



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

Facultad de Ciencias

3
2e5

LOCALIZACION DE ONDAS EN LA
RED DE PENROSE

TESIS PROFESIONAL
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE
F I S I C O
P R E S E N T A
ROBERTO ALVAREZ SANTOS

México, D. F.

Septiembre de 1993

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



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 está 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.

INDICE

RESUMEN

INTRODUCCION..... 1

CAPITULO I CONCEPTOS BASICOS DE LA FISICA DEL ESTADO SOLIDO

I-1 Simetría Espacial.....	3
I-2 Red Recíproca de los Cristales.....	6
I.3 Función de Bloch.....	9
I-4 Excitaciones Elementales en Sólidos.....	11
I-5 Desorden y Localización de la Función de Onda.....	21

CAPITULO II SISTEMAS CUASIPERIODICOS

II-1 Cuasicristales.....	35
II-2 Cuasiperiodicidad.....	38
II-3 La Sucesión de Fibonacci y la Red de Penrose.....	43
II-4 Leyes de Kirchhoff y Modos Normales de Vibración.....	48

CAPITULO III LOCALIZACION Y CUASIPERIODICIDAD

III-1 Antecedentes.....	52
III-2 Localización de Ondas en la Red de Penrose.....	54

CONCLUSIONES..... 61

BIBLIOGRAFIA..... 63

R E S U M E N

En este trabajo, se presenta una simulación analógica de los modos fonónicos en una red cuasicristalina. Dicha simulación se realizó en una red de osciladores LC interconectados de acuerdo con la red de Penrose, ya que existe una equivalencia entre las ecuaciones de movimiento de los fonones isotrópicos y las leyes de Kirchhoff para un sistema de osciladores eléctricos. El método presentado en esta tesis tiene la virtud de ser simple, versátil y proporciona una visualización directa de la localización, consecuentemente podría ser utilizado para los fines docentes.

Los resultados obtenidos revelan aspectos importantes relacionados con el controvertido tema de la localización en los sistemas cuasiperiódicos. Hemos encontrado estados fonónicos realmente extendidos a bajas frecuencias y estados críticamente localizados, cuando la longitud de onda es comparable con el parámetro de la red.

I N T R O D U C C I Ó N

El descubrimiento experimental de un nuevo tipo de estructura con simetría icosaédrica en una aleación de Al-Mn por Shechtman y colaboradores en 1984 (D. Shechtman *et al.* 1984), abre un nuevo campo de investigación en la Física del Estado Sólido, motivo por el cual se ha despertado gran interés entre los investigadores de la materia condensada, generando una gran cantidad de investigaciones tanto experimentales como teóricas en materiales que al ser sometidos a difracción de electrones, presentan patrones de simetría que están prohibidos por la cristalografía tradicional. En relación a este tipo de patrones se les ha dado a tales materiales el nombre de cuasicristales.

Los cuasicristales se parecen a los cristales en el sentido de que tienen un orden orientacional de largo alcance. Sin embargo, el orden traslacional, a diferencia de los cristales, no se presenta en esta nueva estructura cuasiperiódica. El patrón de difracción de la muestra Al-Mn reportado por Shechtman y colaboradores incluye un eje de simetría de orden cinco, este tipo de simetría como se verá posteriormente, está prohibido por la cristalografía tradicional, por lo que anteriormente al descubrimiento de las estructuras cuasicristalinas, se pensaba que la simetría cinco no podía ser compatible con el orden de largo alcance.

Debido a que la cuasiperiodicidad es un estado intermedio entre una estructura idealmente ordenada y un material amorfo, se espera que los cuasicristales compartan algunas propiedades tanto de los cristales como de los amorfos. En cuanto a la investigación de las diversas propiedades de estos sistemas, existe un campo vasto, pero uno de los aspectos más controvertidos se da en relación con la localización de las funciones de onda. Existen estudios teóricos que predicen la naturaleza crítica de las funciones propias electrónicas en redes cuasiperiódicas en una (M. Kohmoto

et.al. 1987) y dos dimensiones (P. Ma y Liu 1989), y se esperan peculiaridades en las propiedades de transporte derivadas de dichas funciones de onda (K. Ueda y Tsunetsugu 1987). Por el contrario, los estudios experimentales de las propiedades de transporte en cuasicristales reales, no han sido lo suficientemente claros y no se han obtenido las peculiaridades esperadas. Sin embargo, los estudios con cuasicristales artificiales han proporcionado resultados que son muy prometedores, uno de los más sobresalientes en este sentido es el de He y Maynard (S. He Y Maynard 1989), quienes se plantean la tarea de investigar el siguiente problema: dada la ecuación de Schrödinger con potencial cuasiperiódico, ¿cómo se manifestará la simetría cuasiperiódica en el espectro de funciones propias y valores propios?. Para estudiar este problema se conecta un conjunto de diapasones formando una red de Penrose, los cuales son excitados con ondas acústicas. La inconveniencia de este experimento consiste en que para realizarlo se necesita un equipo sumamente sofisticado para una medición precisa.

En la presente tesis se aborda un nuevo método, para observar directamente la localización de ondas en sistemas bidimensionales cuasiperiódicos, el cual consiste en aplicar corriente a un circuito de osciladores LC interconectados entre si según una red de Penrose. Este método experimental se caracteriza por ser simple e ilustrativo, además de que no requiere equipos complejos.

Esta tesis está organizada de la siguiente manera: En el primer capítulo se dan algunos conceptos básicos de la Física del Estado Sólido así como ciertas ideas en el campo de las excitaciones elementales en sólidos, particularmente para tratar el concepto de localización en una red dinámica de Penrose. En el capítulo dos se entra propiamente al tema que nos ocupa, desde una perspectiva un tanto general, además de que se sientan las bases a manera de justificación para la culminación del trabajo en el capítulo tres, donde se discute la propagación de ondas eléctricas en la red de Penrose.

CAPITULO I

CONCEPTOS BASICOS DE LA FISICA DEL ESTADO SOLIDO

I.1.. SIMETRIA ESPACIAL.

En esta parte consideramos algunos aspectos y propiedades de la materia que tiene una estructura regular o periódica bien determinada, característica de cada substancia. El objetivo es darle un marco de referencia al trabajo que se desarrollará posteriormente.

Los sólidos que tienen un arreglo regular de sus átomos se llaman cristales, los cuales poseen simetría traslacional y pueden ser tanto monocristales aislados como agregados policristalinos.

A partir de los trabajos de Von Laue en 1912 y Bragg en 1913 quedó establecido que los monocristales están formados por una repetición periódica en el espacio, de átomos ó moléculas.

La propiedad más importante de estos monocristales es su simetría traslacional, lo cual quiere decir que se pueden encontrar regiones idénticas después de trasladarse un cierto período. De aquí se desprende la propiedad de homogeneidad: Un cristal se dice que es homogéneo si para cada punto dentro de él, existe otro punto, totalmente idéntico al primero, situado a cierta distancia finita de él. Partiendo de la definición de homogeneidad y teniendo en cuenta la estructura atómica discreta, se puede demostrar que los puntos idénticos (en adelante se les llamará nodos) están ligados con el punto inicial, elegido arbitrariamente, por tres vectores de traslación linealmente independientes y sus traslaciones forman una red periódica tridimensional que abarca todo el espacio del cristal. La parte más pequeña de un cristal cuya repetición espacial genera al cristal, se le llama celda unitaria, la cual es eléctricamente neutra y puede contener una

o varias moléculas o átomos.

Por efecto de la simetría de traslación, cada punto de la celda unitaria puede compararse con un punto de otra celda unitaria. La posición de estos puntos equivalentes se caracterizan por los vectores de la red:

$$n=ma+nb+pc \quad (I-1.1)$$

que son combinaciones lineales de tres vectores linealmente independientes a , b y c , llamados vectores base.

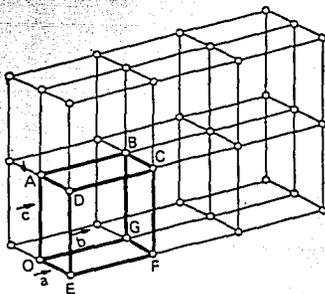


Fig. I.a. Red nodal. Los nodos idénticos se indican con círculos.

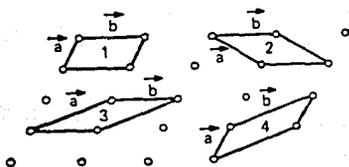


Fig. I.b. Distintos modos de elegir la celda unitaria en el caso bidimensional.

Además de la simetría espacial de traslación, la red posee un conjunto de simetrías de direcciones según sea el tipo de celda unitaria. El movimiento geométrico u operación que se efectúa sobre la red y la deja invariante, se le llama "operación de simetría". Existen las siguientes

operaciones de simetría: 1.- Rotación, 2.- Reflexión, 3.- Inversión e 4.- Inversión-rotación. También se distingue entre una operación de simetría y un elemento de simetría, este último es el elemento geométrico sobre el cual actúa la operación. A las operaciones de simetría enumeradas anteriormente les corresponden respectivamente los siguientes elementos de simetría: 1.- Eje de rotación, 2.- plano de simetría, 3.- centro de inversión y 4.- centro de simetría. Como ejemplo, considérese un eje de rotación del cristal, entonces se le puede hacer coincidir consigo mismo, es decir, se le puede llevar a un estado que no se diferencie del estado inicial, por medio de una rotación alrededor del eje en un ángulo bien determinado o múltiplos de él, el cual a su vez puede ser un submúltiplo de 360 grados, $360/n$, donde n es un elemento del conjunto (1, 2, 3, 4, 6), se dice que n es la multiplicidad del eje. De consideraciones puramente geométricas se puede demostrar que la multiplicidad cinco (la cual constituye nuestro objetivo) y mayores que seis no son posibles. En efecto: Consideremos dos puntos contiguos A y B en una red arbitraria y representemos los puntos C y D, que se obtienen de los dos primeros mediante la operación de giro de un eje de orden n que pasa por uno de ellos, tal y como se indica en la figura 1.2. La recta que une los puntos nuevos C y D es paralela a la que une los puntos originales. Para determinar qué ángulos de giro son posibles, es decir, investigar qué orden tienen los posibles ejes de simetría, se les impone a los nuevos puntos la

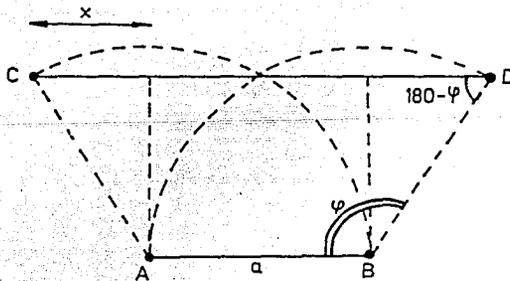


Fig. 1.2. Esta figura se utiliza para demostrar la imposibilidad de construir una red en base a una celda unitaria y con un eje de simetría de orden cinco o mayores que seis.

condición de pertenecer a la red: La distancia x de la figura es,

$$X = a \cos(180 - \varphi) = -a \cos \varphi$$

y la distancia d entre los puntos C y D es por lo tanto

$$d = a - 2a \cos \varphi = a(1 - 2 \cos \varphi).$$

Para que C y D sean puntos de la red se debe cumplir que $(1 - 2 \cos \varphi)$ sea un número entero m , es decir :

$$\cos \varphi = (1 - m)/2.$$

Dando valores enteros a m se obtiene

para	$m=0,$	$\varphi = \pi/3$
	$m=1,$	$\varphi = \pi/2$
	$m=2,$	$\varphi = (2\pi)/3$
	$m=3,$	$\varphi = \pi$

estos ángulos que corresponden a los ejes de orden 6, 4, 3, y 2 respectivamente, de esta manera se demuestra que la simetría de orden cinco y de ordenes mayores que seis en un cristal no son posibles.

I.2. LA RED RECÍPROCA DE LOS CRISTALES.

En la Física del Estado Sólido, al analizar algunos fenómenos (difracción, movimiento de los electrones en un campo de potencial periódico, dispersión de fonones, etc.) relacionados con el arreglo periódico de los átomos, es de gran ayuda y primordial importancia el concepto de la red recíproca. Esta no es una red en el sentido ordinario que se dió al definir la red espacial en la sección anterior. Esta red no

existe en el cristal, es una abstracción cómoda que da la posibilidad de describir matemáticamente con bastante sencillez las condiciones en que ocurren ciertos fenómenos en los sólidos cristalinos. Asimismo, dicha red se encuentra en el espacio abstracto tridimensional de los vectores de onda k , que en lo posterior se le llamará espacio k .

Entre los parámetros de la red directa ordinaria, construida por los vectores de traslación a , b y c , y los parámetros de la red recíproca existen relaciones bien determinadas (P. Pavlov, A. Jovlov 1987). Con el fin de estudiar estas relaciones se traza uno de los planos (hkl) [h , k , l son los índices de Miller y los ejes x , y , z no necesariamente son ortogonales], tal que corte a los ejes x , y , z en los segmentos a/h , b/k , c/l respectivamente donde a , es la magnitud del vector a , b es la magnitud del vector b , etc..

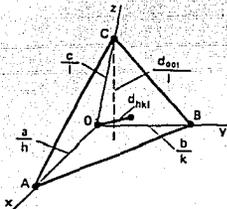


Fig. 1.3. Esquema usado para deducir la relación entre los parámetros de las redes directa y recíproca.

El plano (hkl) junto con los tres planos de coordenadas (100) , (010) y (001) forman el tetraedro $AOBC$. Si las áreas de las caras triangulares del tetraedro se representan con los respectivos vectores S , según el teorema del cálculo vectorial que afirma que el vector de una superficie cerrada es siempre igual a cero, entonces se puede escribir:

$$S_{\Delta(hkl)} = S_{\Delta(100)} + S_{\Delta(010)} + S_{\Delta(001)} \quad (I-2.1)$$

Las áreas se pueden calcular por la fórmula del volumen de un tetraedro: $v = (1/3)SH$, de donde

$$S = 3v/H, \quad (I-2.2)$$

siendo H la altura del tetraedro. La distancia del vértice O al plano (hkl)

es igual a la distancia d_{hkl} entre los planos, es decir, se supone que los planos $\{hkl\}$ forman una familia de planos paralelos separados entre si, una distancia d_{hkl} . La distancia del vértice A al plano de coordenadas (100), de acuerdo con las reglas del corte de los ejes de la celda elemental por los sucesivos planos reticulares de una familia, es igual a d_{100}/h , la distancia que va del vértice B al plano de coordenadas (010) es d_{010}/k y la distancia entre el vértice C y el plano de coordenadas (001), d_{001}/l . Por lo tanto de (I-2.1) y (I-2.2) se sigue que

$$H = \frac{1}{d_{hkl}} = h \frac{1}{d_{100}} + k \frac{1}{d_{010}} + l \frac{1}{d_{001}} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^* \quad (\text{I-2.3})$$

donde \mathbf{a}^* , \mathbf{b}^* , y \mathbf{c}^* son los vectores base de la red reciproca.

Sustituyendo en el segundo miembro de (I-2.2) las áreas de las caras triangulares por los respectivos productos vectoriales, se obtiene

$$\frac{3v}{d_{hkl}} = \frac{1}{2}(\mathbf{b} \times \mathbf{c}) \cdot \frac{1}{h} \mathbf{a} + \frac{1}{2}(\mathbf{c} \times \mathbf{a}) \cdot \frac{1}{k} \mathbf{b} + \frac{1}{2}(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot \frac{1}{l} \mathbf{c}$$

como $6v = \mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = V_c / (hkl)$, siendo V_c el volumen de la celda elemental construida sobre los vectores \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} , resulta que

$$1/d_{hkl} = h(\mathbf{b} \times \mathbf{c})/V_c + k(\mathbf{c} \times \mathbf{a})/V_c + l(\mathbf{a} \times \mathbf{b})/V_c \quad (\text{I-2.4})$$

igualando la expresión (I-2.4) con (I-2.5), se encuentra que,

$$\mathbf{a}^* = 1/d_{100} = (\mathbf{b} \times \mathbf{c})/V_c, \quad \mathbf{b}^* = 1/d_{010} = (\mathbf{c} \times \mathbf{a})/V_c, \quad \mathbf{c}^* = 1/d_{001} = (\mathbf{a} \times \mathbf{b})/V_c$$

y como $\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \mathbf{b} \cdot (\mathbf{c} \times \mathbf{a}) = \mathbf{c} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = V_c$, se tiene que

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}^* = \mathbf{b} \cdot \mathbf{b}^* = \mathbf{c} \cdot \mathbf{c}^* = 1$$

$$\mathbf{b} \cdot \mathbf{c}^* = \mathbf{c} \cdot \mathbf{a}^* = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}^* = \mathbf{a}^* \cdot \mathbf{b} = \mathbf{b}^* \cdot \mathbf{c} = \mathbf{c}^* \cdot \mathbf{a} = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}^* = \mathbf{b} \cdot \mathbf{c}^* = \mathbf{c} \cdot \mathbf{a}^* = \mathbf{a}^* \cdot \mathbf{b} = \mathbf{b}^* \cdot \mathbf{c} = \mathbf{c}^* \cdot \mathbf{a} = 0 \quad (\text{I-2.5})$$

Las seis últimas ecuaciones de la expresión (I-2.5) dan la regla para

construir la red recíproca, a saber: al construir la red, los vectores \mathbf{a} , \mathbf{b} y \mathbf{c} son perpendiculares, respectivamente, a los pares de vectores \mathbf{b} y \mathbf{c} , \mathbf{c} y \mathbf{a} , \mathbf{a} y \mathbf{b} . En forma viceversa, los vectores \mathbf{a} , \mathbf{b} y \mathbf{c} son perpendiculares, a los pares de vectores \mathbf{b}^* y \mathbf{c}^* , \mathbf{c}^* y \mathbf{a}^* y \mathbf{a}^* y \mathbf{b}^* , respectivamente.

Los vectores de la red directa están relacionados con los de la red recíproca por las fórmulas análogas:

$$\mathbf{a} = \mathbf{b} \times \mathbf{c} / V, \quad \mathbf{b} = \mathbf{c} \times \mathbf{a} / V, \quad \mathbf{c} = \mathbf{a} \times \mathbf{b} / V, \quad (I-2.6)$$

aquí, V es el volumen de la celda elemental de la red recíproca.

I.3. FUNCIÓN DE BLOCH

El teorema de Bloch (P.Pavlov, A. Jovlov 1987) nos dice que las funciones de onda, que son soluciones de la ecuación de Schrödinger con potencial periódico, representan ondas planas moduladas por cierta función con la periodicidad de la red; de ahí que estas funciones se puedan escribir de la siguiente manera:

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad (I-3.1)$$

donde $U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ es una función periódica con período igual al de la red y que depende del vector de onda \mathbf{k} .

La condición de periodicidad del potencial donde se mueve el electrón en el cristal es:

$$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{n}), \quad \text{con } \mathbf{n} = n_1 \mathbf{a} + n_2 \mathbf{b} + n_3 \mathbf{c}, \quad (I-3.2)$$

en la ecuación anterior \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} , son los vectores unitarios de las traslaciones principales y n_1 , n_2 , n_3 , son números enteros arbitrarios. Cuando se está en un determinado nodo de la red y a partir de ahí se

desplaza en la magnitud \mathbf{n} se llega a un punto equivalente de la red de tal manera que no hay forma de diferenciarlo del anterior. De la condición de simetría de traslación se sigue que la función de onda $\Psi(\mathbf{r})$ del electrón se diferencia de la función de onda $\Psi(\mathbf{r}+\mathbf{n})$ en un factor constante; es decir,

$$\Psi(\mathbf{r}+\mathbf{n})=C\Psi(\mathbf{r}), \quad (\text{I-3.3})$$

en efecto de (I-3.1) se tiene que $\Psi(\mathbf{r}+\mathbf{n})=U(\mathbf{r}+\mathbf{n})\exp[i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{n})]$, pero según el teorema, $U(\mathbf{r}+\mathbf{n})=U(\mathbf{r})$ por ser periódica con el periodo de la red, entonces $\Psi(\mathbf{r}+\mathbf{n})=U(\mathbf{r})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n})$, se obtiene el resultado (I-3.3) si se toma

$$C=\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}). \quad (\text{I-3.4})$$

En la expresión anterior \mathbf{k} es el vector de onda que caracteriza el estado cuántico del electrón en el cristal. Como el exponente de la función exponencial es una magnitud adimensional, en este caso \mathbf{n} tiene dimensión de longitud, entonces \mathbf{k} debe tener la dimensión recíproca de longitud, es decir cm^{-1} . El módulo del vector \mathbf{k} se llama número de onda, su sentido físico representa el número de longitudes de onda que caben en 2π ,

$$|\mathbf{k}|=k=2\pi/\lambda \quad (\text{I-3.5})$$

Teniendo en cuenta (I-3.4), se vuelve a escribir (I-3.3) en la forma,

$$\Psi(\mathbf{r}+\mathbf{n})=\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n})\Psi(\mathbf{r}), \quad (\text{I-3.6})$$

$$\Psi(\mathbf{r})=\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n})\Psi(\mathbf{r}+\mathbf{n})=U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}), \quad (\text{I-3.7})$$

donde $U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ designa la función,

$$U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})=\exp\left\{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{n})\right\}\Psi(\mathbf{r}+\mathbf{n}), \quad (\text{I-3.8})$$

a continuación mostramos que en efecto $U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ respeta la periodicidad, de (I-3.6) y I-3.8 se tiene que

$$\begin{aligned}
U_k(r+n') &= \exp\{-ik \cdot (r+n+n')\} \Psi(r+n+n') \\
&= \exp\{-ik \cdot (r+n+n')\} \exp(ik \cdot n) \Psi(r+n) \\
&= \exp\{-ik \cdot (r+n)\} \Psi(r+n) \\
&= U_k(r)
\end{aligned}$$

La función de onda del electrón en el cristal representa una onda progresiva, $\exp(ik \cdot r)$, modulada por la función periódica $U_k(r)$, que tiene el período de la red y que depende del vector de onda k . La función $\Psi_k(r)$, determinada por la expresión (I-3.1) recibe el nombre de función de Bloch.

I.4. EXCITACIONES ELEMENTALES EN SÓLIDOS.

Hablar de excitaciones elementales en sólidos, implica adoptar una línea teórica de investigación de sus propiedades físicas, que cae dentro de las corrientes que se basan en la teoría microscópica de su estructura. Otras teorías se basan en los aspectos macroscópicos fenomenológicos de tales sólidos. Los sólidos cristalinos están formados por muchos átomos similares (del orden de 10^{23}cm^{-3}), acomodados espacialmente de forma regular. Para tratar el correspondiente problema de muchos cuerpos, se tendría que resolver la ecuación de Schrödinger para un total de 10^{23} partículas interactuantes, la cual en tal caso no se puede resolver.

En este sentido la teoría cuántica de campos tiende un puente para librar la brecha que existe entre el enfoque según un modelo atómico y los modelos que consideran al cristal como un continuo (H. Haken 1976). En este formalismo, los estados del cristal partiendo de su estado base, se describen fácilmente por medio de los operadores de creación y aniquilación los cuales se pueden usar de manera reiterada para obtener la descripción de cualquier excitación. Como ejemplo, es ilustrativo considerar el caso de las ondas sonoras que según la teoría del continuo son variaciones de la densidad $\Delta\rho(x, t)$ de manera periódica en el tiempo y en el espacio. Para una onda estacionaria $\Delta\rho$ puede escribirse como $\Delta\rho(x, t) = A \sin(\omega t) \sin(kx)$, lo cual

proporciona una base para su cuantización. Como el factor temporal es puramente armónico, se le puede tomar como la correspondiente amplitud de vibración $q(t)=A\sin(\omega t)$ la cual satisface la ecuación para el oscilador armónico cuya cuantización es bien conocida (L. de la Peña 1975). Para una onda k determinada se obtienen niveles de energía $E_n = n\hbar\omega$, $n=0, 1, 2, \dots$ que son múltiplos enteros de $\hbar\omega$. Se pueden interpretar estos niveles de energía como la ocupación de la correspondiente onda sonora por los cuantos de energía $\hbar\omega$, entonces a la onda se le asigna el carácter de partícula a través de las propiedades fundamentales.

$$E = \hbar\omega_k, \quad y \quad p = \hbar k \quad (I-4.1)$$

Como se verá más adelante en el ejemplo sobre fonones, la relación entre el vector de dispersión k y la frecuencia ω_k se da a través de una ecuación que se puede derivar directamente de la física clásica, a través de la ley de dispersión $\omega = vk$, donde v es la velocidad del sonido. El aspecto importante cuando se aplica la teoría cuántica de campos es su dualidad, al igual que en la mecánica cuántica, los procesos de vibración se tratan en ocasiones como si involucrasen partículas.

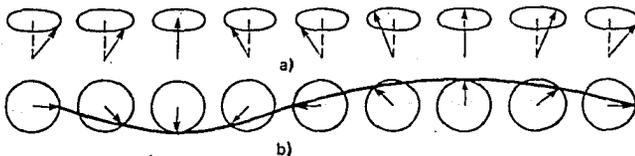


Fig. I.4 Onda de espín, a) vista lateral de la cadena de espines; b), vista superior .

Otro tipo de excitaciones elementales lo constituyen los magnones. En

efecto, en un material ferromagnético a la temperatura de $C K$ todos los espines tienen una orientación en el mismo sentido. Esta disposición de los espines corresponde al mínimo de energía. A medida que la temperatura se eleva, su energía crece dando lugar a que existan espines que se desvían de su orientación que tenían en el estado fundamental (estado de mínima energía). A diferencia del estado fundamental, el de los espines no orientados, es un estado excitado. En el caso de una excitación de poca energía los espines giran parcialmente (P. Pavlov, A. Jovlov 1987), esta onda de espín se representa esquemáticamente en la Fig. I.4. A los cuantos asociados con estas ondas de espín se les denomina magnones.

Las excitaciones elementales que se originan de los movimientos colectivos de los electrones respecto a los iones positivos, les corresponden ondas longitudinales que reciben el nombre de ondas de plasma, a los cuantos de tales ondas se les llama plasmones. Para frecuencias no muy elevadas estas oscilaciones se originan en metales y semiconductores, donde los electrones están débilmente ligados a los iones (P. Pavlov A. Jovlov 1987). En el estado base los electrones compensan totalmente la carga positiva de los iones y cada celda unitaria del cristal es neutra. Si en tal estado neutro ρ_0 es el número medio de electrones en la unidad de volumen del cristal, la desviación del número de electrones de ρ_0 da origen a que se formen los campos eléctricos repulsivos que tienden a restablecer el equilibrio produciéndose así las oscilaciones plásmicas (H. Haken 1976).

Se han mencionado sólo algunas de las excitaciones elementales que son importantes al determinar algunas propiedades en los sólidos; y al hacerlo, se ha estado pensando en un modelo de hamiltoniano, en donde éste se descompone en sus diferentes elementos y éstos se analizan separadamente; sin la interacción con los demás. Posteriormente se estudia la interacción entre los diferentes componentes y se encuentran otros fenómenos. La teoría cuántica de campos se usa para analizar teóricamente éstas excitaciones elementales a partir de la ecuación de Schrödinger, así como para estudiar sus interacciones. Sin embargo, los métodos de dicha teoría no se restringen a cristales, pueden ser aplicables a sólidos en general (H. Haken 1976).

Como un ejemplo de excitaciones elementales estudiaremos con detalle el caso de las vibraciones de la red cristalina.

Consideremos un cristal unidimensional constituido por N átomos de masa m , cuyas posiciones de equilibrio se localizan por el vector de la red $n=na$, $n=1, 2, 3, \dots, N$, donde N es un número muy grande, además el último átomo precede al primero con la finalidad de formar un anillo de tal manera que todos y cada uno tengan vecindades idénticas (condiciones de frontera cíclica), también se supone que los desplazamientos longitudinales y transversales son independientes. Si q_n es uno de los desplazamientos para el átomo que ocupa el nodo n y considerando sólo la interacción a primeros vecinos, es decir, hay interacción con el $(n-1)$ -ésimo y con el $(n+1)$ -ésimo átomo, los desplazamientos ocurren según la ley de Hooke. Para la energía potencial, se tiene,

$$V = (1/2) \gamma \sum_n (q_n - q_{n-1})^2 \quad (I-4.2)$$

y para la energía cinética

$$T = (1/2) \sum_n m \dot{q}_n^2 \quad (I-4.3)$$

de donde la función de Lagrange estará dada como,

$$L = (1/2) \sum_n m \dot{q}_n^2 - (1/2) \gamma \sum_n (q_n - q_{n-1})^2 \quad (I-4.4)$$

Las ecuaciones de movimiento de Lagrange son,

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_n} = \frac{\partial L}{\partial q_n} \quad (I-4.5)$$

que al aplicarlas a (I-4.4), se obtiene:

$$m \ddot{q}_n = -\gamma (q_n - q_{n-1}) + \gamma (q_{n+1} - q_n); \quad (I-4.6)$$

se propone como solución $q_n = x_n e^{i\omega t}$ donde x_n sería la amplitud de

vibración del n-ésimo átomo, con base en que se tiene un sistema oscilatorio. Al substituir esta solución en (I-4.6), se obtiene la siguiente relación de recurrencia para las amplitudes

$$-m\omega^2 x_n = \gamma(x_{n-1} - 2x_n + x_{n+1}), \quad (\text{I-4.7})$$

con las condiciones de frontera $q_n = q_{n+N}$.

A la ecuación anterior le corresponde un determinante secular de orden N, por lo que existen N valores para ω que satisfacen la ecuación (I-4.7); sin embargo, resulta más conveniente utilizar las fórmulas de recurrencia de manera directa que pintar el determinante y luego resolverlo, entonces en vista de que (I-4.6) es una ecuación en diferencias (A. A. Samarski 1986), $x_n = Ae^{ik \cdot n}$ al substituirlo en (I-4.7) se obtiene:

$$-m\omega^2 Ae^{ik \cdot n} = \gamma \left(Ae^{ik \cdot (n-a)} - 2Ae^{ik \cdot n} + Ae^{ik \cdot (n+a)} \right)$$

de donde

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\gamma}{m}} |\text{sen}(k \cdot a/2)|, \quad (\text{I-4.8})$$

el valor absoluto se debe a que la frecuencia siempre es positiva, $w(k)=w(-k)$ es máxima cuando $|\text{sen}(k \cdot a/2)| = 1$ por lo tanto

$$\omega_{\max} = 2\sqrt{\frac{\gamma}{m}}. \quad (\text{I-4.9})$$

La ω_{\max} se conoce como frecuencia natural de corte de la red, entonces para frecuencias por encima de este valor k, debe ser imaginaria para que pueda satisfacer la ecuación (I-4.8). Los valores de k·a que puede tomar la función exponencial están contenidos totalmente en el intervalo, $-\pi \leq k \cdot a/2 \leq \pi$. Los valores positivos y negativos de k son igualmente necesarios debido a que la perturbación puede propagarse tanto a la derecha como a la izquierda, por tanto el dominio de valores independientes en el espacio recíproco está dado por $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$, el cual constituye la primera zona de Brillouin de la red lineal. Podemos notar que debido a que $k=2\pi p a/N a$, donde $p=0 \pm 1 \pm 2 \pm \dots N/2$, existen N valores posibles de k

y por consiguiente N modos normales de vibración en la red.

Las consideraciones anteriores bien se pueden analizar directamente en el espacio \mathbf{k} , el tránsito del tratamiento anterior al nuevo formalismo se hace mediante una transformación unitaria de Fourier de los desplazamientos q_n a las nuevas coordenadas generalizadas A_k (A. S. Davidov 1981), que caracterizan los movimientos colectivos de los átomos correspondientes para determinados valores de \mathbf{k} . Dicha transformación está dada por

$$q_n = N^{-1/2} \sum_k A_k e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}}, \quad (I-4.10)$$

donde,

$$A_k = N^{-1/2} \sum_n q_n \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}). \quad (I-4.11)$$

Debido a que q_n es real se debe cumplir que $A_k = A_{-k}^*$. La energía cinética y potencial en términos de las nuevas coordenadas generalizadas están dadas por:

$$V = (1/2)m \sum_k \omega^2(\mathbf{k}) A_k A_{-k} \quad \text{y} \quad T = (1/2m) \sum_k \dot{A}_k \dot{A}_{-k}, \quad (I-4.12)$$

$$\text{donde} \quad m\omega^2(\mathbf{k}) = m\omega^2(-\mathbf{k}) = 4\gamma \sin^2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}/2). \quad (I-4.13)$$

Por tanto la función clásica de Lagrange toma la forma

$$L = T - V = (1/2)m \sum_k \left[\dot{A}_k \dot{A}_{-k} - \omega^2(\mathbf{k}) A_k A_{-k} \right]. \quad (I-4.14)$$

De (I-4.14) los momentos generalizados correspondientes en esta representación estarán dados por

$$P_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{A}_k} = m \dot{A}_{-k}. \quad (I-4.15)$$

A partir de las ecuaciones (I-4.12) y (I-4.13) la energía total se expresa como:

$$E = T + V = (1/2)m \sum_k (P_k P_{-k} - \omega_k^2 A_k A_{-k}). \quad (I-4.16)$$

Para pasar a la mecánica cuántica (A. S. Davidov 1981), se substituyen A_k y P_k por los operadores correspondientes que satisfacen las relaciones de conmutación

$$[A_k, P_k] = i\hbar\delta_{k,k'} \quad (I-4.17)$$

La expresión I-4.16 se transforma ahora en un operador de energía

$$H = (1/2)m \sum (p_k p_{-k} - \omega_k A_k A_{-k}). \quad (I-4.18)$$

De los operadores A_k y P_k se pasa a los operadores de Bose, a partir de las siguientes relaciones:

$$A_k = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega(k)}} (b_k + b_{-k}^*) \quad p_k = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega(k)}{2}} (b_k^* - b_{-k}). \quad (I-4.19)$$

Los operadores de Bose satisfacen las siguientes relaciones de conmutación

$$[b_k, b_{k'}^*] = \delta_{k,k'} \quad y \quad [b_k, b_{k'}] = 0 \quad (I-4.20)$$

substituyendo (I-4.19) en (I-4.20) se obtiene una expresión para el Hamiltoniano en términos de los operadores de Bose:

$$H = \frac{\hbar}{2} \sum \omega(k) [b_k^* b_k + b_{-k} b_{-k}^*] \quad (I-4.21)$$

El operador de desplazamiento en esta representación está dado por:

$$q_n = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\bar{\omega}(k)}} \exp(ik \cdot n) (b_k + b_{-k}^*), \quad (I-4.22)$$

Los operadores b_k y b_k^* actúan sobre las funciones $|\phi_k\rangle \equiv |0, 0, \dots, \phi_k, \dots, 0\rangle$ de la siguiente forma:

$$b_k^+ |\phi_k\rangle = \sqrt{\phi_k + 1} |\phi_k + 1\rangle \quad \text{y} \quad b_k |\phi_k\rangle = \sqrt{\phi_k} |\phi_k - 1\rangle, \quad (\text{I-4.23})$$

donde se han tomado en cuenta las relaciones de conmutación dados, en (I-4.20). Se supone que las funciones $|\phi_k\rangle$ están normalizadas; es decir,

$$\langle \phi_k | \phi_{k'} \rangle = \delta_{k, k'}. \quad (\text{I-4.24})$$

De (I-4.24) vemos que el operador b_k^+ aumenta y el b_k disminuye en una unidad el número ϕ_k en el estado determinado por la función $|\phi_k\rangle$.

Aplicando b_k y b_k^+ a las expresiones de la ecuación (I-4.23) respectivamente obtenemos

$$b_k b_k^+ |\phi_k\rangle = (\phi_k + 1) |\phi_k\rangle \quad \text{y} \quad b_k^+ b_k |\phi_k\rangle = \phi_k |\phi_k\rangle \quad (\text{I-4.25})$$

De (I-4.25) se deduce que las funciones $|\phi_k\rangle$ son las funciones propias del operador $b_k^+ b_k$ correspondientes a los valores propios ϕ_k .

Mediante las relaciones de conmutación (I-4.20) el operador de energía (I-4.21) se transforma en

$$H = \sum_k \hbar \omega(k) (b_k^+ b_k + 1/2) \quad (\text{I-4.26})$$

El estado base del sistema se define por medio de la función $|0\rangle$. En este estado la energía

$$E_0 = \langle 0 | H | 0 \rangle = 1/2 \sum_k \hbar \omega(k) \quad (\text{I-4.27})$$

tiene su valor mínimo.

La energía del cristal en el estado $|\phi_k\rangle$ se determina de acuerdo con (I-4.25) y (I-4.26) por la relación,

$$E_{\phi_k} = \langle \phi_k | H | \phi_k \rangle = E_0 + \phi_k \hbar \omega(k). \quad (\text{I-4.28})$$

Partiendo del operador dado por la ecuación (I-4.22) hallamos que en este mismo estado el valor medio para el desplazamiento del n-ésimo átomo $\langle \phi_k | q_n | \phi_k \rangle$ es igual a cero, y el valor medio del cuadrado del desplazamiento no depende del número del átomo

$$\langle \phi_k | q_n^2 | \phi_k \rangle = \hbar \phi_k / (mN\omega(k)) + \sum_{k' \neq 0} \hbar [2mN\omega(k)]^{-1}. \quad (I-4.29)$$

El segundo término de la ecuación (I-4.29) nos da la contribución de las "oscilaciones nulas" (cuando todas las $\phi_k = 0$).

Al valor $k=0$ le corresponde el desplazamiento del cristal en conjunto. En este caso $\omega(0) = 0$. De este modo, cuando $k=0$ las oscilaciones de los átomos están ausentes y este valor debe excluirse de la suma de (I-4.29). En esta suma se incluyen únicamente las k cuyo valor absoluto es igual o mayor que $2\pi/Na$, al mismo tiempo $\omega \leq (2\pi/N)\sqrt{\gamma/m}$.

Así pues los estados estacionarios excitados del cristal están distribuidos por todo él y se caracterizan por el vector de onda k (por lo tanto también por el cuasi-momento $\hbar k$ y por la energía $\hbar\omega(k)$). Estos estados excitados se llaman *fonones*. De acuerdo con (I-4.13) los estados con vectores de onda k y $-k$ tienen la misma energía.

Los números ϕ_k en las funciones $|\phi_k\rangle$ indican la cantidad de fonones que hay en un estado dado. La función $|\phi_k\rangle$ del estado con ϕ_k fonones puede obtenerse aplicando sucesivamente el operador b_k a la función del estado base $|0\rangle$:

$$|\phi_k\rangle = (\phi_k!)^{-1/2} (b_k^+)^{\phi_k} |0\rangle.$$

En la figura (I-4.2) se gráfica la frecuencia de los fonones $\omega(k) + \omega(-k) = 2\sqrt{\gamma/m} |\sin(k \cdot a/2)|$. Conociendo la frecuencia de los fonones en función de k pueden calcularse las velocidades de fase V_f y de grupo V_g de las respectivas excitaciones elementales

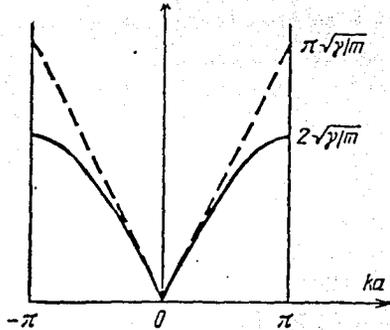


Fig. 1.5 Dispersión de los fonones acústicos

$$V_f = \omega(k)/k = (2/k) \sqrt{\gamma/m} |\sin(k \cdot a/2)|, \quad (I-4.30)$$

$$V_g = \frac{d\omega(k)}{dk} = a \sqrt{\gamma/m} |\cos(k \cdot a/2)|. \quad (I-4.31)$$

Las excitaciones de onda larga, $ka=2\pi a/\lambda \ll 1$, según (I-4.8) y (I-4.31) se caracterizan por las magnitudes

$$\omega(k) = ka \sqrt{\gamma/m} = kV_f \quad \text{y} \quad V_f = V_g = a \sqrt{\gamma/m}. \quad (I-4.35)$$

Las excitaciones de onda larga pueden considerarse como ondas elásticas en un medio. La velocidad de las ondas elásticas (velocidad del sonido) en mecánica se determina por la expresión $V_s = \sqrt{E/\rho}$ donde E es el módulo de Young y ρ la densidad del medio. En nuestro caso $\rho = m/a$, y el módulo de Young, que determina la razón de la fuerza $\gamma(q_n - q_{n-1})$ a la deformación relativa $(q_n - q_{n-1})/a$, producida por ella, es igual $E = \gamma a$. Por lo tanto $V_s = a \sqrt{\gamma/m}$. Por lo que, las excitaciones elementales que se han considerado coinciden, en el límite $ka \ll 1$, con las ondas acústicas en un medio elástico. De ahí que a dichas excitaciones se les llame fonones acústicos.

I.5. DESORDEN Y LOCALIZACIÓN DE LA FUNCIÓN DE ONDA

La característica fundamental de un cristal es que sus átomos o moléculas que lo constituyen tienen una disposición regular ordenada, y existen dos aspectos importantes de este orden que se presentan a continuación.

ORDEN DE CORTO ALCANCE. - "Por orden de corto alcance se entiende una disposición regular de átomos de la red en la vecindad inmediata de algún átomo particular. Por tanto, este orden determina el campo del cristal en el cual tal átomo está inmerso "

ORDEN DE LARGO ALCANCE. - "Por orden de largo alcance se entiende la periodicidad estricta y por tanto, la invariancia de traslación de la red del cristal. El orden de largo alcance conecta las regiones de orden de corto alcance de una manera tal que los átomos en los lugares equivalentes de la red tienen la misma vecindad y la misma orientación " (O. Madelung, 1978) (esta definición es anterior al descubrimiento de redes cuasicristalinas).

El cristal ideal con su simetría perfecta en toda su estructura, no existe en la naturaleza y las leyes de la termodinámica demuestran esta imposibilidad (C. Ruiz Mejía 1983), de ahí que todos los sólidos cristalinos tienen defectos, es decir, interrupciones de la periodicidad. Además, la mayoría de los materiales que existen en la naturaleza no son ordenados (J. Tagüeña, 1983) . A estos materiales se les llama amorfos o materiales desordenados. La consecuencia inmediata del desorden es la falta de orden de largo alcance aún cuando persista el orden de corto alcance. La ausencia de la simetría de traslación en estos materiales hace que el tratamiento matemático sea diferente al caso cristalino.

ALGUNOS TIPOS DE DESORDEN

1.-Desorden sustitucional, en este caso se tiene una red que corresponde a un cristal perfecto, pero no se sabe qué átomos se encuentran de manera determinada en cada uno de los nodos de la red, sino más bien se da una cierta probabilidad de encontrar tal o cual átomo en tales lugares. Lo anterior quiere decir que éstos se distribuyen aleatoriamente en la red. Esta situación se daría, por ejemplo, cuando algunos átomos de un cristal perfecto se cambien por otros como en el caso de una aleación $A B_x^{1-x}$, donde x es la concentración de átomos de A.

2.-Desorden topológico. En el caso del desorden topológico los átomos no se pueden acomodar en una red periódica, sin embargo, los vectores que dan las posiciones de los átomos están a pesar de la falta de orden, sujetos a ciertas restricciones debido a la interacción de los átomos entre vecinos.

3.-Desorden magnético. Supóngase que se tiene un determinado cristal al cual se le puede asociar un momento magnético a cada sitio. Si este momento varía al azar, se dice entonces que se tiene un material magnético desordenado.

El número de diferentes tipos de desorden dificulta una teoría unificada, a partir de principios básicos como sucede en el sólido cristalino (O. Madelung, 1978), por lo que uno se preguntaría cuáles son las propiedades comunes a todos los sólidos desordenados; es decir, en como los sólidos amorfos en general se diferencian de los sólidos cristalinos.

El concepto de localización de estados es quizá el aspecto más importante en la teoría de los sistemas no ordenados, por lo que se considerará con detalle, posteriormente, con el fin de resaltar consecuencias importantes de este fenómeno.

En segundo lugar, se preguntaría cuáles de los resultados que existen para el sólido cristalino se pueden extrapolar al sólido amorfo. En este sentido resulta que el modelo de teoría de bandas con todos sus conceptos

como son las funciones de Bloch, Zonas de Brillouin ya no se pueden aplicar, puesto que estos conceptos surgen como una consecuencia de la periodicidad y de la invarianza traslacional en el cristal. Sin embargo, resulta que el concepto de densidad de estados $N(E)$ (O. Madelung, 1978), de un electrón es aplicable.

Finalmente, se pregunta también cuál es la diferencia de transporte vía estados localizados y vía estados extendidos.

LOCALIZACIÓN

El concepto de localización frecuentemente va ligado al hecho de que existe una cierta interrupción de la periodicidad del cristal o se trata de un material desordenado. De tal manera que cuando se estudian las funciones propias del Hamiltoniano en estos sistemas, aparecen estados localizados, a diferencia de los sistemas ordenados donde las funciones propias corresponden a las funciones de Bloch y representan estados extendidos ($\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$).

Para introducir el concepto de localización consideremos una cadena lineal atómica, como la de la sección I-4, de tal manera que sigan siendo válidas todas las condiciones y la única diferencia es que ahora se considera que en el nodo $n=0$, se tiene una masa atómica ligeramente diferente a las demás; es decir, la cadena está perturbada en el nodo n . Debido a que hay diferentes tipos de desorden, otra posibilidad hubiese sido en lugar de variar la masa, por ejemplo, variar la distancia interatómica. Para la cadena de átomos de la sección I-4 se había encontrado el espectro de frecuencias, el cual está dado por:

$$\omega(\mathbf{k}) = 2 \sqrt{\frac{\gamma}{m}} |\sin(\mathbf{k}a/2)| = \omega_0 |\sin(\mathbf{k}a/2)|, \quad (\text{I-5.1})$$

donde $\omega_0 = 2 \sqrt{\frac{\gamma}{m}}$ es la frecuencia de corte.

La masa en $n = 0$ se escribe de la siguiente forma $m_0 = m(1-c)$, donde c puede ser positivo o negativo. En lugar de la ecuación (I-4.6), ahora se tienen las siguientes ecuaciones de movimiento (O. Madelung, 1978)

$$m_0 \ddot{q}_0 = \gamma (q_1 + q_{-1} - 2q_0) \quad (I-5.2)$$

$$m \ddot{q}_n = \gamma (q_n + q_{n-1} - 2q_n), \quad n \neq 0. \quad (I-5.3)$$

Al considerar la dependencia con respecto al tiempo de $q_n \propto \exp(i\omega t)$ y al derivar dos veces los primeros miembros de la ecuaciones (I-5.2) y (I-5.3) y al cancelar los términos comunes, se tiene:

$$q_1 + q_{-1} + \left[\frac{4\omega^2}{\omega_0^2} (1-c) - 2 \right] q_0 = 0 \quad (I-5.4)$$

$$q_{n+1} + q_{n-1} + \left[\frac{4\omega^2}{\omega_0^2} - 2 \right] q_n = 0 \quad (I-5.5)$$

Para la n -dependencia de los desplazamientos se propone una solución de la forma,

$$q_n = A\lambda^n + B\lambda^{-n} \quad (I-5.6)$$

donde por el momento λ es desconocida. El motivo de tal proposición es que la ecuación anterior es una ecuación en diferencias lineal y de segundo orden. Sustituyendo los valores de (I-5.6) en (I-5.4) y (I-5.5) se obtiene la siguiente ecuación secular para λ

$$\lambda^2 + 1 + \left[\frac{4\omega^2}{\omega_0^2} - 2 \right] \lambda = 0 \quad (I-5.7)$$

En la cadena no perturbada sólo son posibles soluciones de la ecuación anterior para $\omega < \omega_0$ ya que para el caso $\omega > \omega_0$ el discriminante se hace negativo y entonces las raíces son complejas.

Si se escribe $\lambda = \exp(i\alpha)$, se encuentra que las soluciones de la

ecuación de movimiento son ondas planas con frecuencias relacionadas por (I-5.1) con $\alpha=ka$.

Para la cadena perturbada del mismo modo nos restringimos primero a la región $\omega < \omega_0$. Se puede siempre construir una solución general a través de ondas estacionarias, una simétrica ($q_n = q_{-n}$) y la otra antisimétrica ($q_n = -q_{-n}$). Para el segundo caso el átomo perturbado en $n=0$ está en reposo, esta parte no se altera por la perturbación, por lo tanto, se buscan soluciones tales que $q_n = q_{-n}$, para las cuales se puede escribir

$$q_n = A \exp(ika|n|) + B \exp(-ika|n|) \quad (I-5.8)$$

con este tipo solución la ecuación (I-5.4) se puede escribir,

$$\frac{A \exp(ika) + B \exp(-ika)}{A + B} + \left[\frac{2\omega^2}{\omega_0^2} (1-\epsilon) - 1 \right] = 0 \quad (I-5.9)$$

para $\epsilon=0$ (cadena no perturbada), $A=B$; esto se deduce al comparar la ecuación anterior con (I-5.5) (deben ser iguales).

Para la cadena perturbada se propone, $A = \frac{C}{2} \exp(-id)$, $B = \frac{C}{2} \exp(id)$; el motivo para hacerlo es puramente de carácter matemático. De (I-5.8) y (I-5.9) resultan las siguientes ecuaciones,

$$q_n = \text{Cos}(n|ka-d) \quad \text{y} \quad \tan(d) = \epsilon \tan(ka/2). \quad (I-5.10)$$

Para obtener la segunda ecuación de (I-5.10) se ha eliminado ω de acuerdo con (I-5.1), debido a que se tiene todo un espectro de frecuencias, en particular el de (I-5.1). La solución (I-5.10) significa sólo un ligero cambio en relación con la solución para la cadena no perturbada; sin embargo, ahora son posibles soluciones con $\omega > \omega_0$, λ es entonces real y negativa. A continuación se busca la solución para $\omega > \omega_0$. Una de las soluciones de (I-5.7) es menor que la unidad y la otra mayor que la unidad. Ambas dan el mismo resultado cuando se intercambian A por B. Por lo anterior nos restringimos a una solución y elegimos $k < 0$ con $|\lambda| < 1$.

Debemos distinguir los casos de (I-5.6), $n > 0$ y $n < 0$ en cada caso uno de los términos diverge cuando $n \rightarrow \infty$ de ahí que la amplitud asociada debe anularse, con esta consideración se obtiene,

$$q_n = A\lambda^n \text{ para } n > 0, \quad q_n = B\lambda^{-n} \text{ para } n < 0 \quad (|\lambda| < 1). \quad (\text{I-5.11})$$

Ahora se elimina el desplazamiento q_0 de las ecuaciones (I-5.4) y (I-5.5) con $n=1$ y con $n=-1$ para dejarla como una relación entre los desplazamientos q_2, q_1, q_{-1}, q_{-2} . Primero sustituimos para $n=1$ en la ecuación (I-5.5) y se obtiene:

$$A\lambda^2 + q_0 + \left[\frac{4\omega^2}{\omega_0^2} - 2 \right] A\lambda = 0, \quad \therefore q_0 = -A\lambda^2 - \left[\frac{4\omega^2}{\omega_0^2} - 2 \right] A\lambda. \quad (\text{I-5.12})$$

Haciendo lo mismo para $n=-1$, se tiene que:

$$q_0 = -B\lambda^2 - \left[\frac{4\omega^2}{\omega_0^2} - 2 \right] B\lambda; \text{ sustituyendo estos valores en la ecuación}$$

(I-5.4) se obtiene la siguiente ecuación,

$$\begin{aligned} A\lambda + B\lambda + \left[\frac{4\omega^2}{\omega_0^2} (1-\epsilon) - 2 \right] \left\{ -A\lambda^2 - \left[\frac{4\omega^2}{\omega_0^2} - 2 \right] A\lambda \right\} &= \\ = A\lambda + B\lambda + \left[\frac{4\omega^2}{\omega_0^2} (1-\epsilon) - 2 \right] \left\{ -B\lambda^2 - \left[\frac{4\omega^2}{\omega_0^2} - 2 \right] B\lambda \right\} & B\lambda. \end{aligned} \quad (\text{I-5.13})$$

De esta ecuación se concluye que $A=B$, sustituyendo (I-5.11) en (I-5.4), resulta que

$$2\lambda + \frac{4\omega^2}{\omega_0^2} (1-\epsilon) - 2 = 0; \quad (\text{I-5.14})$$

de (I-5.7) se tiene que $\frac{4\omega^2}{\omega_0^2} - 2 = (-\lambda^2 - 1)/\lambda$. Entonces, (I-5.14) se

convierte en $(\lambda-1) \left[2 - (\lambda-1)(1-\epsilon)/\lambda \right] = 0$. Como λ es distinta de 1, de aquí

resulta que,

$$\lambda = \frac{\epsilon - 1}{1 + \epsilon} \quad (I-5.15)$$

insertando esta solución en (I-5.11) y (I-5.7) se obtiene finalmente,

$$q_n = q_0 (-1)^n \left(\frac{\epsilon - 1}{1 + \epsilon} \right)^{|n|} \quad \text{y} \quad \omega^2 = \omega_0^2 / (1 - \epsilon) \quad (I-5.16)$$

Esta solución describe una oscilación, en la cual dos esferas vecinas vibran en dirección opuesta Fig I.6. Los desplazamientos disminuyen cuando se aumenta $|n|$. ¡La vibración está localizada!. Ahora, si atendemos a la suposición de que λ es negativa y además $|\lambda| < 1$, de (I-5.15), esto quiere decir que existe únicamente una solución en la región $\omega > \omega_0$ si ϵ es positivo y mayor que la unidad. De ahí que los estados de vibración localizada son solamente posibles, cuando la masa m_0 del átomo perturbado es menor que la masa M de los átomos de la red. El nivel más alto $\omega = \omega_0$ de la cadena no perturbada se subdivide por efecto de la perturbación y al aumentar el valor de $\epsilon = (M - m_0)/M$ se mueve hacia mayores frecuencias; la vibración que en el caso no perturbado se comportaba como una onda plana extendida, ahora con la perturbación se hace localizada. El ejemplo anterior muestra el concepto de localización, pero se realiza en una cadena lineal con una impureza, por lo que no se puede tomar como modelo de cadena desordenada.

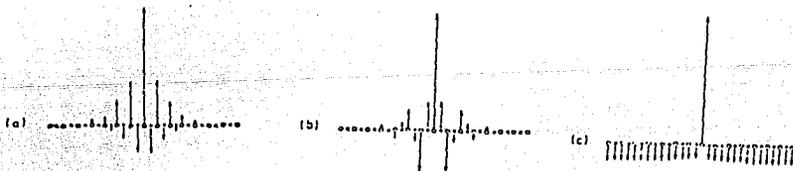


Fig. 1.6. Las vibraciones localizadas de la red: a) para átomos idénticos en la cadena-las vibraciones localizadas ocurren por encima de la frecuencia límite ω_0 , para una cadena con una base-las vibraciones localizadas ocurren por encima de la rama óptica; b) las vibraciones localizadas entre las ramas acústicas y ópticas; c) resonancia en la rama acústica.

El caso más general de la teoría de excitaciones en sistemas desordenados, para algunos autores, se centra en el modelo matemático que corresponde al hamiltoniano de Amarre Fuerte (J. Ziman, 1979) el cual se define por,

$$H = \sum_i |i\rangle \epsilon_i \langle i| + \sum_{i,j} |i\rangle V_{ij} \langle j| \quad (I-5.17)$$

los sitios $\{i\}$ forman una red, cada $\langle r|i\rangle$ está centrado alrededor del correspondiente lugar i y decae a partir de ahí. El primer término del lado derecho de (I-5.17) describe una partícula que puede ser atrapada alrededor de cualquier lugar del sitio i , con una energía propia ϵ_i . El segundo término permite a la partícula saltar del lugar i al lugar j con un elemento de la matriz de transferencia V_{ij} . El movimiento cuántico asociado con el hamiltoniano (I-5.17) es equivalente al movimiento ondulatorio de un conjunto de resortes acoplados (O. Madelung, 1978), lo cual se manifiesta al escribir la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo como $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ donde $|\psi\rangle = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle$, y H se toma según (I-5.17) luego al hacer estas sustituciones resulta la siguiente ecuación

$$(\epsilon_i - E)C_i + \sum_j V_{ij} C_j = 0. \quad (I-5.18)$$

Por otro lado la ecuación que describe el movimiento de un conjunto de resortes acoplados es $-m_1(\omega^2 - \omega_1^2)u_1 + \sum_j K_{ij}(u_1 - u_j) = 0$ donde los u_1 son los desplazamientos de los resortes a partir de sus posiciones de equilibrio y las K_{ij} son las constantes de elasticidad del resorte que conecta el lugar i con el lugar j . Por lo que los resultados se extienden para los fonones isotrópicos y para electrones s , teniendo en consideración que los primeros son bosones y los segundos son fermiones.

Para una cadena regular, la solución de (I-5.18) se da a través del teorema de Bloch (J. Ziman 1979)

$$E(\mathbf{k}) = \epsilon_0 + \sum_{\mathbf{n} \neq 0} V(\mathbf{n}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{n}). \quad (I-5.19)$$

Si la integral de traslape (superposición de ondas) es una constante $-V$ y se extiende solo a los z primeros vecinos más próximos en un lugar dado, se

tiene una banda de energía centrada en ϵ_0 con un ancho de banda total de $2B \approx 2zV$ donde z es el número de coordinación, en este caso B proporciona una medida conveniente de la escala de energía del sistema anterior.

Para el caso de una cadena desordenada se considerará que la interacción se da sólo entre primeros vecinos, con el fin de poder abordar el tema, por lo que la ecuación (I-5.18) se transforma, ahora, en una ecuación en diferencias.

$$(\epsilon_1 - E)C_{1,i} + V_{1,i+1}C_{1,i+1} + V_{1,i-1}C_{1,i-1} = 0 \quad (I-5.20)$$

que puede ser escrita en forma matricial

$$\begin{pmatrix} C_{1,i} \\ C_{1,i+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -(V_{1,i+1})^{-1}V_{1,i-1} & -(V_{1,i+1})^{-1}(\epsilon_1 - E) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{1,i-1} \\ C_{1,i} \end{pmatrix}, \quad (I-5.21)$$

si definimos $U_1 = \begin{pmatrix} C_{1,i-1} \\ C_{1,i} \end{pmatrix}$, la ecuación (I-5.21) se puede escribir en forma

más compacta $U_{1,i+1} = T_1 U_{1,i}$, de donde se observa que la excitación U_1 que pasa por la i -ésima celda, es generada por la correspondiente excitación que pasa por la celda anterior multiplicada por la matriz de transferencia T_1 .

Una matriz de transferencia se le asigna así, sin ambigüedad, a cada celda de la red. La propagación de una excitación a lo largo de la cadena se representa entonces como un producto de una sucesión de matrices,

$$U_{1,i+1} = T_{1,i+1}^{-1} T_{1,i+1}^{-1} \dots T_{1,i} U_{1,i}, \quad (I-5.22)$$

para un sistema ordenado, todas las matrices de transferencia son iguales, por lo que

$$U_{1,1}' = [T]^{-1} U_{1,1}$$

(I-5.23)

El efecto del desorden es cambiar la matriz de transferencia de celda a celda debido a las variaciones aleatorias de los elementos de la matriz de transferencia (I-5.21). Esto quiere decir que la matriz de transferencia T_1 es una función estocástica del lugar 1 , con una distribución estadística determinada por el modelo físico propuesto.

Ziman demuestra: si los valores propios de la matriz de transferencia para una cadena regular son reales, entonces hay una brecha espectral en la cadena. Por otro lado el teorema de Saxon & Hunter (J. Ziman 1979) dice: *cualquier región que es una brecha espectral tanto para una cadena pura del tipo A y una cadena pura del tipo B, es también una brecha para una red mezclada con átomos del tipo A y B.*

Ahora considerese una aleación cuyos dos constituyentes corresponden a dos matrices de transferencia T y T' . Supóngase primero que la variable espectral E está en lo que sería una brecha para una red perfecta del tipo T , pero es una banda permitida para T' . Entonces el teorema de Saxon & Hunter no se aplica y el espectro se puede considerar continuo alrededor de E . Los valores propios de T deben ser reales para esta E y si se hace un análisis de la forma de (I-5.21) se podrá observar que esta matriz se puede elegir tal que sea unimodular, entonces se pueden elegir sus valores propios x_1 y x_2 , para que cumplan con

$$x_1 = 1/x_2 > 1 > x_2 \quad (I-5.24)$$

Primero suponemos que tenemos una cadena con sólo constituyentes T ; si se inicia una excitación en el extremo izquierdo de la cadena con vector de excitación $U_0 = a_1 \phi_1 + a_2 \phi_2$ (donde ϕ_1 y ϕ_2 son los vectores propios de T) y que pasa a través de N celdas sucesivas de este tipo, según (I-5.23) se llega a una excitación

$$U_N = (T)^N U_0 = a_1 (x_1)^N \phi_1 + a_2 (x_2)^N \phi_2 \quad (I-5.25)$$

En general, el valor propio mayor x_1 rápidamente domina en esta

expresión, U_N tiende a la "dirección" de ϕ_1 y crece en amplitud exponencialmente a lo largo de la cadena, con un coeficiente [que resulta de considerar $(x_1)^N = \exp(N \ln x_1)$]

$$\gamma = \ln(x_1) \quad (I-5.26)$$

Pero, si resulta que a_1 es cero, el efecto de multiplicar por T resultará ser muy diferente: la excitación decaerá exponencialmente a lo largo de la cadena, como

$$U_N = \exp(-\gamma N) \phi_2 \quad (I-5.27)$$

Estos son los resultados que se obtienen en la brecha de una cadena perfecta. Ahora se indaga cuál es el efecto de mezclar esta cadena perfecta con celdas del tipo T'. Como E no está en la brecha de esta matriz de transferencia, cada una de las celdas de T' tiene el efecto importante de cambiar la fase en cada ocasión que encuentra la excitación, en otras palabras, la fase del vector de excitación ya no tenderá uniformemente tal que se satisfagan las condiciones de frontera al llegar al otro extremo. Sin embargo se conjetura que la excitación aún crece exponencialmente en promedio (J. Ziman 1979), con un coeficiente

$$\gamma = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln |T_N \dots T_1 U_0| \quad (I-5.28)$$

De manera muy general (I-5.28) predice un valor definido positivo de γ , así que la excitación crece en amplitud al ir hacia la derecha a lo largo de la cadena; sin embargo, resulta el problema de cómo conciliar la necesidad de que se cumplan las condiciones de frontera con este hecho, para esto, se supone que se inicia una excitación en el extremo opuesto de la cadena, las matrices de transferencia que se va encontrando son versiones transpuestas de las del caso anterior y las cuales tienen las mismas propiedades generales y por tanto la excitación crecerá también exponencialmente al ir hacia la izquierda de la cadena con coeficiente γ . Lo anterior establece que la última función es análoga a la función exponencial decreciente (I-5.27) que se encontró como solución especial en la brecha de una cadena perfecta.

De estas consideraciones se hace plausible que en las cadenas desordenadas sus funciones propias no pueden ser extendidas como las funciones de Bloch de una red perfecta. A γ en la ecuación (I-5.28) se le llama exponente de Liapunov y se identifica con el inverso de la longitud de localización.

LOCALIZACIÓN SEGÚN ANDERSON. Anderson considera una red puntual tridimensional ocupada por átomos cada uno de los cuales tiene justamente un único estado E_n para el sitio n . Si todos los E_n son iguales, resulta que existe una banda de energía de ancho B . Para la discusión de los estados en una red desordenada, se mantienen las posiciones de los átomos en los nodos de la red, pero propone que las E_n se distribuyan estadísticamente sobre un intervalo de ancho W . El hamiltoniano se escribe en la representación de Wannier (O. Madelung, 1978), y en términos de los operadores de creación y aniquilación

$$H = \sum_n E_n C_n^+ C_n + \sum_{mn} V_{mn} C_m^+ C_n, \quad (I-5.29)$$

en el cual para simplificar la dificultad matemática, sólo se admiten transiciones entre vecinos inmediatos y para ellos $V_{mn} = V = \text{cte.}$. Entonces a partir de un estado inicial en el cual el electrón bajo consideración se encuentra en un punto determinado de la red, Anderson se pregunta sobre la probabilidad de encontrar al electrón en este punto nuevamente cuando $t \rightarrow \infty$. Si la posición inicial pertenece a un estado localizado, la difusión se restringe a un volumen finito, la probabilidad de retorno cuando $t \rightarrow \infty$ es entonces distinta de cero. Si, el electrón es capaz de difundirse al infinito, la probabilidad de retorno es cero. Anderson fue capaz de demostrar que la magnitud de la razón W/B decide entre estas dos alternativas: en particular para el estado $E=0$ (valor medio de la distribución E_n en la red desordenada, que correspondería al estado de la mitad de la banda en la red ordenada). La probabilidad de retorno es cero si W/B cae por debajo de un valor fijo del orden de 5, el estado es entonces extendido, para razones grandes de W/B , es decir cuando el ancho de la distribución de los niveles de energía excede de una manera importante el ancho de la banda B , el estado $E=0$ es localizado (J. Ziman 1979).

DENSIDAD DE ESTADOS. Por densidad de estados se entiende el número de estados que hay en el intervalo de energía ($E, E+dE$), para algún sistema cuántico, por ejemplo en el caso de una partícula libre que se mueve dentro de una caja de longitud L , de la expresión para su momento, se tiene $p=(2mE)^{1/2}=2n\pi\hbar/L$, $n=0, \pm 1, \pm 2, \dots$. El número total de estados $N(E)$ con energía menor o igual que E es $2n+1$, y al expresar n en términos de E resulta que, $N(E)=(L/\pi\hbar)(2mE)^{1/2}+1$, luego $N(E+\Delta E)=(L/\pi\hbar)(2mE+\Delta E)^{1/2}+1$ aproximadamente igual a $N(E)+(L/2\pi\hbar)(2m/E)^{1/2}\Delta E$, por lo que $\Delta N=N(E+\Delta E)-N(E)=(L/2\pi\hbar)(2m/E)^{1/2}\Delta E$, pero por definición $\Delta N=\rho(E)\Delta E$ por lo que $\rho(E)=(L/2\pi\hbar)(2m/E)^{1/2}$.

Para el caso de una red desordenada, la teoría de Mott hace un análisis de la distribución de los estados energéticos según el grado de localización. Básicamente lo que esta teoría dice es que existe una energía límite E_c en la banda de conducción de los materiales amorfos y respectivamente una energía E_v en la banda de valencia, que divide los estados localizados de los estados extendidos y, según sea el tipo de amorpho, pueden existir dos posibilidades: a) existe un límite inferior exacto (a partir de E_c) del espectro de estados localizados, la probabilidad de que surja un estado localizado con energía de ionización superior a cierta energía crítica es cero. b) no existe un límite inferior exacto del espectro de los estados localizados, o mejor dicho, este límite se encuentra más allá de los límites de la banda prohibida (P. V. Pavlov, 1987).

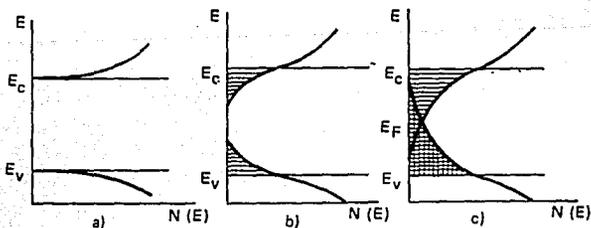


Fig. 1.7. a) Dependencia de la densidad de estados respecto a un cristal, b) y c) para sólidos amorfos. Los estados localizados se han rayado.

La dependencia de la densidad de estados respecto de la energía para estos dos casos, se muestra en la figura I.7, también se adjunta la correspondiente a la dependiente de un cristal para que sirva como patrón de comparación. En el primer caso, Fig I.7a, la representación de la banda prohibida conserva su sentido exacto. Existe una región de energías en la cual, la densidad de estados es igual a cero. En el segundo caso todo el intervalo de energías $E_v < E_c$ está lleno de niveles discretos, en el sentido antes considerado no existe la banda prohibida.

Sin embargo la región $E_c - E_v$ indicada se diferencia por principio de las bandas permitidas. Así los electrones localizados en los niveles discretos sólo pueden participar a saltos en el transporte de carga. En las redes desordenadas, las energías de los estados localizados se distribuyen sobre un amplio intervalo. Los estados localizados adyacentes pueden tener energías ampliamente diferentes. En alguna transición la diferencia de energía debe ser suministrada por un fonón. La probabilidad de transición puede resultar tan pequeña que la transición a otros estados adyacentes, a los cuales el consumo de energía involucrada sea menor se hace más probable, de este modo se tiene una probabilidad de salto además de la probabilidad de salto entre vecinos inmediatos, a saber, la probabilidad de salto de intervalo variable (O. Madelung, 1978).

Para examinar como es la conductividad eléctrica en redes desordenadas, es necesario tener en cuenta los diferentes mecanismos de conducción que suceden para los estados extendidos y para los estados localizados.

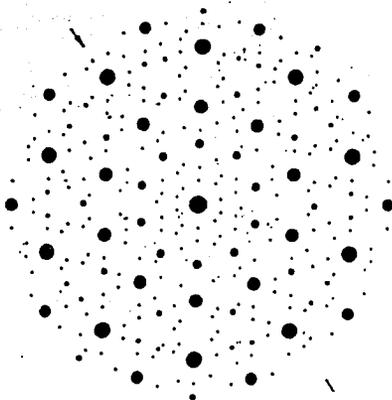
La contribución de los estados extendidos a la conductividad es siempre dominante cuando hay un número suficientemente grande de electrones en estos estados, y por tanto cuando la energía de Fermi está por arriba del borde de movilidad E_c o dentro de algunos $k_B T$ de este límite. El primer caso ocurre en líquidos, metales amorfos y aleaciones. El segundo caso es importante en la banda de impurezas de los semiconductores .

CAPITULO II

SISTEMAS CUASIPERIODICOS

II.1 CUASICRISTALES. Como se dijo en la introducción, el término de cuasicristal se introduce en la física del estado sólido, para referirse a los materiales que presentan orden de largo alcance en el patrón de difracción, pero sus simetrías están prohibidas por la cristalografía tradicional. En particular estos materiales carecen de simetría de traslación en su estructura atómica.

El primer reporte de una fase cuasicristalina fue publicado por Shechtman, Blech, Cahan y Gratias (Shechtman *et al.* 1984). Se refiere a una fase sólida de aleación $\text{Al}_{.86}\text{Mn}_{.14}$ cuyo patrón de difracción de electrones,



*Fig. II.1. Patrón de difracción de electrones en una aleación de Al-Mg enfriada abruptamente; permite observar con claridad la simetría de orden 5 [Shechtman *et al.* PRL 53, 1951(1984)]*

con puntos bien definidos, muestra simetría icosaedral. Por una parte, la definición de los puntos significa una estructura altamente ordenada, como la de un cristal; por otra, el orden icosaedral con sus ejes de simetría pentagonal es imposible para los cristales tradicionales. Estos aspectos contradictorios necesitaban de un modelo que resolviera el problema de hacer compatible el orden de largo alcance con la simetría cinco.

En breve apareció el primer modelo propuesto por Levine y Steinhardt (D. Levine y P. J. Steinhardt, 1984) basado en una generalización de los mosaicos de Penrose, (M. Gardner, 1977) con simetría icosaedral y con patrones de difracción similares a los obtenidos por Shechtman. Es decir, la red de Penrose que es un mosaico bidimensional se generaliza al espacio de tres dimensiones. Cabe decir que la red de Penrose fué introducida por primera vez por el matemático inglés de la Universidad de Oxford, Roger Penrose en 1974 (M. Gardner, 1977). Esta red consiste en el recubrimiento del plano a través de dos motivos o celdas unitarias, que a su vez consisten de dos rombos uno flaco y el otro gordo de ángulos interiores 36° , 144° y $72^\circ, 104^\circ$, respectivamente, y las longitudes de sus lados son iguales, Ver fig. II.2 (las reglas para generar la red se dan más adelante). Una de las propiedades importantes de la red de Penrose es su orden orientacional de largo alcance con simetría cinco a pesar de ser cuasiperiódica. Anteriormente al descubrimiento de las fases cuasicristalinas Makay había estudiado el patrón de difracción de la red de Penrose y había desarrollado un algoritmo para generar una malla bidimensional (F. Mejía Lira 1988). El resultado de este estudio da un patrón de difracción con simetría cinco. A partir de estos hechos se sientan las bases para establecer el paradigma de la "cuasicristalografía" que se encargará de estudiar la estructura y las propiedades de estos materiales, que no son cristales convencionales donde exista una celda unitaria y simetría de traslación, pero que tampoco son amorfos, sino que mas bien constituyen una nueva clase de materiales y que en adelante en relación con su estructura se les llamara "CUASICRISTALES".

En este capítulo se analizarán algunos aspectos relacionados con la cuasiperiodicidad, como son las funciones cuasiperiódicas, pues el orden cuasiperiódico significa que la función que describe la densidad de los

átomos situados en los puntos de la red es cuasiperiódica; entendiéndose por función cuasiperiódica aquella que se expresa como una combinación lineal de funciones periódicas pero donde al menos dos periodos son inconmensurados. También se discutirán algunos algoritmos para construir mallas cuasiperiódicas.

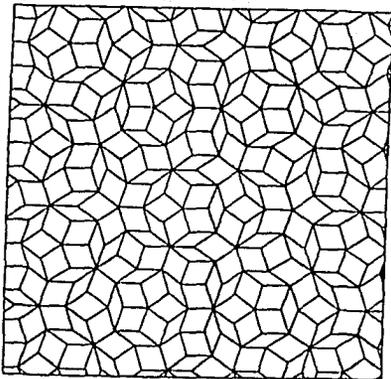


FIG. II.2 La red de Penrose

II.2 CUASIPERIODICIDAD.

En esta sección se aborda el tema de la cuasiperiodicidad con el fin de tener una definición precisa de lo que significa una función y una sucesión cuasiperiódica, así como diferentes métodos de construcción de las mismas.

Definición: Una función $f(x)$ es cuasiperiódica, si y sólo si: para todo $\epsilon > 0$ existe un número real w , tal que $|f(x+w) - f(x)| < \epsilon$, para todo x en el dominio de la función. Como podemos apreciar, las funciones periódicas pertenecen al conjunto de las funciones cuasiperiódicas; en tal caso w es el periodo de la función. Asimismo, una sucesión $\{a_n\}$ es cuasiperiódica siempre y cuando exista una función cuasiperiódica $f(x)$ tal que $f(n) = a_n$ (H. Bohr, 1947).

Con el fin de comprender mejor la definición anterior, consideremos la siguiente función: $f(x) = \sin(2\pi x) + \sin(2\pi \alpha x)$, donde $-\infty < x < \infty$ y α es un número real arbitrario distinto de cero. Nótese que los sumandos de $f(x)$ por separado son funciones periódicas, con periodos respectivos de $p_1 = 1$ y $p_2 = 1/|\alpha|$. Sin embargo, existen dos casos diferentes: 1) Si p_1/p_2 es un número racional, entonces existen n_1 y n_2 enteros tales que $n_1 p_1 = n_2 p_2$. En este caso, las funciones $\sin(2\pi x)$ y $\sin(2\pi \alpha x)$ tienen el periodo común $P = n_1 p_1 = n_2 p_2$ y por tanto, $f(x)$ es puramente periódica con periodo P . 2) Si p_1/p_2 es un número irracional, entonces ningún múltiplo de p_1 es igual a algún múltiplo de p_2 por lo que $f(x)$ no es periódica; sin embargo, se puede demostrar que para todo $\delta > 0$, existen $n_1, n_2 \in \mathbb{Z}$, tales que $|n_1 p_1 - n_2 p_2| < \delta$. Sea w un número próximo a $n_1 p_1$ y $n_2 p_2$ (por ejemplo $w = (n_1 p_1 + n_2 p_2)/2$); entonces se dice que w es un "casi periodo" de $f(x)$ por lo que la diferencia $f(x+w) - f(x)$ puede ser tan pequeña como se quiera. Por ejemplo, sea $\epsilon = 10^{-2}$ y $p_1/p_2 = \sqrt{2} \approx 1.4142135$, existe un cuasiperiodo $w = 985$ tal que $|f(x+w) - f(x)| < 10^{-2}$, para toda $x \in \mathbb{R}$. Cabe mencionar que dicho cuasiperiodo fue hallado usando el método Diofantino (J. Cassels 1947), el cual nos permite aproximar progresivamente a un número irracional a partir de números racionales.

La teoría de las funciones cuasiperiódicas surge como una generalización de las funciones periódicas. Sabemos que una función periódica $f(x)=f(x+T)$ con período T puede expresarse como una suma infinita de funciones senoidales de la forma, $\exp(i2\pi nx)$.

En general una función cuasiperiódica se puede escribir de la forma (T. Janssen, 1988),

$$f(x) = \sum_{n_1, \dots, n_N} f(n_1, \dots, n_N) \exp[2\pi i(n_1 \nu_1 + \dots + n_N \nu_N)x], \quad (\text{II-2.1})$$

donde los ν_j son números reales linealmente independientes con coeficientes n_j enteros; es decir $\sum n_j \nu_j = 0$ si y sólo si $n_j = 0$ para todo n_j .

Nótese que $f(x)$ definida por la Ec. (II-2.1) puede obtenerse a partir de una función generadora g de N variables en cada una de las cuales g es periódica, es decir, g es multiperiodica de la siguiente forma:

$$g(x_1, \dots, x_N) = \sum_{n_1, \dots, n_N} f(n_1, \dots, n_N) \exp[2\pi i(n_1 \nu_1 x_1 + \dots + n_N \nu_N x_N)] \quad (\text{II-2.2})$$

la cual se reduce a la Ec. (II-2.1) si $x_j = x$, para $j=1, \dots, N$.

Una vez que se han definido las funciones y las sucesiones cuasiperiódicas, consideraremos la construcción de una red unidimensional cuasiperiódica. En principio, una red periódica unidimensional es una sucesión de puntos que se puede construir a partir de una celda unitaria por traslación reiterada de la misma. En cambio, para una red cuasiperiódica unidimensional se necesita un conjunto finito de celdas base para construirla por medio de un procedimiento inductivo como sigue (J. Ping Lu, T. Odagaki y J. Birman, 1986): sean a_1, a_2, \dots, a_g unidades básicas, se define el patrón original como la etapa cero de la sucesión. Entonces, la etapa $n+1$ de la sucesión se obtiene inductivamente a partir de la etapa n por la siguiente regla de sustitución,

$$a \rightarrow Ma$$

(II-2.3)

En la ecuación anterior a representa un vector columna $a=(a_1, a_2, \dots, a_g)^t$, donde t indica la transpuesta de la matriz y M es una matriz de $g \times g$ cuyos elementos son m_{ij} . La matriz M y su aplicación sucesiva determina completamente la sucesión. A continuación, veamos dos ejemplos. Sean A y B los motivos que se repiten, entonces

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow AB \rightarrow ABAB \rightarrow ABABAB, \quad (\text{II-2.4})$$

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow AB \rightarrow ABA \rightarrow ABAAB \rightarrow ABAABABA. \quad (\text{II-2.5})$$

[Manera de obtener la cadena que se propone en la Ec. (II-2.5):

$$\begin{bmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{matrix} AB \\ A \end{matrix} ; \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} AB \\ A \end{pmatrix} = \begin{matrix} ABA \\ AB \end{matrix} ; \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ABA \\ AB \end{pmatrix} = \begin{matrix} ABAAB \\ ABA \end{matrix} ; \dots \end{bmatrix}$$

El ejemplo dado por la Ec. (II-2.4) constituye un caso periódico, ya que M tiene la propiedad de que todos sus elementos son unos y su determinante es cero, esta última propiedad es precisamente la condición para tener una estructura periódica. El otro ejemplo es una estructura no periódica, donde se ha considerado un caso simple con dos elementos básicos A y B , el cual discutiremos con detalle a continuación.

Sean $N_A^{(n)}$ y $N_B^{(n)}$ el número de veces en que ocurren los elementos A y B en la etapa n , de la secuencia definida por la Ec. (II-2.5), respectivamente. Estos números cumplen las siguientes relaciones de recurrencia:

$$N_A^{(n+1)} = m_{11} N_A^{(n)} + m_{21} N_B^{(n)}; \quad N_B^{(n+1)} = m_{12} N_A^{(n)} + m_{22} N_B^{(n)}, \quad (\text{II-2.6})$$

donde m_{ij} son los elementos de la matriz M .

A partir de estas relaciones se determinará el límite de $N_A^{(n)}/N_B^{(n)}$ cuando n tiende a infinito, es decir,

$$r = \lim_{n \rightarrow \infty} N_A^{(n)}/N_B^{(n)} = \left[(m_{11} - m_{22}) + \left\{ (m_{22} - m_{11})^2 + 4m_{12}m_{21} \right\}^{1/2} \right] / 2m_{12}$$

con $m_{12} \neq 0$. (II-2.7)

Para el caso de la matriz (II-2.5), se verifica que

$$r = \left(\sqrt{5} + 1 \right) / 2 = \tau. \quad \text{(II-2.8)}$$

Este ejemplo constituye el caso más simple de una red cuasiperiódica unidimensional y se conoce como la cadena de Fibonacci. Para construir esta cadena se implantan los motivos A y B como dos distancias de longitudes L y S respectivamente, tales que cumplen la relación $L/S = \tau$. Por lo anterior los átomos vecinos estarán separados por una distancia S o L. El efecto de la matriz es reemplazar L por LS y S por L, como se muestra en la figura II.3. A este proceso de construcción se le conoce en la literatura como proceso de deflación, debido a que se parte de la etapa cero que consiste en agrupar los motivos según una prescripción inicial deseada y luego hacer subdivisiones.

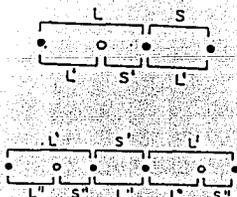


Fig. II.3. Una cadena lineal que se construye de acuerdo a las reglas de deflación según (II-2.9).

Cabe mencionar que la matriz (II-2.5) tiene propiedades sumamente

interesantes, por ejemplo, las potencias de la matriz

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}^m = \begin{bmatrix} f_{m+1} & f_m \\ f_m & f_{m-1} \end{bmatrix}, \quad (\text{II-2.10})$$

donde los f_m son los números de Fibonacci (Mejía-Lira, 1986). La Ec. (II-2.10) se puede comprobar fácilmente por inducción matemática.

Se puede demostrar que la transformada de Fourier de las redes cuasiperiódicas poseen exclusivamente deltas de Dirac [T. Janssen, 1988]. Consecuentemente, el patrón de difracción de un cuasicristal consiste en un conjunto de puntos discretos, ya que dicho patrón es proporcional al cuadrado de la norma de la transformada de Fourier. En una red periódica se necesitan tres índices para etiquetar los picos de difracción. En cambio, para el caso de una red icosaedroal se necesitan seis, por lo que la simetría icosaedroal es compatible con una red periódica en seis dimensiones (J. M. Cabrera-Trujillo, *et al*, 1991). La red cuasicristalina se determina a partir de la intersección de la red periódica en seis dimensiones, con un 3D hiperplano particular. Esto es compatible con la teoría de las funciones cuasiperiódicas, en particular con las ecuaciones (II-1.1) y (II-1.2).

Las consideraciones anteriores dan lugar al método de proyección en la construcción de redes cuasiperiódicas, el cual por simplicidad se ilustra sólo para el caso de la cadena de Fibonacci.

Consideremos una red rectangular en dos dimensiones cuyos rectángulos tienen periodos 1 y τ en las direcciones x , y respectivamente. Luego se traza una recta L a 45° y sólo se proyectan perpendicularmente sobre L los puntos de los vértices que se enmarcan dentro de la tira acotada por dos rectas paralelas a L . Esta tira se obtiene desplazando una celda unitaria a través de L . La magnitud del ancho de esta tira se eligió de tal manera que se pueda observar bien que la proyección reproduce la cadena de Fibonacci Fig. II.4. El procedimiento puede generalizarse a mayores dimensiones, véase por ejemplo T. Janssen (T. Janssen, 1988).

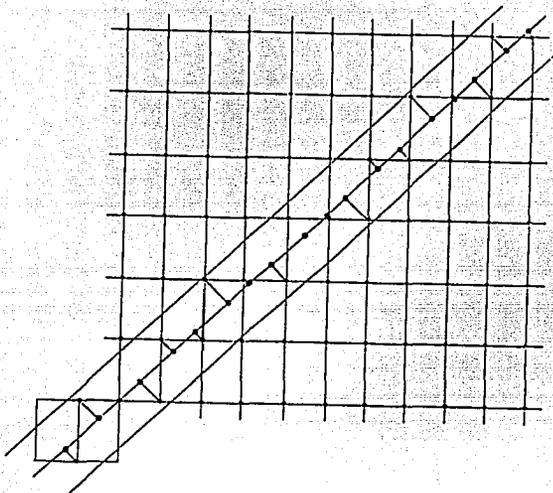


Fig. II.4: Construcción de la cadena de Fibonacci por el método de proyección. Formada por una sucesión aperiódica de segmentos largos y cortos cuya razón entre los mismos es τ .

II.3 LA SUCESIÓN DE FIBONACCI Y LA RED DE PENROSE.

En 1202 apareció el libro "Liber Abaci", en donde el matemático italiano Leonardo de Pisa (Fibonacci) propuso el siguiente problema:

Un par de conejos da una vez por mes una cría de dos conejillos, (un macho y una hembra); al cabo de dos meses de nacimiento los conejos recién nacidos ya dan cría. ¿Cuántos conejos habrá al cabo de un año, si al comienzo de éste había un par de conejos? El problema se puede resolver de manera inductiva siempre y cuando el número de meses considerado no sea muy

grande. De esta forma, al cabo del primer mes habrá dos pares de conejos, el original y el de recién nacidos, y al cabo de dos meses solo habrá tres pares. Sin embargo, para el tercer mes habrá cinco pares dado que el primer par que nació en el primer mes ya da cría. Continuando con el análisis se concluye que al final de doce meses habrá un total de 377 pares de conejos. De esta consideración se observa que al mes n habrá tantos pares como había en el mes anterior más tantos como había en el mes $n-1$, obteniéndose la siguiente relación de recurrencia para la sucesión de Fibonacci:

$$F_{n+1} = F_n + F_{n-1} \quad (\text{II-3.1})$$

La ecuación anterior pertenece a la clase de ecuaciones en diferencias de segundo orden con coeficientes constantes (A. A. Zamarski, 1986). En efecto, la primera diferencia se define por $\Delta F_{n+1} = F_{n+1} - F_n$ y la segunda diferencia es por lo tanto $\Delta(\Delta F_{n+1}) = \Delta F_{n+1} - \Delta F_n = F_{n+1} - 2F_n + F_{n-1}$. La forma general para la ecuación homogénea de segundo orden es por lo anterior:

$$bF_{n+1} - cF_n + aF_{n-1} = 0 \quad n=0,1,2,\dots \quad \text{con } a \text{ y } b \neq 0 \quad (\text{II-3.2})$$

donde los coeficientes a , b , c no dependen de n .

La ecuación (II-3.1) por ser de segundo orden tiene en general dos raíces ($F_n^{(1)}$ y $F_n^{(2)}$) que la satisfacen $F_n = C_1 F_n^{(1)} + C_2 F_n^{(2)}$. Debido a la linealidad de (II-3.1) se buscan soluciones de la forma $F_n = q^n$ por lo que el objetivo es determinar q . Esto se logra de manera muy simple al sustituir q^n en (II-3.1); se obtiene $q^{n+1} = q^n + q^{n-1}$ y al eliminar términos comunes se logra la siguiente ecuación característica $q^2 - q - 1 = 0$ de donde: $q_1 = (1 + (5)^{1/2})/2$, $q_2 = (1 - (5)^{1/2})/2$ por lo tanto la ecuación de relación de recurrencia en la sucesión de Fibonacci, tiene como solución general:

$$F_n = C_1 \left(\frac{\sqrt{5}+1}{2} \right)^n + C_2 \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2} \right)^n \quad (\text{II-3.3})$$

Observese que se tienen dos constantes arbitrarias en la ecuación (II-3.3), que sirven para imponer las condiciones iniciales; por ejemplo, en el problema de los conejos una de las condiciones sería el número de

parejas en el tiempo cero y la otra, la manera de reproducirse, es decir, cuántos pares nuevos nacen en determinado tiempo.

Ahora supóngase que en lugar de tener un par de conejos en el comienzo, se tienen dos triángulos que resultan de partir los rombos de Penrose flaco y gordo, respectivamente, los cuales se muestran en la parte inferior de la Fig. II-5. Mediante estos dos triángulos se genera una colonia de triángulos según la sucesión de Fibonacci y resulta que con determinadas reglas de unión y de discriminación de distancias se logra la construcción de la red de Penrose según el método Wang-Barrio (C. Wang, R. A. Barrio, 1991) que se explica a continuación.

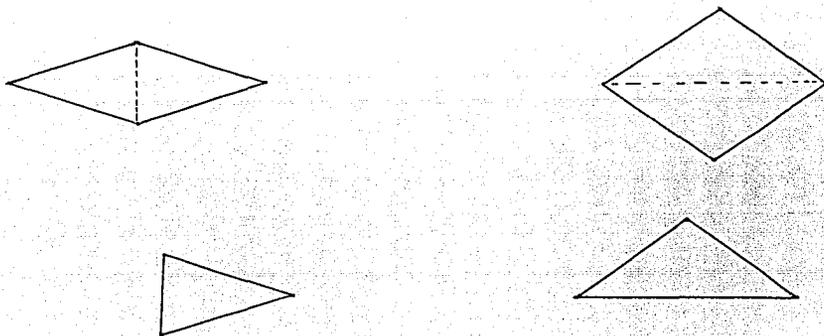


Fig. II-5. En la parte superior se muestran los rombos de Penrose y en la parte inferior los triángulos básicos en el método de construcción Wang-Barrio.

En este método, el primer triángulo de la figura II.5 se dice que es de generación $n=1$ y el segundo de generación $n=2$, y el procedimiento para construir cada una de las siguientes generaciones está dada por la fórmula

de recurrencia siguiente:

$$T_n = T_{n-1} + T_{n-2}^* \quad (\text{II-3.4})$$

donde $*$ en T_{n-2}^* indica imagen especular de la generación $n-2$, la cual debe unirse a la generación $n-1$ para obtener la generación n . Obsérvese que la ecuación (II-3.4) es la misma que la relación de recurrencia (II-3.1) excepto por la imagen especular.

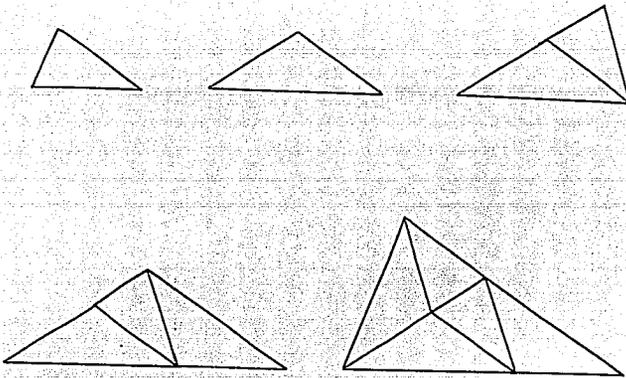


Fig.II.6. Construcción de las cinco primeras generaciones de la red de Penrose, usando el método que se describe en el texto.

En la figura II.6 se puede observar que las sumas de las generaciones $n-1$ y $n-2$ para construir la generación n (en este caso para construir las generaciones $n=3$ y $n=4$) se han realizado por la derecha, mientras en la construcción de las generaciones $n=5$ y $n=6$ la suma se realiza por la izquierda, es decir, la suma de la generación $n-2$ con $n-1$ para construir la generación n se realiza en forma alternada.

La red que se ha construido contiene enlaces que llamamos cortos, medianos y largos. Por lo tanto, la red de Penrose que tiene como base los

rombos, se obtiene a partir de las redes que hemos generado, eliminando los enlaces cortos y largos. En la figura II.7 se presenta la red de Penrose para la generación 13.

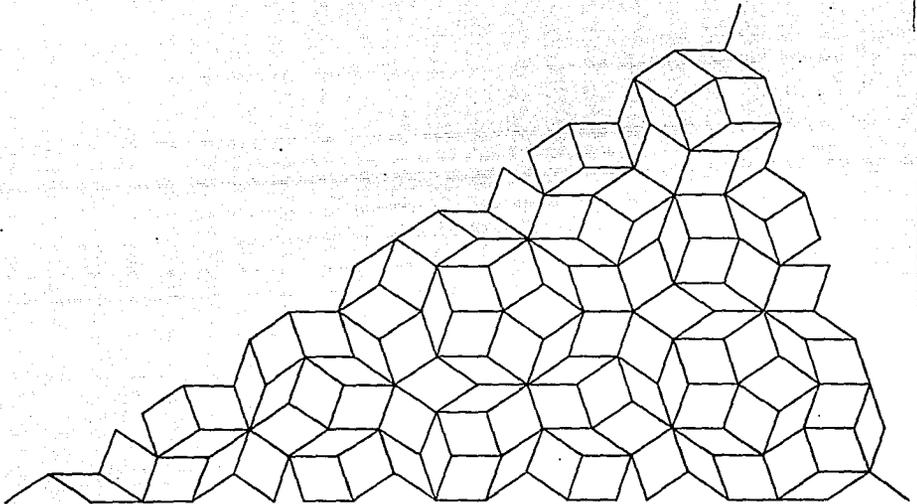


Fig.II.7. Red de Penrose para la generación $n=13$

Si en la ecuación (II-3.3) se propone como condición inicial de que el triángulo 1 tenga área de magnitud 1, entonces el segundo triángulo tiene área τ y la expresión para el área de la n ésima generación se determina entonces por

$$T_n = \tau^n = T_{n-1} + T_{n-2} \quad (II-3.5)$$

De la Ec. (II-3.5) se observa que la razón de las áreas de dos

generaciones consecutivas es la razón dorada τ , además la razón del número de triángulos gordos al número de triángulos flacos cuando la generación tiende a infinito, también es la razón dorada. Por lo que ésta red tiene una relación estrecha con la cadena de Fibonacci y los argumentos anteriores demuestran que la red de Penrose es una extensión directa de la cadena de Fibonacci en dos dimensiones.

II.4 LEYES DE KIRCHHOFF Y MODOS NORMALES DE VIBRACION

En la sección I.2, se presentaron las características principales de vibración de una cadena lineal atómica. Después de pasar del tratamiento clásico al cuántico, se obtiene que los modos normales de vibración están cuantizados y a los cuantos de vibración se les llama fonones.

Aquí se hace una discusión similar para una red más general y la finalidad es mostrar la equivalencia entre los fonones isotrópicos y las leyes de Kirchhoff.

Sea $V(r_0)$ la energía potencial de dos partículas idénticas a la distancia de equilibrio r_0 . Si la separación aumenta en Δr , la nueva energía potencial es

$$V(r) = V(r_0) + \left. \frac{dV}{dr} \right|_{r_0} \Delta r + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2V}{dr^2} \right|_{r_0} (\Delta r)^2 + \dots \quad (\text{II-4.1})$$

En esta expansión $dV/dr|_{r_0}$ indica una fuerza resultante en la posición de equilibrio, pero en la posición de equilibrio no debe haber fuerza resultante por lo que este término es cero. $V(r_0)$ es una constante por lo que se puede elegir un sistema coordenado de tal manera que $V(r_0)$ esté en el origen.

Si los desplazamientos de las partículas a partir de sus posiciones de equilibrio son pequeños, se pueden despreciar los términos mayores a segundo orden. Se dice entonces que se está en la aproximación armónica. Se

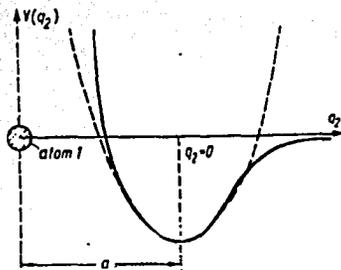


Fig. II.8. Energía de interacción entre los átomos 1 y 2. La coordenada q se fija en $q=0$. El espaciamiento de las posiciones de equilibrio es a . El potencial real se aproxima por una parábola $V(q)=cte \cdot q_2^2$ para pequeños desplazamientos de q_2 .

tiene en tal caso un potencial de interacción del tipo:

$$V(r) = \frac{1}{2} \gamma r^2, \quad (\text{II-4.2})$$

donde $\gamma = \left. \frac{d^2V}{dr^2} \right|_{r_0}$.

A continuación se establece la ecuación de movimiento para un conjunto de N masas idénticas, cada una es colocada en cada uno de los nodos de una red con N nodos. La condición es que cada enlace produce una interacción entre las masas que une, según la Ec. (II-4.2). De las condiciones anteriores se establece la ecuación de movimiento para la masa colocada en el nodo n , la cual tiene l enlaces entre vecinos inmediatos, y los desplazamientos del sitio n a partir de las posiciones de equilibrio se

indican por q_n , se obtiene:

$$M\ddot{q}_n = -\frac{1}{2}\gamma \sum_n (q_n - q_n) \quad (\text{II-4.3})$$

proponiendo una solución para esta ecuación del tipo $q_n = U_n \exp(i\omega t)$, obtenemos

$$-M\omega^2 U_n = \gamma \sum_{n=1}^l [U_n - U_n], \quad (\text{II-4.4})$$

Se puede mostrar que existe similitud entre los osciladores mecánicos y los osciladores eléctricos, para tal fin se propone una malla y en cada nodo de la malla se coloca un condensador de capacitancia C , un extremo se conecta a tierra y el otro extremo se conecta a l inductores cada uno de inductancia L . El otro extremo de estos inductores conectan nodos con capacitores idénticos que son vecinos inmediatos. Según las leyes de Kirchoff, la suma de las corrientes instantaneas que fluyen a un determinado nodo n es cero, se tiene que

$$j\omega CV_n + 1/(j\omega L) \sum_{n=1}^l (V_n - V_n) = 0 \quad (\text{II-4.5})$$

donde la impedancia inductiva es $j\omega L$, V_n es el voltaje en el sitio n .

Nótese que la ecuación (II-4.5) es muy similar a la ecuación (II-4.4), la cual corresponde a un conjunto de osciladores armónicos isotrópicos acoplados. En general los desplazamientos se describen mediante cantidades vectoriales, sin embargo, para ciertos casos, dichas cantidades pueden expresarse en forma de escalares, por ejemplo las vibraciones transversales en una red bidimensional tienen direcciones predeterminadas, consecuentemente las ecuaciones de movimiento se reducen a ecuaciones escalares. Lo anterior significa que cuando estos desplazamientos se describen por medio de escalares, sólo se puede estudiar un subconjunto de los modos normales de vibración del sistema.

Debido a que los desplazamientos de las masas del sistema se describen mediante escalares, a los cuantos de vibración se les llama fonones

isotrópicos.

La similitud entre las ecuaciones (II-4.4) y (II-4.5) demuestra la equivalencia entre las leyes de Kirchhoff y los fonones isotrópicos.

Lo dicho anteriormente no se ha referido a algún modelo particular, por lo que se debe poder utilizar en cualquier modelo, en particular en la red de Penrose. Los argumentos anteriores constituyen la base del experimento que se comenta en el siguiente capítulo.

CAPITULO III

LOCALIZACIÓN Y CUASIPERIODICIDAD

III.1 ANTECEDENTES

En los cuasicristales, uno de los aspectos más importantes en relación a los efectos de la cuasiperiodicidad en sus propiedades físicas, es el de la localización de las funciones de onda. Existen estudios teóricos que predicen la naturaleza crítica de las funciones propias electrónicas en redes cuasiperiódicas de una (M. Kohmoto *et al*, 1987) y dos dimensiones (P. Ma y Liu, 1989), y se esperan peculiaridades en las propiedades de transporte que se derivan de dichas funciones de onda. En particular, para la cadena de Fibonacci en el caso electrónico, las funciones de onda son autosimilares, coexisten los estados extendidos con los localizados e intermedios que les llaman críticos. Las brechas de energía se distribuyen densamente y no hay estados aislados de tal manera que esta distribución forma un conjunto de Cantor (M. Kohmoto and J. R. Banavar 1986). (Para el caso de la red infinita de Penrose sólo se han encontrado algunos valores propios para energías particulares, se esperan consecuencias importantes de la propiedad fractal de la estructura; sin embargo, aún no se establecen definitivamente).

Sin embargo, estas predicciones no se han confirmado en cuasicristales reales. En cambio para sistemas cuasiperiódicos artificiales los resultados experimentales concuerdan razonablemente bien con los teóricos, tal es el caso de un arreglo de juntas Josephson en forma de una red de Penrose (Springer *et al*. 1987). Asimismo otro estudio más sobresaliente para visualizar la distribución espacial de la función de onda, consiste en conectar un conjunto de diapasones formando una red de Penrose y se excita a través de ondas acústicas (He, D. Maynard 1988). Sin embargo, el equipo necesario para realizar las mediciones precisas en el experimento es

sumamente sofisticado.

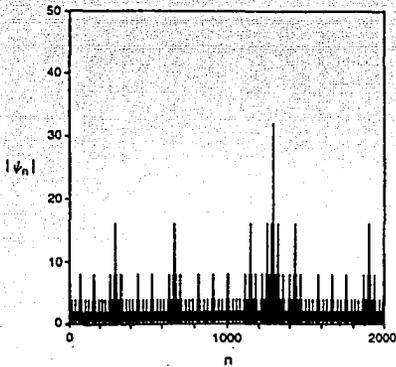


Fig. III.1 Función de onda auto-similar en $E=0$. La Fig. es una gráfica de $|\psi_n|$ contra el número de sitios a lo largo de la cadena de Fibonacci.

Para el sistema de diapasones, las funciones propias se pueden estudiar a partir del registro del movimiento de cada uno de los componentes del sistema en amplitud y dirección. En la Fig. III.2 se

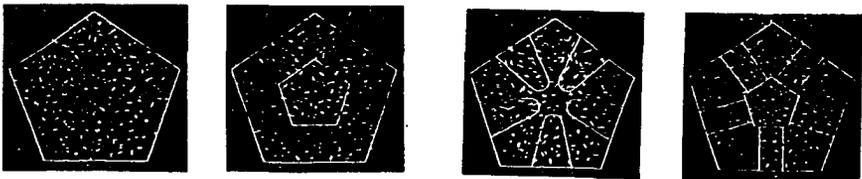


Fig.III.2. Fotografías del sistema de diapasones vibrando a diferentes frecuencias. Muestran el movimiento del sistema (en amplitud y polarización). La distribución de energía tiene simetría cinco.

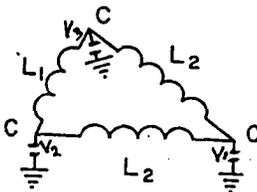
observan algunos de tales registros y sólo dan una idea cualitativa de las funciones propias. Se han marcado las áreas donde las amplitudes son mayores, es decir, donde existe localización.

En la siguiente sección discutiremos un nuevo método para observar directamente la localización de ondas en los sistemas cuasiperiódicos, el cual tiene la ventaja sobre el anterior de ser más fácil de realizar.

III.2 LOCALIZACIÓN DE ONDAS EN LA RED DE PENROSE

En esta sección mostraremos los resultados teóricos y experimentales de los valores propios y las funciones propias vibratorias, en una red de Penrose simulada por medio de un circuito de osciladores LC; se tiene como base las ecuaciones de Kirchhoff para este circuito.

En la sección II.4 se discutió la equivalencia entre las leyes de Kirchhoff y los fonones isotrópicos y aún cuando las ecuaciones (II-4.3) son muy generales, aquí se muestra como se obtienen estas ecuaciones inductivamente y en forma paralela a la construcción de la red, hasta lograr la generación que nos interesa (en este caso la generación 13). Por ejemplo, las ecuaciones de Kirchhoff para el circuito de las primeras dos generaciones de la red de Penrose se pueden escribir de la siguiente manera:

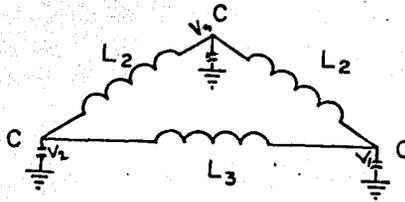


$$\frac{1}{i\omega L_1} (V_1 - V_2) + \frac{1}{i\omega L_2} (V_1 - V_3) + i\omega CV_1 = 0$$

$$\frac{1}{i\omega L_2} (V_2 - V_1) + \frac{1}{i\omega L_1} (V_2 - V_3) + i\omega CV_2 = 0$$

(III-2.1)

$$\frac{1}{i\omega L_2} (V_3 - V_1) + \frac{1}{i\omega L_1} (V_3 - V_2) + i\omega CV_3 = 0$$



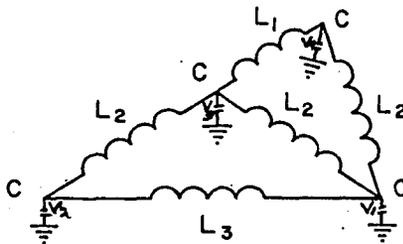
$$\frac{1}{i\omega L_2} (V_1 - V_2) + \frac{1}{i\omega L_2} (V_1 - V_3) + i\omega CV_1 = 0$$

$$\frac{1}{i\omega L_2} (V_2 - V_1) + \frac{1}{i\omega L_1} (V_2 - V_3) + i\omega CV_2 = 0$$

(III-2.2)

$$\frac{1}{i\omega L_2} (V_3 - V_1) + \frac{1}{i\omega L_1} (V_3 - V_2) + i\omega CV_3 = 0$$

donde L_i ($i=1, 2, 3,$) son las inductancias (en general pueden ser complejas ya que existen efectos disipativos de las bobinas), V_i es el voltaje en el



sitio 1, C es la capacitancia y ω es la frecuencia característica de oscilación. En el caso de la tercera generación las ecuaciones de nuestro circuito serán:

$$\frac{1}{i\omega L_3} (V_1 - V_2) + \frac{1}{i\omega L_2} (V_1 - V_3) + \frac{1}{i\omega L_2} (V_1 - V_4) + i\omega CV_1 = 0$$

$$\frac{1}{i\omega L_3} (V_2 - V_1) + \frac{1}{i\omega L_2} (V_2 - V_3) + i\omega CV_2 = 0$$

(III-2.3)

$$\frac{1}{i\omega L_2} (V_3 - V_1) + \frac{1}{i\omega L_2} (V_3 - V_2) + \frac{1}{i\omega L_1} (V_3 - V_4) + i\omega CV_3 = 0$$

$$\frac{1}{i\omega L_2} (V_4 - V_1) + \frac{1}{i\omega L_1} (V_4 - V_3) + i\omega CV_4 = 0$$

De esta forma se puede generalizar el estudio para un circuito de cualquier generación. Asimismo, se deben tener en consideración las restricciones con respecto a los enlaces que en la discusión de la sección II-3 llame discriminación de distancias, es decir, los enlaces que se designan con las inductancias L_1 y L_3 no serán tomadas en cuenta y $L_2 = L_1$. Por lo tanto, las leyes de Kirchhoff para estados estacionarios pueden escribirse convenientemente de la siguiente forma:

$$i\omega CV_n + \frac{1}{i\omega L} \sum_m (V_n - V_m) = 0 \quad (III-2.4)$$

donde la inductancia (L) y la capacitancia (C) tienen el mismo valor para todos los elementos, V_n es el voltaje medido en el sitio n, cuando se excita el sistema mediante una onda estacionaria de frecuencia ω . La sumatoria se extiende a todos los sitios m conectados con el lugar n.

Las medidas del espectro de voltaje como función de la frecuencia para un nodo determinado son analizadas teóricamente, resolviendo las ecuaciones de Kirchhoff con un término disipativo. Como se dijo anteriormente estas ecuaciones son similares a las ecuaciones para fonones isotrópicos, los resultados encontrados se resúmen en la figura III.4 la cual se compara con los resultados experimentales.

El circuito donde se hicieron las mediciones se muestra esquemáticamente en la figura III.3. En este caso, la red de Penrose tiene

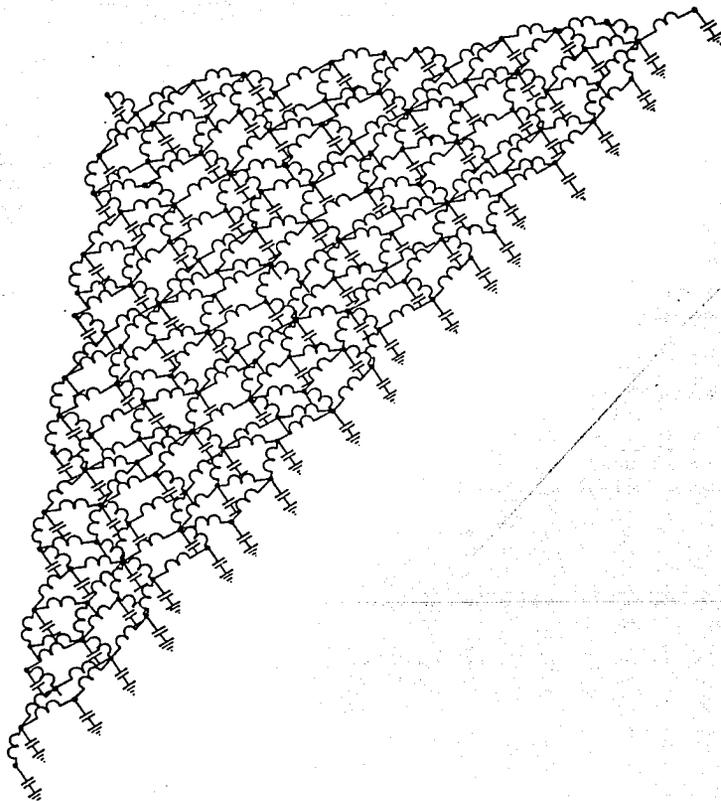


Fig. III.3. Diagrama esquemático del circuito de osciladores LC interconectados formando una red de Penrose.

137 vértices y 240 enlaces, cada vértice tiene un condensador de $1\mu\text{F}\pm 10\%$ con un extremo conectado a tierra y el otro extremo se conecta a los enlaces de la red que son inductores toroidales de $7.8\text{mH}\pm 5\%$.

Los inductores tienen un núcleo de ferrita y son toroidales debido a la necesidad de minimizar los efectos de inductancia mutua. Tienen una permeabilidad magnética relativa dada por $\mu/\mu_0 \approx 1500$, un diámetro exterior de 30mm, un diámetro interior de 18.5mm y un espesor de 8mm. Estos núcleos se embobinaron con alambre de cobre de 1.1mm de diámetro y aproximadamente 4m de largo, además, se ajustan uno por uno en el número de vueltas con el fin de reducir la diferencia en L entre ellos.

Los efectos disipativos de los inductores se examinaron experimentalmente. Se observa que estos inductores tienen un término imaginario $-R(\omega, \Delta v)/\omega$ que depende tanto de la frecuencia como de la diferencia de potencial a la que son sometidos. A voltaje constante ($\Delta v = 0.2$ volts de pico a pico), $R(\omega) \approx 0.006\omega^{0.7}$ y a frecuencia fija ($\omega = 500\text{Hz}$), $R(\Delta v) \approx 5.6\Delta v$. Por otro lado, la parte real de la inductancia es también función del voltaje aplicado, por ejemplo para 500Hz , $L(\Delta v) \approx 7.7 + 4.5\Delta v$.

El experimento se realiza alimentando una corriente monocromática en el extremo agudo del circuito bosquejado en la figura III.3, con un voltaje de 0.2 volts de pico a pico, luego se procede a registrar la corriente de alimentación. Se hace un barrido de la frecuencia haciendo las correspondientes medidas de corriente. El espectro de corriente se grafica en función de la frecuencia ver Fig. III.4. Otro aspecto importante en el experimento es determinar la amplitud de las ondas y esto se hace fijando una determinada frecuencia que corresponda a una función propia, luego se registra la corriente en cada uno de los vértices de la maya, las distribuciones espaciales de amplitud se muestran en la Fig. III.5 que corresponden a la frecuencia de los primeros seis estados propios de la Fig. III.4 De la gráfica III.5 se observa que el estado propio a 750 Hz corresponde a un modo acústico, el cual es de esperarse debido a que la longitud de onda es mayor que el tamaño del sistema por lo que la onda no siente el aspecto discreto del sistema.

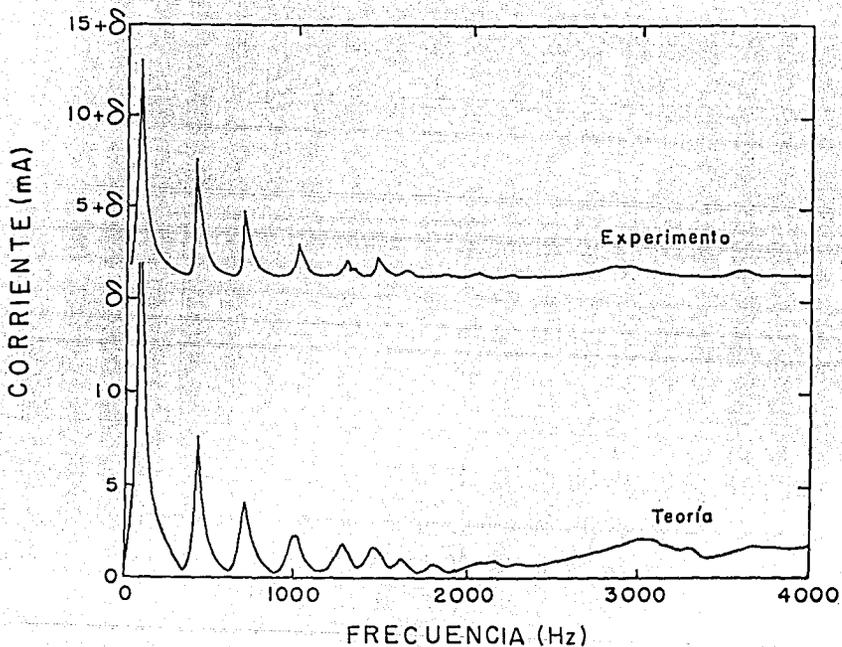


Fig. III.4. Comparación del espectro que resulta del estudio teórico y experimental de la propagación de ondas en la red de Penrose, el experimento se realizó en el circuito correspondiente a la figura III.3.

Al aumentar la frecuencia de los modos, la distribución espacial empieza a ser más complicada, y la amplitud se hace localizada en algunas

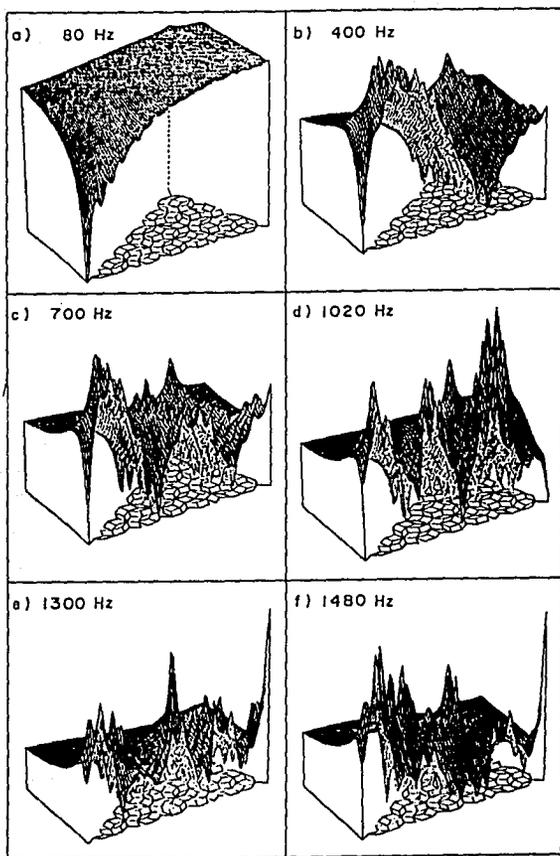


Fig. III.5. Distribución de amplitudes para las frecuencias de los primeros seis picos de la figura III.4. (frecuencias propias).

regiones. Este fenómeno se puede advertir si se compara el sistema por analogía con una membrana vibrante. Se espera que el aspecto cuasiperiódico se determine en la distribución espacial; es decir, que sea bien

característico a medida que la frecuencia aumenta cuando la longitud de onda empieza ser del orden de las distancias internodales.

Antes de resaltar algunos aspectos importantes que tiene el experimento, considero necesario hablar de las pequeñas discrepancias que hay entre el resultado experimental y el teórico. El hecho de que no concuerden bien las intensidades relativas de los picos en esta gráfica entre el resultado teórico y experimental puede deberse al efecto disipativo $R(\omega)$.

También es importante el experimento porque a través de él se pueden estudiar efectos no lineales, los cuales son importantes cuando se excita la red con un voltaje mayor, debido a que hay variaciones en los valores propios del sistema. Para nuestro sistema particular tales variaciones se observan en la gráfica III.6. Su análisis se puede desarrollar si se escriben las ecuaciones de Kirchhoff en forma de ecuaciones diferenciales (C. Wang et al. 1993)

$$C \frac{d^2 V}{dt^2} + \sum_n (V_n - V_m) = 0, \quad (\text{III-2.5})$$

donde la inductancia $L = L_0 + l\Delta V + i(r/\omega)\Delta V$, siendo $L_0 = 7.7 \text{ mH}$, $l = 4.5 \text{ mH/volts}$ y $r = 5.6 \Omega/\text{volts}$. Si se expande la ecuación (III-2.1) en serie de Taylor resulta,

$$C \frac{d^2 V_n}{dt^2} + \frac{1}{L_0} \sum_n (V_n - V_m) - \frac{1}{L_0} \sum_n \left(\frac{l+i(r/\omega)}{L_0} \right) (V_n - V_m) + \frac{1}{L_0} \sum_n \left(\frac{l+i(r/\omega)}{L_0} \right) (V_n - V_m) = 0 \quad (\text{III-2.6})$$

La ecuación anterior representa un sistema acoplado de 137 ecuaciones diferenciales no lineales y se asemeja a las ecuaciones de movimiento para fonones con interacciones anarmónicas. Este sistema de ecuaciones no lineales no tiene solución analítica, de ahí la importancia del circuito, ya que brinda una alternativa al estudio de los efectos anarmónicos en cuasicristales y permite un análisis analógico de la solución exacta (C.

Wang et al. 1993). El análisis detallado de los efectos no lineales aún está en proceso en nuestro laboratorio.

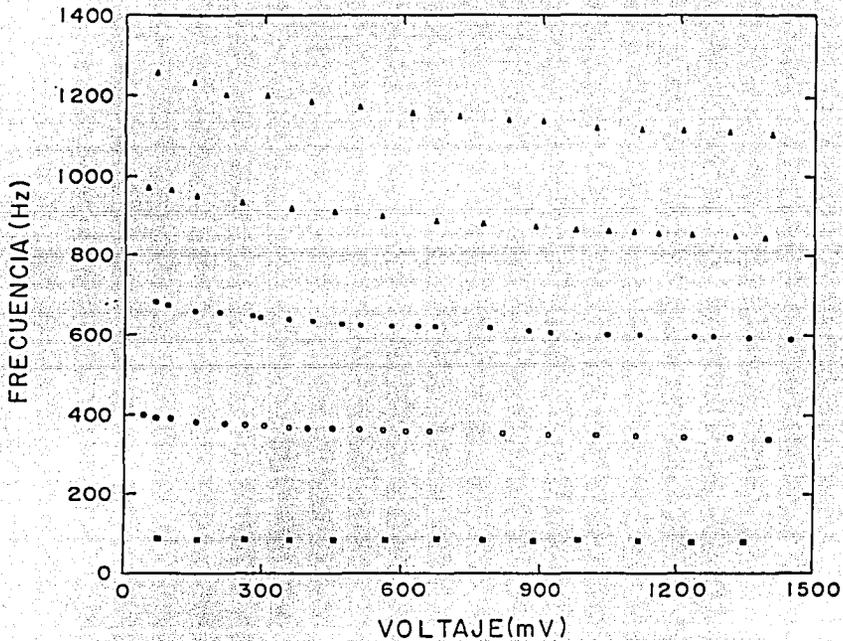


Fig.III.6. Variación de valores propios de los cinco estados de menor frecuencia como función del voltaje de alimentación (RMS).

CONCLUSIONES

Se ha realizado un estudio de los efectos de la cuasiperiodicidad que son importantes en las propiedades fonónicas de los cuasicristales.

El experimento que se ha comentado tiene la virtud de ser un nuevo método de estudiar la propagación de ondas en sistemas cuasicristalinos bidimensionales y proporciona una manera precisa de medir la amplitud de los estados propios en cualquier punto del sistema.

Aún cuando la malla utilizada es relativamente pequeña, los resultados muestran los efectos de la cuasiperiodicidad en las funciones propias del sistema y revelan el mecanismo de localización en redes cuasiperiódicas.

El resultado es compatible con lo preestablecido en la introducción al decir que se esperaba que los materiales de esta nueva clasificación compartieran propiedades tanto de sistemas ordenados como de sistemas desordenados, pues ésto se verifica en el aspecto particular de que en el sistema hay estados extendidos a bajas frecuencias y estados críticos a medida que la longitud de onda es del orden de las longitudes internodales, para frecuencias mayores.

La simplicidad de la red ha permitido aislar las características importantes del sistema, y consecuentemente se logra una buena correspondencia entre la teoría y el experimento, lo cual constituye un hecho poco usual en los estudios de materiales reales.

El aspecto más importante de la simulación analógica, radica en que a través de este experimento se pueden estudiar los efectos no lineales, debido a la falta de una solución exacta general. En esta parte se hace evidente el efecto de aproximación armónica del sistema; es válido en una región restringida, donde las oscilaciones son de baja amplitud.

BIBLIOGRAFIA

- Bohr H., **Almost Periodic Functions**, New York, Chelsea 1947.
- Cassels J. W. S. **An introduction To Diophantine Approximation**, Cambridge At The University Press, 1957.
- Davidov A.S., **Teoría del sólido**, Editorial Mir Moscú, 1981
- De la Peña L., **Introducción a la Mecánica Cuántica**, CECSA, México, 1981
- Economou E. N., **Green's functions in Quantum Physics**, (Springer Series in Solid State Sciences, Vol. 7, Segunda Edición) 1983.
- Gardner M., *Scientific American* 236(1), 110, 1977.
- Haken H., **Quantums Fields Theory of Solids**, an introduction, North Holland publishing company, 1976.
- He S. y Maynard J. D.; *Phys. Rev. Lett.* 16, 1888(1989).
- Janssen T., *Physics Reports (Review section of Physics Letters)* 168, No. 2, 55-113 North Holland, Amsterdam 1988.
- Kohmoto M., Sutherland B., *Physics Review Lett.* 56, 2740(1986)
- Kohmoto M., Sutherland B., Tang C., *Phys. Rev. B* 35, 1020(1987)
- Levine D. and Steinhardt P., *Phys. Rev. Lett.* 53, 2477(1984).
- Levine D. and Steinhardt P., *Phys. Rev. B* 34, 596(1986)
- Ma P. and Liu Y., *Phys. Rev. B* 39, 9904(1989).
- Madelung O., **Introduction to Solid-State Theory**, Springer Verlag, Heidelberg New York, 1978.
- Mejia-Lira F., *Rev. Mex. de Fis.* 34(3), 375-394, 1988.
- Navarro Chávez O., **Tesis Doctoral**, Instituto de Física , Universidad Autónoma de Puebla, 1992.
- Nelson D. R., *Scientific American*, Agosto de 1986
- Pavlov P. V., Jojlov A. F., **Física del estado sólido**; Editorial Mir Moscú, 1987.
- Ping Lu J., Odogaki T. Birman J. L. *Phys. Rev. B* 33, 4809(1986).
- Ruiz Mejia C., **Trampas de Luz**, SEP, FCE, CONACYT.
- Samarski A. A., **Introducción a los Métodos Numéricos**, Editorial Mir

Moscú 1986.

- Shechtman D., Blech I., Gratias D., Cahn J. W., Phys. Rev. Lett. 53, 1951(1984).
- Tagueña J., La Física Contemporanea 2, (Sistemas Desordenados), Editorial UNAM 1983.
- Tsunetsugu H., Fujiwara T., Ueda K., y Tokihiro T. Phys. Rev. B 43, 8879(1991).
- Wang C., Fuentes R., Navarro O., Barrio R. A. and Barrera R.; *Journal of Non-Crystalline Solids*, 153 & 154, 586-590(1993).
- Wang C. and Barrio R. A., *Lectures on Surface Science*, eds. F. A. Ponce and M. Cardona, pag. 67, Springer, Berlin, 1991.