}_{k\sigma'} \hat{c}_{l\sigma}. \quad (2.14)$$

La interacción entre los electrones es de tipo Columbiano, por lo que los electrones de espín opuestos interactuarán tanto como los que tienen espín igual. Sin embargo, en el modelo de Hubbard se considera sólo la interacción entre dos electrones que estén en el mismo sitio. Estos electrones interactúan mediante una constante de energía potencial  $U = V_{iiii}$ , sin embargo, el principio de exclusión de Pauli nos garantiza que dos electrones que estén en el mismo sitio tendrán espín opuesto, por lo tanto, el Hamiltoniano de Hubbard toma la forma

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}. \quad (2.15)$$

## 2.4. Espacio de estados

El espacio de estados es un conjunto de elementos donde están contenidos todos los estados posibles de un sistema dado. El modelo de amarre fuerte considera un espacio de estados de una sola partícula; resolviendo el Hamiltoniano de amarre fuerte podemos conocer la dinámica de la partícula. El caso resuelto en la cadena periódica infinita nos permite generalizar este resultado a mas de una dimensión y considerar distintos grados de libertad.

Para el caso de una partícula en una red cúbica simple (SC), el espacio de estados es  $\mathcal{E}_{SC}$ , que se puede ver como el producto tensorial de tres espacios de estados, cada uno en las direcciones de un sistema coordenado [64], es decir:

$$\mathcal{E}_{SC} = \mathcal{E}_x \otimes \mathcal{E}_y \otimes \mathcal{E}_z. \quad (2.16)$$

Usando el producto tensorial, podemos obtener más información de la red SC a partir de la cadena lineal. La función de onda de la red SC con parámetro de red  $a$  tendrá la forma:

$$|\Psi_{SC}\rangle = |\Psi_x\rangle \otimes |\Psi_y\rangle \otimes |\Psi_z\rangle = \sum_{m,n,l} e^{i(k_x m + k_y n + k_z l)a} |m, n, l\rangle \quad (2.17)$$

Podemos omitir el símbolo de producto tensorial y escribir el producto de funciones de onda siguiendo la notación  $|i\rangle \otimes |j\rangle = |i, j\rangle$ . La relación de dispersión se obtiene resolviendo la ecuación de Schrödinger:

$$H |\Psi_{SC}\rangle = H |\Psi_x, \Psi_y, \Psi_z\rangle = E_{SC} |\Psi_x, \Psi_y, \Psi_z\rangle, \quad (2.18)$$

$$= (E_x + E_y + E_z) |\Psi_x, \Psi_y, \Psi_z\rangle, \quad (2.19)$$

$$= (\alpha + 2t [\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)]) |\Psi_x, \Psi_y, \Psi_z\rangle \quad (2.20)$$

Usando el producto tensorial del espacio de estados, podemos aprovechar la simetría del sistema para obtener relaciones de dispersión de manera simple. Este formalismo se puede aprovechar para el estudio de múltiples partículas que interactúan, como el Hamiltoniano de Hubbard.

## 2.5. Densidad de estados

La densidad de estados (*Density Of States - DOS*) describe la cantidad de estados presentes en un intervalo de energía. La DOS nos permite estudiar la estructura electrónica de un sistema dado conociendo los eigenvalores  $E_k$  del sistema. La DOS se representa mediante:

$$D(E) = \sum_{E_k} \delta(E - E_k), \quad (2.21)$$

donde  $\delta(E - E_k)$  es la función delta de Dirac centrada en  $E_k$ . Mediante la ecuación (2.21) podemos visualizar la densidad de estados a partir de un espectro dado. En la Figura 2.1 se muestra la densidad de estados de una cadena periódica infinita y una red cuadrada. En la Figura 2.2 se observa la densidad de estados para una cadena de Fibonacci.

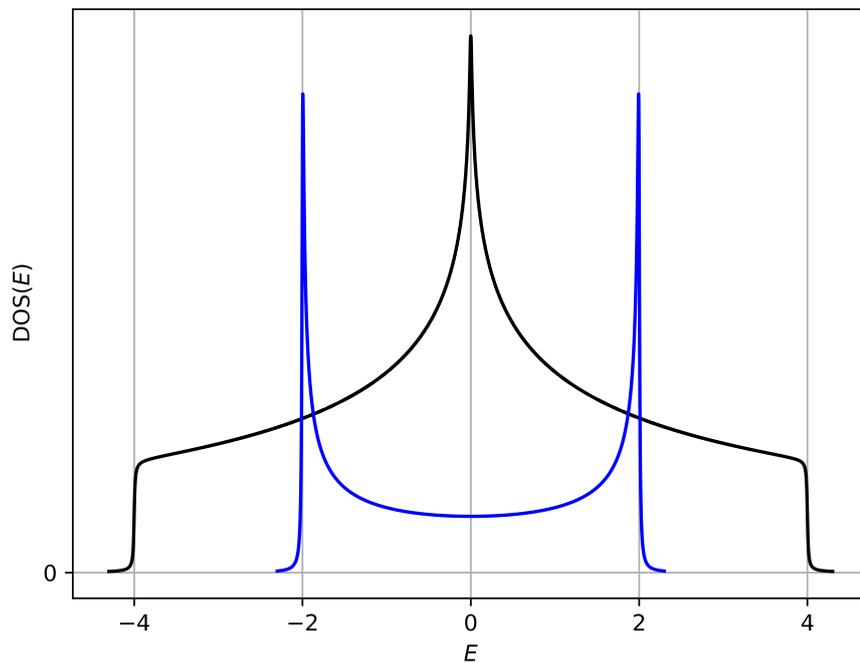


Figura 2.1: Densidad de estados de una cadena lineal (azul) y una red cuadrada (negro).

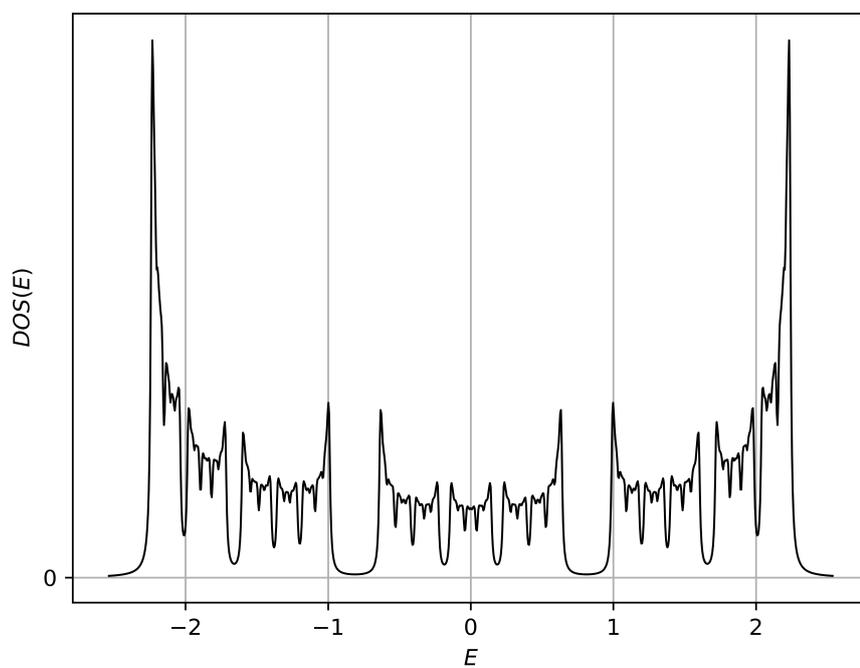


Figura 2.2: Densidad de estados de una cadena de Fibonacci en 1D, con  $t_L = 1,3t_S$ .

# Capítulo 3

## Resultados y discusión

### 3.1. Cadenas acopladas sin correlación

#### 3.1.1. Límite periódico

Empecemos por calcular la relación de dispersión de un electrón en una cadena periódica acoplada, ilustrada en la Figura 3.1. La función de onda de este sistema será el producto tensorial de la función de onda de la molécula diatómica de Hidrógeno y la cadena periódica infinita, por lo tanto:

$$|\Psi\rangle = |\Psi_{H_2}\rangle \otimes |\Psi_k\rangle, \quad (3.1)$$

$$= (c_1 |1\rangle + c_2 |2\rangle) \otimes \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{ikma} |m\rangle, \quad (3.2)$$

$$= \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{ikma} (c_1 |m, 1\rangle + c_2 |m, 2\rangle), \quad (3.3)$$

$m$  es la base de la cadena periódica  $|\Psi_k\rangle$ , 1, 2 es la base de la molécula diatómica de Hidrógeno  $|\Psi_{H_2}\rangle$ ,  $k$  es el vector de onda y  $c_n$  son los pesos de la función de onda de la molécula de Hidrógeno, que cumple  $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$ .

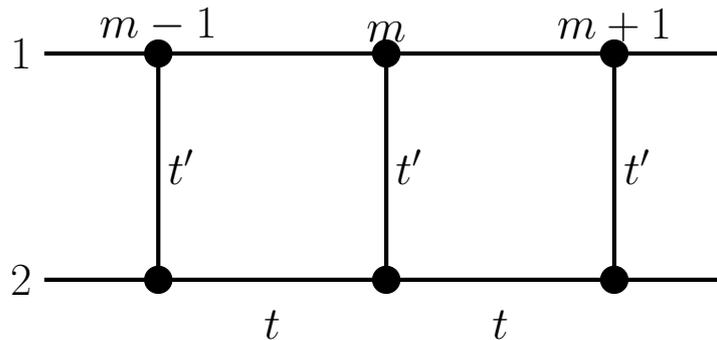


Figura 3.1: Dos cadenas periódicas acopladas con parámetro de tunelamiento  $t$  y  $t'$ .

Introducimos el eigenvector anterior en la ecuación de Schrödinger obteniendo:

$$\begin{aligned} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{ikma} (c_1 H |m, 1\rangle + c_2 H |m, 2\rangle) = \\ E \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{ikma} (c_1 |m, 1\rangle + c_2 |m, 2\rangle) \end{aligned} \quad (3.4)$$

Proyectando (3.4) sobre  $|0, 1\rangle$  se tiene

$$\begin{aligned} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{ikma} \left( c_1^{(1)} \langle 0, 1 | H |m, 1\rangle + c_2^{(1)} \langle 0, 1 | H |m, 2\rangle \right) = \\ E \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{ikma} \left( c_1^{(1)} \langle 0, 1 |m, 1\rangle + c_2^{(1)} \langle 0, 1 |m, 2\rangle \right). \end{aligned} \quad (3.5)$$

de lo anterior obtenemos la primer ecuación

$$(\alpha + e^{-ika}t + e^{ika}t)c_1^{(1)} + t'c_2^{(1)} = E_k^{(1)}c_1^{(1)}. \quad (3.6)$$

Proyectando ahora la ecuación (3.4) sobre  $|0, 2\rangle$  se obtiene:

$$t'c_1^{(2)} + (\alpha + e^{-ika}t + e^{ika}t)c_2^{(2)} = E_k^{(2)}c_2^{(2)}, \quad (3.7)$$

de las dos ecuaciones anteriores obtenemos el siguiente determinante:

$$\begin{vmatrix} \alpha + 2t \cos(ka) - E & t' \\ t' & \alpha + 2t \cos(ka) - E \end{vmatrix} = 0 \quad (3.8)$$

En donde obtenemos la ecuación  $(\alpha + 2t \cos(ka) - E)^2 - t'^2 = 0$ , finalmente las soluciones son del tipo:

$$E_b = \alpha + 2t \cos(ka) - |t'|, \quad E_a = \alpha + 2t \cos(ka) + |t'|. \quad (3.9)$$

### 3.1.2. Límite cuasiperiódico

En el límite cuasiperiódico, los parámetros de tunelamiento se sustituyen por  $t_L$  y  $t_S$  siguiendo una secuencia de Fibonacci. En forma matricial, el Hamiltoniano tiene la forma:

$$H_{Fib} = \begin{pmatrix} \alpha & t_L & 0 & 0 & \dots & t_L \\ t_L & \alpha & t_S & 0 & \dots & 0 \\ 0 & t_S & \alpha & t_L & \dots & 0 \\ 0 & 0 & t_L & \alpha & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ t_L & 0 & 0 & 0 & \dots & \alpha \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

La matriz (3.10) se resuelve numéricamente dándonos el espectro de la una cadena de Fibonacci en aproximante periódico, en donde los términos  $t_L$  en las posiciones  $(1, n)$  y  $(n, 1)$  son las condiciones a la frontera, el caso de una dimensión se ilustra

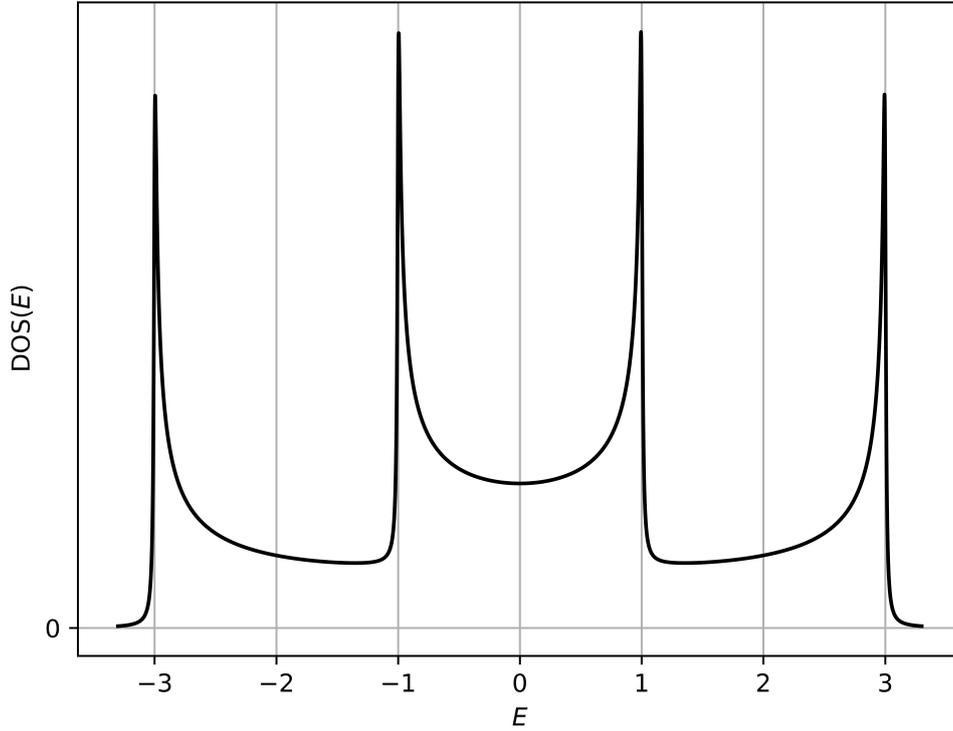


Figura 3.2: Densidad de estados de dos cadenas periódicas, en el caso cuando  $t' = t$ .

en la Figura 2.2. Utilizando el resultado de la ecuación (3.9), obtenemos la densidad de estados coloreada en azul en la Figura 3.3.

Podemos hacer una aproximación para el resultado cuasiperiódico pero sin obtener las brechas distintivas de la cadena de Fibonacci; esta aproximación nos permite calcular los bordes de la banda de una cadena cuasiperiódica infinita, pero mediante un único parámetro de salto. Introduciendo un parámetro  $f$  podemos relacionar los valores de los parámetros de tunelamiento de Fibonacci, así  $t_L = ft_S$ . Si  $f = 1$ , se tiene un sistema periódico. A partir de lo anterior, podemos hacer una aproximación para obtener un parámetro de salto efectivo que considere la cuasiperiodicidad de la red [65]. Iniciamos con el Hamiltoniano de amarre fuerte para una cadena cuasiperiódica, que se puede expresar mediante:

$$H = \sum_{i,j} t_{i,j} |i\rangle \langle j|. \quad (3.11)$$

Considerando a  $\bar{t}$  como un parámetro de hopping promedio, podemos escribir:

$$\bar{t} = \langle \Psi | H | \Psi \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i,j} t_{i,j} = \frac{1}{N} (N_L(n)t_L + N_S(n)t_S) \quad (3.12)$$

donde  $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n |n\rangle$ . Cuando  $n \rightarrow \infty$ , usamos el hecho de que  $N = N_L + N_S$ ,

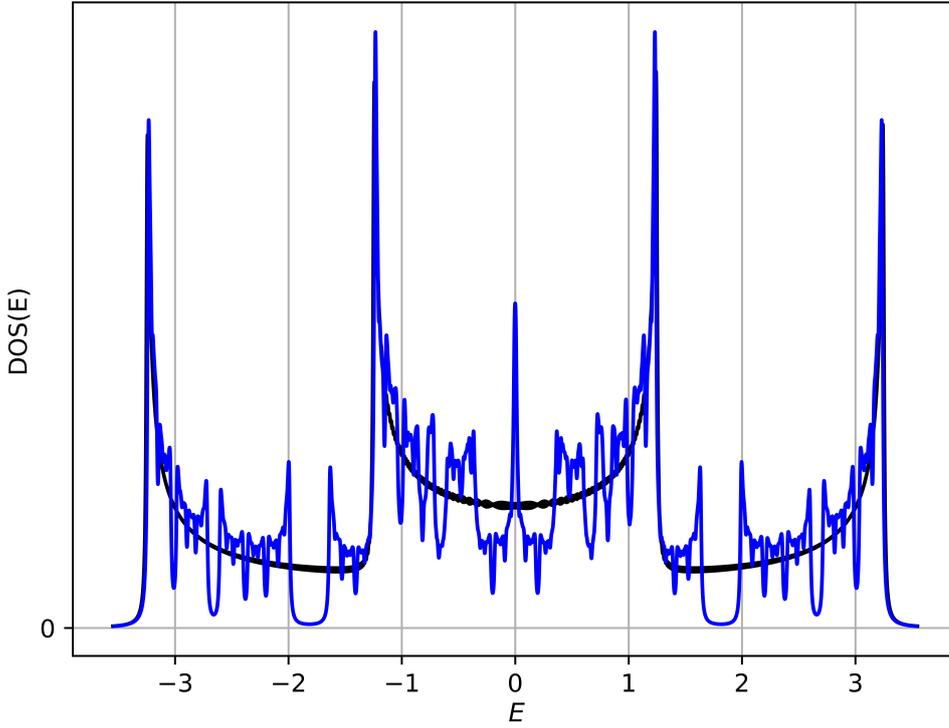


Figura 3.3: Densidad de estados de dos cadenas cuasiperiódicas acopladas; para el caso cuando  $t' = t_S$  y  $f = 1,3$  (negro) y para el caso cuando la solución es exacta (azul).

obteniedo así:

$$\bar{t} = \frac{1}{N}(N_L f t_S + N_S t_S) = \frac{t_S}{N}(N_L f + N_S), \quad (3.13)$$

$$= \frac{t_S}{N(n)}(N(n-1)f + N(n-2)), \quad (3.14)$$

$$= t_S \frac{N(n-1)f + N(n-2)}{N(n-1) + N(n-2)}, \quad (3.15)$$

$$= t_S \frac{\frac{N(n-1)}{N(n-2)}f + 1}{\frac{N(n-1)}{N(n-2)} + 1} = t_S \frac{\tau f + 1}{\tau + 1}. \quad (3.16)$$

La ecuación (3.16) nos permite obtener un parámetro efectivo  $\bar{t}$  que podemos insertar en alguna cadena periódica y así calcular los bordes de la banda. Recordando el resultado analítico obtenido, el espectro de dos cadenas cuasiperiódicas acopladas es similar, recordando la ecuación (3.9), la relación de dispersión para dos cadenas periódicas acopladas con  $\bar{t}$  será:

$$E = \alpha + 2t_T \cos(ka) \pm |t'|. \quad (3.17)$$

En la Figura 3.3, se muestra la densidad de estados para dos cadenas cuasiperiódicas acopladas, cuya solución es exacta, comparada con la relación de dispersión para una cadena periódica utilizando el parámetro  $\bar{t}$ , descrito en la ecuación (3.16).

## 3.2. Correlación electrónica en cadenas acopladas

### 3.2.1. Sistema periódico

Para el estudio de dos cuerpos, resolveremos primero el problema de dos electrones sin interacción, es decir, con  $U = 0$ ; durante los cálculos siguientes consideraremos que  $\alpha = 0$ , ya que esto simplemente funciona como un centro de gravedad. Procedemos a encontrar los estados que pueden ocupar los dos electrones en dos cadenas lineales acopladas, por lo que en este caso, multiplicaremos la función de onda dada por la ecuación (3.3) por sí misma, esto es:

$$\begin{aligned} |\Psi_{\uparrow}\rangle \otimes |\Psi_{\downarrow}\rangle &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{ikma} (c_1 |m, 1\rangle + c_2 |m, 2\rangle) \\ &\otimes \sum_{m'=-\infty}^{\infty} e^{ik'm'a} (c_{1'} |m', 1\rangle + c_{2'} |m', 2\rangle). \end{aligned}$$

Si contraemos la suma de los términos de acoplamiento entre las cadenas, se obtiene

$$|\Psi_{\uparrow}\rangle \otimes |\Psi_{\downarrow}\rangle = \sum_{m,m'} \sum_{n,n'} e^{ikma} e^{ik'm'a} c_n c_{n'} |m, m', n, n'\rangle, \quad (3.18)$$

en donde  $|\Psi_{\uparrow}\rangle$  ( $|\Psi_{\downarrow}\rangle$ ) es la función de onda del electrón con espín  $\sigma$  hacia arriba (abajo), los coeficientes no primados (primados) en (3.18) son los pertenecientes a la función de onda del electrón con espín  $\uparrow$  ( $\downarrow$ ). Lo primero que notamos de este sistema, es que las bases  $|n, n'\rangle$  forman un anillo de 4 sitios, por lo que podemos hacer un cambio de base y nuestro eigenestado queda de la forma

$$|\Psi_{\uparrow}\rangle \otimes |\Psi_{\downarrow}\rangle = |\Psi_{\uparrow}, \Psi_{\downarrow}\rangle = \sum_{m,m'} \sum_j e^{ikma} e^{ik'm'a} e^{ij\theta} |m, m', j\rangle, \quad (3.19)$$

donde  $\theta = \frac{2\pi l}{4}$ , con  $l = 0, 1, 2, 3$ . En el paso anterior, también hicimos un cambio de notación, en donde el producto tensorial de las funciones de onda de los dos electrones las expresamos como  $|\Psi_{\uparrow}, \Psi_{\downarrow}\rangle$ . Introduciendo el eigenestado anterior en la ecuación de Schrödinger se tiene:

$$H |\Psi_{\uparrow}, \Psi_{\downarrow}\rangle = \sum_{m,m'} \sum_j e^{ikma} e^{ik'm'a} e^{ij\theta} H |m, m', j\rangle, \quad (3.20)$$

proyectamos sobre  $|0, 0, p\rangle$ ,

$$\begin{aligned} \langle 0, 0, p | H | \Psi_{\uparrow}, \Psi_{\downarrow} \rangle &= t e^{-ika} + t e^{ika} + t e^{-ik'a} + t e^{ik'a} + t' e^{-i\theta} + t' e^{i\theta}, \\ &= t \left[ (e^{-ika} + e^{ika}) + (e^{-ik'a} + e^{ik'a}) \right] + t' (e^{-i\theta} + e^{i\theta}), \end{aligned}$$

por lo que la relación de dispersión queda:

$$2t(\cos(ka) + \cos(k'a)) + 2t' \cos(\theta) = E(k, k', \theta). \quad (3.21)$$

Hasta ahora hemos calculado la energía cinética de los electrones no apareados ( $U = 0$ ), de esta manera podemos conocer la simetría de la red de estados.

Sin embargo, bajo esta representación, es difícil resolver el problema de correlación electrónica, por lo que prodecemos a disminuir la dimensionalidad del sistema mediante una proyección a un espacio de menor dimensión aprovechando la simetría traslacional de la red [55, 56].

### 3.2.2. Método de proyección

El método de proyección consiste en proyectar un espacio de dos dimensiones a un espacio de una dimensión. En este nuevo espacio, se tiene un parámetro de salto efectivo  $\beta$ . Los parámetros de salto  $t'$  de acoplamiento entre las cadenas no participarán, ya que el espacio de estados del acoplamiento se puede ver como un anillo de 4 miembros. La proyección se puede hacer considerando un vector de posición en el espacio real  $|i, j\rangle$ ; aplicando el operador Hamiltoniano a este vector tenemos

$$H |i, j\rangle = U\delta_{ij} |i, j\rangle + t (|i \pm 1, j\rangle + |i, j \pm 1\rangle). \quad (3.22)$$

Consideremos un cambio de base que aproveche la simetría traslacional de la red. Podemos visualizar la red del espacio de estados como un conjunto de diagonales paralelas

$$|k; l\rangle = c_0 \sum_{p=1}^N e^{ik(p+\frac{l}{2})} |p+l, p\rangle, \quad (3.23)$$

donde  $N$  nos indica el número de sitios a lo largo de la diagonal,  $l$  nos indica en qué diagonal de la red nos encontramos,  $k$  es el momento y  $c_0$  es una constante de normalización que se obtiene mediante:

$$1 = \langle k; l | k; l \rangle = c_0^2 \sum_{q,p} e^{-ik(q-p)} \langle q+l, q | p+l, p \rangle = c_0^2 N. \quad (3.24)$$

Diagonalizamos obteniendo los elementos de la matriz Hamiltoniana con  $\langle k; l | H | k; m \rangle$ . Resolvamos por casos:

- Si  $l = m$ :

$$\begin{aligned} \langle k; m | H | k; m \rangle &= c_0^2 \sum_{q,p} e^{-ik(q-p)} \langle q+m, q | H | p+m, p \rangle, \\ &= c_0^2 \sum_{q,p} e^{-ik(q-p)} \langle q+m, q | \\ &\quad ((\alpha + U\delta_{p+m,p}) |p+m, p\rangle + t [|p+m \pm 1, p\rangle + |p+m, p \pm 1\rangle]), \end{aligned}$$

el único término que permanece es  $\alpha + U\delta_{q+m,q}$ , por lo que tenemos:

$$\langle k; m | H | k; m \rangle = c_0^2 \sum_q U\delta_{q+m,q} = c_0^2 N U \delta_{m,0} = U \delta_{m,0}. \quad (3.25)$$

La relación anterior nos dice que cada una de las diagonales tiene una energía de sitio  $\alpha = 0$  y la única diagonal que nos indica correlación es cuando  $m = 0$ , la cual tendrá energía de sitio  $U$ .

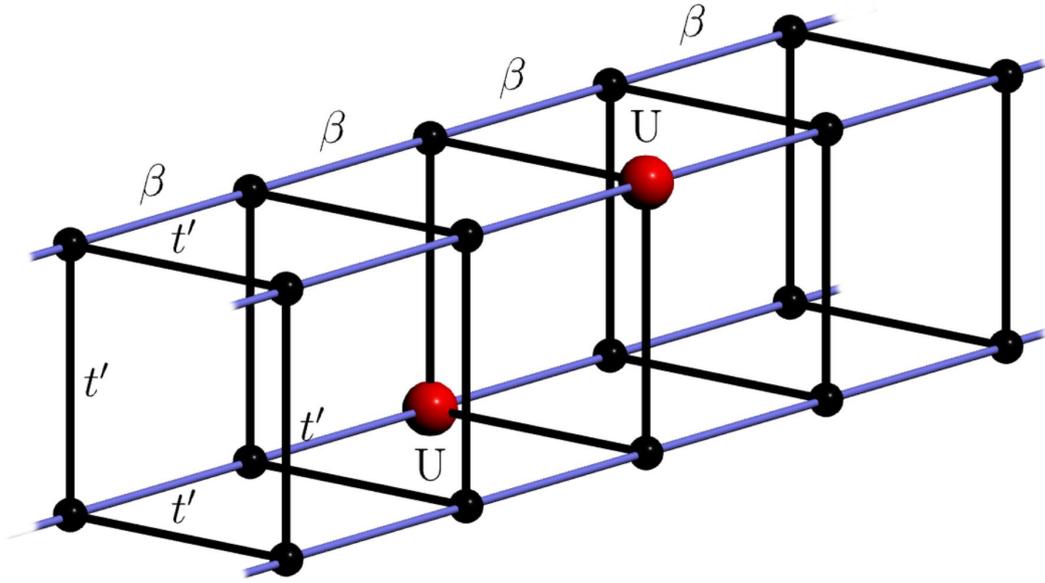


Figura 3.4: Representación del espacio de estados.

- Si  $l = m + 1$ :

$$\begin{aligned}
 \langle k; m + 1 | H | k; m \rangle &= c_0^2 \sum_{q,p} e^{-ik(q + \frac{m+1}{2} - p - \frac{m}{2})} \langle q + m + 1, q | H | p + m, p \rangle, \\
 &= c_0^2 \sum_{q,p} e^{-ik(q - p + \frac{1}{2})} \langle q + m + 1, q | H | p + m, p \rangle, \\
 &= c_0^2 e^{-i\frac{k}{2}} \sum_{q,p} e^{-ik(q-p)} \langle q + m + 1, q | \\
 &\quad ((\alpha + U\delta_{p+m,p}) |p + m, p\rangle + t |p + m \pm 1, p\rangle + t |p + m, p \pm 1\rangle), \\
 &= c_0^2 e^{-i\frac{k}{2}} \sum_{q,p} e^{-ik(q-p)} (t\delta_{q,p} + t\delta_{q+1,p}), \\
 &= e^{-i\frac{k}{2}} t (1 + e^{-ik(q-q-1)}) = t(e^{-i\frac{k}{2}} + e^{i\frac{k}{2}}), \\
 &= 2t \cos \frac{k}{2} = \beta.
 \end{aligned}$$

$\beta$  es el parámetro de salto proyectado. Del procedimiento anterior, obtuvimos un sistema de menor dimensión que consiste en una recta con una impureza. En caso de que no exista correlación en el sistema  $U = 0$ . La Figura 3.4 que tiene forma de ortoedro, es una representación del espacio de estados de las dos cadenas acopladas después de haber hecho la proyección. Las dos esferas rojas representan los sitios con correlación,  $t'$  es el parámetro de salto que acopla las dos cadenas.

### 3.2.3. Solución de impurezas

La relación de dispersión del nuevo sistema ortoédrico se puede obtener aprovechando la simetría del sistema. Esta consiste de una función de onda de un anillo de

4 miembros (4R) y la función de onda de una cadena en una dimensión. Tomando esto en cuenta, los elementos matriciales  $\langle n, p | H | m, j \rangle$  donde  $m$  es la base de la cadena lineal y  $j \in [1, 4]$  la base del anillo de cuatro sitios. De manera general:

$$\langle n, p | H | m, j \rangle = [U\delta_{n,0}(\delta_{1,j} + \delta_{3,j})\delta_{n,m} + \beta(\delta_{n+1,m} + \delta_{n-1,m})] \delta_{p,j} + t'(\delta_{p+1,j} + \delta_{p-1,j}). \quad (3.26)$$

Para un anillo de 4 miembros, este Hamiltoniano tiene la forma:

$$H = \begin{pmatrix} \alpha_1 & t' & 0 & t' \\ t' & \alpha_2 & t' & 0 \\ 0 & t' & \alpha_1 & t' \\ t' & 0 & t' & \alpha_2 \end{pmatrix}, \quad (3.27)$$

$\alpha_1$  es la energía de sitio con correlación electrónica  $U$ . Los eigenvalores de la matriz (3.27) son:

$$E_1 = \alpha_1, \quad (3.28)$$

$$E_2 = \alpha_2, \quad (3.29)$$

$$E_{3,4} = \frac{1}{2} \left[ (\alpha_1 + \alpha_2) \pm \sqrt{(\alpha_1 - \alpha_2)^2 + 16t'^2} \right]. \quad (3.30)$$

$E_{3,4}$  surge de resolver la ecuación de segundo orden  $(\alpha_1 - E)(\alpha_2 - E) - 4t'^2 = 0$ . Procedemos a resolver el Hamiltoniano en los sitios 1 y 3. Este Hamiltoniano tiene la forma

$$H_{n,m} = U\delta_{n,0}\delta_{n,m} + \beta(\delta_{n+1,m} + \delta_{n-1,m}). \quad (3.31)$$

Notemos que cuando no hay correlación,  $\alpha_1 = \alpha_2$ . El eigenvalor de  $\alpha_1$  se obtiene utilizando el ansatz  $\phi_n = Ae^{-qa|n|}$  [51]; podemos ver esta solución como una onda evanescente que tiene su mayor amplitud en el sitio de la impureza, al alejarse de ella, la onda disminuye exponencialmente su amplitud. Resolvamos primero el caso en que  $U = 0$ , por lo tanto

$$Ee^{-qa|n|} = \sum_m H_{n,m}e^{-qa|n|}, \quad (3.32)$$

$$= \beta (e^{-qa|n+1|} + e^{-qa|n-1|}), \quad (3.33)$$

dividiendo entre  $e^{-qa|n|}$  se obtiene una relación de dispersión en forma de funciones hiperbólicas:

$$E = 2\beta \cosh(qa). \quad (3.34)$$

Continuamos ajustando esta onda evanescente a la impureza. Examinando la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en la posición  $n = 0$  se tiene:

$$E = U + \beta (e^{-qa} + e^{-qa}), \quad (3.35)$$

$$E - U = 2\beta e^{-qa}, \quad (3.36)$$

$$2\beta \cosh(qa) - U = 2\beta e^{-qa}, \quad (3.37)$$

$$2\beta (\cosh(qa) - e^{-qa}) = U, \quad (3.38)$$

$$-2\beta \sinh(qa) = U. \quad (3.39)$$

Para  $U < 0$ , tenemos  $qa = \sinh^{-1} \left( \left| \frac{U}{-2\beta} \right| \right)$ . Insertamos este resultado en (3.34) podemos obtener el eigenvalor debido a la presencia de la impureza, el cual es:

$$E_{imp} = 2\beta \cosh \left[ \sinh^{-1} \left( \left| \frac{U}{2\beta} \right| \right) \right], \quad (3.40)$$

$$= 2\beta \sqrt{\left( \frac{U}{2\beta} \right)^2 + 1}. \quad (3.41)$$

El resultado obtenido en (3.40), se puede también obtener mediante una función de onda de la forma [66]:

$$\phi_n = a_0 K^{|n|}, \quad (3.42)$$

de lo anterior, resolviendo la ecuación de Schrödinger con el Hamiltoniano (3.31) se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$-E + U = 2\beta K, \quad (3.43)$$

$$-E = \beta \left( \frac{1}{K} + K \right), \quad (3.44)$$

de lo anterior, se obtiene que  $K$  tiene la forma:

$$K_{\pm} = \frac{U}{2\beta} \pm \sqrt{\left( \frac{U}{2\beta} \right)^2 + 1}. \quad (3.45)$$

Introduciendo este resultado en (3.43) la energía queda como:

$$E = \pm 2\beta \sqrt{\left( \frac{U}{2\beta} \right)^2 + 1}, \quad (3.46)$$

estos resultados son iguales a los obtenidos mediante funciones de Green [28, 55]. A partir de la ecuación (3.27), consideramos a  $\alpha_1$  como el sitio que tiene correlación, a  $\alpha_2$  como el sitio sin correlación y se obtiene lo siguiente:

$$E_1 = 2\beta \sqrt{\left( \frac{U}{2\beta} \right)^2 + 1}, \quad (3.47)$$

$$E_2 = 0, \quad (3.48)$$

$$E_3 = \beta \sqrt{\left( \frac{U}{2\beta} \right)^2 + 1} + \beta \sqrt{\left( \frac{U}{2\beta} \right)^2 + 1 + \left( \frac{2t'}{\beta} \right)^2}, \quad (3.49)$$

$$E_4 = \beta \sqrt{\left( \frac{U}{2\beta} \right)^2 + 1} - \beta \sqrt{\left( \frac{U}{2\beta} \right)^2 + 1 + \left( \frac{2t'}{\beta} \right)^2}. \quad (3.50)$$

También podemos resolver (3.26) utilizando sólo el método de potencias [66]. Proponemos una solución de la forma:

$$|\Psi\rangle = (a_1 |1\rangle + a_2 |2\rangle + a_3 |3\rangle + a_4 |4\rangle) \otimes |\psi\rangle \quad (3.51)$$

en donde  $|j\rangle$  son las posiciones del anillo de cuatro sitios y  $a_j \in \mathbb{C}$  con  $j = 1, 2, 3, 4$ .  $|\psi\rangle$  es la función de onda de la cadena lineal que tendrá la forma:

$$|\psi\rangle = \sum_i \lambda^{|i|} |i\rangle, \quad (3.52)$$

donde  $i \in \mathbb{Z}$  es la etiqueta del sitio de la cadena lineal. Debido a la simetría del problema, las soluciones pueden separarse en simétrica y antisimétrica.

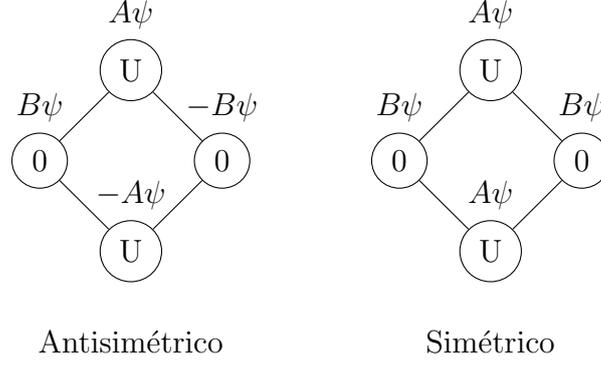


Figura 3.5: Representación esquemática los dos tipos de soluciones.

### 3.2.3.1. Solución antisimétrica

En el caso de la solución antisimétrica tenemos que  $a_1 = -a_3 = A$  y  $a_2 = -a_4 = B$ , como se muestra en la Figura 3.5. Para los sitios centrales, obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones:

$$(-E + U - 2\beta\lambda)A + (t' - t)B = 0, \quad (3.53)$$

$$(t' - t)A + (-E + 2\beta\lambda)B = 0. \quad (3.54)$$

Desarrollando el determinante de las ecuaciones anteriores, se obtiene:

$$(-E + U - 2\beta\lambda)(-E - 2\beta\lambda) = 0 \quad (3.55)$$

análogamente, para los sitios no centrales se tiene

$$(-E + \beta(\lambda + \frac{1}{\lambda}))A + (t' - t)B = 0, \quad (3.56)$$

$$(t' - t)A + (-E + \beta(\lambda + \frac{1}{\lambda}))B = 0, \quad (3.57)$$

cuyo determinante queda de la forma:

$$-E + \beta \left( \lambda + \frac{1}{\lambda} \right) = 0. \quad (3.58)$$

Vemos que las ecuaciones (3.58) y (3.55) son análogas a (3.43) y (3.44). Si sustituimos (3.58) en  $-E + U - 2\beta\lambda = 0$ , obtenemos que  $\lambda$  será expresado como:

$$\lambda_{1,2} = -\frac{U}{2\beta} \pm \sqrt{\left(\frac{U}{2\beta}\right)^2 + 1} \quad (3.59)$$

lo cual nos da una energía que se escribe como

$$E = \pm 2\beta \sqrt{\left(\frac{U}{2\beta}\right)^2 + 1}. \quad (3.60)$$

Así, recuperamos la solución de una cadena con una impureza en el centro. Siguiendo el mismo camino con  $-E - 2\beta\lambda = 0$ , obtenemos que  $E = 2\beta$ , que concuerda con la energía de una cadena lineal periódica sin impureza. Es decir, obtuvimos las soluciones de los sistemas desacoplados.

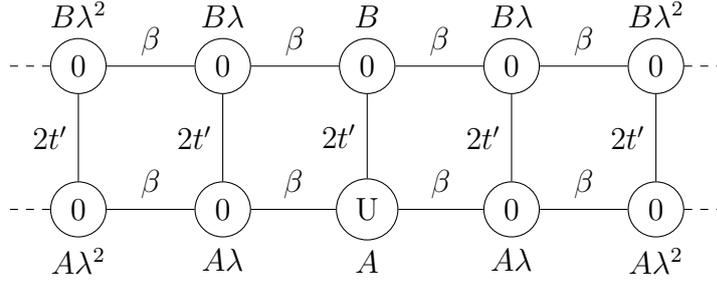


Figura 3.6: Estructura equivalente para encontrar la solución simétrica.

### 3.2.3.2. Solución simétrica

Ahora consideramos que  $a_1 = a_3 = A$  y  $a_2 = a_4 = B$ , como se muestra en la Figura 3.5. En este caso podemos pensar que la cadena  $A|\psi\rangle$  está conectada dos veces a la cadena  $B|\psi\rangle$  dos veces, debido a que las dos cadenas opuestas son iguales, esto se puede ver más claramente en la Figura 3.6.

Para los sitios centrales tenemos el siguiente sistema de ecuaciones:

$$(-E + U + 2\beta\lambda)A + 2t'B = 0, \quad (3.61)$$

$$2t'A + (-E + 2\beta\lambda)B = 0. \quad (3.62)$$

cuyo determinante queda de la forma:

$$(-E + U + 2\beta\lambda)(-E + 2\beta\lambda) - 4t' = 0. \quad (3.63)$$

Para los sitios no centrales tenemos:

$$(-E + \beta(\lambda + \frac{1}{\lambda}))A + 2t'B = 0, \quad (3.64)$$

$$2t'A + (-E + \beta(\lambda + \frac{1}{\lambda}))B = 0, \quad (3.65)$$

y su determinante queda de la forma:

$$(-E + \beta(\lambda + \frac{1}{\lambda}) - 2t')(-E + \beta(\lambda + \frac{1}{\lambda}) + 2t') = 0 \quad (3.66)$$

Primero obtenemos el valor de  $\lambda$  a partir de (3.63). Es una ecuación de segundo grado respecto a  $\lambda$ , por lo que las raíces tendrán la forma:

$$\lambda_{1,2} = -\frac{2(-E) + U}{4\beta} \mp \sqrt{\left(\frac{U}{4\beta}\right)^2 + \left(\frac{t'}{\beta}\right)^2} \quad (3.67)$$

considerando que  $b = \frac{-U}{4\beta}$  y  $a = \sqrt{\left(\frac{U}{4\beta}\right)^2 + \left(\frac{t'}{\beta}\right)^2}$ , se puede trabajar con una expresión más fácil de manipular que tiene la forma:

$$\lambda_{1,2} = \frac{E}{2\beta} + b \mp a. \quad (3.68)$$

Sustituyendo esta solución en (3.66), se obtiene la siguiente expresión:

$$E_1 = 2 \left( t' \pm \sqrt{t'^2 - 2at'\beta - 2bt'\beta + \beta^2 + (a\beta)^2 - 2ab\beta^2 + (b\beta)^2} \right) \quad (3.69)$$

$$E_2 = 2 \left( t' \pm \sqrt{t'^2 + 2at'\beta - 2bt'\beta + \beta^2 + (a\beta)^2 + 2ab\beta^2 + (b\beta)^2} \right) \quad (3.70)$$

Mediante los procedimientos algebraicos anteriores, obtuvimos la energía para los electrones correlacionados por métodos analíticos. Los eigenvalores obtenidos por medio de estos métodos representan dispersión de electrones correlacionados en dos cadenas periódicas acopladas. Estas soluciones son análogas a las obtenidas en (3.9), excepto que aquí se incluye la correlación electrónica.

### 3.2.4. Sistema cuasiperiódico

Podemos resolver el sistema cuasiperiódico de manera analítica utilizando nuestros resultados previos. Usando las ecuaciones (3.47–3.50), podemos obtener la relación de dispersión para la correlación electrónica en un sistema cuasiperiódico. No podemos hacer uso del método de mapeo, ya que no existe simetría traslacional. Sin embargo, utilizando la aproximación descrita por la ecuación 3.16 para  $\bar{t}$ , obtenemos que

$$\bar{\beta} = 2\bar{t} \cos\left(\frac{k}{2}\right) \quad (3.71)$$

en donde  $k \in [-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$ . En la Figura 3.7 se muestra en rojo la densidad de estados de electrones correlacionados en dos cadenas de Fibonacci acopladas con  $U = 7$ . En negro está la energía cinética de dos electrones en un sistema de Fibonacci y la densidad azul representa el resultado exacto.

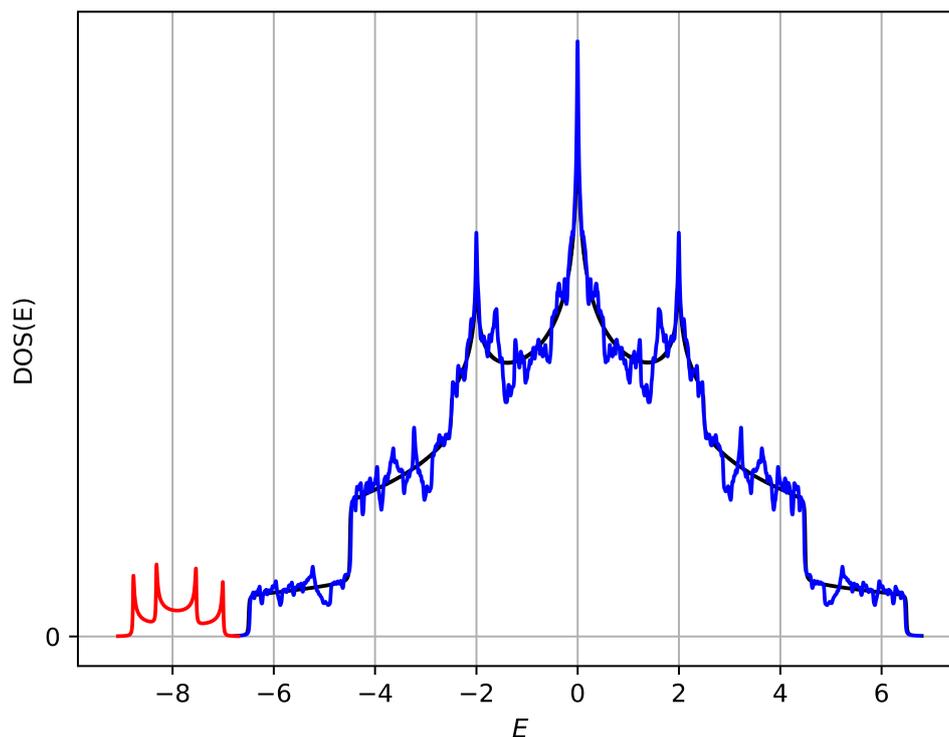


Figura 3.7: Solución exacta de la densidad de estados de dos electrones correlacionados en dos cadenas de Fibonacci acopladas (azul), los parámetros usados son  $t_L = -1,3$ ,  $t_S = t = -1$  y  $U = -7,0|t|$ . Solución analítica aproximada (3.16) para la densidad de estados de dos electrones correlacionados en un sistema de dos cadenas periódicas acopladas (negro), con el parámetro de acoplamiento  $t' = t_S = t$ . Densidad de estado de dos electrones correlacionados en dos cadenas de Fibonacci acopladas (rojo), densidad de estados de los dos electrones correlacionados en dos cadenas acopladas de Fibonacci y periódica usando la aproximación descrita por la ecuación (3.16) (azul y negro, respectivamente). Los parámetros de acoplamiento utilizados son  $t' = t_S$ .

# Capítulo 4

## Conclusiones

El estudio de correlación electrónica en sistemas cuasiperiódicos abre un panorama de posibilidades en el estudio de la superconductividad en estos sistemas. En esta tesis se obtuvo la expresión analítica para la energía de electrones correlacionados en dos cadenas de Fibonacci acopladas. Comparando con el sistema periódico, vemos que el espectro de los electrones apareados es una relación de dispersión que sigue la geometría del sistema, en este caso, el de dos cadenas acopladas.

La aparición de superconductividad convencional en sistemas cuasiperiódicos se puede deber a que la cuasiperiodicidad del sistema obliga a los electrones a correlacionarse a largo alcance, ya que la cuasiperiodicidad localiza a los electrones. Esto lo podemos interpretar mediante la aparición de brechas energéticas en las densidades de estados de la cadena de Fibonacci.

El acoplamiento de los sistemas permite a los electrones obtener nuevos grados de libertad, afecta la dinámica de los electrones. El fenómeno de correlación en sistemas acoplados tiene un comportamiento similar al de los electrones libres en el mismo. La disminución de tamaño de la dispersión del par correlacionado implica que hay menor tunelamiento entre un sitio a otro de la red para el par electrónico.

Los métodos expuestos en esta tesis están basados principalmente en geometría y utilizando diversas representaciones del sistema estudiado. Lo anterior nos permite conocer el sistema con mayor detalle y resolver el problema de correlación electrónica de manera exacta.

# 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] J. G. Bednorz y K. A. Müller. «Possible high  $T_c$  superconductivity in the Ba-La-Cu-O system». En: *Zeitschrift für Physik B-Condensed Matter* 64 (1986), págs. 189-183.
- [3] K. Kamiya y col. «Discovery of superconductivity in quasicrystal». En: *Nature Communications* 9.154 (2018).
- [4] 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.
- [5] L. Pauling. «Apparent icosahedral symmetry is due to directed multiple twinning of cubic crystals». En: *Nature* 317.10 (1985), págs. 512-514.
- [6] D. Levine y P. J. Steinhardt. «Quasicrystals: A New Class of Ordered Structures». En: *Physical Review Letters* 53.26 (1984), págs. 2477-2480.
- [7] D. Levine y P. J. Steinhardt. «Quasicrystals. I. Definitions and structure». En: *Physical Review B* 34.2 (1986), págs. 596-616.
- [8] 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.
- [9] «Report of the Executive Committee for 1991». En: *Acta Crystallographica Section A* 48.6 (nov. de 1992), págs. 922-946.
- [10] A. Jagannathan. «The Fibonacci quasicrystal: Case study of hidden dimensions and multifractality». En: *Reviews of Modern Physics* 93 (2021), pág. 045001.
- [11] C. Janot. *Quasicrystals: a primer*. Oxford University Press, 1994.
- [12] W. Steurer y S. Deloudi. «Decagonal quasicrystals - What has been achieved?» En: *Comptes Rendus Physique* 15 (2014), págs. 40-47.
- [13] S. Ritsch y col. «A stable one-dimensional quasicrystal related to decagonal Al-Co-Ni». En: *Philosophical Magazine Letters* 80.2 (2000), págs. 107-118.
- [14] L. Bindi y col. «Natural Quasicrystals». En: *Science* 324 (2009), págs. 1306-1309.
- [15] L. Bindi y col. «Natural quasicrystal with decagonal symmetry». En: *Scientific Reports* 5.9111 (2015).
- [16] 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.

- [17] L. Bindi y col. «Icosahedrite,  $\text{Al}_{63}\text{Cu}_{24}\text{Fe}_{13}$ , the first natural quasicrystal». En: *American Mineralogist* 96.5-6 (2011), págs. 928-931.
- [18] P. J. Steinhardt y L. Bindi. «In search of natural quasicrystals». En: *Reports on Progress in Physics* 75.9 (ago. de 2012).
- [19] L. Bindi, J. Pham y P. J. Steinhardt. «Previously unknown quasicrystal periodic approximant found in space». En: *Scientific Reports* 8.16271 (2018).
- [20] 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.
- [21] J. M. Dubois. *Useful Quasicrystals*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2005.
- [22] P. A. Thiel y J. M. Dubois. «Quasicrystals. Reaching maturity for technological applications». En: *Materials Today* 2.3 (1999), págs. 3-7.
- [23] C. Patiño-Carachure y col. «Synthesis of onion like carbon-reinforced AlCuFe quasicrystals by high-energy ball milling». En: *Journal of Alloys and Compounds* 694 (2017), págs. 46-50.
- [24] J. O. Téllez-Vázquez, C. Patiño-Carachure y G. Rosas. «Alumina nanovire growth by water decomposition and the peritectic reaction of decagonal  $\text{Al}_{65}\text{Cu}_{15}\text{Co}_{20}$  quasicrystals». En: *Materials Characterization* 112 (2016), págs. 155-159.
- [25] R. N. Araújo y E. C. Andrade. «Conventional superconductivity in quasicrystals». En: *Physical Review B* 100 (2019), pág. 014510.
- [26] S. Sakai y col. «Superconductivity on a quasiperiodic lattice: Extended-to-localized crossover of Cooper pairs». En: *Physical Review B* 95 (2017), pág. 024509.
- [27] S. J. Blundell. *Superconductivity. A Very Short Introduction*. Oxford University Press, 2009.
- [28] O. Navarro Chávez y R. Baquero Parra. *Ideas fundamentales de la superconductividad*. Universidad Nacional Autónoma de México, 2007.
- [29] F. London. «On the Problem of the Molecular Theory of Superconductivity». En: *Physical Review* 74.5 (1948), págs. 562-573.
- [30] C. A. Reynolds y col. «Superconductivity of Isotopes of Mercury». En: *Physical Review* 78 (1950), pág. 487.
- [31] E. Maxwell. «Isotope Effect in the Superconductivity of Mercury». En: *Physical Review* 78 (1950), pág. 477.
- [32] J. Bardeen. «Zero-Point Vibrations and Superconductivity». En: *Physical Review* 79 (1950), págs. 167-168.
- [33] H. Fröhlich. «Theory of Superconducting State. I. The Ground State at the Absolute Zero Temperature». En: *Physical Review* 79.5 (1950), págs. 845-856.
- [34] A. B. Pippard. «The surface impedance of superconductors and normal metal at high frequencies. IV. Impedance at 9400 Mc./sec. of single crystals of normal and superconducting tin». En: *Proceedings of the Royal Society A* 203 (1950), págs. 98-118.

- [35] L. N. Cooper. «Bound Electron Pairs in a Degenerate Fermi Gas». En: *Physical Review* 104.4 (1956), págs. 1189-1190.
- [36] J. Bardeen, L. N. Cooper y J. R. Schrieffer. «Theory of Superconductivity». En: *Physical Review* 108.5 (1957), págs. 1157-1204.
- [37] D. Pines. «Superconductivity in the Periodic System». En: *Physical Review* 109.2 (1957), págs. 280-287.
- [38] J. P. Carbotte y R. C. Dynes. «Calculation of the Superconducting Transition Temperature in Aluminium». En: *Physics Letters A* 25.9 (1967), págs. 685-686.
- [39] P. B. Allen y M. L. Cohen. «Pseudopotential Calculation of the Mass Enhancement and Superconducting Transition Temperature of Simple Metals». En: *Physical Review* 187.2 (1969), págs. 525-538.
- [40] D. A. Papaconstatoupoulos y col. «Calculations of the superconducting properties of 32 metals with  $Z \leq 49$ ». En: *Physical Review B* 15.9 (1977), págs. 4221-4226.
- [41] M. L. Cohen y P. W. Anderson. «Comments on the Maximum Superconducting Transition Temperature». En: *AIP Conference Proceedings* 4 (1972), págs. 17-27.
- [42] M. K. Wu y col. «Superconductivity at 93 K in a New Mixed-Phase Y-Ba-Cu-O Compound System at Ambient Pressure». En: *Physical Review Letters* 58.9 (1987), págs. 908-910.
- [43] A. Schilling y col. «Superconductivity above 130 K in the Hg-Ba-Ca-Cu-O system». En: *Nature* 363 (1993), págs. 56-58.
- [44] B. Keimer y col. «From quantum matter to high-temperature superconductivity in copper oxides». En: *Nature* 518 (2015), págs. 179-186.
- [45] H. Hosono y K. Kuroki. «Iron-based superconductors: Current status of materials and pairing mechanism». En: *Physica C* 514 (2015), págs. 399-422.
- [46] D. Li y col. «Superconductivity in an infinite-layer nickelate». En: *Nature* 572 (2019), págs. 624-627.
- [47] K. S. Novoselov y col. «Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films». En: *Science* 306.5696 (2004), págs. 666-669.
- [48] Y. Cao y col. «Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices». En: *Nature* 556 (2018), págs. 43-50.
- [49] G. Chen y col. «Signatures of tunable superconductivity in a trilayer graphene moiré superlattice». En: *Nature* 572 (2019), págs. 215-219.
- [50] L. Wang y col. «Correlated electronic phases in twisted bilayer transition metal dichalcogenides». En: *Nature Materials* 19 (2020), págs. 861-866.
- [51] S. H. Simon. *The Oxford Solid State Basics*. Oxford University Press, 2013.
- [52] G. G. Naumis. «Electronic properties of 2D materials and its heterostructures: a minimal review». En: *Revista Mexicana de Física* 67 (2021), págs. 050102 1-22.
- [53] T. Lancaster y S. J. Blundell. *Quantum Field Theory for the Gifted Amateur*. Oxford University Press, 2014.

- [54] J. Hubbard. «Electron correlations in narrow energy bands». En: *Proceedings of the Royal Society A* 276.1365 (1963), págs. 238-257.
- [55] O. Navarro y Ch. Wang. «Apareamiento electrónico en hamiltoniano de Hubbard extendido». En: *Revista Mexicana de Física* 38.4 (1992), págs. 553-562.
- [56] E. Vallejo, O. Navarro y J. E. Espinosa. «Two-particle correlations in the one-dimensional Hubbard model: a ground-state analytical solution». En: *Revista Mexicana de Física* 49.3 (2003), págs. 207-211.
- [57] K. Winkler y col. «Repulsively bound atom pairs in an optical lattice». En: *Nature* 441 (2006), págs. 853-856.
- [58] Ch. Wang. *Quasiperiodicidad en la Física de los Sólidos de Dimensionalidad Restringida*. Universidad Nacional Autónoma de México, 1989.
- [59] C. Kittel. *Introducción a la física del estado sólido*. Reverté, 2003.
- [60] J. E. S. Socolar, P. J. Steinhardt y D. Levine. «Quasicrystals with arbitrary orientational symmetry». En: *Physical Review B* 32.8 (1985), págs. 5547-5550.
- [61] M. Gardner. *Penrose Tiles to Trapdoor Ciphers... and the return of Dr. Matrix*. The Mathematical Association of America, 1997.
- [62] A. P. Sutton. *Electronic Structure of Materials*. Oxford University Press, 1993.
- [63] E. N. Economou. *Green's Functions in Quantum Physics*. Springer, 2006.
- [64] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu y F. Laloë. *Quantum Mechanics*. Wiley-VCH, 2005.
- [65] E. Vallejo y O. Navarro. «Analytical solution for pairing of two-particles in a quasiperiodic lattice within the Hubbard model». En: *Journal of Non-Crystalline Solids* 329 (2003), págs. 131-133.
- [66] M. Lannoo y P. Friedel. *Atomic and Electronic Structure of Surfaces. Theoretical Foundations*. Springer-Verlag, 1991.