

**POSGRADO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE  
MATERIALES**

**LOCALIZACIÓN Y TRANSPORTE ELECTRÓNICO  
EN REDES DE FIBONACCI GENERALIZADO**

**T E S I S**

**QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:**

**MAESTRO EN CIENCIA E  
INGENIERÍA DE MATERIALES**

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

**FERNANDO SÁNCHEZ RUEDA**

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

**MÉXICO, D.F. 2012**



Universidad Nacional  
Autónoma de México



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

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

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

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

Con afecto  
a mi Familia y Amigos

# Agradecimientos

Le agradezco infinitamente a la **Dra. Vicenta Sánchez** por haberme brindado la oportunidad de realizar mis estudios de maestría bajo su tutoría. Más aun, por haberme motivado y guiado a través de esta etapa de mi vida académica que concluye con la elaboración de este trabajo de tesis, en el cual estuvo muy pendiente de su desarrollo. *Usted es una gran persona.*

Le agradezco al **Dr. Chumin Wang Chen** por el apoyo académico que me ha proporcionado desde el momento tuve el placer de conocerlo. Gracias a sus observaciones este trabajo de tesis ha concluido de una mejor manera. Le estoy muy agradecido por darme las bases para ser un mejor investigador. *Usted es mi modelo académico a seguir.*

A la **Dra. Monserrat Bizarro** porque a través de sus comentarios y observaciones este trabajo de tesis mejoró en gran medida. *Muchas gracias por su apoyo.*

Agradezco al **Dr. Oracio Navarro**, al **Dr. Miguel Cruz**, al **Dr. Raúl Patricio Esquivel** y al **Dr. Francisco Miguel Castro**, por sus valiosos comentarios que enriquecieron en gran manera este trabajo de tesis. *Muchas gracias.*

Le estoy infinitamente agradecido a mi familia por apoyarme incondicionalmente. Todos han contribuido a mi formación, pero lo siguiente son las cualidades que pienso cada uno de ustedes han inculcado en mí. Por tanto, agradezco a mi padre por enseñarme el valor del esfuerzo, a mi madre por mostrarme que uno siempre debe ser de mente abierta y a mi hermano enseñarme a defender lo que es importante para uno.

Le agradezco a mis amigos Alessio Palavicini, Guillermo Munguía, Marco Reyes, Ángel Santiago, Alejandro Sánchez y Jorge Pineda por sus consejos y compañía. También a mis nuevas amigas Mariana Centeno e Alina González que siempre me contagian su buen humor. Alina muchas gracias por escucharme.

Agradezco a la **Universidad Nacional Autónoma de México** y al Instituto **de Investigaciones en Materiales, UNAM** por brindarme la oportunidad de realizar mis estudios de posgrado y darme la preparación necesaria para incursionar en la vida de un investigador. También agradezco a la **Facultad de Ciencias, UNAM** y especialmente al **Departamento de Física** por brindarme un espacio donde poder estudiar e intercambiar ideas (cubículo 404).

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

# Resumen

En esta tesis se estudia la localización y el transporte electrónico en redes de Fibonacci generalizadas por medio del formalismo de Landauer a temperatura cero dentro del modelo de enlace fuerte. Hemos desarrollado un método general de renormalización capaz de calcular la conductividad eléctrica en redes de Fibonacci generalizadas de tamaño macroscópico. En particular, las redes cuasiperiódicas son proyecciones de estructuras periódicas en un espacio de mayor dimensión. A pesar de su aparente desorden estructural, estas redes poseen un orden oculto que puede conducir a estados extendidos. El prototipo de estas redes cuasiperiódicas es sin duda la de Fibonacci, la cual consiste en una cadena de dos tipos de bloques  $A$  y  $B$  con un orden cuasiperiódico que se construye sustituyendo  $A \rightarrow AB$  y  $B \rightarrow A$ . Una generalización de la cadena de Fibonacci es mediante la sustitución  $A \rightarrow A^l B^m$  y  $B \rightarrow A$ , siendo  $l$  y  $m$  números enteros positivos. En este trabajo, se analiza la densidad de estados y la conductividad eléctrica  $dc$  en nueve sistemas de Fibonacci generalizado del tipo enlace, con integrales de salto variables y energías de sitio constantes. Los nueve sistemas de Fibonacci generalizado considerados en este estudio son: regla de oro ( $l=1, m=1$ ), regla de plata ( $l=2, m=1$ ), regla de bronce ( $l=3, m=1$ ), regla de cobre ( $l=1, m=2$ ), ( $l=2, m=2$ ), ( $l=3, m=2$ ), regla de níquel ( $l=1, m=3$ ), ( $l=2, m=3$ ) y ( $l=3, m=3$ ). Los resultados para las nueve cadenas de Fibonacci generalizadas muestran autosimilaridad en el espectro de densidad de estados y conductividad eléctrica cuando las cadenas son cuasiperiódicas, es decir, cuando  $m=1$  y  $l$  es un número arbitrario. La demostración de que estas cadenas son cuasiperiódicas la llevamos a cabo por medio de las condiciones de Pisot y la unimodularidad de la matriz. En cambio, cuando las cadenas son aperiódicas la amplificación del espectro presentaba oscilaciones periódicas. Asimismo, demostramos de forma analítica como numérica la existencia de estados transparentes –transmitancia igual a uno- para energía igual a cero. Por otro lado, el promedio espectral de la conductividad eléctrica muestra un decaimiento en forma de ley de potencias con la longitud de las cadenas, cuando éstas son cuasiperiódicas con  $m=1$  y decaimientos menos rápidos para los otros casos. Cabe mencionar que para todos los casos analizados, el promedio espectral no es constante como en las redes periódicas ni es exponencial como en los sistemas aleatoriamente desordenados, revelando un

nuevo tipo de localización. Por último, extendimos este estudio a sistemas multidimensionales, tales como nanoalambres aperiódicos. Donde la aperiodicidad se introduce en cualquier dirección. Los resultados muestran que cuando el sistema es periódico en la dirección longitudinal, el espectro de conductancia está cuantizado y coincide con lo reportado experimentalmente. En cambio, cuando la aperiodicidad se encuentra en la dirección longitudinal se destruye la cuantización y tenemos un espectro de conductancia que presenta pseudo gap.

# Introducción

Las propiedades físicas de cada material están intrínsecamente relacionadas con el ordenamiento atómico que poseen, basándose en este ordenamiento se pueden clasificar a los materiales en metales, cerámicos, polímeros y semiconductores [Askeland, 1998]. En un material periódico todos los estados electrónicos tienen la misma probabilidad de encontrarse en cualquier celda primitiva del cristal, como se deduce del teorema de Bloch [Ashcroft, 1976]. Estos estados están completamente extendidos en el sistema. En el año 1958, P. W. Anderson describió una de las consecuencias físicas más importantes del desorden: la localización electrónica [Anderson, 1958]. Anderson estudió la difusión electrónica en un modelo tridimensional de enlace fuerte en el que las energías de sitio se escogían aleatoriamente a partir de una distribución de probabilidad continua. Demostró que por encima de una anchura crítica de la distribución de energías, es decir, por encima de un grado crítico de desorden, la difusión en el sistema era suprimida debido a la localización espacial de todos los estados electrónicos. La localización de los estados implica que su densidad de probabilidad es distinta de cero únicamente en una región limitada del espacio, cuya extensión se caracteriza a través de la longitud de localización. La localización está estrechamente ligada al transporte electrónico y es un concepto fundamental para entender la existencia de materiales metálicos y aislantes.

Para estudiar el transporte en los sistemas de escala nanoscópica se debería de utilizar un formalismo cuántico, debido a los efectos que se producen por las reducidas secciones transversales de los nanoalambres o nanoestructuras. Una forma de investigar este transporte es por medio del formalismo de Landauer [Landauer, 1957 y 1970], donde la conductancia se expresa en términos de las propiedades estáticas de dispersión. El desorden inherente presente en un conductor induce la dispersión de electrones incidentes resultando una fracción de electrones transmitida, la cual es llamada el coeficiente de transmisión y puede ser derivada a través de la mecánica cuántica.

Se tienen grandes avances en la síntesis de nano-alambres, los cuales son materiales que tienen una sección transversal de escala nanométrica y una longitudinal de orden macroscópico [Huang, 2003]. Las formas en que los podemos estudiar son por ejemplo, en forma de cintas, varillas y tubos.

Otra de las características importantes de los sólidos son las simetrías, las cuales son determinantes para muchas propiedades físicas del mismo, en general, por cada simetría existe una cantidad conservada e inclusive se espera que lo inverso también sea cierto, a pesar de que muchas veces las simetrías correspondientes no resultan evidentes. La restricción de simetrías en un sólido puede ser de diversas formas, por ejemplo, la ausencia de simetría traslacional y/o rotacional en una o más direcciones, la falta de orden de largo alcance, la baja dimensionalidad del sistema y los llamados sistemas desordenados. Con frecuencia existen simetrías ocultas en los sólidos, como sucede en el caso de los cuasicristales que son proyecciones de una estructura periódica desde un espacio de mayor dimensión [Shechtman, 1984]. La conducción electrónica en sólidos no cristalinos es uno de los grandes retos de la física de materia condensada, ya que se combinan dos problemas difíciles de por sí que son fenómenos fuera de equilibrio y el desorden estructural. En particular, en las redes cuasiperiódicas la relación entre los estados críticamente localizados y su capacidad de transporte es de gran controversia. Por lo que es importante estudiar la localización y el transporte cuántico en sistemas aperiódicos.

Por otro lado, hoy en día con el uso de las modernas computadoras de alta velocidad, se llevan a cabo cálculos numéricos a gran escala obteniendo la estructura de bandas y las eigenfunciones de sistemas con miles de átomos. Sin embargo, el tiempo que consumen estos cálculos crece como el número de grados de libertad del sistema al cubo, por lo que es prácticamente imposible abordar sólidos a escalas realmente macroscópicas con la capacidad de cómputo actual. Una alternativa más eficiente para estudiar los sólidos son los métodos del grupo de renormalización, los cuales han tenido éxito en la teoría de fenómenos críticos [Ma, 1973]. La técnica del grupo de renormalización en el espacio real ha sido aplicada a sistemas desordenados [Aoki, 1980] [Gonçalves da Silva, 1981] y cuasiperiódicos [Niu, 1986] [Ashraff, 1988]



[Barrio, 1990] [Walther, 1997], debido a la ausencia de un teorema de tipo Bloch en estos casos. En particular, los sistemas cuasiperiódicos son muy sensibles a defectos locales [Naumis, 1996] y entonces, es esencial poder abordar sistemas de gran tamaño para minimizar los efectos de frontera.

En esta tesis, se estudia la localización y el transporte electrónico en redes de Fibonacci generalizadas dentro del formalismo de amarre fuerte a temperatura cero. Usamos las funciones de Green para una sola partícula en la densidad de estados y el formalismo de Landauer para el transporte eléctrico. Hemos encontrado nuevos estados transparentes los cuales comprobamos de forma numérica y analítica, así mismo, observamos que el promedio espectral de la conductividad eléctrica muestra un decaimiento en forma de ley de potencias con la longitud de las cadenas. Por último, extendimos este estudio a sistemas multidimensionales por medio del método de renormalización más convolución.

La presente tesis se organiza de la siguiente forma: en el capítulo I, basándonos en el ordenamiento atómico, damos una visión general de los materiales cristalinos, amorfos y los cuasicristales. Mencionamos sus propiedades, algunas aplicaciones, hablamos de los tipos de impurezas presentes en los materiales y de las técnicas de crecimiento de los cristales. Describimos de manera detallada las secuencias de Fibonacci generalizadas y definimos las condiciones necesarias para que un sistema sea cuasiperiódico.

En el capítulo II se dan las bases conceptuales necesarias para obtener la densidad de estados a través de las funciones de Green, la conductividad eléctrica *dc* mediante el formalismo de Landauer y la localización empleando el coeficiente de Lyapunov. Abordamos sistemas en una, dos y tres dimensiones. Por medio del método de renormalización más la técnica de convolución.

En el capítulo III se muestran los resultados obtenidos para la densidad de estados, la conductividad eléctrica y del promedio espectral de conductividad para los nueve sistemas de Fibonacci generalizado. Se presenta también un análisis numérico y analítico del coeficiente de transmisión en energía cero. Se realiza una comparación de la densidad de estados, la

conductividad eléctrica y el promedio espectral de la conductividad para los isómeros de plata y de bronce. También, se muestra la conductancia para sistemas bidimensionales y tridimensionales.

Finalmente se presentan las conclusiones y un apéndice que contiene los coeficientes obtenidos por el método de renormalización.

# INDICE

## **CAPÍTULO I Ordenamiento atómico en sólidos**

<i>1.1 Introducción</i>	1
<i>1.2 Estructuras periódicas</i>	2
<i>1.2.1 Redes de Bravais</i>	3
<i>1.3 Defectos cristalinos</i>	7
<i>1.4 Estructuras Amorfas</i>	11
<i>1.5 Aplicaciones de los sólidos amorfos</i>	15
<i>1.6 Cuasicristales</i>	17
<i>1.7 Definición de los cuasicristales</i>	18
<i>1.8 Estabilidad cuasicristalina</i>	20
<i>1.9 Métodos de crecimiento</i>	22
<i>1.10 Aplicaciones de los cuasicristales</i>	25
<i>1.11 Método de corte y proyección, inflación y adición</i>	26
<i>1.12 Secuencias de Fibonacci generalizado</i>	29
<i>1.13 Condiciones de Pisot</i>	32
<i>1.14 Mosaicos de Penrose</i>	34

## **CAPÍTULO II Medidas de localización y transporte**

<i>2.1 Introducción</i>	37
<i>2.2 Funciones de Bloch</i>	38
<i>2.3 Modelo de Amarre Fuerte</i>	38
<i>2.4 Función de Green y Densidad de Estados</i>	39
<i>2.5 Método de Convolución</i>	45
<i>2.6 Modelo de Drude</i>	49
<i>2.7 Conductividad Eléctrica DC para Metales</i>	50
<i>2.8 Conductancia de Landauer</i>	51
<i>2.9 Transmitancia</i>	53
<i>2.10 Localización</i>	55

## **CAPÍTULO III Renormalización aplicada al estudio del transporte electrónico**

<i>3.1 Introducción</i>	58
<i>3.2 Densidad de estados</i>	58
<i>3.3 Conductividad DC</i>	60

<i>3.4 Coeficiente de Lyapunov</i>	61
<i>3.5 Autosimilaridad</i>	62
<i>3.6 Estados transparentes</i>	66
<i>3.7 Localización</i>	72
<i>3.8 Isómeros</i>	75
<i>3.9 Sistemas multidimensionales</i>	85
<i>3.10 Conclusiones</i>	89
<b>Apéndice I:</b>	
<i>Formulas de renormalización para el problema enlaces</i>	91
<b>Bibliografía</b>	96

# Capítulo 1 Ordenamiento atómico en sólidos

## 1.1 Introducción

El arreglo atómico en cada material, es decir, la forma en que están dispuestos los átomos en el espacio, nos ayuda a clasificar a los materiales en cuatro grupos: metales, cerámicos, polímeros y semiconductores. La cristalografía clásica se encargó de caracterizar los arreglos atómicos, encontrando que existe una cantidad limitada de formas de acomodar los átomos de manera simétrica; entonces a los materiales que presentan este ordenamiento atómico se les denomina cristales ó materiales cristalinos y todos los demás que no tuvieran dichas simetrías se les llaman materiales amorfos.

Las propiedades de los materiales están fuertemente ligadas a su estructura atómica, ya que la disposición de los electrones que rodean al núcleo de los átomos individuales afecta su comportamiento eléctrico, magnético, térmico y óptico. Por ejemplo el arreglo atómico en el aluminio proporciona buena ductilidad, en tanto que en el hierro es la causa de una buena resistencia. Además, hay transductores cerámicos capaces de detectar tumores en el cuerpo humano, estos se basan en un arreglo atómico que produce un desplazamiento permanente de las cargas eléctricas dentro del material. Estos ejemplos nos permiten ilustrar la importancia del estudio de la estructura atómica de los materiales; ya que a partir del ordenamiento atómico podemos entender las propiedades físicas de ellos [Askeland, 1998].

En este capítulo haremos una síntesis de los conceptos más importantes de la estructura de los materiales que están relacionados con esta tesis, es decir, definiremos los materiales cristalinos, las redes de Bravais, los materiales amorfos y los materiales cuasiperiódicos. Más aun, hablaremos de las técnicas de crecimiento de cristales y las aplicaciones más representativas de cada tipo de material.

## 1.2 Estructuras periódicas

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

Si no se consideran las imperfecciones que aparecen en los materiales, entonces existen tres niveles de arreglos atómicos: *sin orden*, por ejemplo, en gases como el argón, los átomos no tienen orden y llenan de manera aleatoria el espacio en el cual está confinado el gas. El *orden de corto alcance* lo muestran aquellos materiales cuyo arreglo espacial de los átomos se extiende solo a los vecinos más cercanos de dicho átomo, por ejemplo, cada molécula de agua en fase vapor tiene un orden de corto alcance debido a los enlaces covalentes entre los átomos de hidrógeno y oxígeno, sin embargo las moléculas de agua no tienen una organización espacial entre sí; situación similar ocurre en los vidrios cerámicos. El *orden de largo alcance* es una característica de aquellos materiales cuyo arreglo espacial de los átomos se extiende por todo el material, formando un patrón repetitivo, regular en forma de rejilla o red. De aquí surge el concepto de material cristalino.

Un cristal es un material cuyos átomos están distribuidos de manera ordenada, formando una red periódica. Para construirla son necesarios dos elementos: una *base* y una *red*; siendo la base un grupo de átomos y la red un sistema de puntos matemáticos en donde se coloca la base [Kittel, 2005]. La *celda unitaria* es la subdivisión de la red cristalina la cual sigue conservando las características generales de toda la red. [Askeland, 1998]. Se identifican 14 tipos de celdas unitarias o redes de Bravais agrupadas en siete sistemas cristalinos. Los puntos de la red están localizados en las esquinas de las celdas unitarias y en algunos casos, en cualquiera de las caras o en el centro de la celda unitaria. En el siguiente apartado describiremos con detenimiento estas redes.

## 1.2.1 Redes de Bravais

Un concepto fundamental en la descripción de cualquier sólido cristalino son las redes de Bravais, estas resumen la geometría subyacente de la estructura periódica. Existen dos definiciones equivalentes de las redes de Bravais:

- a) Una red de Bravais es un arreglo infinito de puntos discretos con una disposición y orientación que es exactamente igual desde cualquier punto de la estructura.
- b) Una red de Bravais tridimensional consiste de aquellos puntos con vectores de posición  $\mathbf{R}$  de la forma

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3, \quad (1.1)$$

donde  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  y  $\mathbf{a}_3$  son los *vectores primitivos* de la red y  $n_1$ ,  $n_2$ ,  $n_3$ , números enteros.

Si consideramos un conjunto de puntos  $\mathbf{R}$  los cuales constituyen una red de Bravais y una onda plana  $e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}$ . Donde  $\mathbf{K}$  es de la forma

$$\mathbf{K} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3, \quad (1.2)$$

donde

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

y  $(h k l)$  se le denomina *índices de Miller*. Estos últimos se utilizan como una notación abreviada para identificar ciertos planos de átomos significativos, por ejemplo los metales se deforman a lo largo de aquellos planos que están empaquetados más estrechamente [Ashcroft, 1976].

En general para cualquier  $\mathbf{K}$ , dicha onda plana no tendrá, la periodicidad de la red de Bravais, pero el conjunto de todos los vectores de onda  $\mathbf{K}$  que generan ondas planas con la periodicidad de una red de Bravais se conoce como *red recíproca*. Analíticamente,  $\mathbf{K}$  pertenece a la red recíproca de la red de Bravais de puntos  $\mathbf{R}$ , si cumple la siguiente relación

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

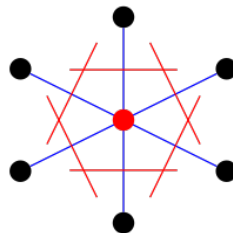
válida para cualquier  $\mathbf{r}$  y para toda  $\mathbf{R}$  en la red de Bravais. Factorizando  $e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}$ , podemos caracterizar a la red recíproca como un conjunto de vectores de onda  $\mathbf{K}$  que satisfacen

$$e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} = 1, \quad (1.4)$$

para todo  $\mathbf{R}$  en una red de Bravais

El conjunto de puntos de la red constituye un espacio vectorial sobre el anillo de los números enteros. Los vectores generadores de dicho espacio vectorial se denominan vectores característicos de la red y determinan un paralelepípedo llamado *celda primitiva* del cristal o celda unidad. Dicha celda primitiva no es única y por convenio se denomina celda primitiva a la construida con vectores característicos cuyos módulos sean los más pequeños posibles. Es evidente que a cada celda primitiva puede asociarse unívocamente un punto de la red.

Para obtener la celda primitiva se puede utilizar el método de Wigner-Seitz, el cual consiste en dibujar líneas rectas desde un determinado elemento de la red conectándolo con sus primeros vecinos, luego se trazan líneas rectas que bisectan las primeras líneas dibujadas y finalmente la celda primitiva es el área contenida de la intersección de las bisectrices ver figura 1.1. Con la repetición infinita de la celda primitiva es posible obtener toda la estructura cristalina.

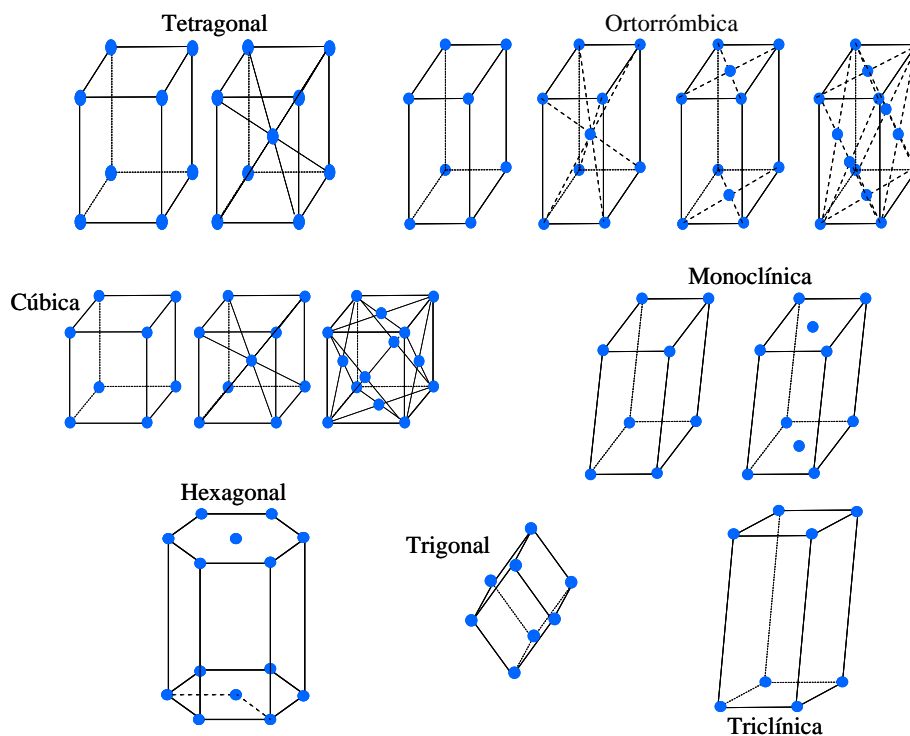


**Figura 1.1** Celda de Wigner-Seitz

La celda primitiva de Wigner-Seitz de la red recíproca es conocida como la “primera zona de Brillouin”, cabe señalar que existe más de una de estas zonas, pero la información de todo el sistema está contenida en ella; de aquí nace la importancia de encontrar y estudiar esta zona [Ashcroft, 1976].



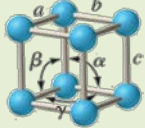
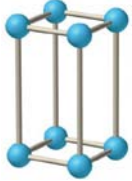
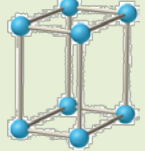
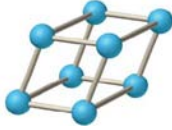
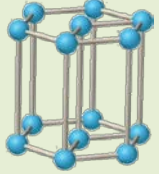
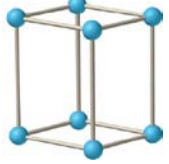
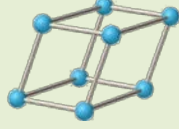
Mediante la teoría de grupos se ha demostrado que sólo existe una única red de Bravais unidimensional, 5 redes bidimensionales y 14 modelos distintos de redes tridimensionales. La red unidimensional es una secuencia de nodos equidistantes entre sí. En dos o tres dimensiones la variabilidad de formas nos obliga a definir ciertas estructuras patrón para trabajar con mayor facilidad las redes, en dos dimensiones son los paralelogramos y en tres los paralelepípedos los cuales constituyen la menor subdivisión de una red cristalina que conserva las características generales de toda la retícula.



**Figura 1.2** Redes de Bravais. Clasificadas en siete sistemas: cúbico (3), tetragonal (2), ortorrómbico (4), monoclínico (2), triclínico (1), trigonal (1) y hexagonal (1)

En tres dimensiones los arreglos atómicos se clasifican en siete sistemas: cúbico (3), tetragonal (2), ortorrómbico (4), monoclínico (2), triclínico (1), trigonal (1) y hexagonal (1) [Ashcroft, 1976]. Los cuales se muestran en la figura 1.2. Estos arreglos atómicos reciben el nombre de Redes de Bravais, en honor al científico Francés que las estudió [Szwacka, 2000]. Las características intrínsecas de cada sistema se desglosan en la tabla I.1.

**Tabla I.1 Características de los sistemas cristalinos**

Sistema Cristalino	Dimensiones	Ejes de Simetría	Red
<b>Cúbico</b>	$a = b = c,$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	4 ejes de orden 3	
<b>Tetragonal</b>	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	1 eje de orden 4	
<b>Ortorrómbico</b>	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	3 ejes binarios mutuamente ortogonales	
<b>Trigonal</b>	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	1 eje de orden 3	
<b>Hexagonal</b>	$a = b \neq c,$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ y $\gamma = 120^\circ$	1 eje de orden 6	
<b>Monoclínico</b>	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$	1 eje de orden 2	
<b>Triclínico</b>	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	Ninguno	

En el caso más sencillo, a cada punto de red le corresponderá un átomo, pero en estructuras más complicadas, como materiales cerámicos y compuestos, cientos de átomos pueden estar asociados a cada punto de red formando celdas unitarias extremadamente complejas. En el primer caso, pueden obtenerse sencillamente diversas características de la red cristalina.

## 1.3 Defectos cristalinos

Hasta el momento hemos hablado de los cristales como sólidos perfectos, es decir, sólidos generados por la repetición infinita de una celda unitaria como las mostradas en la sección anterior. En la naturaleza no es común encontrarse con este grado de perfección. En todos los materiales el arreglo de los átomos contiene imperfecciones las cuales tienen un efecto profundo sobre su comportamiento. Mediante el control de las imperfecciones reticulares, creamos aleaciones más resistentes, imanes más poderosos, transistores, celdas solares de mejor desempeño, etc..

Hay tres tipos básicos de imperfecciones de red: defectos puntuales, lineales (o dislocaciones) y de superficie. Cabe señalar que estas imperfecciones solo representan defectos en relación con el arreglo atómico perfecto y no con el material mismo. Estos defectos pueden ser agregados de manera intencional con el propósito de producir un conjunto deseado de propiedades físicas.

Se dice que existe un *defecto puntual* si el cristal presenta un cambio en su estructura y este se encuentra localizado únicamente en una posición atómica. Por ejemplo, los defectos tipo Schottky se definen como la ausencia de átomos dentro de una estructura cristalina, lo cual se denomina *vacancia* (V). Dichas vacancias no pueden ser generadas de una manera aleatoria, siempre se debe de tomar en cuenta que la carga y la estequiometría del material deben de conservarse. Por lo tanto las vacancias las encontramos en pares, una aniónica y otra catiónica, cualquiera de estas generan una deformación en la red; cómo podemos apreciar en la figura 1.3.

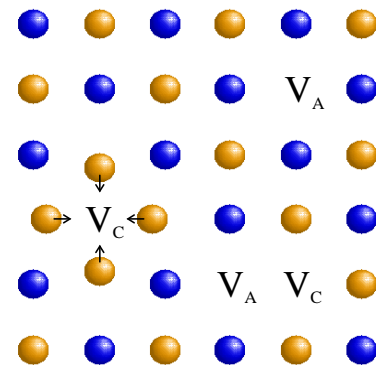


Figura 1.3 Defecto Schottky

En cambio el defecto puntual denominado tipo Frenkel está relacionado con la presencia de vacancias dentro de la estructura del cristal y se origina por el movimiento de un átomo que pasa de su posición normal a una posición intersticial, generando una vacancia. Del tal forma, un defecto Frenkel consiste de una vacancia más un átomo intersticial. Esto se ejemplifica en la figura 1.4.

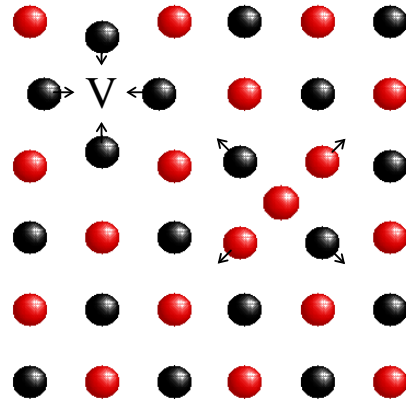


Figura 1.4 Defecto Frenkel.

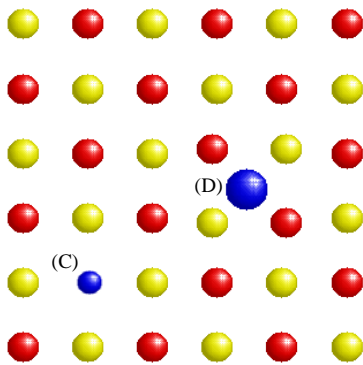


Figura 1.5 Impureza sustitucional (C) e impureza Intersticial (D).

En un material cristalino podemos encontrar átomos de diferente naturaleza de los que conforman el cristal, a este tipo de átomos se les conoce de forma general como impurezas. Las impurezas pueden estar localizadas en posiciones atómicas normalmente ocupadas por un átomo perteneciente al cristal. En este caso, se les denomina como *átomos sustitucionales* (C). En cambio, si los átomos ocupan posiciones que no son

ocupadas por ningún otro átomo perteneciente a la estructura cristalina, entonces se les llama *átomos intersticiales* (D). Los cuales se ejemplifican en la figura 1.5. En el caso de defectos causados por impurezas, la electroneutralidad del cristal también se debe de conservar.

Por otra parte, el fenómeno de centro de color está directamente relacionado con la presencia de defectos puntuales en algunos cristales. Existen una gran variedad de tipos de centro de color, pero en general un *centro de color* es producido por una vacancia aniónica la cual contiene un electrón excedente, entonces la función de onda del electrón atrapado en la vacancia aniónica se comparte entre los iones positivos vecinos a la vacancia, como se muestra en la figura 1.6. A este tipo de centro de color se

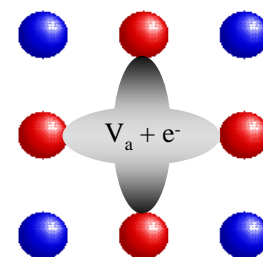
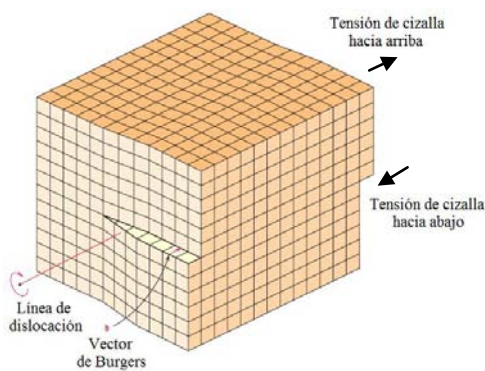


Figura 1.6 Centro de color.

le conoce como centro F y es el centro de color más sencillo. La presencia de los electrones regularmente producen cambios electromagnéticos al cristal y algunos de estos cambios son producidos en la zona visible del espectro electromagnético, produciendo cambios en el color de los cristales.

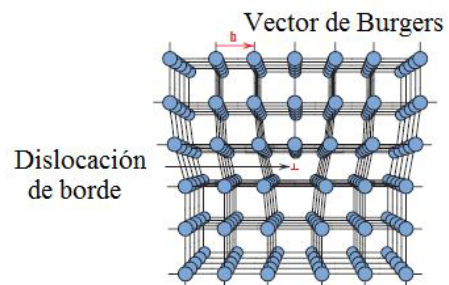
Las dislocaciones son imperfecciones lineales en una red, generalmente se introducen durante el proceso de solidificación del material o al deformarlo. Aunque en todos los materiales hay dislocaciones presentes, incluyendo los materiales cerámicos y los polímeros, estas son de particular utilidad para explicar la deformación y el endurecimiento de los metales. Un concepto clave en el entendimiento de las dislocaciones es el vector de Burgers, el cual nos da la magnitud y dirección de la distorsión de la red asociada con la dislocación, usualmente denotado como  $b$ . *Burgers*. Podemos identificar dos tipos de dislocaciones: *dislocación de borde* y *helicoidales*.



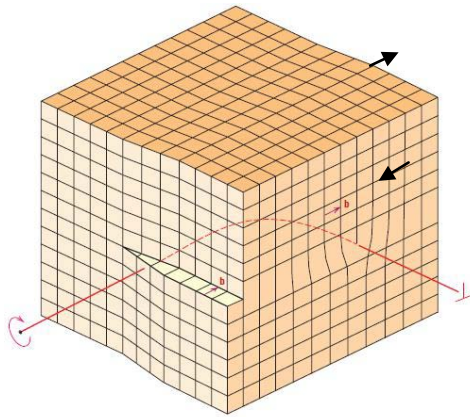
**Figura 1.7** Dislocación helicoidal.

La dislocación helicoidal se origina cuando las partes continuas del material sufren esfuerzos cortantes paralelos pero en sentido contrario (cizalladura). La distorsión atómica asociada con esta dislocación es lineal y a lo largo de la línea de dislocación, es decir, el vector de Burgers es paralelo a la dislocación. Esta dislocación se ilustra en la figura 1.7.

La dislocación de borde se origina al introducir en el material un plano de átomos adicionales, en este caso el vector de Burgers es perpendicular a la dislocación, lo cual origina que los átomos contiguos al plano adicional estén comprimidos. Esta dislocación se ilustra en la figura 1.8.



**Figura 1.8.** Dislocación de borde.



**Figura 1.9** Dislocación mixta.

La mayoría de las dislocaciones que se encuentran en los materiales cristalinos no son solo de borde o puramente helicoidales, sino una combinación de ambas. Estas reciben el nombre de *dislocaciones mixtas* como se muestra en la figura 1.9. El vector de Burgers, sin embargo, se conserva igual para todas las porciones de la dislocación. [Callister, 1995].

El proceso de deslizamiento es de particular utilidad para entender el comportamiento mecánico de los metales por ello requerimos definir el concepto de *deslizamiento*, que es el proceso mediante el cual se mueve una dislocación causando que se deforme un material, la dirección en que se mueve la dislocación es la *dirección de deslizamiento* que para el caso de las dislocaciones de borde coincide con la dirección del vector de Burgers. Durante el deslizamiento, la dislocación de borde barre el plano formado por el vector de Burgers y la dislocación; a este plano se le conoce como *plano de deslizamiento*. La combinación del plano de deslizamiento y de la dirección de deslizamiento se denomina *sistema de deslizamiento*.

El deslizamiento explica por qué la resistencia de los metales es mucho menor que el valor predecible a partir del enlace metálico. Si ocurre deslizamiento, solo es necesario que se rompa en algún momento una pequeña fracción de todas las uniones metálicas a través de la interface por lo que la fuerza requerida para deformar el metal resultará pequeña. Por otra parte el deslizamiento le da ductilidad a los metales. Si no hay dislocaciones presentes, una barra de hierro sería frágil.

Finalmente, controlamos las propiedades mecánicas de un metal o aleación al interferir el movimiento de las dislocaciones. Un obstáculo introducido en el cristal impedirá que en una dislocación se deslice, a menos que apliquemos mayor fuerza. Si es necesario aplicar una fuerza superior, entonces el metal resulta ser más resistente [Askeland, 1998]

Hasta el momento hemos descrito los posibles arreglos atómicos que pueden presentar los sólidos cristalinos. También explicamos los tipos de

imperfecciones que pueden llegar a poseer. En el siguiente capítulo abordaremos la contraparte de los sistemas cristalinos, es decir, describiremos los materiales amorfos.

## 1.4 Estructuras Amorfas

Los términos sólido amorfo, sólido no cristalino, sólido desordenado, vidrio o líquidos no tienen ningún significado estructural preciso más allá de la descripción de que la estructura “no es cristalina a una escala significativa”. El principal orden estructural que se presenta es impuesto por la separación más o menos constante de los átomos o moléculas más cercanas [Kittel, 2005].

Los materiales amorfos no son algo nuevo, la misión del Apolo recuperó unos de esos materiales en la superficie lunar, que data de millones de años [Naumis, 2003]. Los vidrios metálicos, los vidrios calcogenoides, los cristales líquidos, los semiconductores amorfos y algunos materiales plásticos como el poliestireno son los ejemplos más comunes.

En la naturaleza podemos encontrar materiales amorfos, como la obsidiana y materiales orgánicos solidificados, como el ámbar. Hay evidencia de que las civilizaciones más antiguas (sumeria, Egipto) han fabricado vidrios inorgánicos. Más recientemente a la familia de los sólidos amorfos se han unido los polímeros sintéticos (1940) y vidrios metálicos (1960). Todos los sólidos amorfos (naturales y sintéticos) se pueden separar en dos amplias categorías [DiMarcio, 1981]:

- Intrínsecamente no cristalizables (vidrios estables).
- Cristalizables (vidrios metaestables).

La primera categoría está representada por sólidos tales como polímeros entrecruzados ó polímeros orgánicos atácticos (es decir, poliestireno). La segunda categoría incluye vidrios metálicos, metaloides, algunos óxidos metálicos y sólidos lineales macromoleculares (polímeros) en los que la disposición atómica es al azar. Cabe señalar que en el vidrio la cristalinidad puede ser desarrollada por el recocido. Ambas características pueden ser combinadas como en los polímeros semicristalinos. Todos estos

sólidos muestran características comunes a los materiales amorfos, tales como espectros de dispersión de rayos X en forma de un halo amorfo y la presencia de una temperatura de transición vítrea.

Desde el punto de vista de la química, todos los materiales amorfos conocidos pueden ser segregados en (al menos) cuatro clases afines como se enumeran a continuación:

### 1. *Vidrios metálicos*

Un grupo relativamente nuevo de materiales que solidifican en estructuras atómicas amorfas son los vidrios metálicos que corresponden a la categoría de los vidrios metaestables. La cristalización es suprimida por la aleación de un número de elementos, con un radio atómico selectivamente elegido. El término *metálico* (en una primera aproximación) hace referencia al tipo de enlace presente en el material. El cual nos permite un grado de libertad en la formación de diversas disposiciones de clúster atómicos en comparación con el enlace covalente o iónico en vidrios orgánicos e inorgánicos en los cuales la coordinación entre los átomos está limitada a un pequeño rango [Welberry, 2004]. Los vidrios metálicos hechos por el hombre son heterogéneos en composición a escala atómica [Torquato, 2002]. El patrón de dispersión de electrones muestra un halo amorfo que suele atribuirse a los sólidos amorfos [Yavari, 1988]. La transición líquido a sólido es reversible en algún grado, aunque la cristalización se producirá finalmente si continúa el recocido por encima de la temperatura de transición vítrea [Ma, 2005, Wang, 2005]. Las reglas para la formación de estos vidrios han sido publicadas por Inoue [Inoue, 2000], Ma [Ma, 2005] y Yavari [Yavari, 1988].

### 2. *Vidrios inorgánicos*

La estructura de estos sólidos está caracterizada por enlaces direccionales que forman redes tanto bidimensionales como tridimensionales con número de coordinación promedio en el intervalo 3 a 5 (la coordinación puede variar significativamente entre el líquido sobreenfriado y el vidrio sólido). La aleatoriedad de la red se logra mediante la interrupción del patrón de enlaces covalentes (por ejemplo, la adición de sosa y cal al sílice), evitando de esta forma la tendencia natural del sílice a cristalizar. A temperatura alta una gran proporción



de enlaces se disocian y las redes tridimensionales se disuelven en una mezcla de fragmentos de bajo peso molecular, resultando en un líquido de viscosidad relativamente baja. Al enfriar se reconforma la red con un incremento de la viscosidad aproximadamente como (masa de la red – masa Crítica)<sup>-n</sup>, donde  $n > 1$ . La transición líquido-vidrio es reversible y repetible. El recocido por encima de la temperatura de transición vítrea puede conducir a la cristalización parcial. Las reglas para la formación de estos vidrios han sido publicadas por Zachariasen [Zachariasen, 1932] y Warren [Warren, 1934]. La mayoría de los vidrios inorgánicos forman los denominados “vidrios fuertes”, con una distribución estrecha en el número de coordinación en el vidrio [Angell, 1985].

El hielo amorfo (agua solidificada) al parecer tiene varias formas metaestables [Tulk, 2002], lo que sugiere la presencia de vidrios poliamorfos [Yavari, 1988]. El silicio amorfo es un material vítreo especial. Una de sus formas contiene una significativa cantidad de hidrogeno por lo que crean enlaces Si-H.

En esta clase también se debe de incluir al carbono amorfo. El término de carbono amorfo se limita a la descripción de materiales de carbón con electrones localizados como los descritos por P. W. Anderson [Anderson, 1958]. Los cambios en las distancia interatómicas de C-C mayores a 5% ocurren en dichos materiales, así como cambios en los ángulos de enlace debido a la presencia de enlaces colgantes [McBride, 2005]. La descripción anterior de carbono amorfo no es aplicable a los materiales de carbono con elementos estructurales bidimensionales presentes en todos los residuos de pirolisis de compuestos de carbono como capas poliaromáticas con una distancia interatómicas casi ideal de  $a=142 \text{ pm}$  y una extensión mayor que 1000  $\text{pm}$ .

### 3. Vidrios Orgánicos

Estos vidrios se dividen en tres subclases:

- Redes de copolímeros tridimensionales aleatorias (entrecruzadas).
- Vidrios poliméricos basados en macromoléculas atácticas (no entrecruzadas).

- Vidrios poliméricos basados en macromoléculas lineales (isotáctica o sindiotáctica)

En la primera subclase la reacción de entre cruzamiento entre los compuestos toma lugar en una mezcla en estado líquido que consolida el enlace espacialmente aleatorio, lo cual resulta en una red molecular aleatoria, permanente y no reversible.

En la segunda subclase incluye polímeros ramificados con una arquitectura atáctica de la cadena macromolecular (incluyendo los dendrímeros aleatorios). Estos sólidos moleculares se limitan a formar vidrios en el enfriamiento desde el estado fundido debido a que la estructura irregular de la cadena impide el autoordenamiento. Los materiales poliméricos tienen enlaces covalentes permanentes, e inmutables entre el estado líquido y sólido. El recocido por encima de la temperatura de transición vítrea no conduce a la cristalización. La transformación de líquido a vidrio, es por tanto, completamente reversible y repetible.

La tercera subclase incluye polímeros lineales que pueden ser vitrificados por templado. En ese sentido su comportamiento es similar al de los vidrios metálicos en que el recocido, puesto que estos vidrios pueden desarrollar cristalinidad.

Las reglas para la formación de sólidos amorfos poliméricos fueron descritos por Angell [Angell, 1985] y Flory [Flory, 1967].

#### 4. *Películas delgadas amorfas*

Los materiales producidos por métodos similares a las técnicas de deposición de vapor molecular pueden formar capas amorfas. Usualmente no hay información específica acerca de los arreglos atómicos en estas películas, su naturaleza amorfa se declara en base en la ausencia de cualquier pico de difracción de rayos X cristalino.

Los materiales amorfos presentan un desafío y una oportunidad para el teórico de la materia condensada. El reto principal para el científico es la creación de modelos estructurales que representen exactamente su estructura. Hay un zoológico de interesantes procesos físicos únicos para estos sistemas e importantes aplicaciones tecnológicas como las que se verán en la siguiente sección [Drabold, 2009].

## 1.5 Aplicaciones de los sólidos amorfos

Los sólidos amorfos se encuentran entre los materiales más importantes para las aplicaciones que van desde el arte hasta la optoelectrónica. Mientras que nuestros ancestros han fabricado vidrio desde la edad de bronce, los científicos actuales solo han empezado a desentrañar la estructura de este material y todavía hay mucho trabajo por hacer. Las aplicaciones de los materiales amorfos son muy variadas [Zallen, 1998, Elliott, 1990]. Tradicionalmente, la presentación más familiar que conocemos de este tipo de materiales son los vidrios de las ventanas que están basados en dióxido de silicio ( $\text{SiO}_2$ ) fundido, el cual nos ha mantenido cálidos en el invierno, ha decorado las catedrales, ha sido una fuente de la joyería y adornos desde tiempos de los egipcios, etc.

Los fenicios construyeron una gran industria orientada a la exportación de cristalería en las arenas ricas en cuarzo de la costa libanesa. La tabla I.2 muestra una lista representativa de las aplicaciones actuales y algunas potenciales de los sólidos amorfos.

Las aplicaciones se muestran en la tercera columna. En las dos primeras columnas se puede observar el tipo de vidrio empleado en la aplicación y un ejemplo específico de cada material, mientras que en la última columna se indica la propiedad del sólido que está siendo explotada en la aplicación.

Los sólidos amorfos se endurecen de forma continua mientras disminuimos la temperatura hasta una temperatura  $T_g$  (temperatura de transición entre el líquido y el sólido). Por tanto la capacidad de controlar la viscosidad (y las propiedades de flujo) de la masa fundida proporciona una ventaja de procesamiento valiosa en la preparación de productos formados de vidrio.

Por otro lado, un sólido amorfo puede ser usado en lugar de uno cristalino en algunas aplicaciones que tengan que ver con grandes áreas de láminas o películas delgadas ya que se evitan problemas asociados con la policristalización.

**Tabla I.2 Aplicaciones de los materiales amorfos**

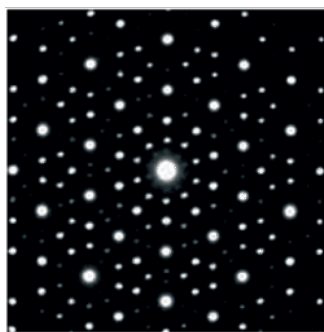
Tipo de sólido amorfo	Material	Aplicación	Propiedades
<b>Óxido de vidrio</b>	$(\text{SiO}_2)_{0.8}(\text{Na}_2\text{O})_{0.2}$	Vidrios de ventana	Transparencia, solidez, conformabilidad como hojas grandes.
<b>Óxido de vidrio</b>	$(\text{SiO}_2)_{0.9}(\text{Na}_2\text{O})_{0.1}$	Guías de onda de Fibra óptica para redes de comunicaciones	Ultra transparencia, pureza, conformabilidad como fibras uniformes.
<b>Polímero orgánico</b>	Poliestireno	Materiales estructurales “plásticos”	Resistencia, ligeras, fácil de producir.
<b>Calcogenuro de vidrio</b>	Se, $\text{As}_2\text{Se}_3$	Xerografía	Fotoconductividad, conformabilidad como películas de gran área.
<b>Semiconductor amorfo</b>	$\text{Te}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$	Elementos de memoria de computadoras	El campo eléctrico induce una transformación amorfo a cristalino
<b>Semiconductor amorfo</b>	$\text{Si}_{0.9}\text{H}_{0.1}$	Celdas solares	Propiedades ópticas fotovoltaicas, películas delgadas de gran área
<b>Vidrio metálico</b>	$\text{Fe}_{0.8}\text{B}_{0.2}$	Núcleos de transformadores	Ferromagnetismo

Los materiales amorfos como a-Si:H y las películas delgadas de óxidos son clave para los transistores de película delgada, celdas solares. Películas amorfas de carbono se utilizan de recubrimiento estándar para brocas, válvulas cardíacas y hojas de afeitar. Los vidrios calcogenuros son base de la tecnología actual de los DVD-R/W y puede emerger como la

próxima generación de computadoras de memoria flash [Wuttig, Waser, 2007]. Como pudimos apreciar existe una gran cantidad de materiales desordenados que tienen aplicación tecnológica que mejora la vida cotidiana. Hasta este punto hemos descrito dos formas clásicas de clasificar a los materiales basándonos en su estructura atómica. Hoy en día tenemos nuevos materiales que no son ni periódicos ni amorfos, ellos se encuentran en el intermedio de estas dos formas de ordenamiento y se les llama estructuras complejas, un ejemplo de ellas son las redes cuasiperiódicas.

## 1.6 Cuasicristales

En las últimas décadas, el concepto de orden sin periodicidad ha surgido para describir adecuadamente un número creciente de sistemas complejos, por ejemplo, los materiales cuasiperiódicos. El concepto de cuasiperiodicidad fue introducido por primera vez por el matemático Bohr en la década de 1930, mientras estudiaba funciones casi periódicas [Bohr, 1926]. El estudio de los mosaicos cuasiperiódicos fue fuertemente intensificado después del descubrimiento de los materiales cuasicristalinos por Shechtman en 1982 [Shechtman, 1984] mientras estudiaba una aleación de Al-Mn la cual enfrió súbitamente, encontrando que su patrón de difracción presentaba simetría de orden cinco (figura 1.10). De esta manera, el estudio de los fenómenos que presentan los arreglos aperiódicos de la materia en el espacio y/o en el tiempo se ha visto estimulado y el conocimiento básico obtenido derivado de estos estudios se ha extendido de forma natural a los dominios de la investigación aplicada. De este modo, los nuevos diseños basados en el orden aperiódico de diferentes bloques de construcción están abriendo caminos para prometedoras aplicaciones tecnológicas [Maciá, 2006].



*Figura 1.10* Patrón de difracción de la aleación Al-Mn.

En las siguientes secciones definiremos a los materiales cuasicristalinos y veremos algunas de sus aplicaciones.

## 1.7 Definición de lo cuasicristales

En general los cuasicristales están caracterizados por un perfecto orden de largo alcance sin tener una periodicidad translacional tridimensional. El primero se manifiesta por la aparición de puntos definidos en el patrón de difracción y el segundo en la existencia de simetrías rotacionales prohibidas para los cristales convencionales.

De acuerdo a su simetría los cuasicristales son clasificados en dos grandes grupos [Steurer, 2009]:

- *Cuasicristales bidimensionales*: son cuasicristales que consisten en planos cuasiperiódicos bidimensionales con una dirección periódica perpendicular a este plano. Por ejemplo, el cuasicristal octagonal con una simetría de orden ocho, el decagonal con una simetría de orden diez y el dodecagonal con una simetría de orden 12.
- *Cuasicristales tridimensionales*: Todos los cuasicristales tridimensionales poseen una simetría icosaédrica caracterizada por una simetría cristalográficamente no permitida, una simetría de rotación de orden dos, tres y cinco. También denominados cuasicristales icosaédricos.

Pero de acuerdo a su estabilidad térmica los cuasicristales se clasifican como:

- Crecimiento estable de cuasicristales por enfriamiento lento o fundición con posterior recocido.
- Cuasicristales metaestables preparados mediante el torneado en estado de fusión.
- Cuasicristales metaestables formados por la cristalización de la fase amorfa.

Un importante paso hacia la producción de muestras de alta calidad fue el descubrimiento de los primeros cuasicristales estables como Al-Cu-Fe (icosaédrica) [Tsai, 1987], Al-Ni-Co (decagonal) [Tsai, 1989] y Al-Pd-Mn [Tsai, 1990].

Varios grupos han reportado la aparición de las estructuras cuasiperiódicas en líquidos y polímeros también conocidos como cuasicristales suaves [Lifshitz, 2007, Takano, 2004, Zeng, 2004]. En Rusia fue descubierto un cuasicristal en la naturaleza (figura 1.11) [Bindi, 2009].



*Figura 1.11* Cuasicristal natural.

Muchos de los materiales cuasicristalinos contienen un alto porcentaje de buenos elementos conductores, se asumía que sus propiedades térmicas y de transporte eléctrico serían similares a los cristales o sistemas amorfos [Dubois, 2005]. Sin embargo resulta que su comportamiento es más parecido al de los semiconductores y materiales desordenados, por que regularmente presentan una gran resistencia para temperaturas pequeñas y su resistividad disminuye al aumentar la temperatura lo cual viene acompañado de un incremento en el orden estructural de los materiales. Por otra parte la conductividad sigue el inverso de la regla de Mathiesen como una función de la temperatura en contraparte con los metales ordinarios [Roche, 1997].

También las propiedades magnéticas se comportan de forma inesperada. Por una parte, muchos de los cuasicristales basados en aluminio contienen elementos magnéticos como el hierro, cobalto y el níquel, pero muestran propiedades diamagnéticas [Hippert, 2008, Stadnik, 1999]. Además, los átomos de manganeso en aleaciones cuasiperiódicas pueden poseer un momento magnético local [Hippert, 2008] y los cuasicristales icosaedrales que contienen elementos de tierras raras, muestran correlaciones de espín antiferromagnéticas de corto alcance [Sato, 2000a, 2000b].

## 1.8 Estabilidad cuasicristalina

A prácticamente tres décadas del descubrimiento de un cuasicristal por Shechtman [Shechtman, 1984]. Los estudios se han enfocado en el análisis de su estructura atómica y a sus propiedades físicas; debido a su inusual estructura y a su mecanismo de estabilización. Al ser una tercera forma de clasificar a los sólidos, el por qué y el cómo se forma un cuasicristal es fascinante y siempre un tema difícil. El primer intento exitoso para formar un cuasicristal fue por solidificación rápida, aunque esto daba como resultado que los cuasicristales fueran defectuosos y altamente desordenados. Esto dejó a la discusión sobre la estabilidad a un nivel de cúmulos (clúster) atómico, aun más, los cuasicristales fueron considerados como una fase de no-equilibrio relativo con respecto a sus fases cuasicristalinas (aproximantes). Esta situación cambió cuando una serie de cuasicristales estables fue descubierta [Tsai, 1987, 1990, 2000].

Los cuasicristales no son solo estables, sino también altamente ordenados; lo cual nos permite discutir la estabilidad de largo alcance de una estructura cuasiperiódica. Se confirmó empíricamente, a partir de la formación de una serie de aleaciones cuasicristalinas que la concentración de electrones de valencia ( $e/a$ ) es importante para su estabilidad [Tsai, 1999]. Posteriormente se realizó espectroscopia de fotoemisión de rayos X en cuasicristales estables verificando la existencia de mínimos en la densidad de estados alrededor del nivel de Fermi [Matsubara, 1991]. También se observaron valores pequeños del coeficiente de calor específico electrónico en una serie de aleaciones cuasicristalinas [Biggs, 1990]. Lo cual es una indicación de la existencia de un pseudo-gap (o un gap) en la densidad de estados en el nivel de Fermi. La estructura de bandas calculada para sus fases cuasicristalinas (aproximantes) confirma un pseudo-gap en el nivel de Fermi [Fujiwara, 1989]. Este es el mecanismo de Hume-Rothery para cuasicristales; en el lenguaje de la teoría de bandas, esta es la interacción de la zona de Brillouin y la esfera de Fermi [Stadnik, 1999].

Muy recientemente, se ha observado teóricamente que la hibridación es un factor dominante en la estabilización de un cuasicristal como en las fases cuasicristalinas (aproximantes) [Ishii, 2001].



En general, los científicos están llegando a un consenso de que los cuasicristales están esencialmente estabilizados por su estructura electrónica. La razón  $e/a$  es el criterio más conveniente para entender el mecanismo de estabilización a primera instancia para un gran número de aleaciones.

Basándose en las investigaciones de cobre y plata, Hume-Rothery y sus colaboradores dedujeron una serie de reglas [Hume-Rothery, 1926] mostrando cuales son los factores que favorecen la formación de fases definidas dentro de ciertos rangos de concentraciones de aleaciones binarias AB.

- Si el tamaño atómico del átomo B difiere en más de un 15% con respecto de A, la estructura es inestable incluso a bajas concentraciones de B. El factor de tamaño atómico está definido como:

$$\delta = (r_A - r_B) / r_A, \quad (1.5)$$

donde  $r_B$  y  $r_A$  son los radios atómicos de los átomos A y B, respectivamente.

- Si B es significativamente más electronegativo que A, es decir, si en un compuesto AB, B atrae electrones más fuertemente que A, entonces los compuestos químicos característicos  $A_xB_y$  formados tienen algún carácter iónico en los enlaces. Si bien, es difícil cuantificar la electronegatividad de un átomo, básicamente, cuanto mayor sea la diferencia de las electronegatividades entre los dos elementos, más fuerte es la tendencia a formar compuestos.
- Estructuras definidas de compuestos surgen preferentemente en rangos característicos de la concentración de electrones de valencia ( $e = a$ ). Esta cantidad indica el número de todos los electrones de valencia en la aleación por número de átomos, es decir,

$$e / a = Z_A(1 - c_B) + Z_B c_B, \quad (1.6)$$

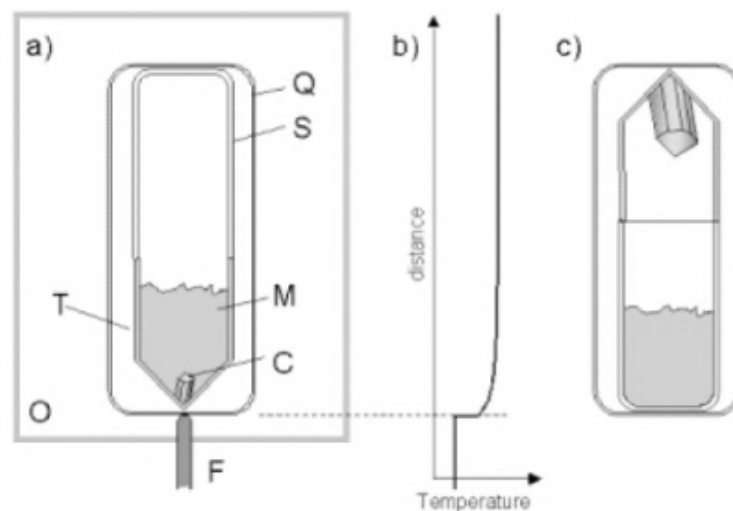
donde  $Z_A$  y  $Z_B$  son las valencias de los átomos A y B, respectivamente y  $c_B$  es la fracción de átomo B.

Estas reglas fueron establecidas en la década de 1930 y eran capaces de resumir la formación de las estructuras de los compuestos

intermetálicos. En el siguiente capítulo hablaremos de las técnicas de crecimiento de cristales o cuasicristales.

## 1.9 Métodos crecimiento

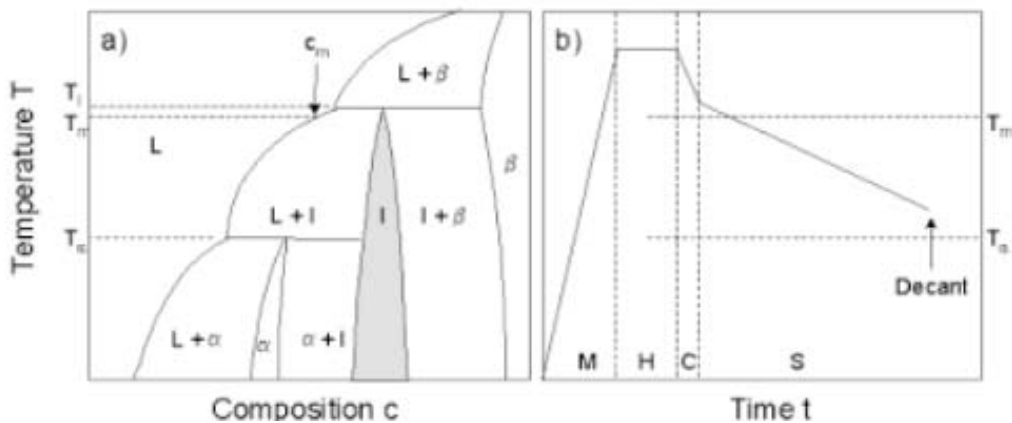
Como ya hemos mencionado a partir del descubrimiento de los cuasicristales muchas de las investigaciones se enfocaron en estudiar sus propiedades físicas ya que estas dependen totalmente de sus características estructurales. Similar a lo sucedido cuando se empezaron a estudiar los materiales cristalinos, se requería de muestras de alta calidad, para lo cual se emplearon diversas técnicas para su fabricación; entre ellas se encuentra la técnica de flujo de crecimiento (figura 1.12), la técnica Bridgman y la técnica Czochralski.



**Figura 1.12** En (a) la configuración básica para perfil de temperatura en el crisol. En (c) Después de la decantación el cristal crecido es separado de la masa fundida residual. C: cristal crecido; M: masa fundida; T: extremos con forma de crisol; S: parte superior invertida del crisol; Q: ampolla de cuarzo; O: horno. El crecimiento de un mono-cristal de acuerdo a la técnica de flujo de crecimiento. En (b) esquema del distancia-temperatura.

La primera de estas técnicas se basa en un proceso de enfriamiento lento, de una masa fundida de una apropiada composición de acuerdo con un programa de temperatura bien definido en un crisol adecuado. La configuración básica es muy simple: el crisol que contiene la masa fundida es colocada en un horno con un gradiente de temperatura bajo y una regulación de la temperatura de alta precisión. Después de un primer paso de homogenización a una temperatura muy por encima de la temperatura de

fusión de la aleación se inicia un proceso de enfriamiento lento durante el cual la aleación prácticamente se mantiene en un equilibrio isotérmico. El proceso se concluye por decantación a una temperatura final apropiada. Es muy importante notar que este procedimiento tendrá resultados satisfactorios, si la composición de la masa fundida y la temperatura se eligen de acuerdo con el diagrama de fase de la aleación (ver figura 1.13).

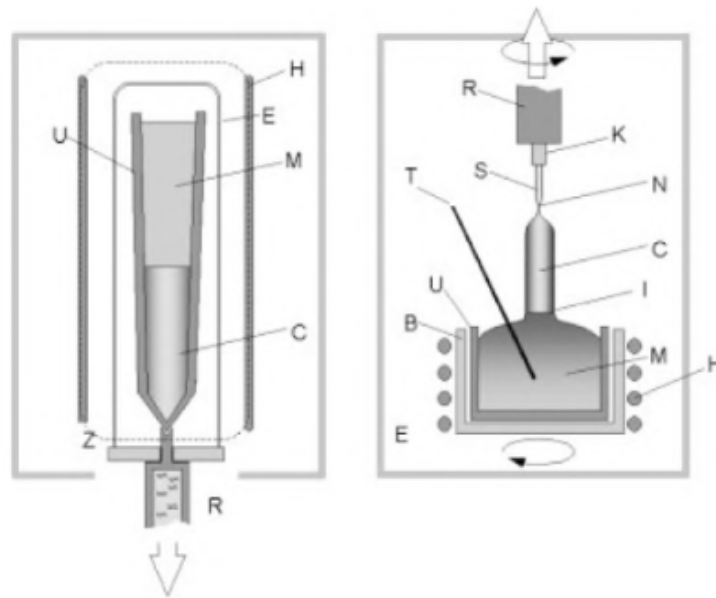


**Figura 1.13** Esquema de un diagrama de fase (a) y su correspondiente perfil de tiempo-temperatura (b) para el crecimiento de flujo de la fase I.

La principal ventaja de este método deriva del hecho de que los cristales pueden crecer libremente dentro de la masa fundida. Esto conduce a una calidad estructural muy alta del material crecido que tiene generalmente una densidad de defectos mucho más baja que los cristales obtenidos mediante la técnica Bridgman. Por otro lado, el costo de mano de obra es bajo debido a que el proceso no tiene que ser controlado como en el caso de la técnica de Czochralski. Una desventaja de la técnica es que el tamaño de los cristales se ve limitada por el tamaño del crisol.

La técnica de Bridgman (figura 1.14 izquierda) es un enfoque clásico al crecimiento de un monocristal. En esta técnica la masa fundida de composición apropiada se coloca verticalmente en un horno bajo un gradiente de temperatura bien definido. La solidificación de la masa fundida empieza en la parte inferior del crisol. La elección de la parte inicial de la composición y de la temperatura del horno se hace de acuerdo con el diagrama de fases. Una ventaja de esta técnica es que el diámetro del cristal crecido depende solamente del diámetro del crisol usado, lo cual contrasta con la técnica de Czochralski, de la cual hablaremos en el siguiente párrafo. Una desventaja técnica de este método es que en muchos

de los casos los lingotes se adhieren firmemente al crisol después del crecimiento y su remoción frecuentemente requiere la destrucción del crisol (algunas veces muy caro), lo cual podría conducir a la fractura de los cristales. Una desventaja adicional es que no se puede realizar el crecimiento sin una semilla.



**Figura 1.14** Configuración básica para el crecimiento de un monocristal de acuerdo a la técnica de Bridgman (izquierda) y Czochralski (derecha). C: cristal crecido, M: masa fundida, U: crisol, E: envoltura protectora, H: calentador, Z: zona caliente, R: tirador de varilla, N: cuello delgado, S: semilla cristalina, K: porta semilla, T: termopar, B: suscepto

La técnica Czochralski (figura 1.14 derecha) es otra de las técnicas bien conocidas para el crecimiento de monocristales; es particularmente empleada en la producción de largas obleas semiconductoras de alta calidad. Esta técnica implica la inmersión de una semilla cristalina en una masa fundida de composición adecuada. La temperatura del proceso se elige de tal forma que un menisco se apoya en la interfase sólido-líquido. Entonces, el cristal crecido es retirado de la masa fundida. Cabe señalar que la temperatura del proceso es el parámetro para determinar el diámetro del cristal, por lo cual no puede elegirse libremente. El diámetro máximo posible está predefinido por el límite inferior de la ventana de temperatura de la zona de solidificación primaria. Si este último es pequeño, solo cristales muy delgados pueden ser crecidos. Esta técnica tiene la gran ventaja de que se pueden obtener cristales con una alta perfección estructural, además de que la orientación puede ser controlada.

## 1.10 Aplicaciones de los cuasicristales

A partir del descubrimiento de los cuasicristales (QCs) se han realizado numerosas investigaciones para revelar las propiedades que los caracterizan, como lo son sus propiedades eléctricas, magnéticas y ópticas [Stadnik, 1999].

Diferentes clases de QCs han sido sintetizados mediante técnicas de la metalurgia convencional. Estas muestras resisten el tratamiento térmico sin transformarse en los cristales convencionales debido al calentamiento. La mayoría de estos QCs estables consisten de una mezcla de aluminio con metales de transición, por ejemplo, el hierro, níquel, o el cobalto o metales normales como el Magnesio y el Zinc [Tsai, 1999]. Los QCs estables fueron también descubiertos en aleaciones basadas en titanio [Kelton, 1997] y en el sistema Mg-Zn-tierra rara [Tsai, 1994]. Además la fase binaria cuasicristalina fue descubierta en el sistema Cd(Ca,Tb) [Tsai, 2000]. Entre todos ellos la fase icosaédrica de AlPd(Re,Mn) y Al-Cu-Fe han sido consideradas ampliamente para la aplicaciones prácticas. En particular, la aleación icosaedral Al-Cu-Fe tiene un alto interés comercial debido a que sus componentes son más baratos.

Los QCs son muy frágiles a temperaturas bajas e intermedias, aunque presentan una transición de un comportamiento frágil a dúctil aproximadamente al 75% de la temperatura de su punto de fusión [Dubois, 2000]. Por lo tanto, los QCs han adquirido una mayor atención como recubrimientos que combinan la resistencia al desgaste con la baja fricción y/o baja adherencia. Ejemplo de esto es un sartén recubierto con una material cuasicristalino, vendido por SITRAM bajo la marca comercial de Cybernox. Cabe señalar que respecto a su propiedad antiadherente es menor que la del Teflón, pero la dureza de la capa es mayor [Dubois, 1997].

Las barreras térmicas basadas en aleaciones cuasicristalinas pueden ser manufacturadas como revestimientos gruesos mediante técnicas de pulverización térmica o pulverización catódica con magnetron. En comparación con las aleaciones habituales, los cuasicristales resisten la oxidación y la corrosión por azufre a alta temperatura. El principal inconveniente de utilizar los QCs proviene que su temperatura de fusión es relativamente baja y su movilidad atómica es significativa. Entonces

debido a su propiedad de aislante térmico puede ser empleado en motores de combustión, generadores de energía o en general piezas mecánicas que requieren estar en constante movimiento. Entre los materiales compuestos, una precipitación cuasicristalina de acero reforzado se comercializa por Sandvik Steel en Suecia. [Macia, 2006].

Algunas otras aplicaciones de los QCs están siendo exploradas [Dubois, 2005]. Estos incluyen el almacenamiento de hidrogeno [Kelton, 1997], la catálisis [Yoshimura, 2002], los biomateriales protésicos [Anderson, 2002], amortiguadores ópticos [Eisenhammer, 1997 y 1994].

En estas secciones hemos definido a los cuasicristales y sus propiedades, asimismo hemos hablado de los métodos de crecimiento. A continuación abordaremos algunas formas en la que podemos modelar los sistemas cuasiperiódicos y aperiódicos.

## 1.11 Método de corte y proyección, inflación y adición

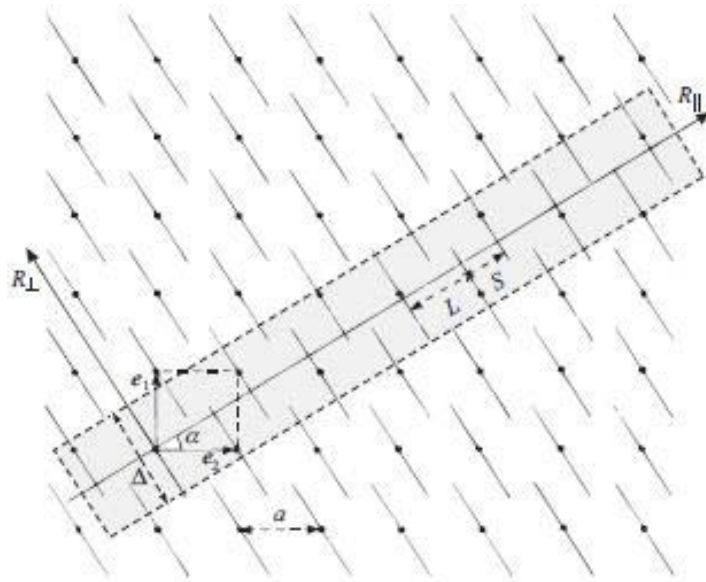
A partir del descubrimiento de los cuasicristales ha aumentado el interés entre los sistemas que están a la mitad del camino entre los ordenados y los amorfos. Los investigadores han hecho grandes esfuerzos teóricos para estudiar los cuasicristales. Estos estudios fueron estimulados tanto por la indicación experimental de que en la naturaleza pudieran existir estructuras intermedias entre los cristales y los amorfos, asimismo, por la capacidad actual de fabricar estructuras en capas ordenadas arbitrariamente. Para modelar estos sistemas se puede partir de una dimensión donde comúnmente se emplean diferentes métodos, tales como el de corte y proyección desde un espacio de mayor dimensión, el de adición y el de inflación. En esta sección vamos a describir estos métodos.

- *Método de corte y proyección*

Podemos generar una red cuasiperiódica unidimensional a partir de una red periódica bidimensional, como se muestra en la figura 1.15. Primero definamos una red bidimensional cuadrada  $[\rho(x,y)]$  con parámetro de red  $a$ ,

$$\rho(x, y) = \sum_{n, m} \delta(x - na) \delta(y - ma), \quad (1.7)$$

donde  $n$  y  $m$  son enteros. Trazamos una línea recta  $R_{\parallel}$  con pendiente  $\alpha$ , en donde realizaremos las proyecciones. Si la pendiente de esta línea es irracional, entonces esta línea no tocará todos los puntos de la red cuadrada [Steurer, 2009]. Los puntos de la red proyectados sobre la línea  $R_{\parallel}$  podrán formar una red cuasiperiódica, siempre que los puntos proyectados de la red estén limitados dentro de una franja de ancho  $\Delta$  a lo largo de  $R_{\perp}$  que es perpendicular a  $R_{\parallel}$ ; de lo contrario, la línea  $R_{\parallel}$  estará densamente poblada por los puntos proyectados de la red.



**Figura 1.15** Método de corte y proyección.

Al considerar el caso en que  $\tan \alpha = \tau^{-1}$ , siendo  $\tau = (1 + \sqrt{5}) / 2$ , el intervalo entre los puntos vecinos proyectados será  $L = a \cos \alpha$  ó  $S = a \sin \alpha$ , mientras que la franja tendrá un ancho  $\Delta = a(\cos \alpha + \sin \alpha)$ , así la red de Fibonacci a lo largo de  $R_{\parallel}$ , es generada por medio del método de corte y proyección [Duan, 2005].

- *Método de inflación y adición*

Consideremos el problema de la cría de conejos, el cual fue tratado por primera vez por el matemático Fibonacci en 1202. En este problema se utilizan dos tipos de conejos: conejos adultos y conejos bebés, los cuales se

identifican por las letras A y B respectivamente. Conforme crecen las generaciones se considera que un par de conejos adultos procrea un par de conejos bebés, mientras que los conejos bebés que teníamos crecen y se convierten en adultos, de acuerdo a la siguiente regla de sustitución

$$A \rightarrow AB \text{ y } B \rightarrow A, \quad (1.8)$$

podemos escribir esta misma regla en forma matricial, es decir,

$$M_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow M_{ij} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} AB \\ A \end{pmatrix} \rightarrow ABA, \quad (1.9)$$

que corresponde a la tercera generación de este tipo de sistema. La siguiente generación quedaría como

$$M_{ij} \begin{pmatrix} AB \\ A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ABA \\ AB \end{pmatrix} \rightarrow ABAAB. \quad (1.10)$$

Si continuamos aplicando la matriz  $M_{ij}$  al vector columna resultante de la generación anterior obtendremos los siguientes arreglos:

$$B \rightarrow A \rightarrow AB \rightarrow ABA \rightarrow ABAAB \rightarrow ABAABABA \rightarrow ABAABABAABAAB...$$

Este es el denominado *método de inflación*. Notemos que el número total de letras A y B para cada generación sigue la secuencia numérica de Fibonacci, es decir, 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13,.... Esta secuencia cumple la siguiente relación de recurrencia

$$F_n = F_{n-1} + F_{n-2}. \quad (1.11)$$

Al analizar la forma en que va creciendo el sistema observamos que podemos obtener una nueva generación a partir de sumar las dos generaciones anteriores, lo cual se puede expresar mediante las condiciones iniciales  $f_0=B$  y  $f_1=A$  y la siguiente relación de recurrencia

$$f_n = f_{n-1} \oplus f_{n-2}. \quad (1.12)$$

Este es el denominado *método de adición*. Para que esta relación pueda ser usada se necesita tener las dos primeras generaciones como condiciones iniciales. En la tabla I.3, compararemos estos últimos métodos con el fin de mostrar que ambas formas son equivalentes.



**Tabla I.3 Métodos de construcción para la secuencia de Fibonacci**

Generación (n)	Método de Inflación $A \rightarrow AB$ y $B \rightarrow A$	Método de Adición $f_n = f_{n-1} \oplus f_{n-2}$
1	A	A
2	AB	$A \oplus B = AB$
3	ABA	$AB \oplus A = ABA$
4	ABAAB	$ABA \oplus AB = ABAAB$
5	ABAABABA	$ABAAB \oplus ABA = ABAABABA$
⋮	⋮	⋮

Como podemos ver existe una clara equivalencia entre el método de inflación y el de adición. Ambos métodos nos serán de gran utilidad para calcular la densidad de estados, la conductividad eléctrica y la localización en los sistemas de Fibonacci generalizado. En la siguiente sección se mostrará la forma en que se construyen las secuencias de Fibonacci generalizado.

## 1.12 Secuencias de Fibonacci generalizado

El descubrimiento experimental de los cuasicristales por Shechtman en 1982, causo un gran revuelo a nivel científico ya que este nuevo estado de la materia ofrecía múltiples temas investigación. Los primeros estudios teóricos se enfocaron en las propiedades electrónicas de los sistemas de Fibonacci y fueron realizados por Kohmoto, Kadanoff y Tang (KKT) [Kohmoto, 1983] y de forma independiente por Ostlund [Ostlund, 1983]. Para modelar los sistemas cuasicristalinos se emplearon dos diferentes métodos; la proyección desde un espacio de mayor dimensión y la generación de sistemas aperiódicos mediante reglas de sustitución [Luck, 1993]. Este último método puede generar sistemas aperiódicos que no son cuasicristales, por lo tanto, algunos sistemas tipo Fibonacci Generalizado (GF) son versiones unidimensionales (1D) de cuasicristales.

En las últimas décadas se puso mucho interés en obtener las propiedades físicas de los sistemas con potenciales cuasiperiódicos basados en la secuencia de Fibonacci, debido a que sus propiedades son totalmente diferentes de las observadas en los cristales y en los materiales amorfos.

Las cadenas de Fibonacci Generalizado pueden ser estudiadas de diferentes formas, por ejemplo, generando el sistema mediante el uso de dos tipos de enlaces (problema de enlaces), dos tipos de átomos (problema de sitios) o una combinación de ambos (problema mixto) [Oviedo-Roa, 2000] siguiendo alguna secuencia FG.

En esta tesis estudiaremos el problema de enlaces, el cual considera dos diferentes energías de salto  $t_A$  y  $t_B$ , las cuales se sitúan siguiendo las secuencias de Fibonacci generalizado (SFG) y se considera que todos los átomos tienen la misma naturaleza, es decir, su auto-energía es  $\alpha_j=0$ , donde  $j=1,2,\dots,N$ . Este problema tiene la ventaja de poderse extender a redes aperiódicas multidimensionales, como se mostrará más adelante.

Hay muchos tipos de SFG. Estudiamos las secuencias de dos letras, que pueden ser generadas por el esquema de inflación [Kolář 1990, Gumbs, 1988].

$$S_0 = B, \quad S_1 = A, \quad S_n = S_{n-1}^l S_{n-2}^m, \quad (1.13)$$

con  $l$  y  $m$  enteros positivos arbitrarios. También dichas secuencias pueden ser generadas mediante la regla de sustitución

$$A \rightarrow A^l B^m, \quad B \rightarrow A \quad (1.14)$$

El número total de letras A y B en  $S_n$  las denotamos como  $f_n$  y satisface la relación de recursión

$$F_n = lF_{n-1} + mF_{n-2}, \quad F_0 = F_1 = 1 \quad (1.15)$$

El valor característico irracional  $\sigma(l,m)$  de cada secuencia, esta dado por la solución positiva de la ecuación cuadrática  $\sigma^2 - l\sigma - m = 0$ . Es decir,

$$\sigma = \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{F_{n+1}}{F_n} = \frac{l + \sqrt{l^2 + 4m}}{2}. \quad (1.16)$$

Algunos valores de  $\sigma$  son conocidas ~~únicamente~~ como “reglas metálicas” [Kohmoto, 1987] y son

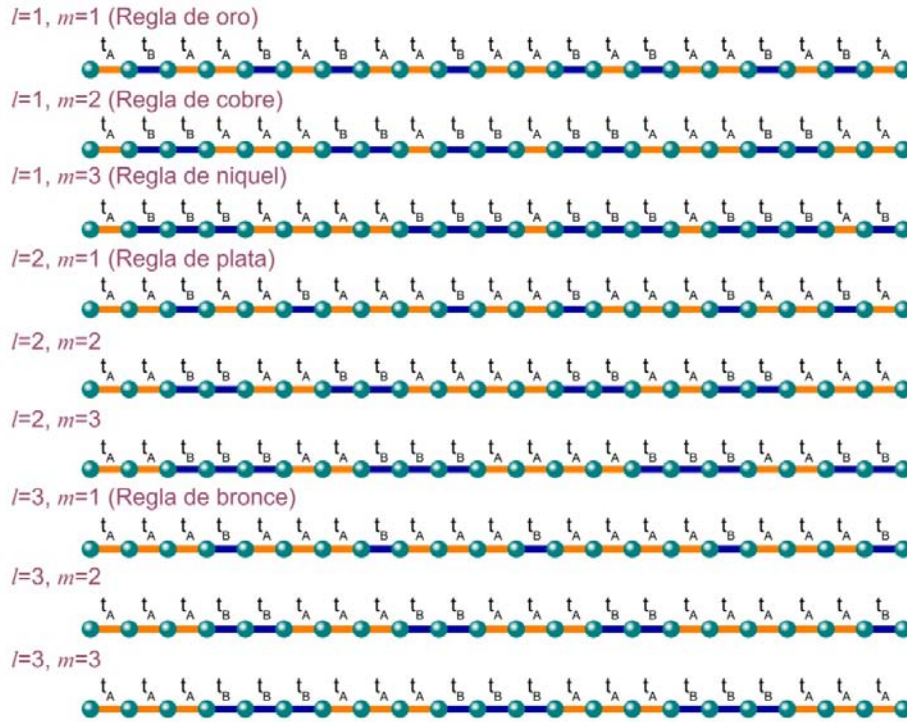
$$\begin{aligned}
\text{a) } l = 1 \text{ y } m = 1 \text{ (regla de oro):} & \quad \sigma_g = \frac{1 + \sqrt{5}}{2}, \\
\text{b) } l = 2 \text{ y } m = 1 \text{ (regla de plata):} & \quad \sigma_s = 1 + \sqrt{2}, \\
\text{c) } l = 3 \text{ y } m = 1 \text{ (regla de bronce):} & \quad \sigma_b = \frac{3 + \sqrt{13}}{2}, \\
\text{d) } l = 1 \text{ y } m = 2 \text{ (regla de cobre):} & \quad \sigma_c = 2, \\
\text{e) } l = 1 \text{ y } m = 3 \text{ (regla de niquel):} & \quad \sigma_n = \frac{1 + \sqrt{13}}{2}.
\end{aligned} \tag{1.17}$$

En esta tesis estudiamos nueve diferentes arreglos de Fibonacci generalizado, los cuales se muestran en la Tabla I.4.

**Tabla I.4 Fibonacci generalizado por sustitución  $B \rightarrow A$  y**

	$m = 1$	$m = 2$	$m = 3$
$l = 1$	$A \rightarrow AB$ $f_n = f_{n-1} \oplus f_{n-2}$	$A \rightarrow ABB$ $f_n = f_{n-1} \oplus 2f_{n-2}$	$A \rightarrow AB BB$ $f_n = f_{n-1} \oplus 3f_{n-2}$
$l = 2$	$A \rightarrow AAB$ $f_n = 2f_{n-1} \oplus f_{n-2}$	$A \rightarrow A ABB$ $f_n = 2f_{n-1} \oplus 2f_{n-2}$	$A \rightarrow A ABBB$ $f_n = 2f_{n-1} \oplus 3f_{n-2}$
$l = 3$	$A \rightarrow AAAB$ $f_n = 3f_{n-1} \oplus f_{n-2}$	$A \rightarrow AA ABB$ $f_n = 3f_{n-1} \oplus 2f_{n-2}$	$A \rightarrow AA ABBB$ $f_n = 3f_{n-1} \oplus 3f_{n-2}$

donde  $f_n$  representa la regla de suma para generar al sistema. La figura 1.16 muestra un segmento de cada cadena FG usando las relaciones mostradas en la Tabla I.4.



**Figura 1.16** Segmento de las cadenas de Fibonacci generalizado estudiadas en esta tesis.

Así mismo, para formar nuestros sistemas podemos utilizar el método matricial:

$$\begin{pmatrix} A' \\ B' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l & m \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underbrace{AA \cdots A}_{l} \underbrace{BB \cdots B}_{m} \\ A \end{pmatrix} \quad (1.18)$$

Si consideramos  $l=1$  y  $m=1$  recobramos la matriz  $M_{ij}$  correspondiente a la secuencia de Fibonacci de la sección anterior. Esta forma de expresar a los sistemas, junto con las condiciones de Pisot que estudiaremos en la siguiente sección, nos serán de gran utilidad para demostrar si las cadenas estudiadas son cuasiperiódicas.

## 1.13 Condiciones de Pisot

En “redes” cuasiperiódicas (cuasiredes), los eigenvalores son *números algebraicos* (*números de Pisot*), los cuales tiene la propiedad de *Pisot-Vijayaraghavan (PV)* [Steurer, 2009]:

$$\lambda_1 > 1, \quad |\lambda_i| < 1 \quad \forall i > 1. \quad (1.19)$$

Por lo tanto para que se satisfaga la condición de Pisot, un eigenvalor debe ser un número algebraico real mayor a uno y los restantes tienen un valor absoluto menor que uno. Las redes satisfacen la propiedad PV si presentan un espectro de Fourier puntual. En cambio, las estructuras que no cumplen la condición PV usualmente exhiben espectros de difracción complejos con picos de dispersión singulares y propiedades de escalamiento multifractales [Godrèche, 1991, Luck, 1993]. La propiedad de PV es una propiedad necesaria para tener un espectro puntual puro, sin embargo, esta no es suficiente. La secuencia de Thue Morse, por ejemplo, tiene la propiedad de PV, pero tiene un espectro de Fourier singularmente continuo sin ningún pico de Bragg [Steurer, 2009].

Como vimos en las secciones anteriores podemos construir nuestros sistemas a través de diversos métodos, uno de ellos, se basaba en la aplicación consecutiva de una matriz. La forma matricial general para obtener las cadenas de Fibonacci generalizada es

$$\begin{pmatrix} A' \\ B' \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} l & m \\ 1 & 0 \end{pmatrix}}_S \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underbrace{AA \cdots A}_l \underbrace{BB \cdots B}_m \\ A \end{pmatrix}, \quad (1.20)$$

Ahora vamos a comprobar si las matrices con que se forman los sistemas de Fibonacci generalizado cumplen las condiciones de PV. Para ello obtendremos los eigenvalores de la matriz "S" a partir de su ecuación secular, es decir,

$$\begin{vmatrix} l - \lambda & m \\ 1 & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda^2 - l\lambda - m = 0 \Rightarrow \lambda = \frac{l \pm \sqrt{l^2 + 4m}}{2} \quad (1.21)$$

Como se explico anteriormente, los eigenvalores deben de cumplir con que  $\lambda_1 > 1$ ,  $|\lambda_2| < 1 \quad \forall i > 1$ . Los únicos valores para los cuáles se cumple esta condición de forma general son para las secuencias con  $m=1$ ,

$$\lambda = \frac{l \pm \sqrt{l^2 + 4}}{2} \Rightarrow \lambda_1 = \frac{l + \sqrt{l^2 + 4}}{2} \text{ y } \lambda_2 = \frac{l - \sqrt{l^2 + 4}}{2} \quad (1.22)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \lambda_1 > 1 \\ |\lambda_2| < 1 \end{cases} \quad (1.23)$$

Además una condición adicional que nos permite en conjunto con las condiciones de PV saber si nuestro sistema en estudio es cuasiperiódico; esta consiste en que el determinante de la matriz “S” debe ser unimodal. El determinante para nuestros sistemas de Fibonacci generalizado es

$$\begin{vmatrix} l & m \\ 1 & 0 \end{vmatrix} = -m, \quad (1.24)$$

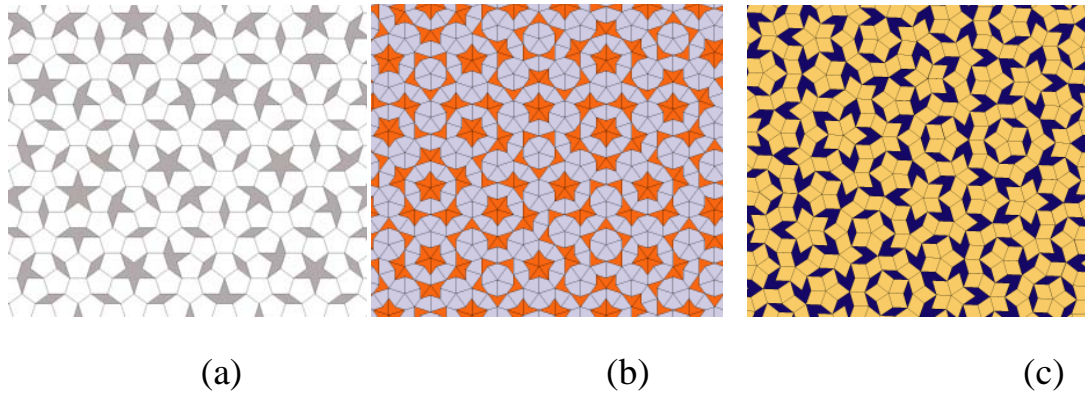
Como podemos observar el determinante de esta matriz solo depende de un término, el cual está relacionado con cuantas veces aparece la integral de salto  $t_B$  en el sistema. Por lo tanto, los sistemas para cualquier  $l$  (número entero positivo) y  $m=1$  son sistemas *cuasiperiódicos*.

En el siguiente capítulo se mostraran uno de los ejemplos más conocidos de los sistemas cuasiperiódicos bidimensionales, los mosaicos de Penrose.

## 1.14 Mosaicos de Penrose

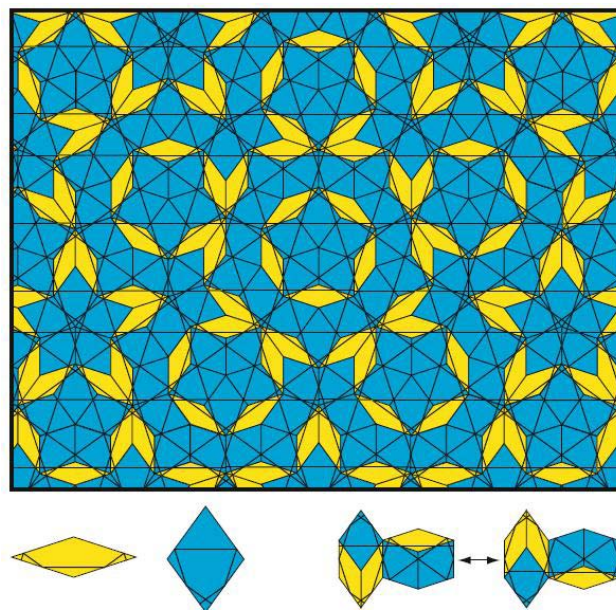
Los aspectos matemáticos y estéticos de los mosaicos cuasiperiódicos han atraído la atención mucho antes que se descubrieran los cuasicristales. Los mosaicos de Penrose (MP) fueron nombrados de esta forma en honor a su descubridor Roger Penrose [Penrose, 1974] y fueron popularizados por Martin Gardner en la revista de divulgación científica *Scientific American* [Gardner, 1977]. Nicolaas Govert de Bruijn desarrolló importantes técnicas para la construcción y análisis de los mosaicos de Penrose [Bruijn, 1981]. Existen varias versiones de los MP que se presentan en el libro *Tilings and Patterns* por Grünbaum and Shephard [Grünbaum, 1987]: un mosaico basado en el pentágono (P1), la versión del dardo y la cometa (P2) y el mosaico rómbico (P3), los cuales se muestra en la figura 1.17.

Los tres pertenecen a la clase de isomorfismo local de Penrose (ILP). Esto lo podemos explicar de la siguiente manera. Dos mosaicos son localmente isomórficos, si y solo si, cada región finita contenida en cualquiera de los mosaicos puede ser encontrada, con la misma orientación, en el otro. Las estructuras localmente isomórficas tienen la misma función (Patterson) de autocorrelación. Esto significa que tienen el mismo patrón de difracción.



**Figura 1.17.** (a) Mosaico de Penrose P1, (b) Mosaico de Penrose P2 y (c) Mosaico de Penrose P3

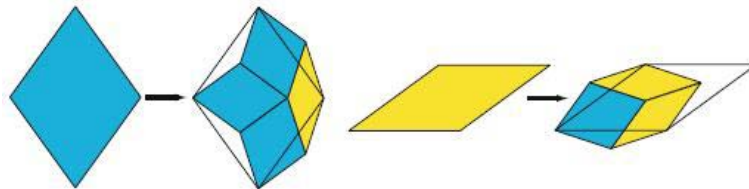
Los mosaicos que son autosimilares, que tienen reglas de coincidencia y una cuasired de Ammann (líneas continuas paralelas que se forman al unir los mosaicos que tienen pequeños segmentos de líneas dibujados en ellas, figura 1.18), se dice que pertenecen a la clase de isomorfismo local de Penrose (ILP).



**Figura 1.18** Mosaico de Penrose (P3) con líneas de Amman dibujadas en él (líneas oscuras). También se muestran las unidades usadas para formar el mosaico.

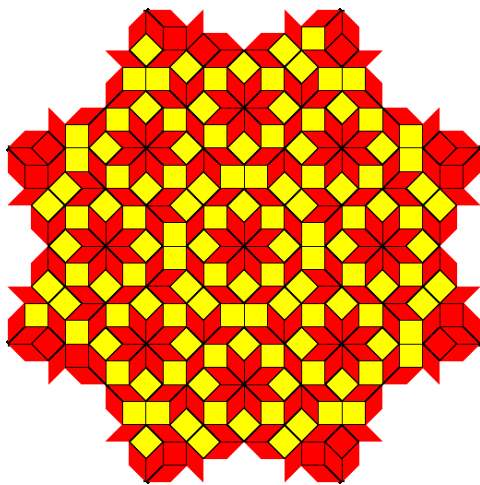
De acuerdo con la simetría de su espacio recíproco, los MP son mosaicos cuasiperiódicos decagonales. Los mosaicos de clase ILP poseen un grupo de reglas de coincidencia que forzan la cuasiperiodicidad. Si las reglas de coincidencia se relajan otros mosaicos son posibles, ya sean cuasiperiódicos, periódicos o no periódicos. Por ejemplo, al relajar las

reglas de congruencia para el P3 considerando la condición de que cada uno de los ángulos del mosaico sean múltiplos pares o impares de  $\pi/5$ , entonces obtenemos un mosaico binario rómbico. [Lançon, 1988]. La regla de sustitución se muestra en la figura 1.19.



**Figura 1.19** Regla de sustitución para el mosaico binario rómbico.

Tras el descubrimiento de los materiales cuasicristalinos se intensificó el estudio de los mosaicos cuasiperiódicos, debido a que los patrones de difracción de los materiales cuasicristalinos no podían ser explicados mediante la repetición periódica de la celda unitaria de las estructuras cristalinas, en cambio, el concepto matemático de los mosaicos



**Figura 1.20** Mosaico de Ammann-Beenker con simetría de rotación 8.

cuasicristalinos explicaban las propiedades de esta nueva clase de materiales. Por ejemplo, Levine y Steinhardt lograron explicar la simetría icosaédral de los picos de Bragg obtenidos por Shechtman con un mosaico tridimensional de Penrose [Levine, 1984 y 1986]. También la estructura octagonal del cuasicristal MnSiAl logro ser descrita por el mosaico de Ammann-Beenker [Ben-Abraham, 1999], el cual se muestra en la figura 1.20. La superficie del

$\text{Al}_{70}\text{Pd}_{21}\text{Mn}_9$ , logro ser descrita por el mosaico P1 de Penrose [Papadopolos, 2002 y Penrose, 1979]. En conclusión una forma bidimensional de modelar cuasicristales puede ser también por medio de las baldosas que generan los masaicos de Penrose.

En este capítulo hemos estudiado materiales cristalinos, amorfos y cuasicristales. Ahora vamos a describir la teoría para investigar el transporte y la localización en sólidos.



# Capítulo 2 Medidas de localización y transporte

## 2.1 Introducción

Entre las teorías de la conductividad eléctrica en metales basada en el promedio de las velocidades se encuentra la desarrollada por Drude en 1900. Lorentz en 1905 reinvestigó el problema usando la ecuación de transporte de Boltzmann y un modelo simplificado para colisiones entre los electrones y átomos en la red. En 1928 Sommerfeld investigó las conductividades desarrolladas en la teoría de Lorentz remplazando la estadística clásica por la estadística de Fermi-Dirac, asimismo asumió que el tiempo de relajación puede ser definido como función de la energía de los electrones solamente [Dekker, 1958]. Otra forma de estudiar el transporte es por medio del formalismo de Landauer [Landauer, 1957 y 1970], donde la conductancia se expresa en términos de las propiedades estáticas de dispersión. El desorden inherente presente en un conductor induce la dispersión de electrones incidentes resultando una fracción de electrones transmitida, la cual es llamada el coeficiente de transmisión y puede ser derivada a través de la mecánica cuántica.

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

## 2.2 Funciones de Bloch

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

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

donde  $u_k(\mathbf{r})$  es un potencial periódico, es decir,  $u_k(\mathbf{r}+\mathbf{T}) = u_k(\mathbf{r})$ , para toda  $\mathbf{T}$ , vector de traslación en una red de Bravais [Kittel, 2005]. Por lo que el teorema de Bloch se expresa:

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

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

## 2.3 Amarre fuerte

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

Este modelo se basa en las funciones de Wannier, las cuales ofrecen una herramienta ideal para la discusión de fenómenos en los que la localización espacial de los electrones juega un papel importante. Entre las áreas más importantes de aplicación se encuentran el estudio de los fenómenos que implican niveles electrónicos localizados y fenómenos magnéticos. Las funciones de Wannier son las transformadas de Fourier de las funciones de Bloch, localizadas en las posiciones atómicas; son ortonormales entre sí y forman una base alternativa para las soluciones de la ecuación de Schrodinger [Ashcroft, 1976]. El hamiltoniano de amarre fuerte (TBH) es de la forma:

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

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

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

## 2.4 Función de Green y Densidad de Estados

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

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

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

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

donde  $\{\phi_n(r)\}$  satisface las condiciones de frontera como  $G(r,r';z)$ . El subíndice  $n$  puede representar más de un índice que especifica cada eigenfunción y su correspondiente eigenvalor. El sistema  $\{\phi_n(r)\}$  puede ser considerado como ortonormal sin pérdida de generalidad, es decir,

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

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

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

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

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

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

de las ecuaciones anteriores podemos obtener:

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

de forma explícita esta ecuación se escribe:

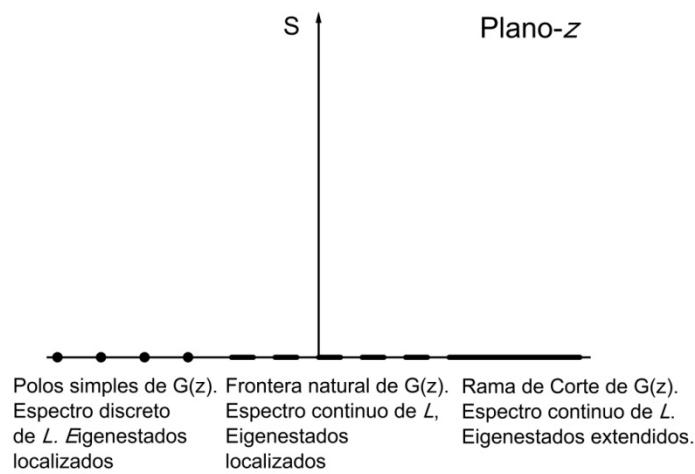
$$G(z) = \sum_n' \frac{|\phi_n\rangle \langle \phi_n|}{z - \lambda_n} + \int dc \frac{|\phi_c\rangle \langle \phi_c|}{z - \lambda_c}. \quad (2.9)$$

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

Si  $z$  coincide con alguno de los eigenvalores discretos de  $L$  ( $z = \lambda$ ),  $G$  no existe, como se puede observar en la expresión (2.8),  $G(z)$  tiene un polo

simple en la posición de los eigenvalores discretos. Si  $z$  pertenece al espectro continuo de  $L$ , entonces  $G$  usualmente existe, pero no está unívocamente definido por que uno puede añadir a cualquier  $G$  particular, la solución general de la ecuación homogénea correspondiente a (2.3).

Dos expresiones particulares,  $G^+$  y  $G^-$ , son usualmente empleadas en el caso donde el espectro continuo de  $L$  corresponde a una rama de corte. Para sistemas desordenados infinitos, parte del espectro continuo puede dar origen a la denominada *frontera natural*. El comportamiento analítico de  $G(z)$  esta resumido en la figura 2.1.



**Figura 2.1** Comportamiento analítico de  $G(z)$ .

Debido a que  $L$  es hermitiano, todos los eigenvalores son reales; por lo tanto las singularidades de  $G(z)$  están en el eje  $z$  real. Así entonces, para las ramas de corte de  $G(z)$  (las cuales corresponden a un espectro continuo asociado con eigenestados extendidos) podemos definir los límites laterales como siguen:

$$G^+(r, r'; \lambda) \equiv \lim_{s \rightarrow 0^+} G(r, r'; \lambda + is),$$

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

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

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

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

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

o en la representación  $r, r'$

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

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

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

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

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

donde

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

por lo tanto

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

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

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

siendo

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

y en una dimensión

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

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

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

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

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

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

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

donde

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

Nótese que el denominador dentro del integrando tiene dos raíces:

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

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

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

Para  $z$  que coincide con el espectro:

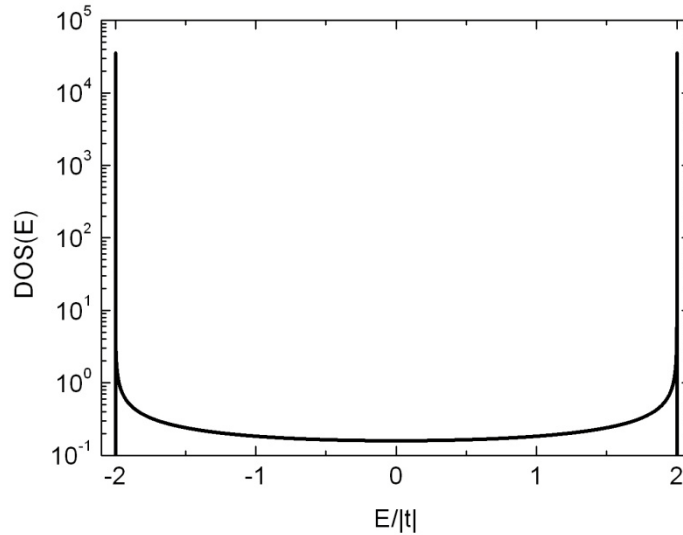
$$G^{\pm}(\ell, m; z) = \frac{\mp i}{\sqrt{B^2 - (E - \varepsilon_0)^2}} \left( x \pm i\sqrt{1-x^2} \right)^{|\ell-m|}, \quad (2.27)$$

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

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

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

La figura 2.2 presenta la densidad de estados versus la energía de Fermi para una cadena periódica infinita.



**Figura 2.2** Densidad de estados de una cadena unidimensional periódica con auto-energías nulas e integrales de salto  $t$ .

Nótese que las singularidades de Van Hove se encuentran en los bordes de las bandas.

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



## 2.5 Método de Convolución

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

$$\begin{aligned}
 \hat{H} &= \sum_{i,j,k} \varepsilon_0 |i, j, k\rangle \langle i, j, k| + \sum_{i,j,k} V_{(i-1,j,k),(i,j,k)} |i-1, j, k\rangle \langle i, j, k| + \\
 &\quad \sum_{i,j,k} V_{(i,j-1,k),(i,j,k)} |i, j-1, k\rangle \langle i, j, k| + \sum_{i,j,k} V_{(i,j,k-1),(i,j,k)} |i, j, k-1\rangle \langle i, j, k| + h.c. \\
 &= \sum_{i,j} [\varepsilon_0 |i\rangle \langle i| |j\rangle \langle j| |k\rangle \langle k| + V_{(i-1,j,k),(i,j,k)} |i-1\rangle \langle i| |j\rangle \langle j| |k\rangle \langle k| + \\
 &\quad V_{(i,j-1,k),(i,j,k)} |i\rangle \langle i| |j-1\rangle \langle j| |k\rangle \langle k| + V_{(i,j,k-1),(i,j,k)} |i\rangle \langle i| |j\rangle \langle j| |k-1\rangle \langle k|] + h.c. \\
 &= \left\{ \sum_i \frac{\varepsilon_0}{3} |i\rangle \langle i| + V_{i-1,i} |i-1\rangle \langle i| + V_{i+1,i} |i+1\rangle \langle i| \right\} \left\{ \sum_j |j\rangle \langle j| \right\} \left\{ \sum_k |k\rangle \langle k| \right\} \\
 &\quad + \left\{ \sum_i |i\rangle \langle i| \right\} \left\{ \sum_j V_{j-1,j} |j-1\rangle \langle j| + V_{j+1,j} |j+1\rangle \langle j| + \frac{\varepsilon_0}{3} |j\rangle \langle j| \right\} \left\{ \sum_k |k\rangle \langle k| \right\} \\
 &\quad + \left\{ \sum_i |i\rangle \langle i| \right\} \left\{ \sum_j |j\rangle \langle j| \right\} \left\{ \sum_k V_{k-1,k} |k-1\rangle \langle k| + V_{k+1,k} |k+1\rangle \langle k| + \frac{\varepsilon_0}{3} |k\rangle \langle k| \right\} \\
 &= \hat{H}_x \otimes I_y \otimes I_z + I_x \otimes \hat{H}_y \otimes I_z + I_x \otimes I_y \otimes \hat{H}_z \\
 &= \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z \\
 \therefore \hat{H} &= H_x + H_y + H_z \tag{2.29}
 \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
 \hat{H}\Psi &= (\hat{H}_x \otimes I_y \otimes I_z + I_x \otimes \hat{H}_y \otimes I_z + I_x \otimes I_y \otimes \hat{H}_z)\Psi \\
 &= (E_a \otimes I_y \otimes I_z + I_x \otimes E_b \otimes I_z + I_x \otimes I_y \otimes E_c)\Psi \tag{2.30}
 \end{aligned}$$

Como ejemplo vamos a desarrollar la función de Green asociada al hamiltoniano en dos dimensiones, la cual está dada como:

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

y aplicando una propiedad de la función delta de Dirac:

$$f(y) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(y-x)dx, \quad (2.32)$$

se tiene que:

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

recordando:

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

y separamos las sumas:

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

se obtiene:

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

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

$$\Rightarrow DOS^{2D}(z) = \frac{1}{\pi^2} \lim_{\eta' \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im}[G_{rr}(z-y)] \text{Im}G_{jj}^{\perp}(y+i\eta') dy.$$

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

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

$$G_{(r,j)(k,l)}(z) = \sum_B \int_{-\infty}^{\infty} G_{rk}(z-y) \langle j|B \rangle \langle B|l \rangle \delta(y-E_B) dy \quad (2.38)$$

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

Recordando nuevamente las propiedades de la función delta de Dirac

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

Para obtener la densidad de estados tenemos

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

$$\Rightarrow DOS^{2D}(z) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} [G_{(r,j)(k,l)}(z)]$$

$$= -\frac{1}{\pi} \frac{1}{\Omega} \sum_B \text{Im} [G_{rr}(z-E_B)] \quad (2.41)$$

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

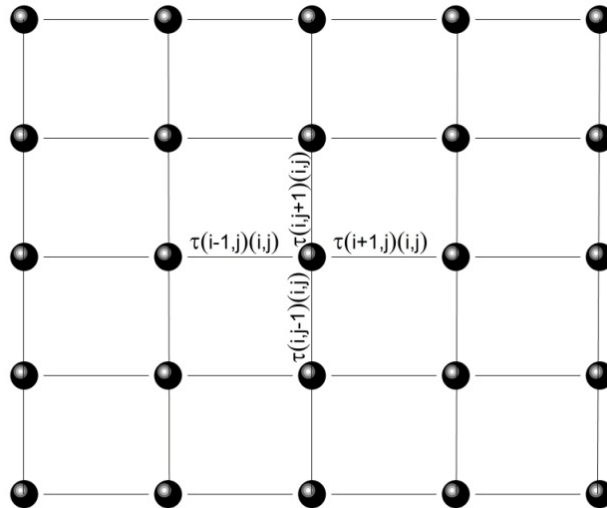
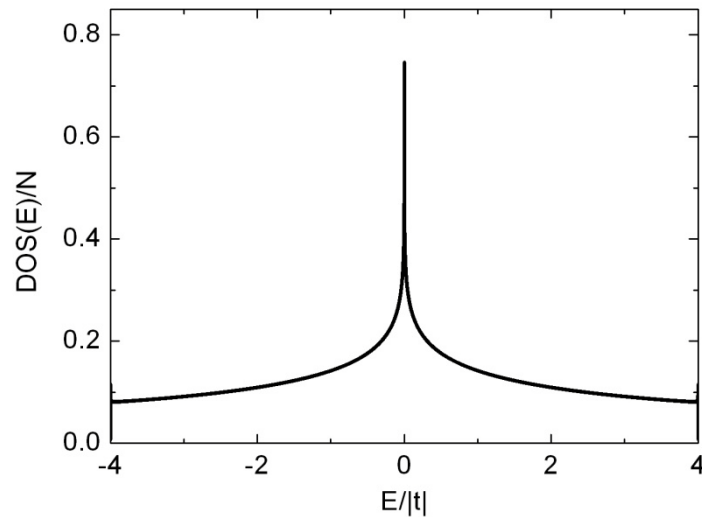


Figura 2.3 Integrales de salto alrededor del átomo  $(i,j)$

La figura 2.4 muestra la densidad de estados (DOS) para una red periódica infinita con auto-energía nula y integral de salto  $t$ . observe que solo tiene una singularidad de van Hove la cual está en el centro de la banda, en comparación con las dos singularidades que se tienen para la cadena unidimensional de la fig. 2.2, como se encuentra reportado en la literatura.



**Figura 2.4** DOS versus energía de Fermi para una red cuadrada periódica.

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

## 2.6 Modelo de Drude

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

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

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

## 2.7 Conductividad Eléctrica *dc* para metales

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

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

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

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

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

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

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

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

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

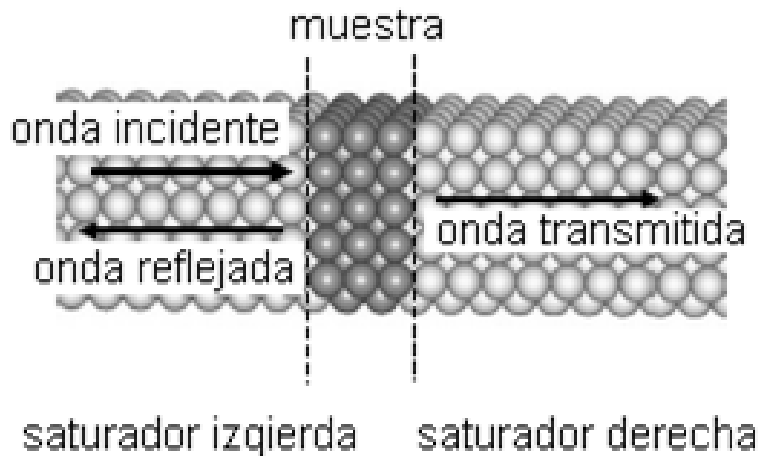
$$\sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m}. \quad (2.46)$$

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

## 2.8 Conductancia de Landauer

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

La formula de Landauer ha sido usada para calcular la conductancia de sistemas mesoscópicos [Landauer, 1992]. La idea esencial es considerar una región molecular conectada a dos saturadores balísticos, con potenciales químicos  $\mu_L$  y  $\mu_R$  representados en la figura 2.5.



**Figura 2.5** Región molecular conectado a dos saturadores, mostrando la onda incidente, reflejada y transmitida.

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

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

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

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

siendo  $M$  el número de canales transversales y  $T$  es la probabilidad promedio sobre los  $M$  canales de que un electrón inyectado por un reservorio sea transmitido al otro. La ecuación (2.48) puede deducirse partiendo de un conductor ideal, es decir, sin colisiones ( $\tau \rightarrow \infty$ ). Si

adicionalmente el sistema es homogéneo la ecuación conduce a que la función de distribución es una constante que puede normalizarse como uno. Para un solo canal de conducción la corriente puede calcularse como:

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

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

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

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

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

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

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

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

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



proporcional a la transmitancia del sistema, la cual discutiremos a continuación.

## 2.9 Transmitancia

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

de la ecuación (2.57) se sigue que:

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

Por lo que encontramos [Suto, 1994]

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

y

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

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

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

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

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

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

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

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

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

## 2.10 Localización

El fenómeno de la localización, es en primera instancia, una propiedad de los estados en sistemas desordenados en mecánica cuántica, tiene su más notable manifestación experimental en las propiedades de transporte de los sistemas en materia condensada.

En una dimensión las funciones de onda de los sistemas desordenados cuánticos a la temperatura del cero absoluto ( $T=0K$ ) son exponencialmente localizadas, esto significa que, en promedio, las amplitudes de sus funciones de onda decaen exponencialmente en el espacio. Esto es esperado si el desorden es suficientemente fuerte o en regiones de la banda en donde la densidad de estados es suficientemente pequeña. Por otro lado, para desordenes débiles o regiones con suficiente densidad de estados, las funciones de onda pueden extenderse a través de todo el sistema con sus fases y amplitudes variando aleatoriamente en el espacio. Físicamente el desorden lo podemos relacionar con la presencia de impurezas, vacaciones y dislocaciones. Otra posibilidad es distribuir átomos o moléculas de manera aleatoria. Por tanto, un fuerte desorden puede ser logrado mediante el uso de una gran concentración de impurezas.

Las partículas que ocupan estados exponencialmente localizados están restringidas a regiones finitas del espacio. Ellas no pueden contribuir al transporte en  $T=0K$ , en cambio, las partículas en estados extendidos pueden contribuir al transporte. Por tanto, si hay solo estados localizados cerca de la energía de Fermi el sistema será un aislante. Cuando el nivel de Fermi cae en la región de las funciones de onda extendidas el sistema será

un metal. En la actualidad, el estudio del fenómeno de localización constituye una de las áreas de investigación más importantes de la física del estado sólido. Esto se debe al descubrimiento del papel fundamental que desempeñan las correlaciones espaciales del desorden en la determinación de la estructura de los estados electrónicos. Los primeros estudios donde se analizó la localización fueron hechos por P. W. Anderson, en 1958 mostró que los electrones en medios desordenados, bajo ciertas condiciones, pueden quedar confinados en regiones limitadas del espacio [Anderson, 1958]. Posteriormente en 1961 Mott y Twose publicaron un extenso trabajo en donde conjeturaron que, en una dimensión espacial (1D), todos los estados electrónicos son localizados sea cual sea el tipo y grado de desorden [Mott, 1961], a diferencia de lo que ocurre en los modelos tridimensionales (3D) donde los electrones resultan completamente localizados sólo si el grado de desorden es suficientemente grande.

Con estos resultados concluyeron que en las cadenas 1D no existen estados extendidos y, consecuentemente, no puede producirse una transición metal-aislante análoga a la que ocurre en muestras 3D cuando la intensidad del desorden rebasa un umbral crítico. Sin embargo, hoy en día se sabe que estados electrónicos extendidos pueden existir aun en sistemas 1D con la condición que el desorden presente correlaciones espaciales específicas. Los primeros estudios que predijeron teóricamente la existencia de estados extendidos en modelos 1D fueron alrededor de los años 90. En estos trabajos se demostró que un conjunto discreto de estados extendidos puede producirse en modelos 1D cuando el desorden, en lugar de ser totalmente aleatorio, presenta particulares correlaciones de corto alcance [Flores, 1989, Phillips, 1990]. Recientemente se observó la manifestación experimental de estos estados extendidos en superredes de semiconductores [Bellani, 1999]. Actualmente, la investigación ha ido enfocándose en los modelos desordenados 1D cuyo desorden presente correlaciones de largo alcance, ya que se ha establecido que correlaciones específicas de este tipo pueden producir estados electrónicos (parcialmente) extendidos en un intervalo continuo de energías, dotando así a los modelos 1D de propiedades de transporte mucho más complejas de lo esperado [Izrailev, 1999].

Una forma de estudiar la localización de electrones en sistemas desordenados es mediante el coeficiente de Lyapunov ( $\gamma$ ), los cuales fueron introducidos en 1960 por Furstenberg y Kesten [Ishii, 1973]. Este coeficiente se obtiene mediante la siguiente expresión [Sutto, 1994]:

$$\gamma \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\ln \|\mathbf{T}\|}{N}. \quad (2.65)$$

En sistemas desordenados unidimensionales,  $c_i$  disminuye exponencialmente a grandes distancias desde su máximo ubicado, por ejemplo, en  $i=1$  [Ishii, 1973], es decir,

$$\|C_N\| \approx \|C_1\| \exp(-N/\xi_0), \quad (2.66)$$

donde  $\xi_0$  es la longitud de localización de la función de onda. Por otro lado, como  $\|C_1\| \approx 1$ , entonces

$$\|C_N\| = \|TC_1\| \approx \|T\|. \quad (2.68)$$

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

$$\xi_0 \approx |\gamma^{-1}|. \quad (2.69)$$

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

# Capítulo 3 Renormalización aplicada al estudio del transporte electrónico

## 3.1 Introducción

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

En el presente capítulo se muestran los resultados obtenidos para la densidad de estados y el transporte electrónico en redes de Fibonacci generalizado.

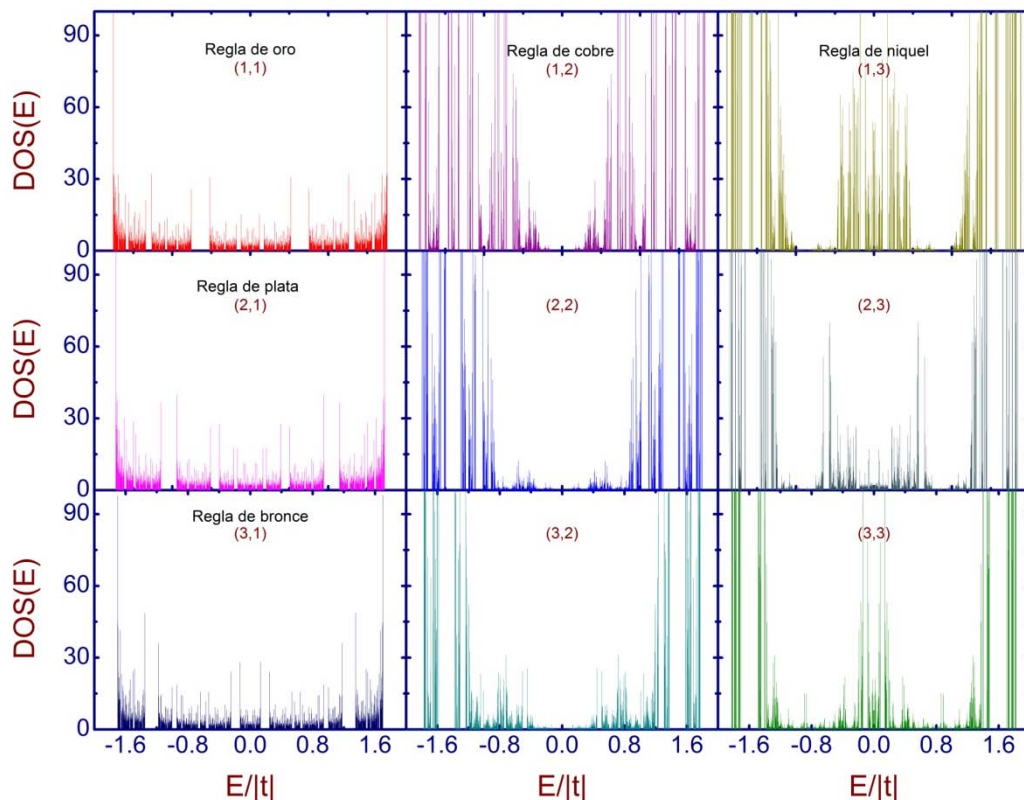
## 3.2 Densidad de estados

En esta sección analizaremos los resultados obtenidos por medio del método de renormalización para la densidad de estados (DOS) de las cadenas de Fibonacci generalizadas, todo dentro del formalismo de amarre fuerte. Este método se encuentra en el apéndice 1, un caso particular de este método con  $l=1$  y  $m=1$  se estudió en la referencia [Sánchez, 2004]. Las cadenas consideradas son las mostradas en la tabla I.4, los parámetros empleados en todas las cadenas fueron: integrales de salto  $t_A=0.8t$  y  $t_B=t$ , las auto-energías nulas y la parte imaginaria en la energía es de  $10^{-5}t$ . Además, como pudimos observar en la tabla I.4 cada sistema crece de forma diferente, por lo que empleamos distintas generaciones para cada sistema y poder así compararlos. El número de átomos ( $N$ ) como el de la generación ( $n$ ) se muestra en la Tabla III.1.

**Tabla III.1. Tamaño de los sistemas de FG analizados**

$N$	$m = 1$	$m = 2$	$m = 3$
$l = 1$	433494438 ( $n = 42$ )	357913942 ( $n = 29$ )	315732482 ( $n = 24$ )
$l = 2$	318281040 ( $n = 23$ )	268377089 ( $n = 20$ )	581130734 ( $n = 19$ )
$l = 3$	239244623 ( $n = 17$ )	253841390 ( $n = 16$ )	187869862 ( $n = 15$ )

La figura 3.1 nos muestra los espectros de DOS versus la energía de Fermi para los sistemas mencionados anteriormente. A todos los sistemas le conectamos dos saturadores periódicos semi-infinitos a los extremos, con integrales de salto  $t$  y autoenergías nulas. Nótese la similitud en los espectros de cada columna y como la altura del espectro de las cadenas cuasiperiódicas (que cumple la condición de Pisot) es menor que en cualquiera de los demás casos.



**Figura 3.1** Espectro de la densidad de estados como función de la energía de Fermi ( $E$ ) para los nueve sistemas de Fibonacci generalizado. Con integrales de salto  $t_A=0.8t$  y  $t_B=t$ , las energías de sitio son cero. Todos los sistemas están conectados a dos semi-infinitos saturadores. La generación en cada cadena es: ( $l=1, m=1$ )  $n=42$ , ( $2,1$ )  $n=23$ , ( $3,1$ )  $n=17$ , ( $1,2$ )  $n=29$ , ( $2,2$ )  $n=20$ , ( $3,2$ )  $n=16$ , ( $1,3$ )  $n=24$ , ( $2,3$ )  $n=19$  y ( $3,3$ )  $n=15$ .

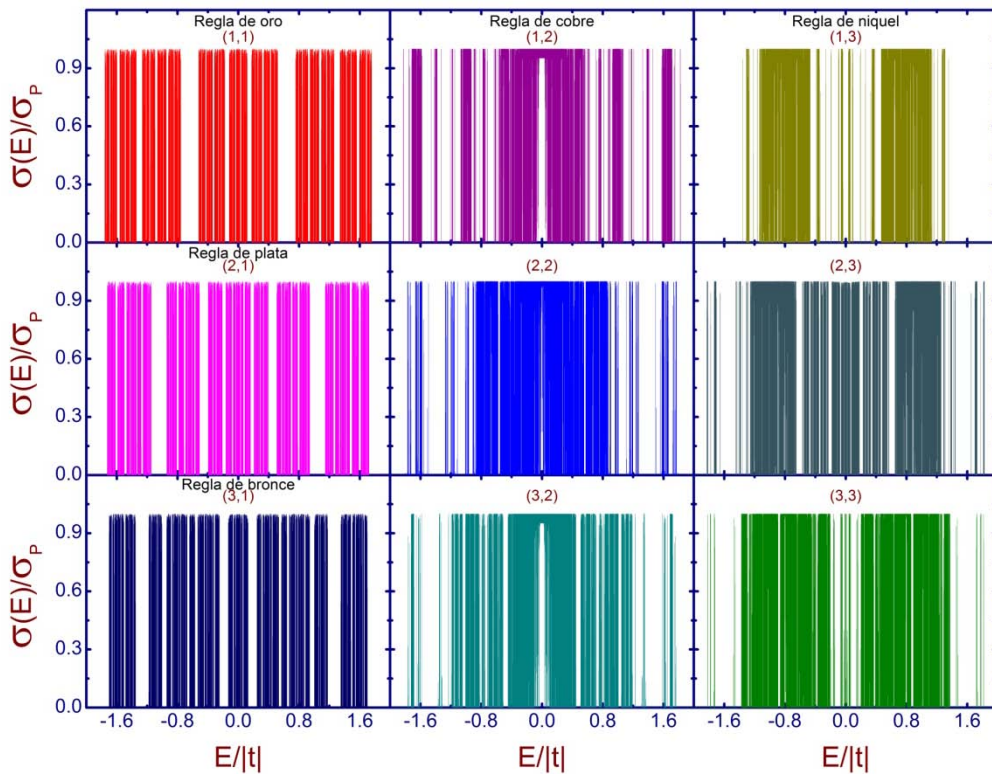
Más aún, el espectro de DOS para la cadena que sigue un ordenamiento de sus átomos como la secuencia de la regla de oro es igual al mostrado en la referencia [Yuan, 2000] y el espectro de DOS para la cadena que el ordenamiento de sus átomos sigue la secuencia de la regla de plata es igual al mostrado en la referencia [Yuan, 2000].

Al estar tratando sistemas aperiódicos el espectro de la DOS no es continuo como para el caso de sistemas periódicos. Los nueve sistemas presentan una combinación de gaps y estados continuos a lo largo de toda la banda de energía. En la siguiente sección vamos a analizar el transporte electrónico  $dc$  para estas nueve cadenas.

### 3.3 Conductividad $dc$

En la figura 3.2 se presenta el espectro de conductividad eléctrica  $dc$  ( $\sigma$ ) versus la energía de Fermi ( $E$ ), tomando los mismos parámetros empleados en la Figura 3.1. La conductividad eléctrica  $dc$  ( $\sigma_p$ ) del sistema periódico está dada por

$$\sigma_p = \frac{e^2 a}{\pi \hbar} (N - 1)$$



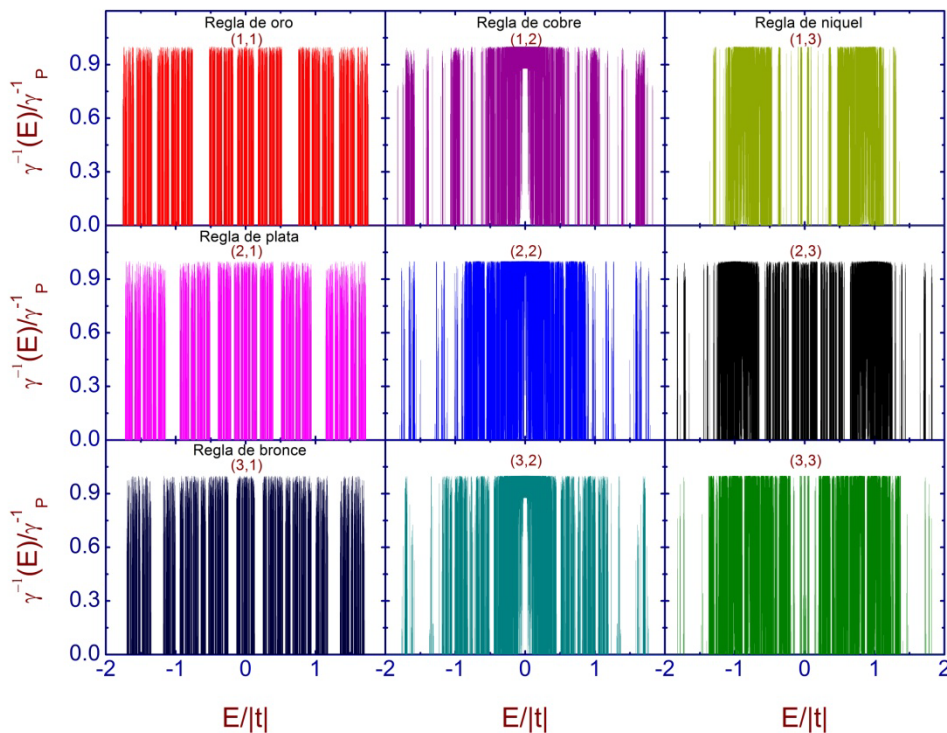
**Figura 3.2** Espectro de la conductividad eléctrica ( $\sigma$ ) como función de la energía de Fermi ( $E$ ) para los mismos sistemas de la figura 2



Como podemos apreciar, todos los espectros de conductividad eléctrica  $dc$  para los nueve distintos sistemas presentan regiones de alta conductividad, la mayoría de ellos la presentan en la parte central de la banda de energía. Así mismo, estas regiones concuerdan con las secciones en donde el espectro de la densidad de estados casi no varía, es decir, como si fuera constante. Pero al amplificar esta región podemos ver diferentes estructuras. Además, en estos espectros se sigue conservando la similitud por columnas presentada en los espectros de la DOS. Para ver una diferencia un poco más puntual realizamos una amplificación de los espectros de DOS y de conductividad  $dc$ , con el fin de obtener cuáles de ellos presentan autosimilaridad.

### 3.4 Coeficiente de Lyapunov

Como mostramos en el capítulo 2 el coeficiente de Lyapunov es una herramienta para cuantificar la localización electrónica de estados en sistemas aperiódicos. La figura 3.3 nos muestra el coeficiente de Lyapunov ( $\gamma$ ) versus la energía de Fermi para los nueve sistemas de Fibonacci generalizado descritos en la fig. 3.1.

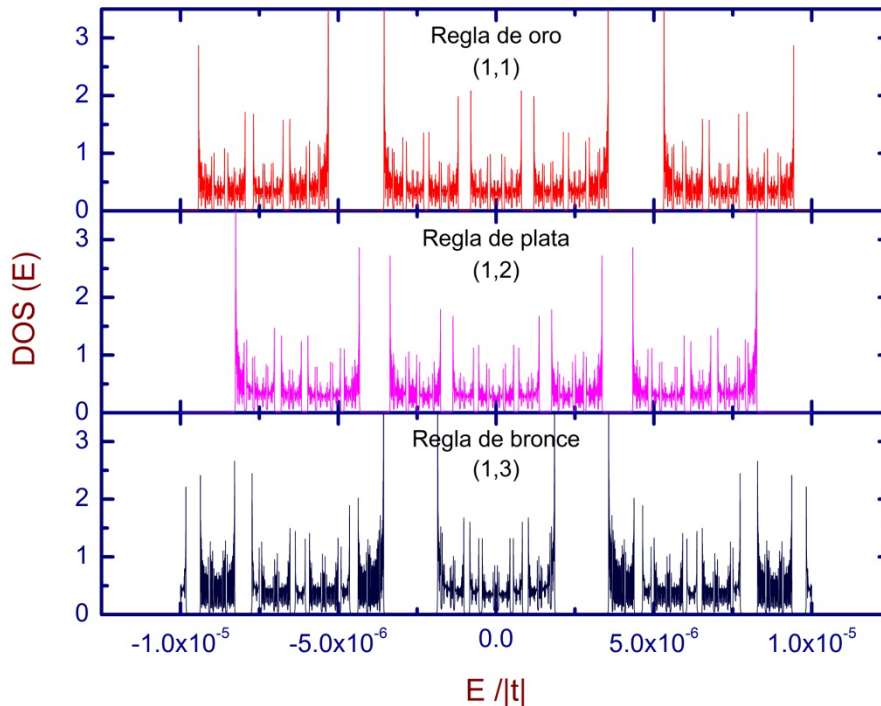


**Figura 3.3** Coeficiente de Lyapunov ( $\gamma$ ) en función de la energía ( $E$ ) para los nueve sistemas de Fibonacci generalizado. Los parámetros son los mismos que la fig.3.1.

Obsérvese que los nueve espectros de Lyapunov son muy similares a los espectros de conductividad eléctrica dc de la figura 3.2, lo cual es de esperarse [Ishii, 1973].

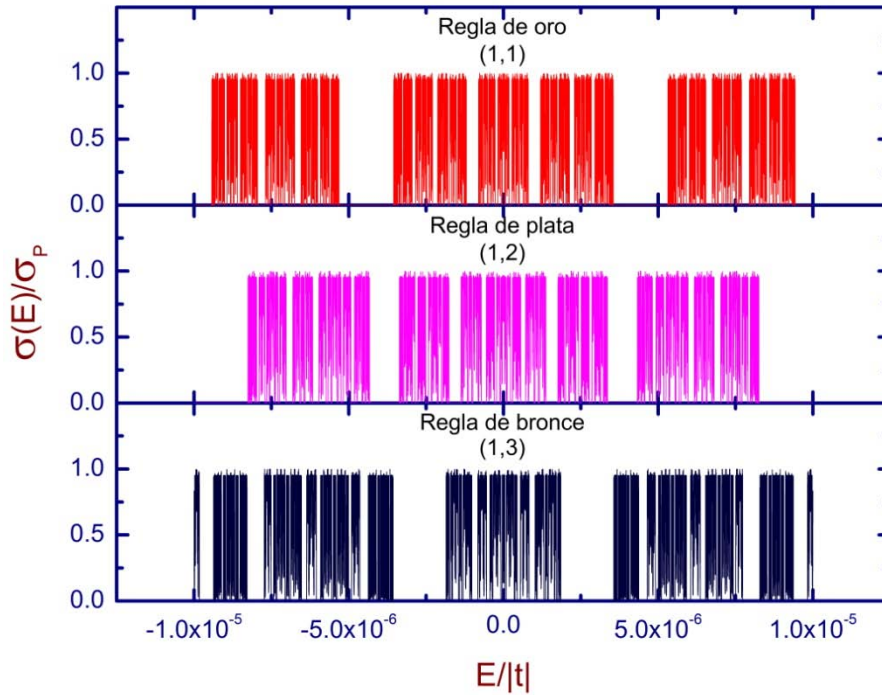
### 3.5 Autosimilaridad

En la figura 3.4 mostramos una amplificación de  $10^{-5}t$  del espectro de la DOS alrededor de la energía cero para la primera columna de la figura 3.1, la cual corresponde a los sistemas cuasiperiódicos. Como podemos observar los espectros presentan una gran similitud a sus correspondientes de la fig. 3.1, lo que comprueba que los sistemas cuasiperiódicos son autosimilares.



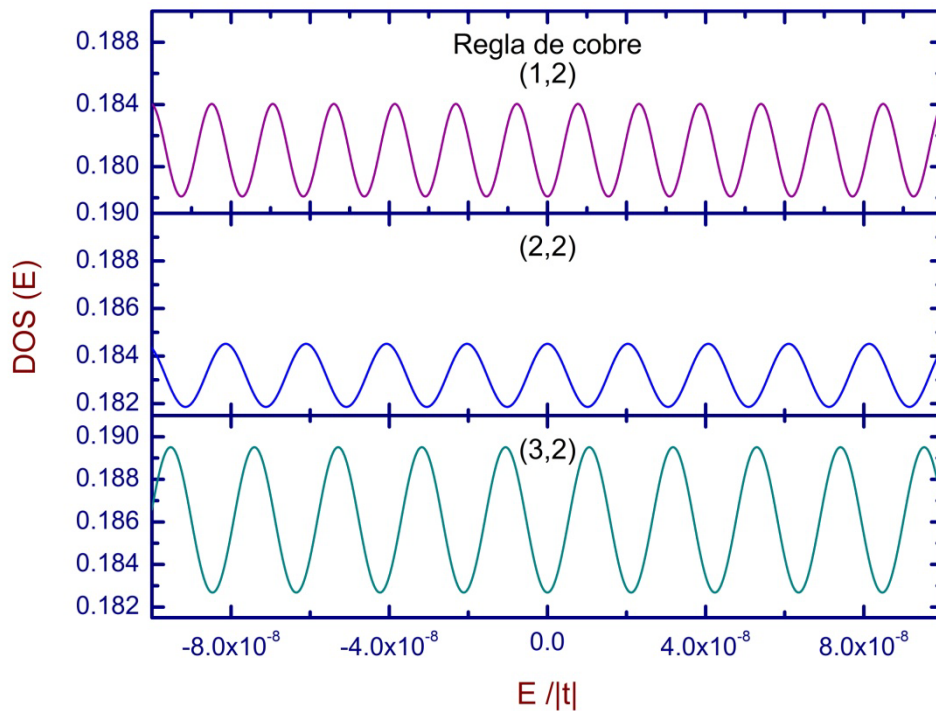
**Figura 3.4** Amplificación del espectro de DOS versus la energía para los tres sistemas cuasiperiódicos, es decir,  $l=1, 2, 3$  y  $m=1$ . Sus parámetros son los mismos que la figura 3.1, excepto que la parte imaginaria es  $10^{-9}t$ .

Realizamos una amplificación del espectro de conductividad eléctrica dc en la misma región empleada en la figura anterior. Observamos que también presenta la autosimilaridad.



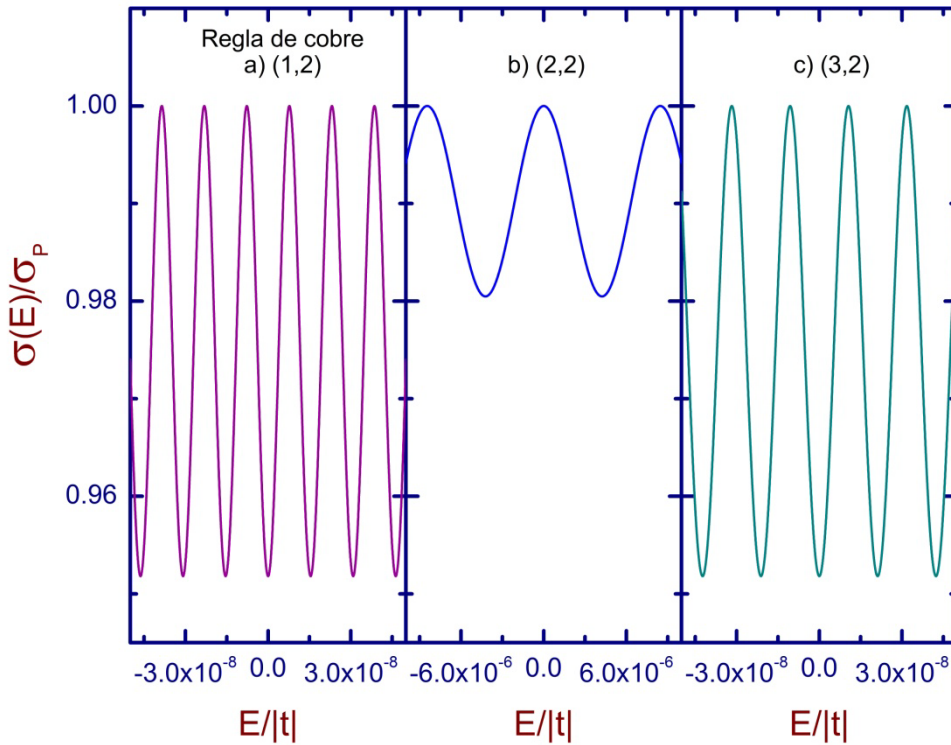
**Figura 3.5** Amplificación del espectro de  $\sigma$  versus  $E$ , con los mismos parámetros que la figura 3.2.

En la figura 3.6 presentamos la amplificación del espectro de DOS alrededor de energía cero para la segunda columna de la figura 3.1. Nótese que el espectro en los tres casos es oscilante.



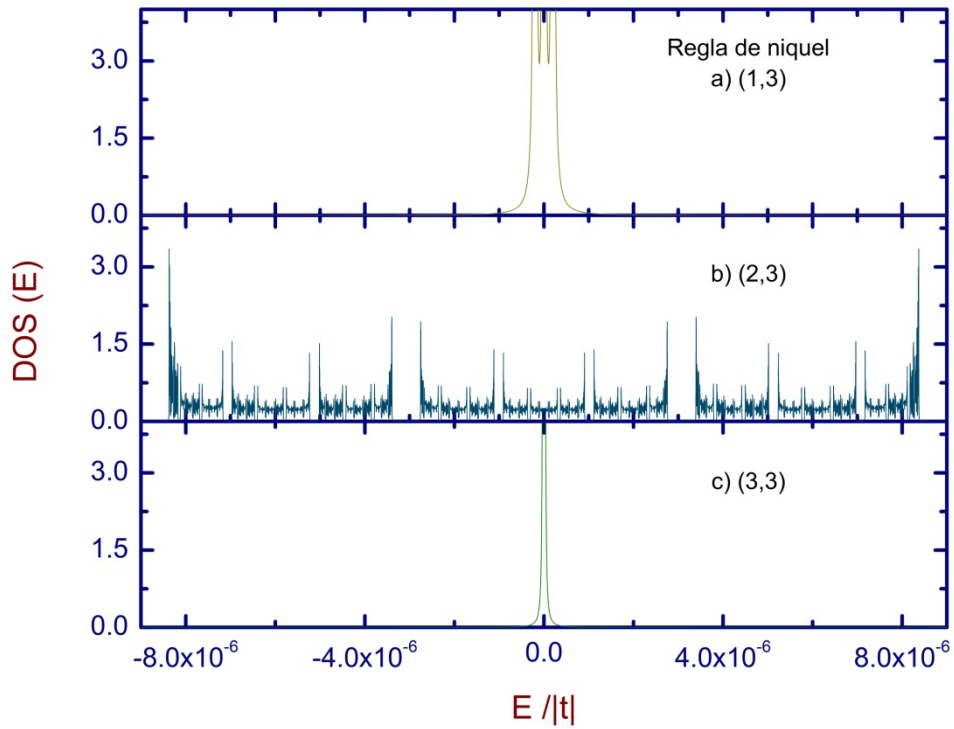
**Figura 3.6** Amplificación del espectro de DOS alrededor de energía cero para la segunda columna de la figura 3.1

La figura 3.7 corresponde a las ampliaciones del espectro de la conductividad de la segunda columna de la figura 3.2. Aquí como en densidad de estados también oscila su espectro.



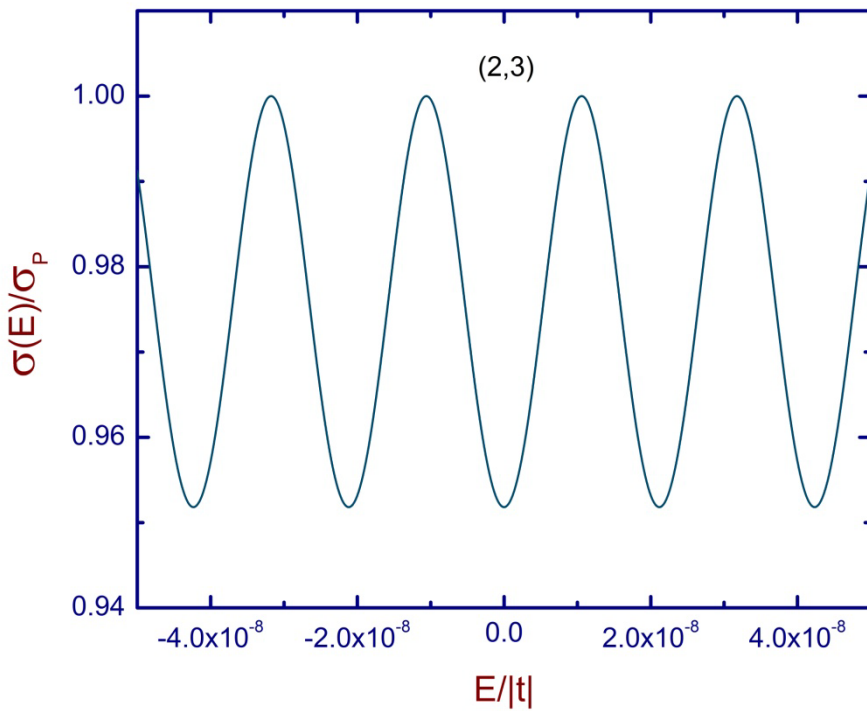
**Figura 3.7** Amplificación de la conductividad para los sistemas  $l=1, m=2, l=2, m=2, l=3$  y  $m=2$

Por último, presentamos en a figura 3.8 y 3.9 las ampliaciones de los espectros de DOS y  $\sigma$  respectivamente alrededor de energía cero para la tercera columna de figura 3.1. Obsérvese que en la fig. 3.8 a) y c) casi no tiene estados en el espectro en comparación con los otros espectros de DOS y sus espectros de conductividad en esta generación son casi nulo, por lo cual no los presentamos. Una demostración analítica de lo anterior es presentada en la siguiente sección. La figura 3.8 b) presenta el espectro amplificado de DOS alrededor de la energía igual a cero. Note que sistema no tiene autosimilaridad porque no se parece al espectro completo de la fig. 3.1.



**Figura 3.8** Amplificación del espectro de la DOS para los sistemas  $l=1, m=3$ ,  $l=2, m=3$ ,  $l=3$  y  $m=3$

En la figura 3.9 mostramos la amplificación del espectro de  $\sigma$  alrededor de energía igual a cero para el sistema,  $l=2, m=3$ , este presenta una oscilación parecida a los espectros mostrados en la fig. 3.7.



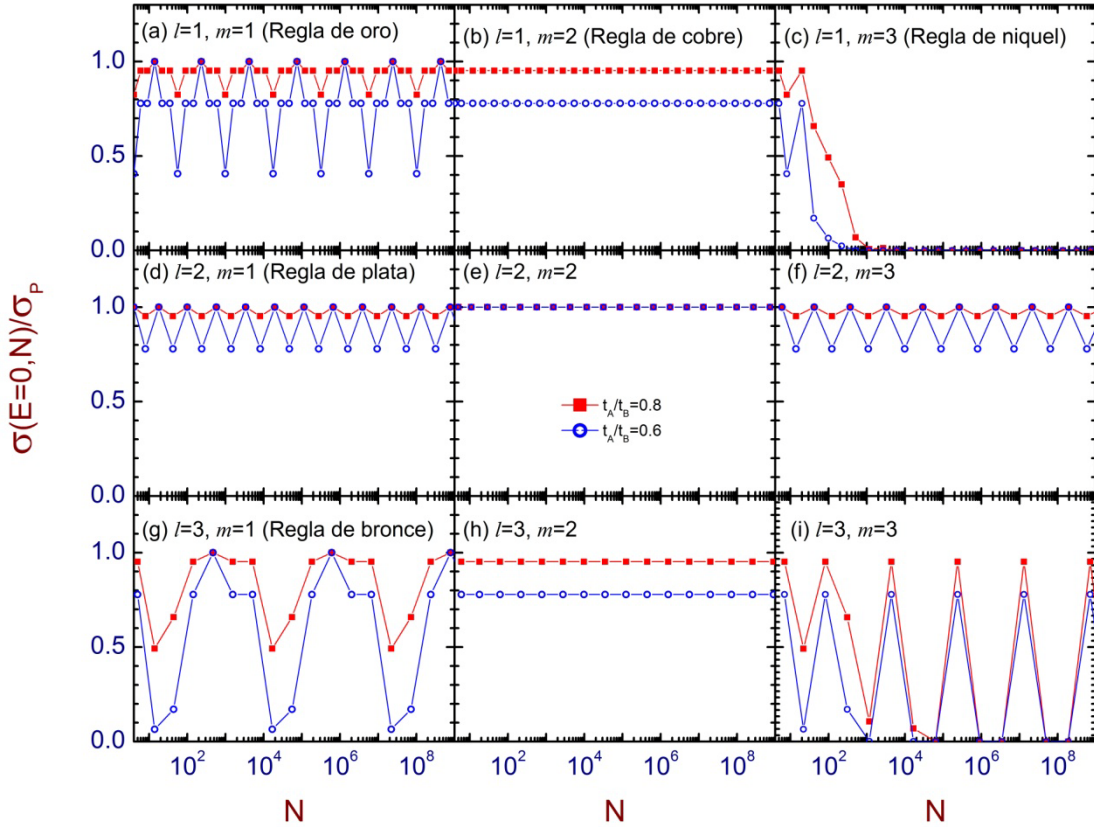
**Figura 3.9** Amplificación del espectro de la conductividad para el sistema,  $l=2, m=3$

Como podemos notar las cadenas de Fibonacci generalizado que cumplen tanto las condiciones de Pisot y la de la matriz unimodular, presentan espectros de  $\sigma$  autosimilares. En cambio observamos una tendencia a tener espectros de  $\sigma$  oscilantes en los sistemas que no cumplen las condiciones anteriores, es decir cadenas aperiódicas.

Al analizar los espectros de conductividad eléctrica  $dc$  en las cadenas de Fibonacci generalizado observamos estados de alta conductividad. Por ello en la siguiente sección presentamos un análisis del coeficiente de transmisión en  $E=0$  con respecto a la longitud del sistema.

### 3.6 Estados transparentes

Al analizar los espectros de conductividad eléctrica  $dc$  para diferentes generaciones de cadenas de Fibonacci generalizado encontramos que algunas secuencias presentan un estado transparente –coeficiente de transmisión uno– en energía igual a cero. La Figura 3.10 muestra el comportamiento de  $\sigma(E)/\sigma_P$  en energía cero versus el número de átomos en el sistema para las nueve cadenas de Fibonacci generalizado que se encuentran en la tabla III.1. Expondremos dos de los casos más representativos para ver cómo la aperiodicidad afecta al estado transparente. La aperiodicidad se modifica al ir variando las energías de salto. En esta figura los parámetros que se utilizaron fueron: dos integrales de salto,  $t_A=0.8t$  (cuadrados rojos llenos) y  $t_A=0.6t$  (círculos azules), con autoenergías de sitio nulas. Note que para las secuencias oro y bronce el estado transparente aparece cada seis generaciones, en cambio, para plata y la secuencia  $l=2$  y  $m=3$  cada dos generaciones. Además, la cadena con ordenamiento  $l=2$  y  $m=2$  en todas las generaciones presenta conducción balística. También, la figura muestra el comportamiento de las otras secuencias en la misma energía, observando que ninguna de ellas presenta estado transparente en esta energía.



**Figura 3.10** La conductividad eléctrica ( $\sigma$ ) en energía igual a cero en función del número de átomos ( $N$ ) en el sistema para dos integrales de salto  $t_A=0.8t$  (cuadrados rojos llenos) y  $t_A=0.6t$  (círculos azules).

El análisis anterior se llevo acabo de forma numérica y como la conductividad eléctrica de Landauer (ec. 2.48) en una dimensión es proporcional a la transmitancia nos dimos a la tarea de obtener expresiones analíticas para la transmitancia en energía igual a cero para los nueve sistemas de Fibonacci generalizado estudiados.

La ecuación (ec. 2.63) de la transmitancia evaluada en energía cero está dada por

$$T(E=0) = \frac{4}{[\tau_{21} - \tau_{12}]^2 + (\tau_{22} + \tau_{11})^2}, \quad (3.1)$$

donde  $\tau_{i,j}$  son los elementos de la matriz de transferencia descrita en el capítulo 2, con  $i=1,2, j=1,2$ . A continuación mostraremos las ecuaciones analíticas para los elementos de la matriz de transferencia, así como para el coeficiente de transmisión.

Primero analizamos un sistema con un ordenamiento atómico que sigue la regla de oro ( $l=1, m=1$ ), los elementos de la matriz de transferencia evaluados  $E=0$  se pueden escribir como:

$$\tau_{i,j} = kf(i+j) \left[ \left( \frac{1-(-1)^k}{2} \right) \theta(n) \gamma^{(1+\theta(n))\theta(i)} - f(k) \gamma^{\theta(i)} \right] - \left( 1 - \left\lceil \frac{k}{2} \right\rceil \right) (j-i) \theta(n) \gamma^{\theta(n)(j-i)}, \quad (3.2)$$

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

$$T = \frac{4}{\left[ f(k)(\gamma + \gamma^{-1})^2 + (1 - (-1)^k)(\gamma^{1+\theta(n)} + \gamma^{-(1+\theta(n))})^2 / 2 \right]}. \quad (3.3)$$

Observe que la transmitancia es igual a uno cuando  $k=1$ , es decir, hay un estado transparente en  $E=0$  en el problema de enlaces para las generaciones  $n=6b$ , siendo  $b=1, 2, \dots$ . En cambio para el problema mixto se encuentra un estado transparente para esta forma de ordenar los átomos donde la energía es diferente de cero [Sánchez, 2001].

Ahora considerando una cadena cuyas energías de salto siguen la regla de cobre ( $l=1, m=2$ ), encontramos que las entradas de la matriz de transferencia en  $E=0$  para toda generación se puede escribir como:

$$\tau_{i,j} = \begin{cases} (-1)^n \gamma^{3-2j} & \text{si } i=j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases}, \quad (3.4)$$

donde  $\gamma = t_A/t_B$ . En tanto que el coeficiente de transferencia para este sistemas es

$$T(E=0) = \frac{4}{\left[ \gamma + \gamma^{-1} \right]^2} \quad (3.5)$$

Como podemos observar la ec. 3.5 no presenta un estado transparente en  $E=0$ ; el valor de este coeficiente depende únicamente de la aperiodicidad del sistema, es decir, para diferentes  $\gamma$ , por lo cual obtendremos siempre un valor constante invariante al tamaño del sistema.



Por otra parte, para una cadena que sigue la regla de plata ( $l=2, m=1$ ) los elementos de la matriz de transferencia se pueden escribir mediante la siguiente expresión

$$\tau_{i,j} = \begin{cases} s\gamma^{(-1)^i p} & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases}, \text{ donde } p = \left[ \frac{(-1)^n - 1}{2} \right] \text{ y } s = 1 - 2 \left[ \frac{k}{2} \right], \quad (3.6)$$

siendo  $k = (n-2)$  con  $k \bmod(4) \in [0,3]$ , para toda  $n \geq 2$ . Entonces el coeficiente de transmisión en esta energía es:

$$T(0) = \frac{4}{[\gamma^p + \gamma^{-p}]^2}. \quad (3.7)$$

Hay que notar que el coeficiente de transmisión depende nuevamente del factor  $\gamma$  y además del coeficiente  $p$ , pero en este caso podemos obtener estados transparentes cuando  $p=0$ , es decir, para todas las generaciones pares.

En cambio, el sistema  $l=2, m=2$  encontramos que existe un estado transparente en  $E=0$  para todas las generaciones con excepción de  $n=3$ . Los elementos de matriz de transferencia para cualquier generación son una matriz antidiagonal

$$\tau_{i,j} = \begin{cases} (-1)^i & \text{si } i \neq j \\ 0 & \text{si } i = j \end{cases} \Rightarrow T(0)=1 \quad (3.8)$$

Al sustituir los elementos de la matriz de transferencia en la ec. 3.1 obtenemos que el coeficiente de transmisión es uno, no importando la generación en que nos encontremos, lo cual es consecuencia de que los elementos de la matriz de transferencia sean constantes unitarias.

Para los sistemas  $l=2, m=3$  encontramos que el estado transparente se presenta cada dos generaciones. Los elementos de la matriz de transferencia correspondientes a estos sistemas son

$$\tau_{i,j} = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j \\ -\gamma^{(-1)^{i-1}\Phi} & \text{si } i = j \end{cases} \text{ donde } \Phi = \frac{1 - (-1)^n}{2}. \quad (3.9)$$

Por tanto, su coeficiente de transmisión es  $T(0) = 4 / [\gamma^\Phi + \gamma^{-\Phi}]^2$ . Para obtener un estado transparente necesitamos que  $\Phi$  sea cero y esto ocurre cuando las generaciones son pares.

Al estudiar un sistema que sigue la regla de bronce ( $l=3, m=1$ ) encontramos que para  $E=0$  existe un estado transparente cada seis generaciones (6, 12, 18,...). Las entradas de la matriz de transferencia son

$$\begin{aligned} \tau_{i,j}(n) = k \left( \frac{1 + (-1)^{i+j}}{2} \right) & \left[ \left( \frac{1 - (-1)^k}{2} \right) \gamma^b + \left( \frac{1 + (-1)^k}{4} \right) (-1)^n \gamma^{-(1)^d} \right] \\ & + |j - i| \left[ \left[ \frac{1 - k}{2} \right] (-1)^a \gamma^{(-1)^a} \right], \end{aligned} \quad (3.10)$$

$$\text{donde } d = 3 \left( \frac{1 + (-1)^n}{2} \right) + \left( \frac{1 - (-1)^n}{2} \right), \quad a = n + 1 - j$$

$$\text{y } b = -4 \left( \frac{(-1)^i - (-1)^{n+i}}{2} \right).$$

Para esta cadena definimos  $k = (n - 2) \bmod 3 \in [0, 2]$ . Cuyo coeficiente de transmisión esta dado como:

$$T(0) = \frac{4}{\left( \left[ \frac{1 - k}{2} \right] \right)^2 (\gamma + \gamma^{-1})^2 + \frac{k^2}{4} \left[ (1 - (-1)^k) (\gamma^{-2(1-(-1)^n)} + \gamma^{2(1-(-1)^n)}) + \left( \frac{1 + (-1)^k}{2} \right) (\gamma^d + \gamma^{-d}) \right]^2} \quad (3.11)$$

Debemos notar que el coeficiente de transmisión depende de  $\gamma, k, n$  y  $d$ . Entonces para que se presente un estado transparente  $n$  debe de ser múltiplo de 6, lo cual implica que  $k=1$  y  $d=3$ . Por lo cual solo se presenta el estado transparente cada 6 generaciones.

Continuamos con el ordenamiento de átomos que sigue la secuencia de la regla de níquel ( $l=1, m=3$ ). La matriz de transferencia es:

$$\tau_{i,j} = \left[ \frac{\theta}{2} \left( \frac{1 + (-1)^{i-j}}{2} \right) \left[ (-1)^{n+\theta} \left( \left[ \frac{k}{2} \right] \gamma^{f(i)\alpha(n)\beta(n)} - \left( \left[ \frac{k}{2} \right] - 1 \right) \gamma^{f(i)\alpha(n)[\beta(n-1)+\alpha(n)]} \right) \right] + \right. \\ \left. \left( \left[ \frac{\theta}{2} \right] - 1 \right) (j-i) \left[ \left[ \frac{k}{2} \right] \gamma^{(j-i)\alpha(n)\beta(n)} - \left( \left[ \frac{k}{2} \right] - 1 \right) \gamma^{(j-i)\alpha(n)[\beta(n-1)+\alpha(n)]} \right] \right], \quad (3.12)$$

donde  $k = n - 1 \bmod(3) \in [0, 2]$ ,  $\theta = n - 2 \bmod(3) \in [0, 2]$ ,  $f(i) = (-1)^{i-1}$ ,  $\alpha(n) = -(-1)^n$  y  $\beta(n) = \beta(n-1) + \beta(n-2)$ , con  $\beta(2) = 1$  y  $\beta(3) = 2$ . Entonces la transmitancia para  $E=0$  es

$$T(0) = \frac{4}{\left[ \left[ \frac{k}{2} \right] (\gamma^{\beta(n)} + \gamma^{-\beta(n)}) - \left( \left[ \frac{k}{2} \right] - 1 \right) (\gamma^{\beta(n)+\alpha(n)} + \gamma^{-\beta(n)-\alpha(n)}) \right]^2}. \quad (3.13)$$

Obsérvese que la transmitancia nunca es uno, sino que esta decae rápidamente conforme crece el sistema.

Finalmente, para el sistema  $l=3$ ,  $m=3$  la matriz de transferencia la podemos escribir como

$$\tau_{i,j} = \left( \frac{1 + (-1)^{i-j}}{2} \right) \left[ \left( \left[ \frac{k}{2} \right] - 1 \right) \gamma^{f(i)} - \left[ \frac{k}{2} \right] \gamma^{f(i)\alpha(n)[3\beta(n-1)+\alpha(n)]} \right] + \\ (j-i) \left( \frac{1 - (-1)^k}{2} \right) \gamma^{f(i)\alpha(n)[\beta(n-2)-\alpha(n)]}, \quad (3.14)$$

Siendo  $k = (n-1) \bmod(3) \in [0, 2]$ ,  $f(i) = (-1)^{i-1}$ ,  $\alpha(n) = -(-1)^n$  y  $\beta(2) = 1$ . Por lo tanto, el coeficiente de transmisión es

$$T(0) = \frac{4}{\left[ \left( 1 - \left[ \frac{k}{2} \right] \right) (\gamma + \gamma^{-1}) + \left[ \frac{k}{2} \right] (\gamma^{3\beta(n-1)+\alpha(n)} + \gamma^{-3\beta(n-1)-\alpha(n)}) + \frac{1 - (-1)^k}{2} (\gamma^{\beta(n-2)-\alpha(n)} + \gamma^{-\beta(n-2)+\alpha(n)}) \right]^2}$$

La transmitancia tiende a cero cuando se incrementa el tamaño del sistema, excepto cuando  $n = 3b + 1$  con  $b = 1, 2, 3, \dots$ , es decir,  $k = 0$ . El valor de la transmitancia solo depende de la aperiodicidad y esta dado por:

$$T(0) = \frac{4}{(\gamma + \gamma^{-1})^2}. \quad (3.15)$$

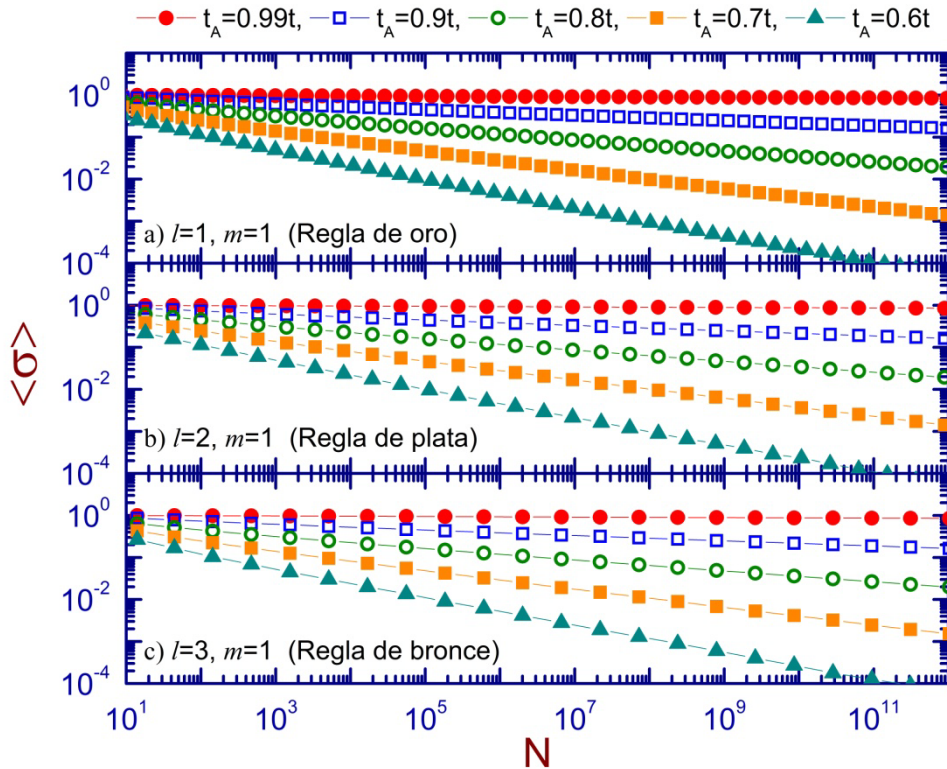
Entonces para esta secuencia no presenta estados transparentes para  $E=0$ . A continuación analizaremos el comportamiento global del espectro de conductividad eléctrica  $dc$ .

### 3.7 Localización

Con el objetivo de analizar el comportamiento global del espectro mostrado en la figura 3.2, se ha obtenido el promedio espectral de la conductividad eléctrica  $dc$ , el cual se define como:

$$\langle \sigma \rangle = \frac{\int \sigma(E) DOS(E) dE}{\int DOS(E) dE}, \quad (3.16)$$

En las figuras 3.11 y 3.12 se muestran los promedios espectrales de la conductividad respecto del tamaño del sistema.



**Figure 3.11** Promedio espectral de la conductividad eléctrica  $dc$  versus la longitud de la cadena las reglas de oro, plata and bronce, variando las integrales de salto  $t_A=0.99t$  (círculos rojos llenos),  $t_A=0.9t$  (cuadrados azules vacíos),  $t_A=0.8t$  (círculos verdes vacíos),  $t_A=0.7t$  (cuadrados naranjas llenos) y  $t_A=0.6t$  (triángulos cian oscuro)

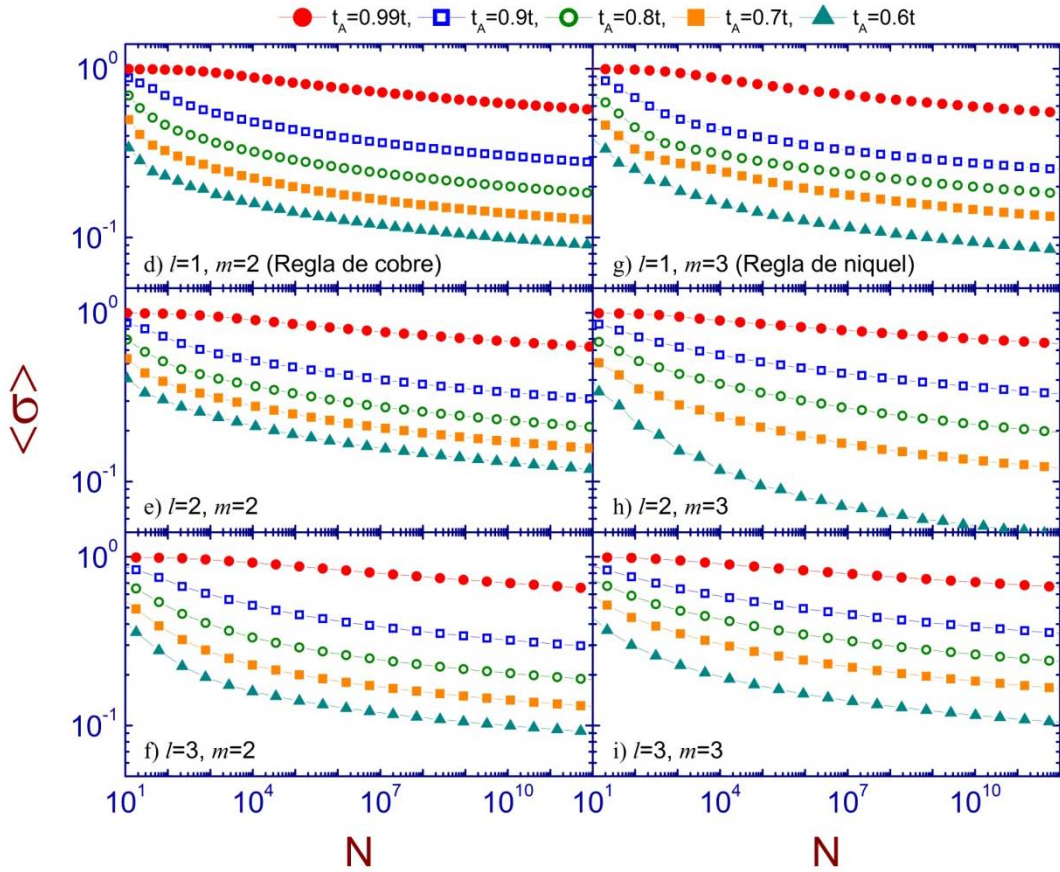
En la figura 3.11 se puede observar el promedio espectral de la conductividad eléctrica  $dc$   $\langle \sigma \rangle$  para las tres cadenas de FG en función del número de átomos del sistema, estos sistemas corresponden a los mostrados en la primera columna de la figura 3.2. Consideramos los siguientes parámetros: integrales de salto  $t_A=0.99t$  (círculos rojos llenos),  $t_A=0.9t$  (cuadrados azules vacíos),  $t_A=0.8t$  (círculos verdes vacíos),  $t_A=0.7t$  (cuadrados naranjas llenos) y  $t_A=0.6t$  (triángulos cian oscuro),  $t_B=t$  y autoenergías nulas. Estas cadenas cumplen con las condiciones de Pisot y la unimodularidad de la matriz S y por tanto son sistemas cuasiperiódicos ( $l=1,2,3,\dots$  y  $m=1$ ).

Para todos los sistemas cuasiperiódicos estudiados, el promedio de la conductividad eléctrica  $dc$  muestra un decaimiento que sigue una ley de potencias con la longitud de las cadenas. Este comportamiento se puede modelar mediante las expresiones mostradas en la Tabla III.2.

**Tabla III.2 Ecuaciones de los sistemas cuasiperiódicos**

	$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$
$\langle \sigma \rangle = N^{-b}$	$b=0.77(1-t_A/t)$	$b=0.71(1-t_A/t)$	$b=0.68(1-t_A/t)$

Además calculamos el promedio espectral de la conductividad eléctrica  $dc$  para los otros seis sistemas de FG, los cuales no cumplen las condiciones de Pisot. Este promedio es presentado en la Figura 3.12.



**Figura 3.12** Promedio espectral de la transmitancia versus la longitud de la cadena para  $(l=1, m=2)$ ,  $(l=1, m=3)$ ,  $(l=2, m=2)$ ,  $(l=2, m=3)$ ,  $(l=3, m=2)$  y  $(l=3, m=3)$ . Para las mismas integrales de salto en la figura 5.

Nótese que el comportamiento del  $\langle \sigma \rangle$  decae más rápido que la ley de potencias que presentan los sistemas cuasiperiódicos, pero sigue siendo una ley de potencias. La ecuación analítica que modela estos comportamientos tiene la forma

$$\langle \sigma \rangle = A_1 N^{-B_1} + A_2 N^{-B_2} + A_0, \quad (3.17)$$

donde  $A_0$ ,  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $B_1$  y  $B_2$  son constantes que dependen de la aperiodicidad de cada sistema. Por ejemplo para el sistema  $l=3$  y  $m=2$  las constantes las podemos ver en la tabla III.3.

**Tabla III.3 Valores de las constantes de la ec. 3.17**

$\gamma$	$A_0$	$A_1$	$A_2$	$B_1$	$B_2$
<b>0.9</b>	0.20491	0.44007	0.59945	0.058284	0.263533
<b>0.8</b>	0.13983	0.31387	0.71411	0.068865	0.357228
<b>0.7</b>	0.09995	0.22607	0.7369	0.073673	0.43367
<b>0.6</b>	0.07367	0.169	0.79037	0.081437	0.543396

Nótese como el exponente  $B_2$  es mayor que cualquiera de los exponentes mostrados en la tabla III.3. Por lo que comprobamos que no presenta un decaimiento exponencial como lo esperado para los sistemas aleatoriamente desordenados ni constante como en los sistemas periódicos.

Después de revisar la literatura encontramos otras formas de generar las cadenas de Fibonacci generalizado, por lo que nos dimos a la tarea de analizar en detalle dos de los sistemas.

### 3.8 Isómeros

Los isómeros son compuestos que tienen la misma composición atómica pero diferente arreglo estructural. En varios artículos reportan de forma diferente el arreglo para la regla de plata ( $l=2$  y  $m=1$ ) y la de bronce ( $l=3$  y  $m=1$ ). En estos arreglos también se puede utilizar el método de sustitución para ir creciendo las cadenas, por lo que para la regla de plata se encuentran tres arreglos, los cuales son:

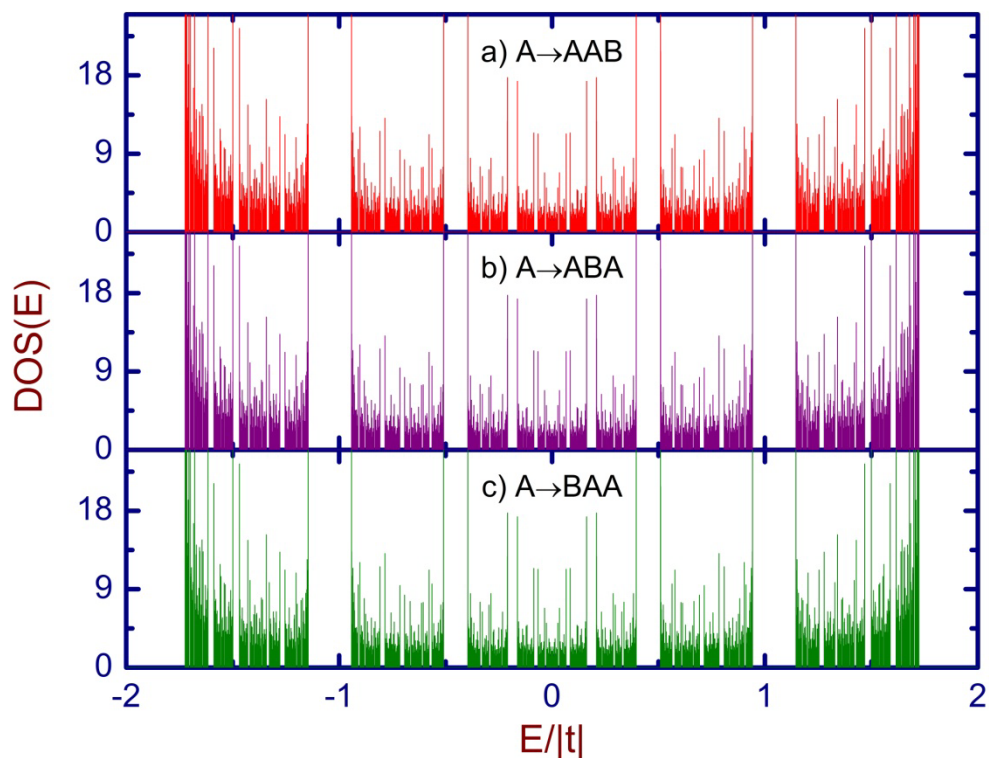
$$A \rightarrow \begin{cases} AAB \\ ABA \\ BAA \end{cases} \text{ y } B \rightarrow A, \quad (3.18)$$

para la regla de bronce encontramos cuatro formas de acomodarlos y son

$$A \rightarrow \begin{cases} AAAB \\ AABA \\ ABAA \\ BAAA \end{cases} \text{ y } B \rightarrow A. \quad (3.19)$$

Los primeros arreglos de las dos ecuaciones 3.18 y 3.19 son los que se estudiaron anteriormente. Ahora vamos hacer un análisis comparativo del comportamiento entre los isómeros de cada sistema, es decir, presentamos su densidad de estados, su conductividad eléctrica  $dc$ , los estados transparentes y el promedio espectral de la conductividad.

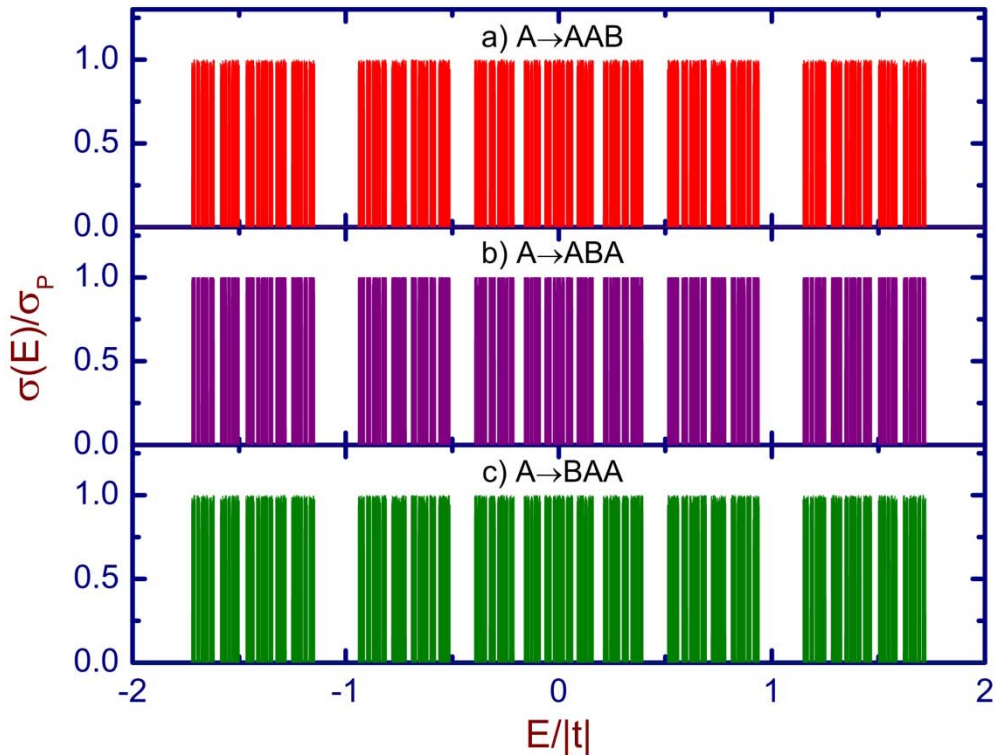
En la figura 3.13 se muestra la densidad de estados en función de la energía para los isómeros que siguen la regla de plata. Los parámetros utilizados son autoenergías nulas, integrales de salto  $t_A=0.8t$ ,  $t_B=t$ , el número de átomos es  $N=318281040$  ( $n=23$ ) y la parte imaginaria de la energía es  $\eta=10^{-5}t$ .



**Figura 3.13** Densidad de estados en función de la energía para los isómeros que siguen la regla de plata. Los parámetros utilizados son autoenergías nulas, integrales de salto  $t_A=0.8t$ ,  $t_B=t$ , el número de átomos es  $N=318281040$  ( $n=23$ ) y la parte imaginaria de la energía es  $\eta=10^{-5}t$ .

Nótese que a grandes rasgos no existe diferencia alguna en los espectros aunque el ordenamiento de los átomos es diferente. Por este motivo obtuvimos el espectro de la conductividad eléctrica  $dc$  para los tres casos. En la figura 3.14 mostramos los espectros de la conductividad versus la energía para los mismos sistemas y parámetros que tiene la figura 3.13.





**Figura 3.14** Espectros de la conductividad versus la energía para los mismos sistemas y parámetros que tiene la figura 3.12.

Obsérvese que los gaps en los espectros se conservan pero la altura de los picos de conductividad son iguales en a) y b), en cambio los picos en c) tienen mayor altura comparados con los dos anteriores.

Realizamos un análisis de la conductividad en energía cero para diferentes longitudes de cadenas y encontramos que solo dos de ellas presentan estado transparente y la otra decae a cero conforme crece la longitud de la cadena. Este comportamiento lo podemos observar en la figura 3.15 para dos diferentes integrales de salto  $t_A=0.8t$  (rojo) y  $t_A=0.6t$  (ciano).

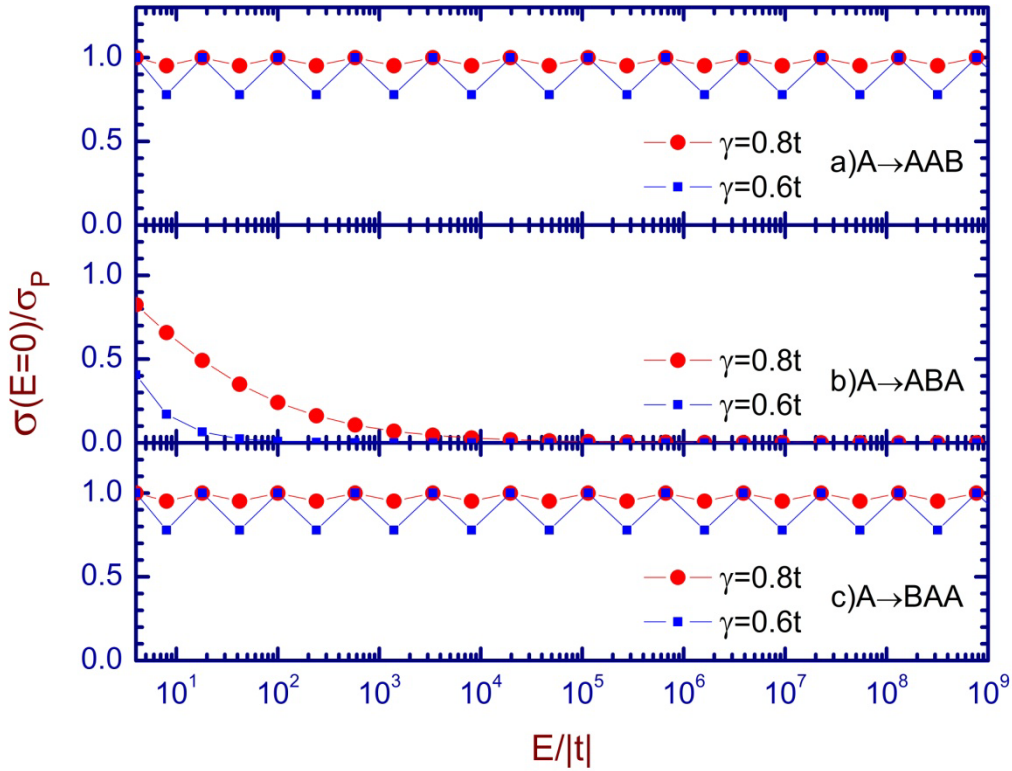


Figura 3.15 Conductividad eléctrica para los isómeros de plata en  $E=0$

Estos resultados numéricos los comprobamos por medio de las siguientes ecuaciones analíticas. Para el caso b) obtuvimos que las entradas de la matriz de transferencia para toda generación ( $n$ ) se pueden escribir como:

$$\tau_{i,j}(n) = \begin{cases} s\gamma^{n(3-2j)} & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad (3.20)$$

donde  $s = (-1)^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor + 1}$ , Y el coeficiente de transmisión asociado en energía cero es:

$$T(E=0, n) = \frac{4}{(\gamma^n + \gamma^{-n})^2} \quad (3.21)$$

De aquí podemos observar como el coeficiente de transmisión depende de la aperiodicidad de la cadena, también podemos ver que el valor del coeficiente nunca es uno para este sistema.

Para un sistema que se construye basándose en la regla de sustitución del inciso c) obtuvimos que las entradas de la matriz de transferencia son:

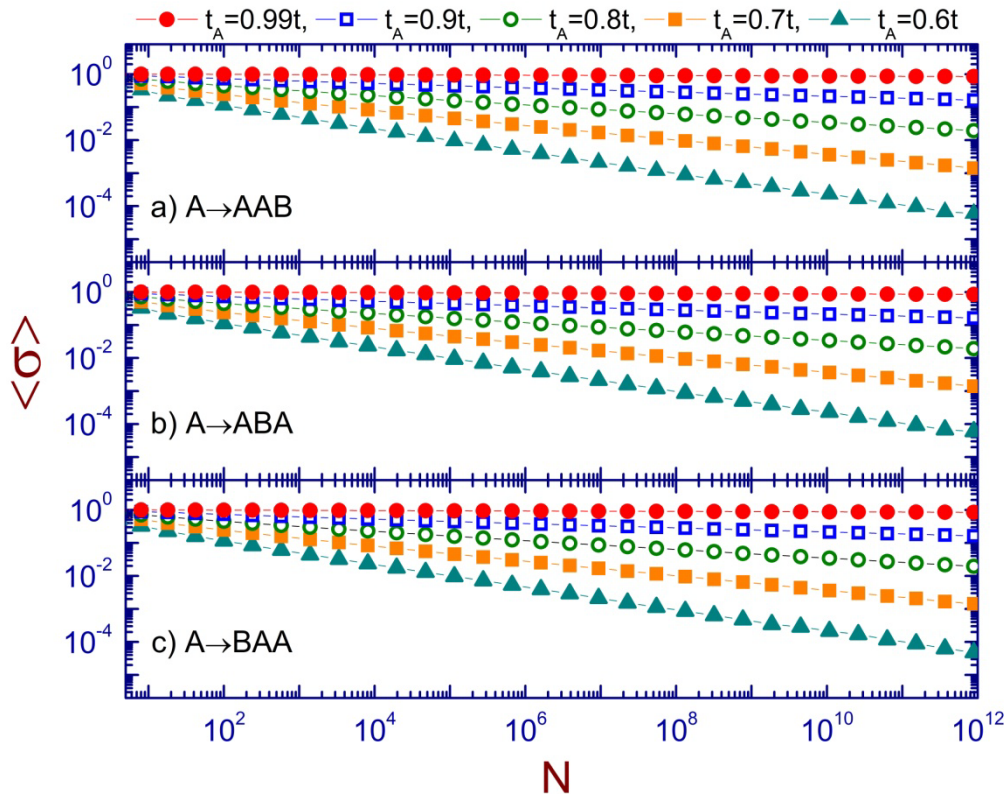
$$\tau_{i,j}(n) = \begin{cases} s\gamma^{(3-2j)\nu} & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad (3.22)$$

donde  $\nu = [1 - (-1)^n]/2$  y  $s = (-1)^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor + 1}$ . A partir de estas expresiones podemos obtener el coeficiente de transmisión:

$$T(E=0, n) = 4 / (\gamma^\nu + \gamma^{-\nu})^2 \quad (3.23)$$

para este isómero el coeficiente de transmisión si puede ser uno, lo cual sucede cuando  $\nu = 0$ , esto ocurre para  $n = 2, 4, 6, 8, \dots$ , es decir, para generaciones pares.

Como observamos que casi no varían los espectros en las figuras 3.13 y 3.14, analizamos el promedio espectral de la conductividad. En la figura 3.16 presentamos este promedio versus el número de átomos de las cadenas.



**Figura 3.16** Promedio espectral de la conductividad eléctrica versus el tamaño del sistema para los isómeros de plata.

Los tres isómeros cumplen las condiciones de Pisot y la matriz unimodular por lo que son sistemas cuasiperiódicos y por lo tanto se espera

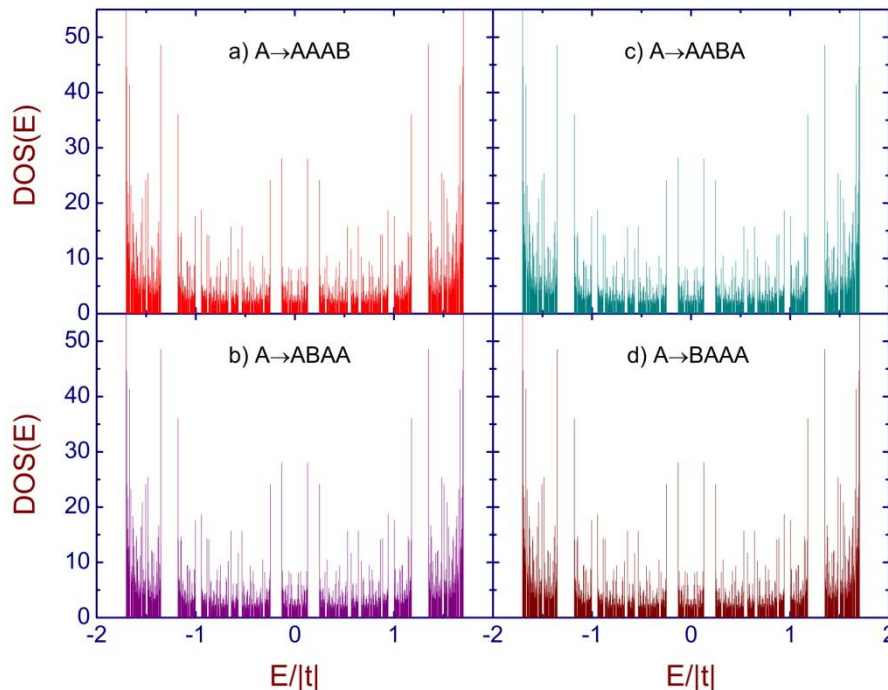
que el promedio espectral decaiga como una ley de potencia en función de la longitud del sistema. El cual se comprueba tanto en la figura 3.16 como en la tabla III.2, donde se encuentran las expresiones analíticas que modelan este comportamiento.

**Tabla III.4 Ecuaciones de los isómeros de plata**

	$A \rightarrow AAB$	$A \rightarrow ABA$	$A \rightarrow BAA$
$\langle \sigma \rangle = N^{-b}$	$b=0.71(1-t_A/t)$	$b=0.715(1-t_A/t)$	$b=0.71(1-t_A/t)$

Después de este análisis podemos concluir que no hay un cambio significativo en la localización de los estados de los isómeros de la regla de plata.

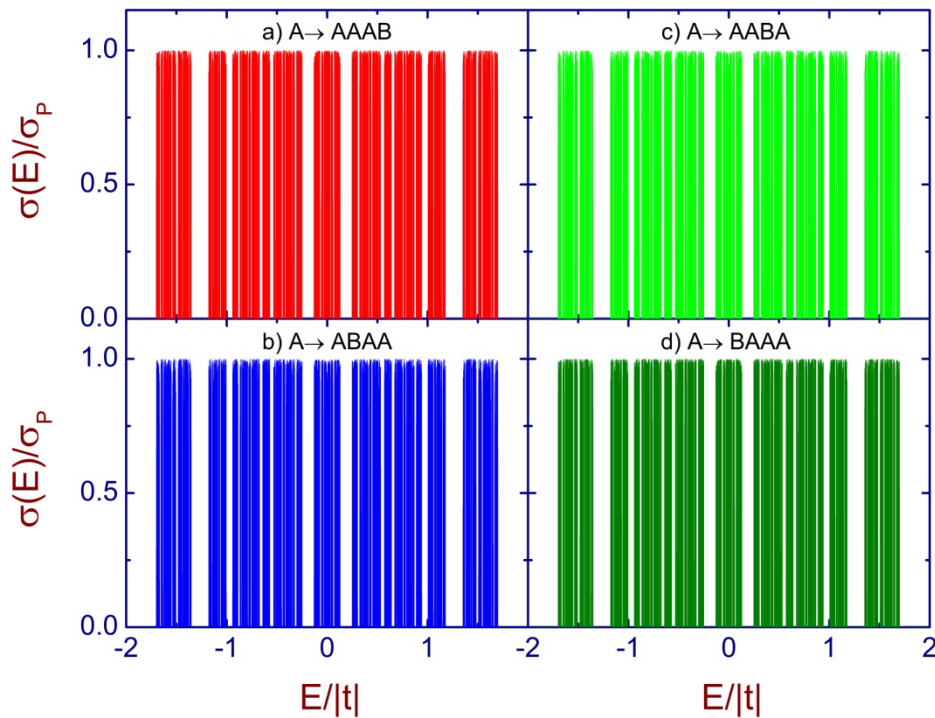
Ahora continuamos con los isómeros de bronce. En la figura 3.17 mostramos el espectro de densidad de estados versus la energía para los cuatro isómeros de bronce presentados en la ec. 3.17. Los parámetros que tomamos fueron los mismos que en la figura 3.13 excepto la longitud del sistema que fue de 239244623 átomos ( $n=17$ ).



**Figura 3.17** Espectro de la densidad de estados de los isómeros de bronce. Los parámetros que tomamos fueron los mismos que en la figura 3.12 excepto la longitud del sistema que fue de 239244623 átomos ( $n=17$ )

Como podemos apreciar, al igual que en el caso de los isómeros de plata, los espectros de la densidad de estados para los cuatro isómeros de

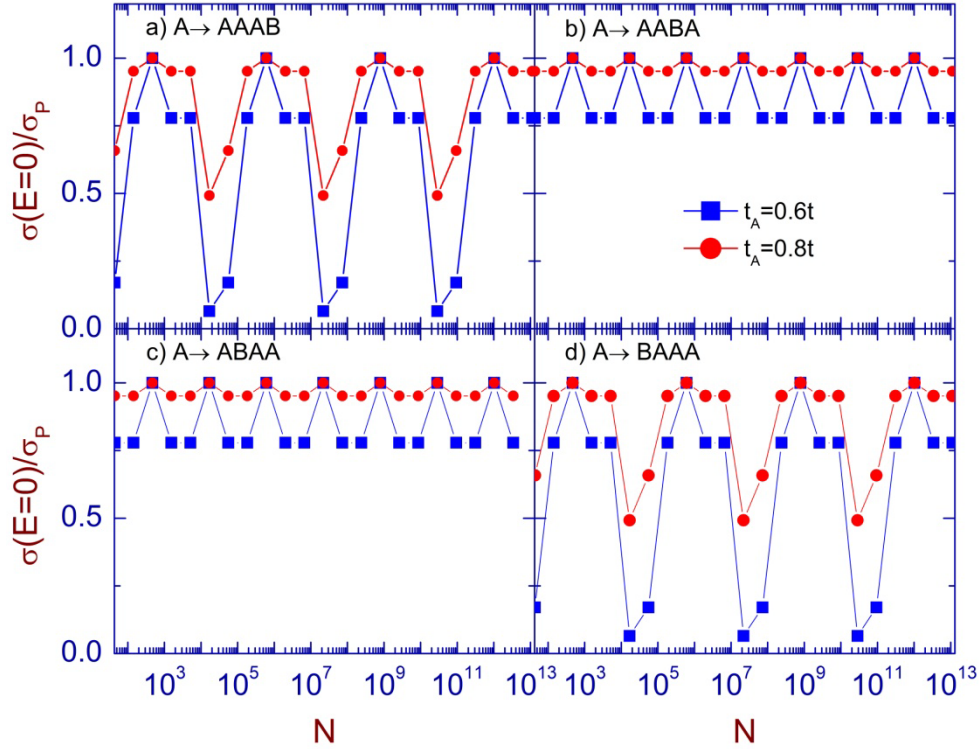
bronce es similar. La figura 3.18 nos muestra el espectro de la conductividad eléctrica  $dc$  en función de la energía, para los mismos parámetros que la figura 3.17.



**Figura 3.18** Espectro de la conductividad eléctrica de los isómeros de bronce para los mismos parámetros que la figura 3.17.

Como se puede observar los espectros son similares, al analizar las alturas de los picos de conductividad encontramos que los espectros de a) y d) son iguales y los espectros de b) y c) también son los mismos entre ellos.

Realizamos un análisis en energía igual a cero de la conductividad eléctrica contra el número de átomos para los cuatro isómeros de bronce, este estudio se encuentra representado en la figura 3.19. Los parámetros fueron dos diferentes integrales de salto  $t_A=0.8t$  (círculos cian),  $t_A=0.6t$  (cuadrados rojos),  $t_B=t$  y autoenergía nula.



**Figura 3.19** Conductividad eléctrica en energía cero para los isómeros de bronce con respecto del tamaño del sistema.

Obsérvese que en a) y d) presenta estados transparentes cada seis generaciones, en cambio en b) y c) tiene estados transparentes cada tres generaciones. Además, el valor de la conductividad no depende del número de átomos en el sistema, este valor solo depende de la aperiodicidad.

Los resultados anteriores son numéricos, a continuación vamos a dar las ecuaciones analíticas que reproducen los espectros de la figura 3.19. Empezaremos por el caso b) ya que el a) se encuentra en la sección anterior. La matriz de transferencia la podemos escribir como:

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

donde  $k = n - 2 \pmod{3} \in [0, 2]$  y  $s(x) = (-1)^x$ . La transmitancia es

$$T(E=0) = \frac{4}{(\gamma^{k-1} + \gamma^{-(k-1)})^2}, \quad (3.24)$$

como podemos notar existen estados transparentes ( $T=1$ ) cuando  $k=1$ , es decir,  $k=3r$  siendo  $r=1,2,3,\dots$

Para el caso c) la matriz de transferencia es muy similar al anterior caso es decir

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

y la transmitancia es la misma que la ecuación 3.9, por lo que los estados transparentes están en las mismas generaciones que la secuencia anterior.

Finalmente, para el inciso d) la matriz de transferencia es muy similar a de la ec. 3.10

$$\tau_{i,j}(n) = k \left( \frac{1+(-1)^{i+j}}{2} \right) \left[ - \left( \frac{1-(-1)^k}{2} \right) \gamma^b + \left( \frac{1+(-1)^k}{4} \right) (-1)^n \gamma^{-(i)d} \right] - |j-i| \left[ \left\lfloor \frac{1-k}{2} \right\rfloor (-1)^a \gamma^{(-1)^a} \right],$$

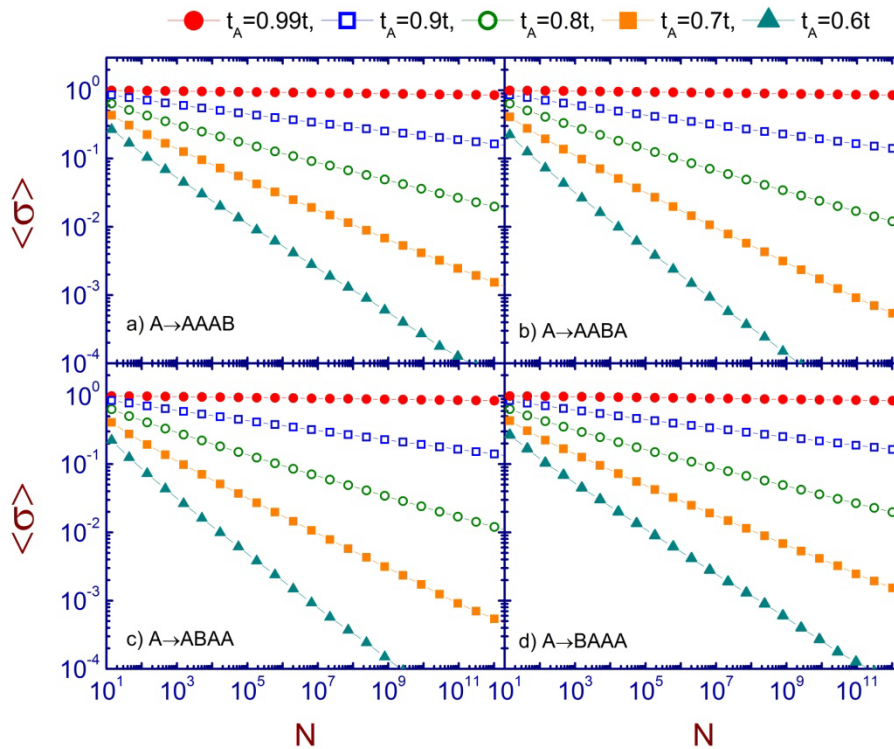
$$\text{donde } d = 3 \left( \frac{1+(-1)^n}{2} \right) + \left( \frac{1-(-1)^n}{2} \right), \quad a = n+1-i \text{ y } b = -4 \left( \frac{(-1)^i - (-1)^{n+i}}{2} \right)$$

Para esta cadena definimos  $k = (n-2) \bmod 3 \in [0,2]$ . Cuyo coeficiente de transmisión esta dado como:

$$T(0) = \frac{4}{\left( \left\lfloor \frac{1-k}{2} \right\rfloor \right)^2 (\gamma + \gamma^{-1})^2 + \frac{k^2}{4} \left[ (1-(-1)^k) (\gamma^{-2(1-(-1)^n)} + \gamma^{2(1-(-1)^n)}) + \left( \frac{1+(-1)^k}{2} \right) (\gamma^d + \gamma^{-d}) \right]^2}$$

En este sistema presenta estados transparentes para energía igual a cero cuando  $k=1$  y la generación es par, es decir para  $n=6r$  con  $r=1,2,3,\dots$

Después de analizar tanto numérica como analítica los estados transparentes de los isómeros de bronce y notar muy pocas diferencias entre ellos. Continuaremos con el estudio del promedio espectral de la conductividad eléctrica  $dc$ . La figura 3.20 muestra el promedio espectral de la conductividad en función del número de átomos de cada cadena (N) para cinco diferentes integrales de salto,  $t_A=0.99t$  (círculos rojos),  $t_A=0.9t$  (cuadrados azules),  $t_A=0.8t$  (círculos verdes),  $t_A=0.7t$  (cuadrados anaranjados) y  $t_A=0.6t$  (triángulos cian).



**Figura 3.20** Promedio de la conductividad versus el tamaño del sistema para los isómeros de bronce

Obsérvese que esta familia de isómeros pertenece a los cuasicristales por lo que su promedio espectral tiene un decaimiento en ley de potencias en función del número de átomos del sistema. La tabla III.5 representa la ecuación analítica que reproduce este comportamiento.

**Tabla III.5** Valor del exponente para los cuatro isómero de bronce

	$A \rightarrow AAAB$	$A \rightarrow AABA$	$A \rightarrow ABAA$	$A \rightarrow BAAA$
$\langle \sigma \rangle = N^{-b}$	$b=0.68(1-t_A/t)$	$b=0.728(1-t_A/t)$	$b=0.724(1-t_A/t)$	$b=0.64(1-t_A/t)$

Después de analizar la densidad de estados, la conductividad eléctrica  $dc$ , los estados transparentes y el promedio espectral de la conductividad para los isómeros correspondientes al de plata y de bronce casi no varían sus propiedades. Hasta este momento solo hemos presentado resultados para sistemas unidimensionales, pero si el método de renormalización (apéndice) lo combinamos con la técnica de convolución presentada en la sección 2.5, podemos estudiar sistemas de dos y tres dimensiones.

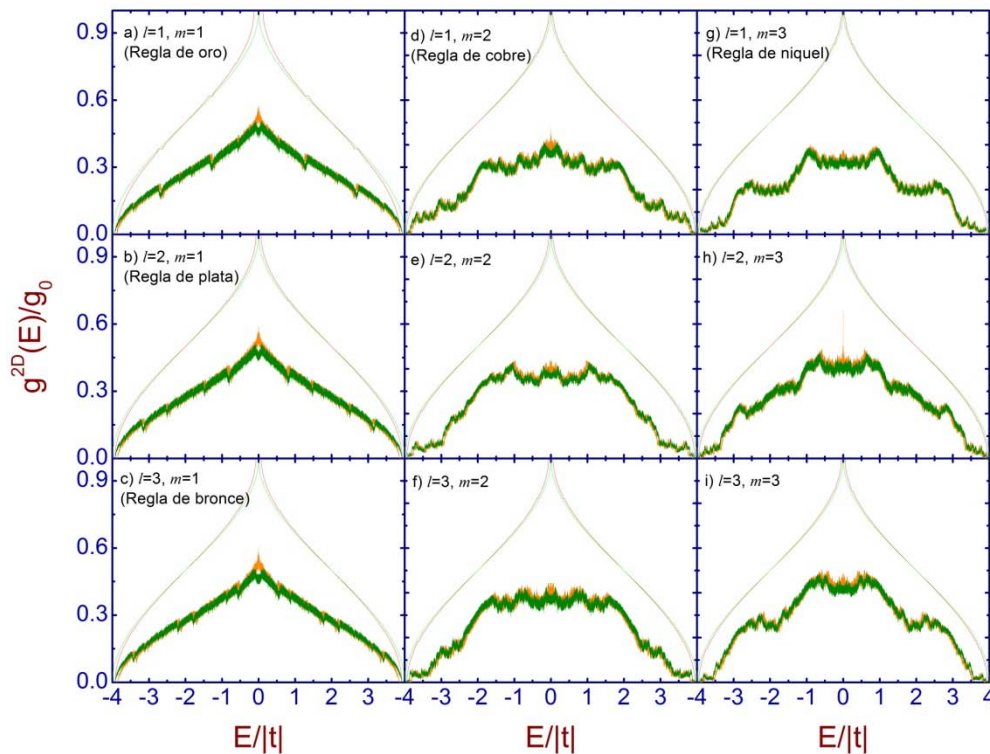


### 3.9 Sistemas multidimensionales

La conductancia eléctrica  $dc$  de los sistemas bidimensionales en función de la energía es mostrada en la figura 3.21. Los espectros conservan el mismo orden que usamos en las cadenas, solo que tenemos un mayor número de espectros en cada sección, debido a que en los sistemas bidimensionales se puede ordenar sus átomos de forma aperiódica en una o en ambas direcciones. Los parámetros utilizados son  $t_A=0.9t$ , autoenergías nulas y en la dirección longitudinal el número de átomos es el mismo que está en la tabla III.1, en la transversal su número de átomos se encuentra en la tabla III.6. En cada recuadro se tienen cuatro espectros estos corresponden a diferentes ordenamiento de los átomos. Estos ordenamientos son: periódico en las dos direcciones (línea azul), periódico en la dirección longitudinal y aperiódico en la dirección transversal (línea roja), aperiódico en la longitudinal y periódico en la transversal (línea naranja) y aperiódico en las dos direcciones (línea verde). Esto se muestra en la figura 3.21.

$$g = \sigma \frac{W}{L}$$

Donde  $L$  es la longitud y  $W$  es el área transversal del sistema.

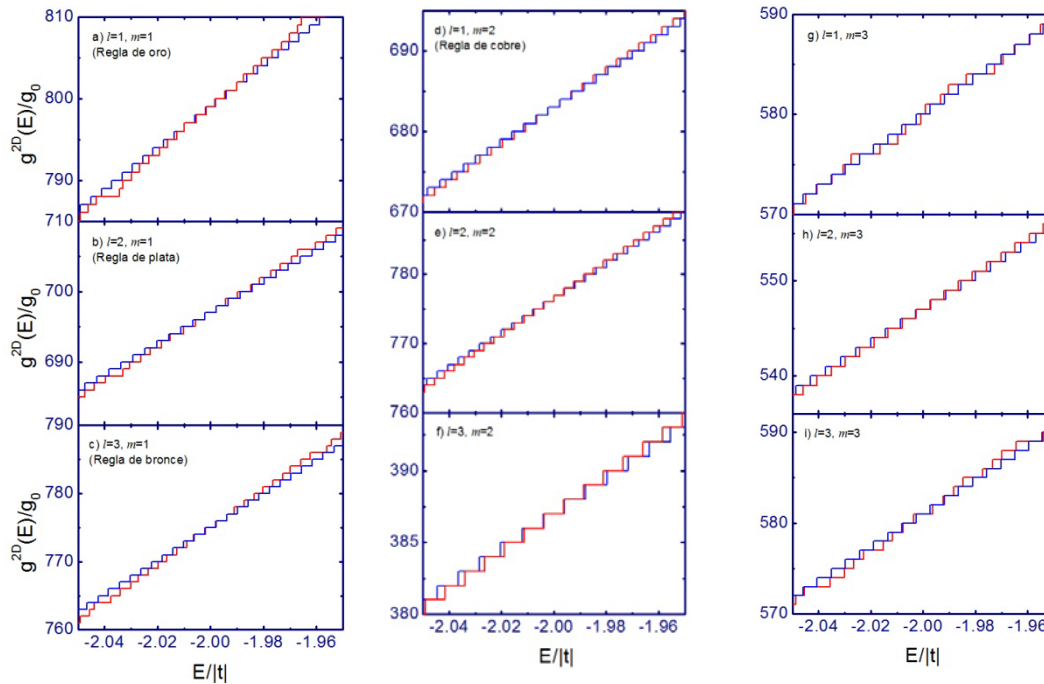


**Figura 3.21** Conductividad eléctrica para los nueve sistemas bidimensionales. Los parámetros utilizados son  $t_A=0.9t$ , autoenergías nulas y en la dirección longitudinal el número de átomos es el mismo que está en la tabla III.1, en la transversal su número de átomos se encuentra en la tabla III.6.

**Tabla III.6 Tamaño de los sistemas transversales**

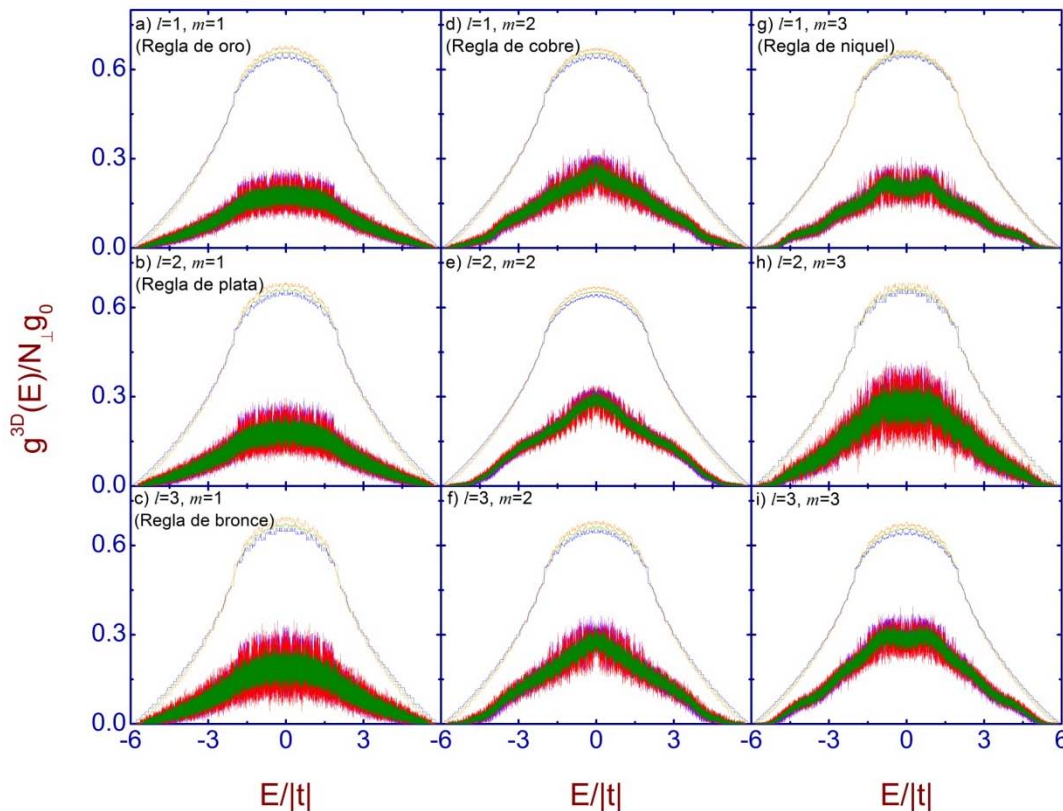
$N$	$m = 1$	$m = 2$	$m = 3$
$l = 1$	1598 ( $n = 16$ )	1366 ( $n = 11$ )	1160 ( $n = 9$ )
$l = 2$	1394 ( $n = 23$ )	1553 ( $n = 8$ )	1094 ( $n = 7$ )
$l = 3$	1550 ( $n = 7$ )	774 ( $n = 6$ )	1162 ( $n = 6$ )

Nótese que cuando el ordenamiento de los átomos es periódico en la dirección longitudinal la conductancia eléctrica esta cuantizada, es decir, son escalones de unidad  $g_0 = 2e^2/h$ , como ha sido observado en dispositivos de gas de electrones en 2D. Esta cuantización se observa mejor en la figura 3.22. Además, la altura de estos espectros es el número de átomos transversal ya que los eigenvalores de una dimensión no presentan degeneración. En cambio los sistemas en donde el ordenamiento de sus átomos es aperiódico en la dirección longitudinal presentan un espectro que tiene seudo gap y la conductancia se destruye conforme se incrementa la aperiodicidad del sistema.



**Figura 3.22** Amplificación del espectro de conductividad versus energía para los mismos sistemas de la figura 3.21.

Ahora presentaremos el espectro de conductancia eléctrica para sistemas tridimensionales siguiendo el mismo orden que la figura 3.21. Cada recuadro muestra seis diferentes espectros, nuevamente en cada dirección los átomos pueden ser ordenados de forma periódica o aperiódica. Empleamos energías de salto  $t_A=0.9t$  en todos los sistemas en la dirección longitudinal el número de átomos es el mismo que en la tabla III 1, en cambio para las direcciones transversales el número de átomos considerado se muestra en la tabla III.7. Los ordenamientos que consideramos fueron los siguientes: un ordenamiento periódico en todas las direcciones (PPP, línea azul), un ordenamiento periódico en la primer y tercer dirección y aperiódico en la segunda (PAP, línea verde olivo), periódico en la primer dirección y aperiódico en las otras dos direcciones (PAA, anaranjado), aperiódico en la primera dirección y periódico en las otras dos (APP, línea roja), aperiódica en las dos primeras direcciones y periódica en la tercera (AAP, línea azul) y por último un ordenamiento aperiódico en las tres direcciones. Estos sistemas son mostramos en la figura 3.23.



**Figura 3.23** Conductividad eléctrica en tridimensional versus la energía de Fermi, para los nueve sistemas estudiados en esta tesis. Empleamos energías de salto  $t_A=0.9t$  en todos los sistemas en la dirección longitudinal el número de átomos es el mismo que en la tabla III 1, en cambio para las direcciones transversales el número de átomos considerado se muestra en la tabla III.6.

**Tabla III.7. Tamaño de los sistemas transversales**

N	$m = 1$	$m = 2$	$m = 3$
$l = 1$	484 ( $n_{\perp}=7 \times n_{\perp}=7$ )	484 ( $n_{\perp}=5 \times n_{\perp}=5$ )	400 ( $n_{\perp}=4 \times n_{\perp}=4$ )
$l = 2$	324 ( $n_{\perp}=4 \times n_{\perp}=4$ )	841 ( $n_{\perp}=4 \times n_{\perp}=4$ )	196 ( $n_{\perp}=3 \times n_{\perp}=3$ )
$l = 3$	196 ( $n_{\perp}=3 \times n_{\perp}=3$ )	196 ( $n_{\perp}=3 \times n_{\perp}=3$ )	484 ( $n_{\perp}=3 \times n_{\perp}=3$ )

Como podemos observar los espectros donde el ordenamiento de los átomos es periódico en la dirección longitudinal presentan escalones de altura variable, porque en dos dimensiones el espectro de eigenvalores es degenerado por lo que la altura es el número de degeneración por  $g_0$ . En cambio, para aquellos sistemas donde en la dirección longitudinal es aperiódico el ordenamiento de átomos la conductividad se destruye presentando pseudo-gap en el espectro.

Estos es solo un ejemplo para corroborar que el método de renormalización más convolución es una herramienta poderosa para estudiar el transporte electrónico en sistemas multidimensionales. Como el consumo de tiempo de cómputo crece conforme se incrementan los eigenvalores del sistema transversal seguiremos con esta investigación más adelante.

## 3.10 Conclusiones

En esta tesis hemos estudiado la localización y el transporte electrónico en sistemas aperiódicos de una, dos y tres dimensiones dentro del formalismo de amarre fuerte. Para dicho estudio desarrollamos nuevos métodos de renormalización en el espacio real para la densidad de estados y la conductividad eléctrica  $dc$  en redes de Fibonacci generalizado, los cuales permiten analizar las propiedades físicas de los sistemas de tamaño variable, es decir, el tamaño puede variar desde nanoscópico hasta macroscópico. Además, obtuvimos ecuaciones analíticas para reproducir los promedios espectrales de la conductividad eléctrica. Asimismo, hemos demostrado de forma numérica y analítica la existencia de nuevos estados transparentes para las cadenas de Fibonacci generalizado.

Las principales conclusiones de esta tesis son:

- 1) Los métodos de renormalización en espacio real son una herramienta eficiente y exacta para el estudio de los sistemas aperiódicos, dada la ausencia del espacio recíproco.
- 2) La extensión de estos métodos a redes de Fibonacci generalizado, nos permite estudiar el grado de localización de los estados electrónicos en dichas redes.
- 3) La demostración que solo las cadenas de Fibonacci generalizado que cumplen con  $m=1$  son sistemas cuasiperiódicos.
- 4) La autosimilaridad de los espectros solo se presenta en sistemas cuasiperiódicos.
- 5) La existencia de nuevos estados transparentes con coeficiente de transmisión uno en  $E=0$  para las cadenas de Fibonacci generalizado con  $m=1$ .
- 6) La localización en forma de potencias revelada por el promedio espectral de la transmitancia como función del tamaño del sistema en redes de Fibonacci cuasiperiódicas
- 7) La invariancia de la localización en forma de potencias para los isómeros de plata y bronce.

- 8) La extensión del método de renormalización a sistemas tanto bidimensionales como tridimensionales, para estudiar la densidad de estados y la conductividad eléctrica por medio de la técnica de convolución.
- 9) La cuantización del espectro de conductancia cuando el ordenamiento de sus átomos es periódico en la dirección longitudinal.
- 10) La presentación de pseudo gap en el espectro de conductancia cuando la aperiodicidad es en la dirección longitudinal.

El ordenamiento en los sólidos es decisivo para su transporte electrónico, siendo completamente nuevo cuando se trata de redes cuasiperiódicas, debido a las simetrías de la red hipercúbica de la cual fue proyectado el cuasicristal. La conductividad eléctrica dc del estado transparente en las redes de Fibonacci generalizado es similar a la de los sistemas periódicos revelando el orden de largo alcance, en cambio el transporte eléctrico en los estados que no son transparentes es semejante al de los sistemas desordenados debido a la ausencia de simetría translacional. Por último, el presente trabajo podría extenderse a investigar el transporte electrónico por medio de la fórmula de Kubo-Greenwood en sistemas aperiódicos con campo eléctrico y temperatura finita. Además, se podría extender a otras excitaciones (fonones, fotones, etc.) aplicando el método del grupo de renormalización en espacio real.

## Apéndice I: Formulas de renormalización para el problema de enlaces

La traza en la formula de la densidad de estados para cadenas de Fibonacci generalizado con dos tipos de enlaces puede ser escrita como

$$\begin{aligned} DOS(E) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_j G_{j,j}(E^+) \\ &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \{ A_F(E^+, n) G_{L,L}(E^+) + B_F(E^+, n) G_{R,R}(E^+) + C_F(E^+, n) G_{L,R}(E^+) + D_F(E^+, n) \} \end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned} A_F(E^+, n) &= A(E^+, l, n-1) + [B(E^+, l, n-1) + A(E^+, m, n-2) - 1] \theta_1^2(E^+, l, n) + C(E^+, l, n-1) \theta_1(E^+, l, n) \\ B_F(E^+, n) &= B(E^+, m, n-2) + [B(E^+, l, n-1) + A(E^+, m, n-2) - 1] \theta_2^2(E^+, m, n) + C(E^+, m, n-2) \theta_2(E^+, m, n) \\ C_F(E^+, n) &= C(E^+, l, n-1) \theta_2(E^+, m, n) + C(E^+, m, n-2) \theta_1(E^+, l, n) \\ &\quad + 2[B(E^+, l, n-1) + A(E^+, m, n-2) - 1] \theta_1(E^+, l, n) \theta_2(E^+, m, n) \end{aligned}$$

$$D_F(E^+, n) = D(E^+, l, n-1) + D(E^+, m, n-2) + [B(E^+, l, n-1) + A(E^+, m, n-2) - 1] \theta_3(E^+, n)$$

$$\theta_1(E^+, l, n) = \frac{t(E^+, l, n-1)}{E^+ - E_{MF}(E^+, n)}, \quad \theta_2(E^+, m, n) = \frac{t(E^+, m, n-2)}{E^+ - E_{MF}(E^+, n)},$$

$$\theta_3(E^+, n) = \frac{1}{E^+ - E_{MF}(E^+, n)}, \quad E_{MF}(E^+, n) = E_R(E^+, l, n-1) + E_L(E^+, m, n-2),$$

$$E_{LF}(E^+, n) = E_L(E^+, l, n-1) + t(E^+, l, n-1) \theta_1(E^+, l, n),$$

$$E_{RF}(E^+, n) = E_R(E^+, m, n-2) + t(E^+, m, n-2) \theta_2(E^+, m, n), \quad t_F(E^+, n) = \frac{t(E^+, l, n-1) t(E^+, m, n-2)}{E^+ - E_{MF}(E^+, n)},$$

siendo

$$A(E^+, r, s) = A(E^+, r-1, s) + [B(E^+, r-1, s) + A(E^+, 1, s) - 1] \alpha_1^2(E^+, r, s) + C(E^+, r-1, s) \alpha_1(E^+, r, s)$$

$$B(E^+, r, s) = B(E^+, 1, s) + [B(E^+, r-1, s) + A(E^+, 1, s) - 1] \alpha_2^2(E^+, 1, s) + C(E^+, 1, s) \alpha_2(E^+, 1, s)$$

$$\begin{aligned} C(E^+, r, s) &= C(E^+, r-1, s) \alpha_2(E^+, 1, s) + C(E^+, 1, s) \alpha_1(E^+, r, s) \\ &\quad + 2[B(E^+, r-1, s) + A(E^+, 1, s) - 1] \alpha_1(E^+, r, s) \alpha_2(E^+, 1, s) \end{aligned}$$

$$D(E^+, r, s) = D(E^+, r-1, s) + D(E^+, 1, s) + [B(E^+, r-1, s) + A(E^+, 1, s) - 1] \alpha_3(E^+, s),$$

$$\alpha_1(E^+, r, s) = \frac{t(E^+, r-1, s)}{E^+ - E_M(E^+, s)}, \alpha_2(E^+, 1, s) = \frac{t(E^+, 1, s)}{E^+ - E_M(E^+, s)}, \alpha_3(E^+, s) = \frac{1}{E^+ - E_M(E^+, s)},$$

$$E_M(E^+, s) = E_R(E^+, r-1, s) + E_L(E^+, 1, s),$$

$$E_L(E^+, r, s) = E_L(E^+, r-1, s) + t(E^+, r-1, s)\alpha_1(E^+, r, s), E_R(E^+, r, s) = E_R(E^+, 1, s) + t(E^+, 1, s)\alpha_2(E^+, 1, s)$$

$$, t(E^+, r, s) = \frac{t(E^+, r-1, s)t(E^+, 1, s)}{E^+ - E_M(E^+, s)}, \text{ donde } r \text{ puede tomar el valor de } l \text{ ó } m \text{ y } s \text{ es}$$

igual a  $n-1$  ó  $n-2$ .

Las condiciones iniciales son:

$$A_F(E^+, 1) = B_F(E^+, 1) = 1, C_F(E^+, 1) = D_F(E^+, 1) = 0, E_{LF}(E^+, 1) = E_{RF}(E^+, 1) = 0, t_F(E^+, 1) = t_A$$

$$A(E^+, 1, 1) = B(E^+, 1, 1) = 1, C(E^+, 1, 1) = D(E^+, 1, 1) = 0, E_L(E^+, 1, 1) = E_R(E^+, 1, 1) = 0,$$

$$t(E^+, l=1, 1) = t_A \text{ y } t(E^+, m=1, 1) = t_B, \text{ donde } E^+ = E + i\eta.$$

Las funciones finales de Green sin saturadores son:

$$G_{L,L}(E^+) = [E^+ - E_{RF}(E^+, n)] / \gamma_G$$

$$G_{R,R}(E^+) = [E^+ - E_{LF}(E^+, n)] / \gamma_G$$

$$G_{L,R}(E^+) = t_F(E^+, n) / \gamma_G$$

Donde  $\gamma_G = [E^+ - E_{LF}(E^+, n)][E^+ - E_{RF}(E^+, n)] - t_F^2(E^+, n)$ , y para el caso en donde el sistema está conectado a dos saturadores son

$$G_{L,L}(E^+) = \left\{ E^+ - E_{LF}(E^+, n) - E_{RP}(E^+, k) - \frac{t_p^2(E^+, k)}{E^+ - E_{LP}(E^+, k)} - \frac{t_F^2(E^+, n)}{E^+ - E_{RF}(E^+, n) - E_{LP}(E^+, k) - t_p^2(E^+, k) / [E^+ - E_{RP}(E^+, k)]} \right\}^{-1}$$

$$G_{R,R}(E^+) = \left\{ E^+ - E_{RF}(E^+, n) - E_{LP}(E^+, k) - \frac{t_p^2(E^+, k)}{E^+ - E_{RP}(E^+, k)} - \frac{t_F^2(E^+, n)}{E^+ - E_{LF}(E^+, n) - E_{RP}(E^+, k) - t_p^2(E^+, k) / [E^+ - E_{LP}(E^+, k)]} \right\}^{-1}$$

$$G_{L,R}(E^+) = \frac{G_{R,R}(E^+)t_F(E^+, n)}{E^+ - E_{LF}(E^+, n) - E_{RP}(E^+, k) - t_p^2(E^+, k) / [E^+ - E_{LP}(E^+, k)]},$$

donde  $k$  es el número de generación de los saturadores periódicos construidos siguiendo las secuencias de Fibonacci, y sus auto-energías efectivas e integrales de salto efectivas están dadas por:



$$E_{LP}(E^+, k) = E_{LP}(E^+, k-1) + t_p^2(E^+, k-1) / \gamma_p(E^+, k),$$

$$E_{RP}(E^+, k) = E_{RP}(E^+, k-2) + t_p^2(E^+, k-2) / \gamma_p(E^+, k)$$

$$t_p(E^+, k) = t_p(E^+, k-1)t_p(E^+, k-2) / \gamma_p(E^+, k)$$

$$\gamma_p(E^+, k) = \left[ E^+ - E_{RP}(E^+, k-1) - E_{LP}(E^+, k-2) \right].$$

Ahora aplicamos el método de renormalización para obtener los coeficientes de la matriz de transferencia para las cadenas de Fibonacci generalizado con dos tipos de enlaces, los cuales pueden ser escritos como:

$$\tau_{1,1} = M_{1,1}(E, N)E^2 / (t_A t) - M_{2,1}(E, N)t_n E / (t_A t) + M_{1,2}(E, N)E / t - M_{2,2}(E, N)t_n / t$$

$$\tau_{1,2} = -M_{1,1}(E, N)E / t_A + M_{2,1}(E, N)t_n / t_A$$

$$\tau_{2,1} = M_{1,1}(E, N)E / t_A + M_{1,2}(E, N)$$

$$\tau_{2,2} = -M_{1,1}(E, N)t / t_A,$$

donde  $t_n = [1 - (-1)^n]t_A / 2 + [1 + (-1)^n]t_B / 2,$

$$M_{1,1}(E, N) = L_{1,1}(E, l, N-1)(R_{1,1}(E, m, N-2)E / t_A + R_{1,2}(E, m, N-2)) - L_{2,1}(E, l, N-1)R_{1,1}(E, m, N-2)t_i / t_A$$

$$M_{1,2}(E, N) = L_{1,2}(E, l, N-1)(R_{1,1}(E, m, N-2)E / t_A + R_{1,2}(E, m, N-2)) - L_{2,2}(E, l, N-1)R_{1,1}(E, m, N-2)t_i / t_A$$

$$M_{2,1}(E, N) = L_{1,1}(E, l, N-1)(R_{2,1}(E, m, N-2)E / t_A + R_{2,2}(E, m, N-2)) - L_{2,1}(E, l, N-1)R_{2,1}(E, m, N-2)t_i / t_A$$

$$M_{2,2}(E, N) = L_{1,2}(E, l, N-1)(R_{2,1}(E, m, N-2)E / t_A + R_{2,2}(E, m, N-2)) - L_{2,2}(E, l, N-1)R_{2,1}(E, m, N-2)t_i / t_A$$

siendo  $t_i = [1 + (-1)^n]t_A / 2 + [1 - (-1)^n]t_B / 2,$

$$W_{1,1}(E, r, s) = W_{1,1}(E, 1, s) \left[ W_{1,1}(E, r-1, s)E / t_A - W_{1,2}(E, r-1, s) \right] - W_{2,1}(E, 1, s)W_{1,1}(E, r-1, s)t_k / t_A$$

$$W_{1,2}(E, r, s) = W_{1,2}(E, 1, s) \left[ W_{1,1}(E, r-1, s)E / t_A - W_{1,2}(E, r-1, s) \right] - W_{2,2}(E, 1, s)W_{1,1}(E, r-1, s)t_k / t_A$$

$$W_{2,1}(E, r, s) = W_{1,1}(E, 1, s) \left[ W_{2,1}(E, r-1, s)E / t_A - W_{2,2}(E, r-1, s) \right] - W_{2,1}(E, 1, s)W_{2,1}(E, r-1, s)t_k / t_A$$

$$W_{2,2}(E, r, s) = W_{1,2}(E, 1, s) \left[ W_{2,1}(E, r-1, s)E / t_A - W_{2,2}(E, r-1, s) \right] - W_{2,2}(E, 1, s)W_{2,1}(E, r-1, s)t_k / t_A$$

$$W_{1,1}(E, 1, s) = M_{1,1}(E, s), \quad W_{1,2}(E, 1, s) = M_{1,2}(E, s), \quad W_{2,1}(E, 1, s) = M_{2,1}(E, s), \quad \text{y} \quad W_{2,2}(E, 1, s) = M_{2,2}(E, s)$$

Si  $W$  es igual a  $L$ , entonces  $r=l$ ,  $s=n-1$  y  $t_k = [1+(-1)^n]t_A/2 + [1-(-1)^n]t_B/2$  ó  $W=R$ , entonces  $r=m$ ,  $s=n-2$  y  $t_k = [1-(-1)^n]t_A/2 + [1+(-1)^n]t_B/2$ .

Las condiciones iniciales son

Para  $n=2$ ,  $l=1$ , y  $m=1$   $M_{1,1}(E,2) = E/t_B$ ,  $M_{1,2}(E,2) = t_A/t_B$ ,  $M_{2,1}(E,2) = 1$   $M_{2,2}(E,2) = 0$

Para  $n=2$ ,  $l=1$ , y  $m \geq 2$   $M_{1,1}(E,2) = R_{1,1}(E,m,1)E/t_B + R_{2,1}(E,m,1)$ ,  $M_{1,2}(E,2) = -R_{1,1}(E,m,1)t_A/t_B$   
 $M_{2,1}(E,2) = R_{2,1}(E,m,1)E/t_B + R_{2,2}(E,m,1)$ ,  $M_{2,2}(E,2) = -R_{2,1}(E,m,1)t_A/t_B$

Para  $n=2$ ,  $l \geq 2$ , y  $m=1$   $M_{1,1}(E,2) = L_{1,1}(E,l,1)E/t_B - L_{2,1}(E,l,1)t_A/t_B$ ,  
 $M_{1,2}(E,2) = L_{1,2}(E,l,1)E/t_B - L_{2,2}(E,l,1)t_A/t_B$ ,  $M_{2,1}(E,2) = L_{1,1}(E,l,1)$ ,  $M_{2,2}(E,2) = L_{1,2}(E,l,1)$

Para  $n=2$ ,  $l \geq 2$  y  $m \geq 2$  entonces

$$M_{1,1}(E,2) = L_{1,1}(E,l,1)(R_{1,1}(E,m,1)E/t_B + R_{1,2}(E,m,1)) - L_{2,1}(E,l,1)R_{1,1}(E,m,1)t_A/t_B$$

$$M_{1,2}(E,2) = L_{1,2}(E,l,1)(R_{1,1}(E,m,1)E/t_B + R_{1,2}(E,m,1)) - L_{2,2}(E,l,1)R_{1,1}(E,m,1)t_A/t_B$$

$$M_{2,1}(E,2) = L_{1,1}(E,l,1)(R_{2,1}(E,m,1)E/t_B + R_{2,2}(E,m,1)) - L_{2,1}(E,l,1)R_{2,1}(E,m,1)t_A/t_B$$

$$M_{2,2}(E,2) = L_{1,2}(E,l,1)(R_{2,1}(E,m,1)E/t_B + R_{2,2}(E,m,1)) - L_{2,2}(E,l,1)R_{2,1}(E,m,1)t_A/t_B$$

Si  $W$  es igual a  $L$ , entonces  $r=l$ , ó  $W=R$ , entonces  $r=m$ ,

$$W_{1,1}(E,r,1) = W_{1,1}(E,r-1,1)W_{1,1}(E,2,1) + W_{1,2}(E,r-1,1)W_{2,1}(E,2,1)$$

$$W_{1,2}(E,r,1) = W_{1,1}(E,r-1,1)W_{1,2}(E,2,1) + W_{1,2}(E,r-1,1)W_{2,2}(E,2,1)$$

$$W_{2,1}(E,r,1) = W_{2,1}(E,r-1,1)W_{1,1}(E,2,1) + W_{2,2}(E,r-1,1)W_{2,1}(E,2,1)$$

$$W_{2,2}(E,r,1) = W_{2,1}(E,r-1,1)W_{1,2}(E,2,1) + W_{2,2}(E,r-1,1)W_{2,2}(E,2,1)$$

$$L_{1,1}(E,2,1) = E/t_A, L_{1,2}(E,2,1) = -1, L_{2,1}(E,2,1) = 1, y L_{2,2}(E,2,1) = 0$$

$$R_{1,1}(E,2,1) = E/t_B, R_{1,2}(E,2,1) = -1, R_{2,1}(E,2,1) = 1, y R_{2,2}(E,2,1) = 0$$

Iterando los coeficientes podemos obtener el espectro de transmitancia para cualquier cadena de Fibonacci generalizado con diferentes longitudes, las cuales van desde la escala microscópica a la macroscópica

## Referencias

- [Aldabe, 2005] S. Aldabe y F. Doctorovich, *Materiales Cristalinos* (Ministerio de Educación ciencia y tecnología, 2005).
- [Anderson, 1958] P.W. Anderson, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958).
- [Angell, 1985] C. Angell, *Complex systems. In National Technical Information Service*; (Ngai, K., Wright, G.B., Eds.; US Department of Commerce: Springfield, VA, USA, 1985).
- [Ashcroft, 1976] N.W. Ashcroft y N.D. Mermin, *Solid State Physics* (Saunders College Publishing, 1976).
- [Askeland, 1998] D.R. Askeland, *Ciencia e Ingeniería de los Materiales* (International Thomson Editores, 1998).
- [Ben-Abraham, 1999] S.I. Ben-Abraham y F. Gähler, *Phys. Rev. B* **60**, 860, (1999).
- [Bellani, 1999] V. Bellani, E. Diez, R. Hey, L. Toni, L. Tarricone, G.B. Parravicini, F. Domínguez-Adame, y R. Gómez-Alcalá, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 2159 (1999).
- [Biggs, 1990] B.D. Biggs, S.J. Poon y N.R. Munirathnam, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2700, (1990).
- [Bindi, 2009] L. Bindi, P.J. Steinhardt, N. Yao, y P.J. Lu, *Science* **324**, 1306, (2009).
- [Bohr, 1925] H. Bohr, *Acta Math.* **45**, 29 (1925).
- [Bruijn, 1981] N.G. de Bruijn. *Mathematics Proceedings A* **84**, (1981).
- [Callister, 2007] W. Callister, *Materials Science and Engineering. An introduction*, (John Wiley & Sons Inc. 2007)
- [Dekker, 1958] A.J. Dekker, *Solid State Physics* (Prentice-Hall, 1958).
- [DiMarcio, 1981] E.A. DiMarcio, *Equilibrium theory of glasses*. (In Annals of the New York Academy of Sciences; O'Reilly, J.M., Goldstein, M., Eds.; Publ. New York Academy of Sciences: New York, NY, USA **371**, 1981).

- [Datta, 1995] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, (Cambridge University Press, London, 1995).
- [Drabold, 2009] D.A. Drabold, *Eur. Phys. J. B* **68**, 1 (2009).
- [Duan, 2005] F. Duan y J. Guojin, *Introduction to Condensed Matter Physics* (World Scientific, Vol. 1, 2005).
- [Dubois, 1997] J. M. Dubois, *New Horizons in Quasicrystals: Research and Applications* (Ed. A.I. Goldman *et.al.* Singapore: World Scientific, 1997)
- [Dubois, 2000] J.M. Dubois, P. Brunet y E. Belin-Ferré, *Quasicrystals: Current Topics* (Ed. E. Belin-Ferré *et.al.* Singapore: World Scientific, 2000).
- [Dubois, 2005] J.M. Dubois, *Useful Quasicrystals*. (World Scientific, Singapore London, 2005).
- [Economou, 2006] E.N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics* (Springer Series in Solid-State Sciences, **7**, 2006).
- [Economou, 1981] E.N. Economou y C.M. Soukoulis, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 618 (1981).
- [Eisenhammer, 1994] T. Eisenhammer y M. Lazarov, *German Patent* No 4425140 (1994).
- [Eisenhammer, 1997] T. Eisenhammer, *New Horizons in Quasicrystals: Research and Applications* (Ed A.I. Goldman *et.al.* Singapore: World Scientific, 1997).
- [Elliott, 1990] S.R. Elliott, *Physics of Disordered Materials*, (2nd ed. Longman, Essex, UK, 1990).
- [Flores, 1989] J.C. Flores, *J. Phys.: Condens Mater* **1**, 8471 (1989).
- [Flory, 1967] P. Flory. *Principles of Polymer Chemistry*; (Cornell University Press: Ithaca, NY, USA, 1967).
- [Fujiwara, 1989] T. Fujiwara, *Phys. Rev. B*, **40**, 942 (1989).
- [Gardner, 1977] M. Gardner, *Sci. Amer.* **236**, 110 (1977).

- [Godrèche, 1991] C. Godrèche. *Phase Transitions: Multinational Journal*, **32**, 45 (1991).
- [Grünbaum, 1987] B. Grünbaum, G.C. Shephard, *Tilings and Patterns*. (W.H. Freeman and Company, New York 1987).
- [Gumbs, 1988] G. Gumbs and M.K. Ali, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1081 (1988); M. Holzer, *Phys. Rev. B* **38**, 1709 (1988); M. Severin y R. Riklund, *Phys. Rev. B* **39**, 10 362 (1989); M. Severin, M. Dulea, y R. Riklund, *Phys. Rev. B* **1**, 8851 (1989); G.Y. Oh y M.H. Lee, *Phys. Rev. B* **48**, 12 465 (1993); S. Sil, S.N. Karmakar, y R.K. Moitra, *Phys. Rev. B.* **48**, 4192 (1993); J.X. Zhong, T. Xie, J.Q. You, y J.R. Yan, *Z. Phys. B: Condens. Matter* **87**, 223 (1992).
- [Hans-Rainer, 2003] Hans-Rainer Trevin. *Quasicrystals*. (WILEY-VCH GmbH & Co. KGaA, 2003)
- [Hippert, 2008] F. Hippert y J.J. Prejean. *Philosophical Magazine*, **88**, 2175 (2008).
- [Huang, 2003] X. Huang, J. Cai y J. Liu, *Am. Chem. Soc.* **125**, 5636 (2003).
- [Hume-Rothery , 1926] W. Hume-Rothery, *J. Inst. Met.* **35**, 295 (1926).
- [Inoue, 2000] A. Inoue. *Acta Mater*, **48**, 279 (2000).
- [Imry, 1999] Y. Imry y R. Landauer, *Rev. Mod. Phys.* **71**, S306 (1999).
- [Ishii, 1973] K. Ishii, *Suppl. Prog. Theor. Phys.* **53**, 77 (1973).
- [Ishii, 2001] Y. Ishii, T. Fujiwara, *Phys. Rev. Lett.* **87** (2001).
- [Izrailev, 1999] F.M. Izrailev y A.A. Krokhin, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 4062 (1999).
- [Janssen, 2007] T. Janssen, G. Chapuis y M. de Boissieu, *Aperiodic Crystals* (Oxford University Press, 2007).
- [Kelton, 1997] K.F. Kelton, A.M. Viano, R.M. Stroud, E.H. Majzoub, P.C. Gibbons, S.T. Misture, A.I. Goldman y M.J. Kramer. *New Horizons in Quasicrystals: Research and Applications* (Ed. A.I. Goldman *et.al.* Singapore: World Scientific, 1997).

- [Kittel, 2005] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics* (John Wiley & Sons, 2005).
- [Kohmoto, 1983] M. Kohmoto, L.P. Kadanoff, y C. Tang, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1870 (1983).
- [Kohmoto, 1987] M. Kohmoto, L.P. Kadanoff, y C. Tang, *Phys. Rev. B* **35**, 1020 (1987).
- [Kolář, 1990] M. Kolář y M.K. Ali, *Phys. Rev. B* **41**, 7108 (1990).
- [Lançon, 1988] F. Lançon, y L. Billard. *J. Phys. (France)* **49**, 249 (1988).
- [Landauer, 1957] R. Landauer, *IBM J. Res. Dev.* **1**, 223 (1957).
- [Landauer, 1970] R. Landauer, *Philos. Mag.* **21**, 863 (1970).
- [Landauer, 1992] R. Landauer, *Physica Scripta* **T42**, 110 (1992).
- [Levine, 1984] D. Levine y P.J. Steinhardt. *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2477 (1984).
- [Levine, 1986] D. Levine y P.J. Steinhardt. *Phys. Rev. B* **34**, 596 (1986).
- [Lifshitz, 2007] R. Lifshitz y H. Diamant. *Philosophical Magazine* **87**, 3021 (2007).
- [Luck, 1993] J.M. Luck, C. Godreche, A. Janner y T. Janssen. *Journal of Physics A: Mathematical and General* **26**, 1951 (1993).
- [Ma, 2005] E. Ma. *Prog. Matls. Sci.* **50**, 413 (2005).
- [Maciá, 2006] E. Maciá. *Rep. Prog. Phys.* **69**, 397 (2006).
- [Matsubara, 1991] H. Matsubara, S. Ogawa, K. Kinoshita, K. Kishi, S. Takeuchi, K. Kimura y S. Suga, *J. Jpn. Appl. Phys.* **30**, L389 (1991).
- [Mott, 1961] N.F. Mott y W.D. Twose, *Adv. Phys.* **10**, 107 (1961).
- [McBride, 2005] W. McBride, D. McKenzie; D. McCulloch; D. Cockayne y T. Petersen, *J. Non-Cryst. Solids* **351**, 413 (2005).
- [Naumis, 1999] G.G. Naumis, *Phys. Rev. B* **59**, 11315 (1999).
- [Naumis, 2003] G.G. Naumis, *Ciencias* **54**, 4 (2003).

- [Ostlund, 1993] S. Ostlund, R. Pandit, D. Rand, H. J. Schellnhuber, y E. Siggia, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1873 (1983).
- [Oviedo-Roa, 2000] R. Oviedo-Roa, L.A. Pérez, y C. Wang, *Phys. Rev. B* **62**, 13 805 (2000).
- [Papadopolos, 2002] Z. Papadopolos, G. Kasner, J. Ledieu, E.J. Cox, N.V. Richardson, Q. Chen, R.D. Diehl, T. A. Lograsso, A. R. Ross y R. McGrath. *Physical Review B* **66**, 184207 (2002).
- [Penrose, 1974] R. Penrose. *Bull. Inst. Math, Appl.* **10**, 266 (1974).
- [Penrose, 1979] R. Penrose, *The Mathematical Intelligencer* **2**, 32 (1979).
- [Phillips, 1990] P. Phillips, D.H. Dunlap y H.L. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 88 (1990).
- [Roche, 1997] S. Roche, G. Trambly de Laissardiére, y D. Mayou. *Journal of Mathematical Physics* **38**, 1794 (1997).
- [Sánchez, 2001] V. Sánchez, L.A. Pérez, R. Oviedo-Roa y C. Wang, *Phys. Rev. B* **64**, 174205 (2001).
- [Sánchez, 2004] V. Sánchez y C. Wang, *Phys. Rev. B* **70**, 144207 (2004).
- [Sato, 2000a] T.J. Sato, H. Takakura, A.P. Tsai, K. Ohoyama, K. Shibata, y K.H. Andersen. *Materials Science and Engineering A* **294**, 481 (2000).
- [Sato, 2000b] T.J. Sato, H. Takakura, A.P. Tsai, K. Shibata, K. Ohoyama, y K.H. Andersen. *Phys. Rev. B* **61**, 476 (2000).
- [Shechtman, 1984] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, y J.W. Cahn. *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1951 (1984).
- [Stadnik, 1999] Z.M. Stadnik, *Physical Properties of Quasicrystals*. (Springer, Berlin Heidelberg New York, 1999).
- [Steurer, 2009] W. Steurer. *Crystallography of Quasicrystals*. (Springer, Berlin Heidelberg New York, 2009).



- [Szwacka, 2000] T. Szwacka, *Introducción a la física del estado sólido: CRISTALOGRAFÍA* (Departamento de Física, Universidad de Los Andes, 2000).
- [Takano, 2004] A. Takano, S. Wada, S. Sato, T. Araki, K. Hirahara, T. Kazama, S. Kawahara, Y. Isono, A. Ohno, N. Tanaka y Y. Matsushita. *Macromolecules* **37**, 9941 (2004).
- [Tsai, 1987] A.P. Tsai, A. Inoue, y T. Masumoto, *Jpn. J. Appl. Phys.* **26** 1505 (1987).
- [Tsai, 1989] A.P. Tsai, A. Inoue, Y. Bizen y T. Masumoto, *Acta Met.* **37** 1443 (1989).
- [Tsai, 1990] A.P. Tsai, Y. Yokoyama, A. Inoue y T. Masumoto, *Mater. Trans. Japan Inst. Met.* **31**, 98 (1990).
- [Tsai, 1994] A.P. Tsai, A. Niikura, A. Inoue y T. Masumoto. *Phil. Mag. Lett.* **70**, 169 (1994).
- [Tsai, 1999] A.P. Tsai. *Physical Properties of Quasicrystals*. (Springer Series in Solid-State Physics, 1999).
- [Tsai, 2000] A.P. Tsai, J. Guo, E. Abe, H. Takakura y T. Sato. *Nature* **408**, 537 (2000).
- [Torquato, 2002] S. Torquato. *Random Heterogenous Materials*. (Springer-Verlag: New York, NY, USA, 2002).
- [Tulk, 2002] C. Tulk, C. Benmore, J. Urquidi; D. Klug, J. Neufeind, B. Tomberli y P. Egelstaff, *Science* **297**,1320 (2002).
- [Waser, 2007] R. Waser y M. Aono, *Nature Materials* **6**, 833 (2007).
- [Wuttig, 2007] M. Wuttig y N. Yamada, *Nature Materials* **6**, 824 (2007).
- [Yavari, 1988] A. Yavari. *Acta Metall* **36**, 1863 (1988).
- [Yoshimura, 2002] M. Yoshimura y A.P. Tsai *J. Alloys Compounds* **342**, 451 (2002).
- [Yuan, 2000] H.Q. Yuan, U. Grimm, P. Repetowicz y M. Schreiber, *Phys. Rev. B* **62**, 15569 (2000).

- [Wang, 2005] G. Wang, J. Shen, J. Sun, B. Zhou, Fitz Gerald, D. Llewellyn y Z. Stachurski, *Scrip. Mater.* **53**, 641 (2005).
- [Warren, 1934] B. Warren. *J. Am. Ceram. Soc.* **17**, 249 (1934).
- [Welberry, 2004] T. Welberry. *Diffuse X-Ray Scattering and Models of Disorder*; (Oxford University Press: Oxford,UK, 2004).
- [Zachariasen, 1932] W. Zachariasen. *J. Am. Chem. Soc.* **54**, 3841 (1932).
- [Zallen, 1998] R. Zallen, *The physics of amorphous solids*. (Wiley classics library, 1998).
- [Zeng, 2004] X. Zeng, G. Ungar, Y. Liu, V. Percec, A.E. Dulcey y J.K. Hobbs, *Nature* **428**, 157 (2004).