



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MEXICO**  
**MAESTRÍA EN CIENCIAS (FÍSICA)**

**TRANSPORTE ELECTRÓNICO Y DENSIDAD DE ESTADOS EN SISTEMAS NO  
PERIÓDICOS**

**TESIS**  
**QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:**  
**MAESTRO EN CIENCIAS**

**PRESENTA:**  
**LUIS ANTONIO GALEOTE GUEVARA**

**TUTOR PRINCIPAL**  
**DRA. VICENTA SÁNCHEZ MORALES**  
**FACULTAD DE CIENCIAS**

**MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR**  
**DR. CHUMIN WANG CHEN**  
**INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN MATERIALES**

**DR CARLOS RAMÍREZ RAMOS**  
**FACULTAD DE CIENCIAS**

**CIUDAD DE MÉXICO**  
**ENERO 2020**



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.

## Resumen

Un buen entendimiento teórico de las características y comportamiento de los materiales con o sin impurezas es esencial para el desarrollo de nuevas tecnologías. Siendo uno de los grandes desafíos en la física de la materia condensada el poder predecir propiedades de distintos tipos de heteroestructuras e interpretar experimentos. En particular, estudiar el transporte electrónico de los sólidos con impurezas contribuye al conocimiento en esta línea de investigación. En el presente trabajo se estudia conductancia eléctrica y densidad de estados (*DOS*) para sistemas bidimensionales de tamaño macroscópico con y sin impurezas tipo Fano. Las redes seleccionadas fueron triangulares, hexagonales y cuadradas. El formalismo utilizado fue el de amarre fuerte, la fórmula de Kubo-Greenwood y la función de Green. Al introducir impurezas en los sistemas impide el uso de teorías aplicadas comúnmente en la física de estado sólido, tales como el espacio recíproco o el teorema de Bloch, además de que, la inversión directa para la función de Green es impráctica para sistemas macroscópicos, ya que el número de operaciones y, por lo tanto, el tiempo computacional, crecen como el número de sitios al cubo al no tener simetrías. Entonces para abordar redes de tamaño de  $10^{10}$  átomos, se desarrollaron métodos de renormalización en espacio real para todas las cantidades antes mencionadas. El análisis de resultados de esta tesis nos conduce a notar que la presencia de impurezas Fano tiene efectos en la densidad de estados de sistemas triangulares y hexagonales a partir 0.01%. Su adición genera bandas prohibidas que no existen en los sistemas periódicos, además de presentar un pico en el espectro de los sistemas triangulares. El tamaño del gap que aparece en la *DOS*, tanto en las redes triangulares como hexagonales, aumenta al crecer el valor de las energías de sitio en la impureza, así como al hacer mayor la integral de salto. Por otro lado, la amplitud de la banda prohibida se mantiene fija al crecer la cantidad de impurezas, esto únicamente genera un incremento de los sitios disponibles en las bandas no prohibidas. Con respecto a la conductancia eléctrica en redes cuadradas la inclusión de las impurezas destruye la cuantización del espectro y forman nuevas bandas de energía prohibida dependiendo de la longitud de la cadena acoplada. Finalmente se demostró la existencia de un estado balístico para diferentes planos de impurezas tipo Fano.

# Contenido

Introducción.....	3
1 Transporte Electrónico.....	4
1.1 Modelo de Drude.....	4
1.2 Ecuación de Boltzmann .....	5
1.3 Conductancia de Landauer.....	7
1.4 Función de Green .....	8
1.5 Hamiltoniano de Amarre Fuerte .....	9
1.6 Densidad de estados.....	11
1.7 Matriz de Transferencia .....	12
1.8 Fórmula de Kubo-Greenwood .....	13
2 Estructura.....	18
2.1 Cristales.....	19
2.2 Teorema de Bloch.....	22
2.3 Espacio Recíproco y Espacio Real.....	22
2.4 Sólidos Amorfos .....	23
2.5 Cuasiperiodicidad .....	24
2.6 Cadena de Fibonacci .....	26
2.7 Impurezas.....	29
3 Renormalización en Espacio Real .....	30
3.1 Filosofía del Método .....	30
3.2 Renormalización para Fórmula de Kubo-Greenwood.....	32
3.3 DOS para redes triangulares .....	34
3.4 DOS para redes hexagonales .....	35
4 Densidad de Estados .....	37
4.1 Red Triangular.....	37
4.2 Red Hexagonal.....	41
5 Conductividad de Kubo-Greenwood.....	44
6 Conclusiones .....	47
Apéndice A: Renormalización de Kubo-Greenwood.....	49
Apéndice B: DOS para red triangular y hexagonal.....	52
Bibliografía .....	59

## Introducción

Actualmente existen grandes expectativas en el desarrollo de nuevos productos y dispositivos basados en el estudio de sistemas a escala nanométrica, tal es el caso de la industria de los procesadores, donde algunos transistores llegan a tener un tamaño cercano a los cien átomos (Ferry, 2008). Similarmente, los nanoalambres y nanocintas (nanoribbons) han tomado un papel importante en la fabricación de electrónicos, optoelectrónicos (Kind, 2002) y catalizadores (Sun, 2014). La adición de impurezas a estas estructuras puede considerarse como una mejora, ya que, al estar formados de más de un tipo de material, permite aprovechar propiedades de ambos o nuevas características provenientes de la unión.

El objetivo de este trabajo es cuantificar el efecto de las impurezas en la densidad de estados y el transporte electrónico para sistemas bidimensionales triangulares, hexagonales y cuadrados, esto a través del método de renormalización en espacio real para la fórmula de Kubo-Greenwood y la densidad de estados, permitiendo analizar sistemas que van desde varios cientos de átomos hasta  $10^{10}$ . La presente tesis se organiza de la siguiente forma; en el capítulo 1 se estudia la teoría del transporte electrónico. En este apartado describimos algunas formas de abordar el estudio de la conductividad, desde un punto de vista clásico hasta uno cuántico, presentando el modelo de Drude, la ecuación de Boltzmann, el formalismo de Landauer y la fórmula de Kubo-Greenwood, además de abordar la descripción y obtención de la función de Green para la densidad de estados electrónica. En el segundo capítulo se revisan algunos conceptos de estado sólido, resumiendo propiedades que caracterizan sistemas periódicos y no periódicos, enunciando el teorema de Bloch y haciendo una descripción del espacio recíproco y sus consecuencias. El capítulo 3 describe los métodos de renormalización en espacio real utilizados durante el trabajo, desarrollados para la fórmula de Kubo-Greenwood y la densidad de estados bidimensional. En el capítulo 4 y 5 presentamos un estudio exhaustivo de los efectos de las impurezas en la densidad de estados y transporte electrónico, respectivamente, utilizando los métodos descritos en el tercer capítulo. Finalmente se presentan las conclusiones de esta investigación, así como dos apéndices que detallan los métodos de renormalización.

# 1 Transporte Electrónico

El estudio de la conducción electrónica en sólidos no cristalinos ocupa un lugar privilegiado en la Física de Estado Sólido, sin embargo, sigue siendo uno de los mayores retos, ya que combina cuestiones de gran dificultad, como lo son fenómenos fuera del equilibrio y el desorden estructural. A lo largo de este capítulo nos centraremos en la presentación de teorías para la descripción del transporte electrónico a distintos niveles de sofisticación, comenzando por el modelo clásico para la conducción en sistemas metálicos; el modelo de Drude, el cual no es suficiente para describir las implicaciones cuánticas del transporte, para resolver este obstáculo, examinaremos métodos que tratan la teoría de conducción electrónica tomando en cuenta dichos efectos, además de permitir explorar el desorden inherente de los sistemas.

## 1.1 Modelo de Drude

Tras el descubrimiento del electrón por parte de J. J. Thomson, Paul Drude desarrolló un modelo para la corriente eléctrica aplicando teoría cinética de los gases (*TCG*) a un metal, considerando a los electrones como un gas (Neil W. Ashcroft, 1976).

La teoría cinética considera las partículas en un gas como esferas sólidas que se mueven en línea recta hasta colisionar con otra o con las paredes del recipiente que lo contiene, aunque esto último es generalmente ignorado al tratar electrones en un metal. Usualmente en *TCG* se considera un solo tipo de partículas, sin embargo, aquí deben ser al menos dos, ya que los electrones poseen carga negativa y el metal es neutro en su totalidad. Para compensar eso, son tomados en cuenta iones positivos (pesados) inmóviles.

La aplicación de *TCG* se realiza partiendo de las siguientes suposiciones:

- a) El gas electrónico se mueve libremente entre colisiones, despreciando la interacción electromagnética ion-electrón y electrón-electrón.
- b) Las colisiones con los iones son elásticas e instantáneas, mientras que las colisiones entre electrones se desprecian por ser consideradas infrecuentes.

- c) La probabilidad de colisión con un ion por unidad de tiempo es  $1/\tau$ , por lo que la probabilidad en un intervalo temporal infinitesimal  $dt$  es  $dt/\tau$ .
- d) El equilibrio térmico se alcanza únicamente a través de colisiones.

Utilizando esto, en conjunto con la Ley de Ohm y la distribución de velocidades de Maxwell-Boltzmann, la conductividad es:

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m_e}, \quad (1)$$

donde  $n$  es la densidad de electrones,  $\tau$  el tiempo de relajación del gas,  $m_e$  la masa del electrón y  $e$  la carga del electrón.

Este modelo, a pesar de otorgar un resultado *simple* para la conductividad, tiene algunos problemas, puesto que recae principalmente en el tiempo de relajación, tomándolo como una constante, aunque en realidad depende de la temperatura cuando ésta es finita. Adicionalmente, no considera efectos cuánticos, ya que parte de teorías clásicas y sólo es aplicable a sistemas macroscópicos.

## 1.2 Ecuación de Boltzmann

Fuera del equilibrio térmico, es posible utilizar la función de distribución de Fermi-Dirac, la cual obedece la siguiente ecuación de movimiento (la ecuación de Boltzmann):

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{tr} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c, \quad (2)$$

que denota la evolución en el tiempo de la función de distribución debido a traslaciones en el espacio fase  $(\partial f/\partial t)_{tr}$  y a colisiones  $(\partial f/\partial t)_c$ . Las cuales pueden escribirse como

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{tr} = -\dot{\vec{r}} \cdot \nabla_r f - \dot{\vec{p}} \cdot \nabla_p f = -\dot{\vec{v}} \cdot \nabla_v f + e \left( \mathbb{E} + \frac{1}{c} \vec{v} \times \vec{H} \right) \cdot \nabla_p f, \quad (3)$$

y

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c = -\frac{f - f_0}{\tau}, \quad (4)$$

donde  $f_0$  es la función de distribución del sistema en equilibrio y  $\tau$  es el tiempo de relajación. Sin embargo, la ecuación sigue siendo difícil de resolver en forma general, por lo cual consideraremos el caso estacionario, es decir, con  $df/dt = 0$  y tomando en cuenta que  $f$  no tiene dependencia explícita del tiempo ( $\partial f/\partial t = 0$ ), el problema se reduce a

$$\vec{v} \cdot \nabla_v f - e \left( \mathbb{E} + \frac{1}{c} \vec{v} \times \vec{H} \right) \cdot \nabla_p f + \frac{f - f_0}{\tau} = 0. \quad (5)$$

En el análisis de la conductividad eléctrica, se considera un sistema homogéneo ( $\nabla_r f = 0$ ) en ausencia de campo magnético ( $\vec{H} = 0$ ), simplificando la ecuación a

$$f = f_0 + e\tau \mathbb{E} \cdot \nabla_p f \cong f_0 + e\tau \mathbb{E} \cdot \nabla_p f_0, \quad (6)$$

ya que el campo eléctrico aplicado ( $\mathbb{E}$ ) es mucho menor al del interior del sólido, haciendo que sólo se preserve el término lineal del campo aplicado (Ashcroft, 1976).

Por otro lado, la densidad de corriente puede escribirse de la siguiente forma

$$\vec{J} = -\frac{2}{(2\pi)^3} \iiint e\vec{v}f(k)d^3k, \quad (7)$$

que debe contener el 2 en el numerador inicial debido al espín electrónico. Con esto, podemos sustituir el valor de  $f$  en la corriente, llegando a

$$\vec{J} = -\frac{e^2}{4\pi^3} \iiint \tau \vec{v} \vec{E} \cdot \nabla_p E \frac{\partial f_0}{\partial E} d^3k = \frac{e^2}{4\pi^3} \iint_{S_F} \tau \vec{v} \mathbb{E} \cdot \vec{v} \frac{dS}{|\nabla_k E|}, \quad (8)$$

donde la integral de  $f_0$  no contribuye a la conductividad, además, la derivada parcial respecto a la energía de  $f_0$  es aproximadamente una delta de Dirac, es decir,  $\partial f_0/\partial E \approx -\delta(E - E_F)$ , con  $E_F$  la energía de Fermi. Por otro lado, la doble integral se realiza sobre la superficie de Fermi del sistema ( $S_F$ ).

Considerando un material isotrópico, si el campo eléctrico se aplica en una sola dirección ( $x$ ), tenemos  $\mathbb{E} = \varepsilon_x \hat{x}$ , se tiene que



$$J_x = \frac{e^2}{4\pi^3} \iint_{S_F} \tau v_x^2 \frac{dS}{|\nabla_k E|} \varepsilon_x = \sigma \varepsilon_x, \quad (9)$$

donde la conductividad queda dada por

$$\sigma = \frac{e^2}{4\pi^3} \iint_{S_F} \tau v_x^2 \frac{dS}{|\nabla_k E|}, \quad (10)$$

y si además tomamos el caso de electrones libres, el resultado se reduce a

$$\sigma = \frac{ne^2\tau(E_F)}{m}, \quad (11)$$

que es un resultado similar al obtenido en la sección anterior, sin embargo, aquí el tiempo de relajación depende de la energía de Fermi, mientras que el modelo de Drude lo considera como una constante.

### 1.3 Conductancia de Landauer

Hasta ahora hemos trabajado con la conductividad ( $\sigma$ ), la cual es una cantidad intensiva, mientras que la conductancia ( $G$ ) es extensiva, teniendo como ecuación de correlación:

$$G = \frac{1}{R} = \frac{\sigma A}{L}, \quad (12)$$

con  $R$  la resistencia,  $A$  y  $L$  el área transversal y la longitud del conductor, respectivamente.

Ahora, si trabajamos con un único canal de conducción y lo consideramos un conductor perfecto, podemos utilizar la ecuación anterior para calcular la corriente unidimensional:

$$I = -\frac{1}{\pi} \int e v f(k) dk = -\frac{e}{\pi} \int \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} dk = -\frac{e}{\pi \hbar} \int_{\mu_1}^{\mu_2} dE = -\frac{e(\mu_2 - \mu_1)}{\pi \hbar}, \quad (13)$$

donde los potenciales químicos ( $\mu_1$  y  $\mu_2$ ) cumplen que  $\mu_2 - \mu_1 = -eV$ , con  $V$  la diferencia de voltaje entre los extremos del conductor.

Con esto, y utilizando la ley de Ohm en (12), tenemos

$$G = \frac{I}{V} = \frac{2e^2}{\hbar}, \quad (14)$$

que es el cuanto de conductancia, de modo que si se consideran  $N$  canales unidimensionales con una probabilidad  $T$  de transmitirse de un extremo del canal al otro, la conductancia total del sistema es

$$G = TN \frac{2e^2}{\hbar}, \quad (15)$$

la cual es la conductancia de Landauer, reduciendo el problema a encontrar el valor de  $T$ .

Es importante mencionar que, bajo este formalismo, la distribución de potencial se debe al flujo de electrones en el conductor, mientras que en otros casos se considera a la corriente como una consecuencia del voltaje aplicado. Por otra parte, si el potencial es promediado sobre una región lo suficientemente grande para inhibir las oscilaciones debido a interferencias, la transmitancia  $T$  se reemplaza por  $T/(1 - T)$ , es decir (Y. Imry, 1999):

$$G = \frac{T}{1 - T} N \frac{2e^2}{\hbar}. \quad (16)$$

La principal diferencia entre estos dos resultados proviene de los saturadores conectados al sistema, esto es, si son conductores perfectos, debe utilizarse el primer resultado, pero si se trata de fuentes de corriente, es necesario ocupar el último (Datta, 1995). En la sección 1.7 se mostrará una forma de obtener la transmitancia  $T$ .

## 1.4 Función de Green

Antes de continuar con las siguientes teorías de conducción, es necesario hacer un paréntesis matemático para hablar de la función de Green y cómo ésta nos ayudará a estudiar propiedades físicas en nuestros sistemas.

La solución a una ecuación diferencial no homogénea (sujeta a condiciones de frontera) del siguiente tipo

$$[z - L(r)]G(r, r'; z) = \delta(r - r') \quad (17)$$

es conocida como función de Green, con  $z = \lambda + is \in \mathbf{C}$ , es decir,  $\lambda = \text{Re}(z)$  y  $s = \text{Im}(z)$ , mientras que  $L(r)$  es un operador lineal, independiente del tiempo y Hermitiano. Las eigenfunciones de  $L(r)$  son un conjunto ortonormal dado por  $\{\varphi_n(r)\}$ , que satisfacen las mismas condiciones de frontera que  $G(r, r'; z)$ .

Con lo que, en función de  $\varphi_n(r)$ , es posible escribir  $G(r, r'; z)$ , como

$$G(r, r'; z) = \sum_n \frac{\varphi_n(r)\varphi_n^*(r')}{z - l_n} + \int dc \frac{\varphi_c(r)\varphi_c^*(r')}{z - l_c}, \quad (18)$$

donde  $l_n$  es el eigenvalor correspondiente a la función propia  $\varphi_n(r)$ . Aquí, se considera la suma para el espectro discreto de  $l_n$  y la integral para el continuo. Con esto,  $G(r, r'; z)$  es una función analítica en el plano complejo, excepto para algunos segmentos o puntos del eje real, dados por  $l_n$  (Economou E. , 2005).

## 1.5 Hamiltoniano de Amarre Fuerte

El Hamiltoniano de Amarre Fuerte (TBH) es un modelo que permite estudiar transporte electrónico en banda S, además de describir estados electrónicos en sistemas no necesariamente periódicos. Por su simplicidad, es posible estudiar impurezas y desórdenes estructurales al modificar las energías correspondientes. Este Hamiltoniano tiene la siguiente forma:

$$\hat{H} = \sum_l |l\rangle \varepsilon_l \langle l| + \sum_{l \neq m} |l\rangle T_{lm} \langle m|, \quad (19)$$

donde  $|l\rangle$  son funciones que describen orbitales atómicos ortonormales localizados en el sitio  $l$  (funciones de Wannier), con  $\varepsilon_l$  la energía de sitio y  $T_{lm}$  son las energías o integrales de salto, esto es, la amplitud de probabilidad de transición entre el sitio  $l$  y  $m$ . Una vez conocido el Hamiltoniano, podemos utilizar la siguiente ecuación

$$[E_s \hat{I} - \hat{H}] \hat{G}(E) = \hat{I}, \quad (20)$$

cuya solución es una función de Green, mientras que  $E_s = E + is$ . La función de Green que es solución estará dada en términos de los eigenvalores  $E_n$  y las eigenfunciones  $\varphi_n$  del Hamiltoniano:

$$G(r, r'; E) = \sum_n \frac{\varphi_n(r)\varphi_n^*(r')}{E_s - E_n} + \int dc \frac{\varphi_c(r)\varphi_c^*(r')}{E_s - E_c}. \quad (21)$$

Dado el Hamiltoniano en la base correcta, es posible expresarlo como una matriz y por consecuencia, también la función de Green, que esquemáticamente sería

$$\mathbf{G} = [\mathbf{E}_s - \mathbf{H}]^{-1}, \quad (22)$$

con lo que podemos definir dos funciones de  $E$ , que son:

$$G^+(r, r'; E) \equiv \lim_{s \rightarrow 0^+} G(r, r'; E + is), \quad (23)$$

$$G^-(r, r'; E) \equiv \lim_{s \rightarrow 0^+} G(r, r'; E - is), \quad (24)$$

las cuales satisfacen

$$G^-(r, r', E) = [G^+(r, r', E)]. \quad (25)$$

Ahora, utilizando la siguiente identidad que relaciona el límite de una fracción compleja con la parte principal de una real

$$\lim_{y \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm iy} = P \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x), \quad (26)$$

y definiendo la diferencia entre las funciones anteriores como

$$\tilde{G}(E) = G^+(E) - G^-(E), \quad (27)$$

se obtiene

$$\tilde{G}(r, r', E) = -2\pi i \sum_n \delta(E - E_n) \varphi_n(r)\varphi_n^*(r'). \quad (28)$$

Por otro lado, para los elementos de la diagonal de  $G^\pm(r, r'; E)$ , con  $r = r'$ , se tiene

$$G^{\pm}(r, r; E) = P \sum_n \frac{\varphi_n(r)\varphi_n^*(r)}{E - E_n} \mp i\pi \sum_n \delta(E - E_n) \varphi_n(r)\varphi_n^*(r), \quad (29)$$

que al integrarse sobre toda  $r$  nos da la traza de la función de Green, esto es:

$$\int dr G^{\pm}(r, r; E) = Tr\{G^{\pm}(E)\} = P \sum_n \left[ \frac{1}{E - E_n} \right] \mp i\pi \sum_n \delta(E - E_n), \quad (30)$$

siendo  $\sum_n \delta(E - E_n)$  la densidad de estados ( $DOS$ ) en función de la energía  $E$ , es decir

$$DOS(E) = \mp Im\{Tr[G^{\pm}(E)]\}. \quad (31)$$

En la siguiente sección se profundizará en el significado de este resultado.

## 1.6 Densidad de estados

La densidad de estados  $DOS(E)$  de un sistema es el número de estados disponibles en un intervalo de energía  $(E, E + dE)$  y es esencial para determinar la concentración de portadores de carga y la distribución de energías en un semiconductor.

La densidad de estados juega un papel fundamental en la teoría cinética de los sólidos, ya que es utilizada para calcular propiedades físicas de la materia, apareciendo en varias áreas de la física, explicando, entre otras cosas, fenómenos de la mecánica cuántica.

Un ejemplo de esto es que, en sistemas reducidos, la distribución electrónica cambia al variar la dimensionalidad; para nanoalambres, la densidad de estados de ciertas energías se vuelve mayor que en el problema de bulto (bulk), mientras que, en puntos cuánticos, los electrones están cuantizados a ciertas energías como deltas de Dirac (Chen, 2005).

Las propiedades macroscópicas como el calor específico, la susceptibilidad magnética y otros fenómenos de transporte dependen de la densidad de estados, ya que dichas propiedades se ven ponderadas por ella, al depender del ordenamiento y comportamiento electrónico o fonónico.

## 1.7 Matriz de Transferencia

Consideremos una cadena de  $N$  átomos (finita) conectada en sus extremos a dos saturadores periódicos semi-infinitos. Para este caso, a partir del Hamiltoniano de amarre fuerte, tomaremos autoenergías  $\{\varepsilon_n\}$  y energías de salto a primeros vecinos  $\{t_{n,n+1}\}$ , además de dar a los saturadores parámetros periódicos  $\varepsilon_0$  y  $t$ .

Dentro de este formalismo, la ecuación de Schrödinger estacionaria puede verse en forma matricial como

$$\mathbf{C}_{n+1} = \mathbf{T}_n \mathbf{C}_n, \quad (32)$$

con  $\mathbf{T}_n$ , la matriz de transferencia y  $\mathbf{C}_n$  el vector de amplitudes de onda en la base de los orbitales atómicos localizados, dados por

$$\mathbf{T}_n = \begin{pmatrix} \frac{E - \varepsilon_n}{t_{n,n+1}} & -\frac{t_{n,n-1}}{t_{n,n+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (33)$$

y

$$\mathbf{C}_n = \begin{pmatrix} c_n \\ c_{n-1} \end{pmatrix}. \quad (34)$$

En el caso de un sistema unidimensional (no necesariamente periódico), el producto de las matrices de transferencia, que siguen el mismo ordenamiento que los átomos, describe la propagación de un electrón a lo largo de toda la cadena:

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbf{T}_N \mathbf{T}_{N-1} \dots \mathbf{T}_2 \mathbf{T}_1 = \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix}. \quad (35)$$

Tomando una energía  $E$  dentro de una banda permitida de la cadena, lo cual está definido por la densidad de estados, las ondas planas en los saturadores son de la forma

$$\varphi_n(k) = \begin{cases} Ae^{ikna} + Be^{-ikna}, & n \leq 1 \\ Ce^{ikna} + De^{-ikna}, & n \geq N' \end{cases} \quad (36)$$

donde  $E$  y  $\varepsilon_0$  se relacionan con  $k$  a través de la relación de dispersión

$$\cos ka = \frac{E - \varepsilon_0}{2t}, \quad (37)$$

y para el caso en que un electrón incide por el extremo izquierdo de la cadena (desde  $n = 1$ ), se tiene que  $k > 0$ ,  $A = 1$ ,  $B = r$ ,  $C = \varkappa$ ,  $D = 0$ , con  $r$  y  $\varkappa$  las amplitudes de reflectancia y transmitancia respectivamente, que satisfacen

$$|\varkappa|^2 + |r|^2 = 1. \quad (38)$$

Tomando lo anterior (Süto, 1994), se llega a la siguiente relación

$$\begin{pmatrix} \varkappa e^{ik(N+1)a} \\ \varkappa e^{ikNa} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ika} + r e^{-ika} \\ 1 + r \end{pmatrix}, \quad (39)$$

que nos lleva a los valores para  $\varkappa$  y  $r$ :

$$\varkappa = -\frac{2i(\sin ka)e^{-ikNa}}{\tau_{11}e^{-ika} + \tau_{12} - e^{ika}(\tau_{21}e^{-ika} + \tau_{22})}, \quad (40)$$

$$r = -\frac{\tau_{11}e^{ika} + \tau_{12} - e^{ika}(\tau_{21}e^{ika} + \tau_{22})}{\tau_{11}^{-ika} + \tau_{12} - e^{ika}(\tau_{21}e^{-ika} + \tau_{22})}, \quad (41)$$

a partir de lo cual, usando la relación de dispersión, la transmitancia ( $T$ ) en función de la energía  $E$  es

$$T(E) \equiv |\varkappa|^2 = \frac{4 - \left(\frac{E}{t}\right)^2}{[\tau_{21} - \tau_{12} + (\tau_{22} - \tau_{11})E/2t]^2 + (\tau_{22} + \tau_{11})^2(1 - E^2/4t^2)}, \quad (42)$$

el cual, es el resultado utilizado para obtener la conductancia del sistema bajo el formalismo de Landauer.

## 1.8 Fórmula de Kubo-Greenwood

Una de las primeras teorías completamente cuánticas de la conducción electrónica en sólidos es la fórmula de Kubo-Greenwood, la cual deduciremos en esta sección dentro del formalismo de la función de Green.

La presencia de un campo eléctrico  $\mathbb{E}$  induce una densidad de corriente  $\vec{J}$  en un sistema. A partir de esto, la conductividad eléctrica ( $\sigma$ ) se define como el coeficiente que acompaña a  $\vec{E}$  en  $\vec{J}$ , como se muestra a continuación

$$\vec{J}_\alpha(\vec{r}, t) = \int_0^\infty dt' \int d\vec{r}' \sigma_{\alpha\beta}(\vec{r}, \vec{r}'; t') \mathbb{E}_\beta(\vec{r}', t - t'), \quad (43)$$

donde  $\alpha$  y  $\beta$  denotan las coordenadas cartesianas y se considera una suma implícita sobre el subíndice repetido  $\beta$ . Si consideramos un material isotrópico y, además  $\mathbb{E}$  y  $\vec{J}$  están en la misma dirección ( $x$ ), solamente será necesario considerar  $\sigma_{xx}$ .

Por simplicidad, a partir de este punto, omitiremos los subíndices, ya que todos son  $x$ . Dado esto, y tras realizar una integración sobre  $\vec{r}'$  y un promedio en  $\vec{r}$ , bajo la condición  $\sigma \approx 0$  para  $|\vec{r} - \vec{r}'| \gg \ell_0$ , con  $\ell_0$  la distancia de correlación espacial, podemos reescribir la densidad de corriente, ahora en una sola dimensión

$$J(t) = \int_0^\infty dt' \sigma(t') \mathbb{E}(t - t'), \quad (44)$$

con

$$\sigma(t') = \frac{1}{\Omega} \iint d\vec{r} d\vec{r}' \sigma(\vec{r}, \vec{r}'; t'), \quad (45)$$

siendo  $\Omega$  el volumen del sistema. Tomando la transformada de Fourier de  $\sigma(t')$

$$\sigma(\omega) = \int_0^\infty dt' \sigma(t') e^{i\omega t'}, \quad (46)$$

y si  $\mathbb{E}(t)$  es dada por

$$\mathbb{E}(t) = F e^{-i\omega t} + F^* e^{i\omega t},$$

llegamos a

$$J(t) = \sigma(\omega) F e^{-i\omega t} + \sigma(-\omega) F^* e^{i\omega t}. \quad (47)$$



Para que  $J(t)$  sea real, es necesario que  $\sigma(-\omega) = \sigma^*(\omega)$ , con lo que la parte real  $\sigma_1$  de  $\sigma$  es una función par de  $\omega$ , mientras que  $\sigma_2$  (la parte imaginaria) es impar (Economou E. , 2005).

Con esto, procedemos a obtener una expresión general para la parte real de la conductividad ( $\sigma_1$ ). Partimos del promedio temporal de la potencia consumida por el sistema, que puede escribirse como

$$P = \frac{\Omega}{\Theta} \int_0^\Theta dt \mathbb{E}(t)J(t), \quad (48)$$

con  $\Theta$  el periodo del campo eléctrico externo, que con lo anterior nos lleva a

$$P = \Omega|F|^2[\sigma(\omega) + \sigma(-\omega)] = 2\Omega|F|^2\sigma_1(\omega). \quad (49)$$

Por otro lado, la potencia promedio es calculable multiplicando la energía que absorbe el sistema durante la transición  $|\eta\rangle \rightarrow |\nu\rangle$ :

$$\varepsilon_{\eta\nu} \equiv \hbar\omega_{\eta\nu} = E_\nu - E_\eta > 0, \quad (50)$$

por la razón de transición  $p_{\eta\nu}$  y sumando sobre todas las posibilidades  $|\eta\rangle \neq |\nu\rangle$ :

$$P = \sum_{\eta\nu} \varepsilon_{\eta\nu} p_{\eta\nu} = \frac{1}{2} \sum_{\eta\nu} (p_{\eta\nu} - p_{\nu\eta}), \quad (51)$$

con la probabilidad  $p_{\eta\nu}$  dada por

$$p_{\eta\nu} = f_\eta(1 - f_\nu)W_{\eta\nu}, \quad (52)$$

donde  $f_\eta \equiv f(E_\nu)$  es la distribución Fermi-Dirac y  $W_{\eta\nu}$  se puede obtener con la regla de oro de Fermi (Sakurai, 2017), considerando la perturbación  $\hat{H} = e\mathbb{E}(t)x = e[F e^{-i\omega t} + F^* e^{i\omega t}]x$ :

$$W_{\eta\nu} = \frac{2\pi}{\hbar} e^2 |F|^2 |\langle \eta | x | \nu \rangle|^2 \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_{\eta\nu}), \quad (53)$$

llevándonos, en conjunto con lo anterior, a una expresión para  $\sigma_1(\omega)$

$$\sigma_1(\omega) = \frac{2\pi e^2}{\Omega} \sum_{\eta\nu} |\langle \eta | x | \nu \rangle|^2 \omega_{\eta\nu} (f_\eta - f_\nu) \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_{\eta\nu}), \quad (54)$$

donde fue manualmente incluido un factor de 2 debido al espín electrónico. Este último resultado es la fórmula de Kubo-Greenwood para la conductividad eléctrica (Greenwood, 1958), que puede ser reescrita en términos de los elementos de matriz del operador  $p_x$ :

$$p_x = \frac{im}{\hbar} [\hat{H}x - x\hat{H}], \quad (55)$$

con lo que

$$\langle \eta | p_x | \nu \rangle = im\omega_{\eta\nu} \langle \eta | x | \nu \rangle, \quad (56)$$

llevando a

$$\sigma_1(\omega) = \frac{2\pi e^2}{\Omega m} \sum_{\eta\nu} |\langle \eta | p_x | \nu \rangle|^2 \frac{(f_\eta - f_\nu)}{\omega_{\eta\nu}} \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_{\eta\nu}). \quad (57)$$

Para continuar, expresaremos la conductividad en términos de la función de Green, para ello, primero reescribiremos la ecuación anterior como

$$\begin{aligned} \sigma_1(\omega) &= \frac{2\pi e^2}{\Omega m^2 \hbar \omega} \sum_{\eta\nu} |\langle \eta | p_x | \nu \rangle|^2 [f(E_\eta) - f(E_\nu)] \delta(\hbar\omega - E_\nu + E_\eta) \\ &= \frac{2\pi e^2}{\Omega m^2 \hbar \omega} \int_{-\infty}^{\infty} dE \sum_{\eta\nu} \langle \eta | p_x | \nu \rangle \langle \nu | p_x | \eta \rangle [f(E_\eta) - f(E_\nu)] \times \\ &\quad \times \delta(E - E_\eta) \delta(E + \hbar\omega - E_\nu), \end{aligned} \quad (58)$$

donde la suma dentro de la integral se puede escribir

$$\begin{aligned} \sum_{\eta\nu} [\dots] &= \sum_{\eta\nu\gamma} \langle \nu | \gamma \rangle \langle \gamma | p_x | \eta \rangle [f(E_\eta) - f(E_\nu)] \times \\ &\quad \times \delta(E - E_\eta) \langle \eta | p_x | \nu \rangle \delta(E + \hbar\omega - E_\nu) \\ &= \sum_{\eta\nu\gamma} [f(E_\eta) - f(E_\nu)] \langle \gamma | p_x | \eta \rangle \delta(E - E_\eta) \times \\ &\quad \times \langle \eta | p_x | \nu \rangle \delta(E + \hbar\omega - E_\nu) \langle \nu | \gamma \rangle. \end{aligned} \quad (59)$$

De la ecuación de densidad de estados, tenemos la siguiente identidad:

$$\sum_{\eta} \delta(E - E_{\eta}) |\eta\rangle\langle\eta| = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G(E), \quad (60)$$

lo que nos permite escribir  $\sigma_1(\omega)$  como

$$\sigma_1(\omega) = \frac{2\hbar e^2}{\Omega m^2 \pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{f(E) - f(E + \hbar\omega)}{\hbar\omega} \text{Tr}\{p_x \text{Im} G^+(E) p_x \text{Im} G^+(E + \hbar\omega)\}, \quad (61)$$

que es la fórmula de Kubo-Greenwood, donde la información del sistema en el formalismo de amarre fuerte se introduce a través de la función de Green. Se ha mostrado que, bajo ciertas condiciones, este formalismo es equivalente al de Landauer (Economou E. , 1981).

## 2 Estructura

Actualmente existen grandes expectativas en el desarrollo de nuevos productos y dispositivos basados en el estudio de sistemas nanométricos. Las propiedades ópticas, mecánicas y de transporte han sido profundamente estudiadas con diversos métodos. A pesar del esfuerzo colectivo, es necesario un mayor empeño para descubrir los mecanismos que rigen lo microscópico y sus posibles aplicaciones. Uno de los elementos principales en el desarrollo de la ciencia y tecnología es la comprensión de las propiedades físicas de los materiales (naturales o modificados), los cuales en la naturaleza no se encuentran libres de defectos, por el contrario, los defectos estructurales siempre están presentes a temperaturas finitas, ya que su presencia minimiza la energía libre al aumentar la entropía.

Asimismo, las propiedades de un sólido se pueden alterar significativamente al modificar la estructura del material, por lo que la búsqueda de una relación simple entre el ordenamiento atómico y las características macroscópicas es una de las tareas principales de la ciencia de los materiales.

Desde la síntesis del grafeno a través de exfoliación en 2004 (K. Novoselov, 2004), el estudio de sistemas bidimensionales ha recibido especial interés (A.K. Geim, 2007). Una de las principales búsquedas, es la de sintetizar materiales bidimensionales a base de boro, como lo es el borofeno, esto se debe, entre otras cosas a su cercanía con el carbono. Estudios extensos han mostrado que en pequeños cúmulos de boro (entre dos y catorce átomos), se observan celdas triangulares y hexagonales (Boustani, 1997) que son base para la construcción de cúmulos de mayor tamaño (Zhai, 2003) con estas mismas estructuras.

Estudios analíticos han encontrado que la red triangular es una de las geometrías más rígidas y resistentes entre los sistemas dos dimensionales (D.L. McDowell, 2004). En 2018 se verificó experimentalmente la robustez de dichas propiedades mecánicas tanto para redes triangulares como hexagonales (Gu, 2018), incluso en la naturaleza se ha observado la resistencia de estas estructuras ante fuerzas de compresión, como en la madera de ciertas coníferas (Ando, 1999).

El estudio de las propiedades eléctricas y térmicas de estos materiales es fundamental, ya que su descripción permite el diseño y construcción de

instrumentos que mejor se adaptan a las necesidades tecnológicas actuales, tales como los transistores (Ferry, 2008) o materiales electrónicos y optoelectrónicos (Kind, 2002).

## 2.1 Cristales

Clásicamente, un cristal es un sólido de partículas ordenadas de forma regular en el espacio. La cristalografía clásica caracterizó los arreglos atómicos, mostrando que sólo existe una cantidad limitada de formas de acomodar los átomos de manera simétrica. Con ello, los materiales que presentan dichos ordenamientos fueron denominados cristales. Al resto de los materiales se les llamó amorfos (Bruce Averill, 2006).

A partir de los patrones de difracción de rayos X, se sabe que el orden regular con que se forman los cristales es la repetición de una unidad, llamada celda unitaria, mientras que la estructura formada por el arreglo periódico de centros de gravedad de las celdas unitarias es la red cristalina, por lo que las propiedades físicas en cada zona del cristal son las mismas (Fan, 2001).

Debido a dicha periodicidad, cada punto de la red puede ser escrito como

$$\vec{r} = \vec{r}_0 + l\vec{r}_1 + m\vec{r}_2 + n\vec{r}_3, \quad (62)$$

donde  $l, m$  y  $n$  son enteros arbitrarios y  $\vec{r}_0$  es un punto cualquiera de la red, mientras que  $\vec{r}_1, \vec{r}_2$  y  $\vec{r}_3$  son los vectores base que describen el arreglo del cristal. De este modo, las celdas de la estructura cristalina se pueden además describir por paralelepípedos de seis caras, con longitudes de sus aristas  $a, b$  y  $c$ , y ángulos  $\alpha, \beta$  y  $\gamma$  entre las aristas. Con esto, se observan siete formas de celda, dadas en la Tabla 2.1.

Sistema Cristalino	Aristas	Ángulos
<b>Triclínico</b>	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$
<b>Monoclínico</b>	$a \neq b \neq c$	$\beta \neq \gamma = \alpha = 90^\circ$
<b>Ortorrómbico</b>	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
<b>Tetragonal</b>	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
<b>Romboédrico</b>	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
<b>Hexagonal</b>	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
<b>Cúbico</b>	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

Tabla 2.1 Sistemas cristalinos y la relación aristas-ángulos

Adicionalmente, Auguste Bravais encontró que las celdas de los cristales tridimensionales pueden ser clasificados de la siguiente forma:

- Primitiva (P): tiene puntos de la red sólo en los vértices de la celda.
- Centrada en las caras (FCC): además de tener puntos en los vértices, tiene también en el centro de las caras, que puede ser en todas o algunas.
- Centrada en el cuerpo (BCC): tiene puntos de la red en los vértices y uno en el centro de la celda.

Combinando estas nuevas configuraciones con los sistemas de la Tabla 2.1, se obtienen catorce estructuras tridimensionales (Tabla 2.2), llamadas redes de Bravais, las cuales son las únicas configuraciones que pueden llenar el espacio con un solo tipo de celda, sin dejar espacios vacíos.

Sistema cristalino	Redes de Bravais			
Triclínico	(P)			
Monoclínico	(P)	(FCC)		
	$\beta \neq 90^\circ$ $a \neq c$	$\beta \neq 90^\circ$ $a \neq c$		
Ortorrómbico	(P)	(FCC)	(BCC)	(FCC)
	$a \neq b \neq c$	$a \neq b \neq c$	$a \neq b \neq c$	$a \neq b \neq c$
Tetragonal	(P)	(BCC)		
	$a \neq c$	$a \neq c$		
Romboédrico	(P)			
	$\alpha \neq 90^\circ$			
Hexagonal	(P)			
Cúbico	(P)	(BCC)	(FCC)	
	$a$	$a$	$a$	

Tabla 2.2. Redes de Bravais (Fan, 2001).

## 2.2 Teorema de Bloch

Debido a la periodicidad del potencial de Coulomb en un cristal, la función de energía potencial en la ecuación de Schrödinger es de la forma

$$V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R}_n), \quad (63)$$

con  $\vec{R}_n = l\vec{r}_1 + m\vec{r}_2 + n\vec{r}_3$ , un vector arbitrario de traslación dentro de la red (Bhattacharya, 2011).

Partiendo de esto, el teorema de Bloch establece que las funciones de onda electrónicas  $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$  en un cristal, obtenidas de la ecuación de Schrödinger pueden expresarse como el producto de una onda plana y una función  $u_{\vec{k}}(\vec{r})$  con la misma periodicidad de la red, i.e.

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}_n), \quad (64)$$

las cuales son llamadas funciones de Bloch. Nótese que dichas funciones no son periódicas por sí mismas en  $\vec{r}$ , sin embargo, la densidad de probabilidad  $|\psi_{\vec{k}}|^2$  sí tiene la misma periodicidad que la red (Martínez, 2006).

Con lo anterior, se tiene como consecuencia directa que

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}_n) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}). \quad (65)$$

## 2.3 Espacio Recíproco y Espacio Real

En cristalografía, es posible obtener la transformada de Fourier de una red periódica, usualmente una red de Bravais, dicha transformada será la red recíproca. Por un lado, la red original (o red directa) existe en espacio real, siendo interpretada como una red física, mientras que la red recíproca lo hace en el espacio de momentos (espacio-k).

La red recíproca juega un papel fundamental en el estudio de estructuras periódicas, ya que el patrón de difracción de un cristal se puede utilizar para determinar los vectores recíprocos de la red y con ello, su ordenamiento atómico (Kittel, 2005).



Para una red tridimensional, definida por los vectores primitivos  $(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3)$ , la red recíproca está determinada por los vectores:

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{r}_2 \times \vec{r}_3}{\vec{r}_1 \cdot (\vec{r}_2 \times \vec{r}_3)}, \quad \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{r}_3 \times \vec{r}_1}{\vec{r}_2 \cdot (\vec{r}_3 \times \vec{r}_1)}, \quad \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{r}_1 \times \vec{r}_2}{\vec{r}_3 \cdot (\vec{r}_1 \times \vec{r}_2)}. \quad (66)$$

Así, un cristal, un sólido que posee orden de largo alcance e invarianza ante rotaciones, mostrará un patrón de difracción formado por un conjunto de puntos ordenados, siendo esta la red recíproca, como se puede ver en la Figura 2.1.

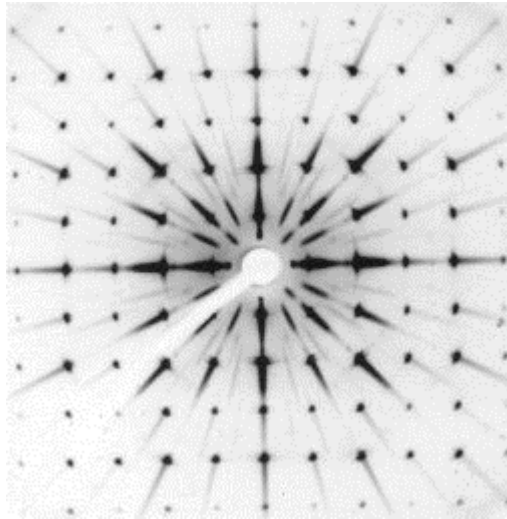


Figura 2.1. Patrón de difracción de perovskita, un sistema cristalino ortorrómbico.

## 2.4 Sólidos Amorfos

En el otro extremo del se encuentran los sólidos amorfos o sólidos no cristalinos, que son materiales que carecen de orden de largo alcance, lo cual caracteriza a un cristal. Algunos ejemplos de estos materiales son ciertos polímeros, películas delgadas y vidrios.

Los materiales amorfos tienen una estructura interna formada por bloques, estos bloques pueden compararse con las celdas que forman un cristal del mismo compuesto, manteniendo un orden de corto, pero no de largo alcance.

Para este tipo de materiales, el patrón de difracción se presenta a manera de círculos concéntricos difusos con distintas intensidades, esto es apreciable en la Figura 2.2.

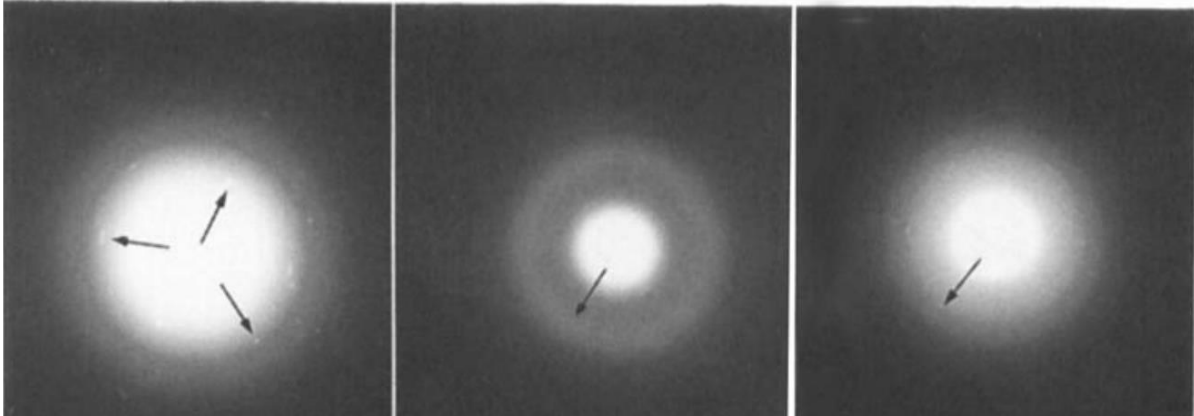


Figura 2.2. Patrón de difracción de distintos materiales amorfos (Subotic, 1994).

## 2.5 Cuasiperiodicidad

Hasta hace algunos años, se tenía la certeza de que sólo podían existir materiales con estructura periódica que tuvieran simetrías invariantes ante rotaciones de  $30^\circ$ ,  $60^\circ$ ,  $90^\circ$ ,  $180^\circ$  y múltiplos enteros de esos ángulos. Incluso se aseguraba que no podían existir sistemas con simetrías invariantes ante rotaciones de orden cinco ( $72^\circ$  pues corresponde a  $360^\circ/5$ ), siete, ocho, diez y doce, pues resulta imposible llenar un plano con pentágonos, heptágonos, octágonos, etcétera, sin dejar zonas sin cubrir.

Dicho de otra forma, la periodicidad de una estructura cristalina sólo sería compatible con simetrías de orden dos, tres, cuatro y seis, correspondientes a las celdas de la Tabla 2.1. Partiendo de esto, si existen simetrías prohibidas para las estructuras, también para los patrones de difracción puntuales.

Esto duró mucho tiempo, pero en 1984, fue encontrada una aleación de aluminio y manganeso que difractó electrones como un cristal (Figura 2.3) con simetría icosaedral, implicando que el sólido está formado por piezas regulares cuyas caras son pentágonos (Shechtman, 1984), lo cual no coincide con lo que en ese momento se sabía de redes cristalinas.

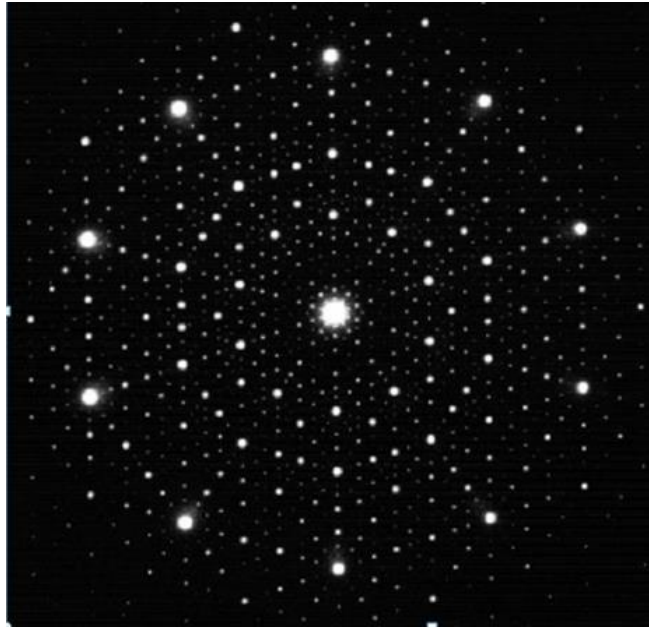


Figura 2.3. Patrón de difracción para una fase icosaedra (Shechtman, 1984).

Quienes encontraron este patrón de difracción, inicialmente pensaron que se trataba de una especie de macla, cuando cristales idénticos se agrupan y crecen compenetrados entre sí, un ejemplo de ello es la Figura 2.4, que consiste en una macla de pirita.



Figura 2.4. Macla de pirita (Nelson, 2019).

La aleación, a pesar de mostrar simetría rotacional de orden cinco, no presentó simetría traslacional, lo que impedía que se le considerara como un cristal, para ello se acuñó el término cuasicristal (Steinhardt, 1984), refiriéndose a una estructura ordenada que no es periódica y forma patrones de difracción puntuales que llenan todo el espacio. Estos cuasicristales pueden tratarse de una

construcción unidimensional, como las cadenas de Fibonacci (Shahtahmasebi, 2005), bidimensional como el teselado de Penrose (Bruijn, 1981) o una tridimensional, como la aleación antes mencionada.

## 2.6 Cadena de Fibonacci

Una manera de construir sistemas con cuasiperiodicidad, es a partir de una serie de reglas de construcción, aunque no se posea una celda unitaria que se repita al infinito.

Durante el año de 1202, Leonardo de Pisa, mejor conocido como Fibonacci, publicó el texto matemático más influyente de la época, *Liber Abaci*, donde entre otras cosas, obtuvo la sucesión que lleva su nombre (Scott, 2014). Dicha sucesión surgió como solución al siguiente problema: “Si una persona coloca una pareja de conejos en un corral ¿Cuántas parejas de conejos habrá en un año? Esto considerando que cada mes, una pareja da a luz a otro par, que estará listo para producir en un mes”.

La secuencia resultante es: 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 55, 89, 144 ..., llevando a la siguiente recurrencia para obtener cada número:

$$\begin{aligned} Fib(0) &= 1, \\ Fib(1) &= 1, \\ Fib(2) &= 2, \\ Fib(n) &= Fib(n - 1) + Fib(n - 2) \end{aligned} \tag{67}$$

Particularmente, podemos extender este resultado a la formación de un sistema unidimensional, que parte de dos tipos de segmentos, uno largo ( $L$ ) y uno corto ( $s$ ), ya que, a diferencia de los sistemas periódicos, que permiten su construcción a partir de un solo tipo de celda, un arreglo cuasiperiódico, requiere más de uno.

Una de las formas de obtener la cadena es con el método de corte y proyección, cuyos principios básicos se describen a continuación.

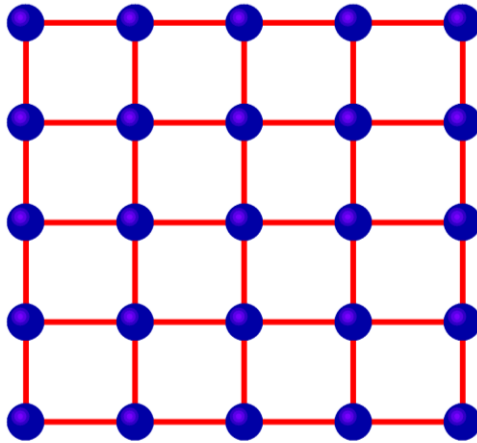


Figura 2.5. Arreglo bidimensional periódico formado por un solo tipo de celda (cuadro).

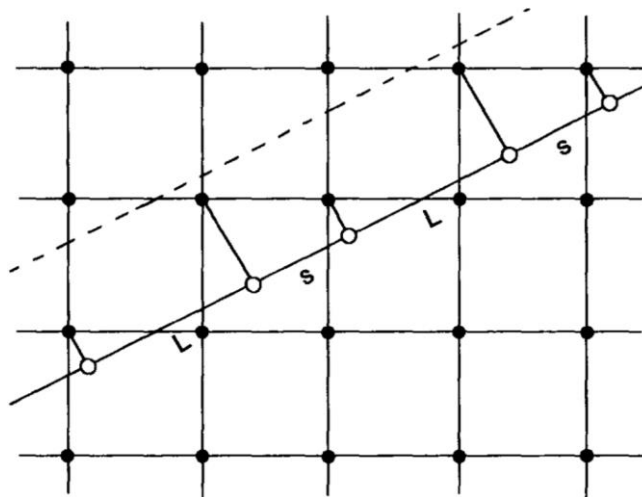


Figura 2.6 Método de corte y proyección con una tangente racional (1/2).

Primero, se toma una red bidimensional cuadrada como la mostrada en la Figura 2.5 y se le añade una línea recta que corte la red como en la Figura 2.6, que tiene paralelamente otra línea (punteada) que genera una banda en la cual están contenidos los puntos más cercanos a la recta, que, al ser proyectados en la recta original, la dividen en segmentos cortos y largos. La forma en que se ordenan estas partes está dada por el ángulo de corte ( $\theta$ ) entre la horizontal y la línea. Este ángulo, en la Figura 2.6, es tal que cumple  $\tan \theta = 1/2$ , donde, al tratarse de un número racional, se genera un arreglo periódico en una dimensión menor, con la tangente representando la cantidad de segmentos largos entre la cantidad total de cada celda unitaria (Dunlap, 1997).

Por otro lado, si la tangente es un número irracional, el cociente entre partes largas y totales, sería también un número irracional, impidiendo que la secuencia sea periódica, pues dicho cociente sólo puede ser visto como una celda en una cadena infinita.

Particularmente, es posible utilizar los números de Fibonacci, para generar la cadena, tomando la tangente como

$$\tan \theta = \frac{Fib(n-1)}{Fib(n)}, \quad (68)$$

se obtienen distintos arreglos de los segmentos  $L$  y  $s$ , donde la relación entre  $L$  y los totales, será nuevamente,  $Fib(n-1)$  para  $L$  y  $Fib(n)$  para el total, con una celda básica en cada construcción periódica formada por las dos anteriores. Esto se ve a detalle en la Tabla 2.3.

$n$	$\tan \theta$	Celda básica	Segmentos totales
1	1/1	$L$	1
2	1/2	$Ls$	2
3	2/3	$LsL$	3
4	3/5	$LsLLs$	5
5	5/8	$LsLLsLsL$	8
6	8/13	$LsLLsLsLLsLLs$	13
7	13/21	$LsLLsLsLLsLLsLsLLsLsL$	21
8	21/34	$LsLLsLsLLsLLsLsLLsLsLLsLsLLsLLs$	34

Tabla 2.3. Secuencia de segmentos largos y cortos producidos por el método de corte y proyección para ángulos cuya tangente es el cociente de dos números de Fibonacci consecutivos.

Ahora, si en el cociente, hacemos que la generación  $n$  tienda a infinito, llegaremos a una expresión dada por la razón dorada, esto es

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{Fib(n-1)}{Fib(n)} = \frac{2}{1 + \sqrt{5}} \approx 0.618339887 \dots, \quad (69)$$

que es un número irracional, dando lugar a una celda unitaria que representa la secuencia infinita cuasiperiódica de Fibonacci.

Por otro lado, durante la década de los setentas, Roger Penrose mostró un conjunto de teselados bidimensionales no-periódicos, como el de la Figura 2.7, que tiene simetría de orden cinco y es autosimilar, es decir, cualquier región finita del mosaico aparece un número infinito de veces en la teselación (Penrose, 1974), además, al implementarse como una estructura física, ésta muestra, a través de la difracción de Bragg, un patrón de difracción con simetría de orden cinco.

Fue el cristalógrafo Alan Mackay quien notó la importancia de este mosaico al marcar los vértices del mosaico sobre una transparencia y atravesarla con un haz de luz, mostrando la imagen en el espacio recíproco. Este patrón de difracción consiste en puntos luminosos discretos con simetría cinco (Naumis, 2007).

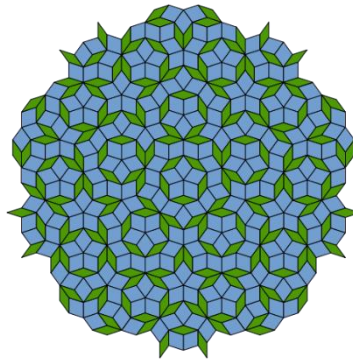


Figura 2.7. Teselado de Penrose (Bruijn, 1981)

A pesar de la irregularidad del teselado, éste cubre todo el espacio de forma ordenada, aunque no periódica. Al igual que las secuencias de Fibonacci, este mosaico se puede obtener a través del método de corte y proyección, partiendo de una red periódica en un espacio de cinco dimensiones.

## 2.7 Impurezas

Además de los desórdenes estructurales, la periodicidad de un sistema se pierde en presencia de impurezas, cuyo estudio es de fundamental importancia, ya que, en la naturaleza, los materiales reales siempre tienen impurezas, esto se debe a que la presencia de impurezas minimiza la energía libre al aumentar la entropía del sistema.

Por otro lado, es posible alterar significativamente las propiedades macroscópicas de un sólido en presencia de impurezas o defectos. Por ejemplo, un semiconductor extrínseco consiste en un cristal dopado, es decir, al cual se le han añadido impurezas con el propósito de manipular sus propiedades eléctricas que originalmente no tendría (Neamen, 2003), mientras que en un semiconductor intrínseco se trata de un material puro al cual se le han retirado elementos, generando agujeros o defectos, haciendo que el número de portadores de carga varíe, siendo éste determinado por el material base (Sze, 1981).

## 3 Renormalización en Espacio Real

En tamaño macroscópico, los sistemas aperiódicos son difíciles de abordar, principalmente debido al tiempo computacional requerido, pues éste crece como el tamaño del sistema al cubo en la obtención de la matriz de Green. Por ello, en las últimas décadas se han desarrollado métodos que permiten estudiar materiales de tamaño macroscópico con ordenamientos donde, debido a la falta de periodicidad, no es posible utilizar el teorema de Bloch o la red recíproca, además de que, para la función de Green, la inversión del Hamiltoniano es impráctica por el uso de tiempo.

Uno de los principales métodos exactos (pues no realiza aproximaciones) es el grupo de renormalización en espacio real más convolución, el cual es capaz de calcular la conductividad eléctrica de forma exacta en redes cuasiperiódicas (Sánchez & Wang, 2004) y laberínticas (Sánchez, Sánchez, & Wang, 2018) dentro de la fórmula de Kubo-Greenwood. La aplicación de estos métodos en sistemas aperiódicos ha permitido la obtención de espectros para conducción DC y AC.

Por otro lado, debido a la ausencia de una red recíproca en sistemas no periódicos, este método debe realizarse en espacio real.

### 3.1 Filosofía del Método

La idea detrás de estos métodos es reducir el número de grados de libertad de un sistema, tomando las energías originales y llevándolo a un nuevo sistema con energías efectivas sin perder información. Este método es válido, ya que, en un sistema con muchos grados de libertad, los estados correspondientes a altas energías no son relevantes en la descripción de la física de bajas energías (White, 1992).

Tomando esto en cuenta, es posible construir un sistema utilizando pequeños subsistemas, considerando únicamente los estados de bajas energías. Los métodos de renormalización en espacio real generalmente constan de dos partes, la primera une subsistemas para generar uno de mayor escala, mientras que la segunda envía la información de este nuevo sistema a una cantidad menor de energías efectivas, sin perder la contribución original.



Lo anterior puede verse en la Figura 3.1 donde se genera una cadena periódica a partir de una celda diatómica con energías de sitio  $\varepsilon_A$  y  $\varepsilon_B$ , mientras que les une una integral de salto  $t_{AB}$ . Con esto, el primer paso del método genera la siguiente generación  $[F(2)]$  con dos veces la anterior, uniendo las partes con una energía de salto  $t_{AB}$ .

Durante el segundo paso, las cuatro energías de sitio y las tres integrales de salto se reducen a tres energías efectivas, dos de sitio  $\varepsilon_L(2)$  y  $\varepsilon_R(2)$ , y una de salto  $t(2)$ . Estos dos pasos se repiten en cada generación  $n$ , permitiendo tener la información de un sistema con  $2^n$  sitios contenida en sólo tres energías efectivas.

En la práctica, el primer paso del procedimiento consiste en representar los operadores implicados como matrices básicas, caracterizando la unión de los subsistemas como una matriz de mayor dimensión formada por bloques menores que son las matrices iniciales. En esta nueva matriz, las interacciones entre los dos subsistemas son entradas cruzadas.

El segundo paso, el más importante del proceso, reduce la matriz de la unión a la dimensión de las básicas. En los siguientes apartados se explicará a detalle la aplicación de estos métodos.

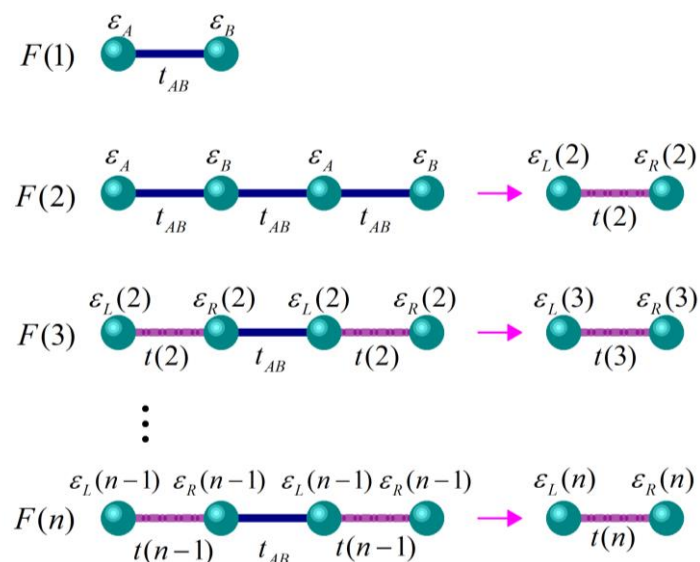


Figura 3.1. Renormalización de una cadena periódica a partir de una celda diatómica.

### 3.2 Renormalización para Fórmula de Kubo-Greenwood

El método de renormalización para la fórmula de Kubo-Greenwood permite calcular la conductividad eléctrica en cadenas de Fibonacci de tamaño macroscópico, partiendo de la expresión obtenida en la sección 1.8, tenemos

$$\sigma(\omega) = \frac{2\hbar e^2}{\Omega m^2 \pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{f(E) - f(E + \hbar\omega)}{\hbar\omega} \text{Tr}\{p \text{Im} G^+(E) p \text{Im} G^+(E + \hbar\omega)\}, \quad (70)$$

donde

$$p = \frac{ima}{\hbar} \sum_j \{t_{j,j+1}|j\rangle\langle j+1| - t_{j,j-1}|j\rangle\langle j-1|\} \quad (71)$$

es la proyección del operador de momento en la dirección del campo eléctrico.

Para una cadena de Fibonacci, siguiendo el esquema mostrado en la Figura 3.2, las autoenergías siguen la secuencia de Fibonacci, mientras que la integral de salto que las une está definida por las energías de sitio. Esta cadena se construye partiendo de dos energías de sitio y cada generación  $n \geq 2$  se construye como la unión de las dos anteriores tras ser renormalizada.

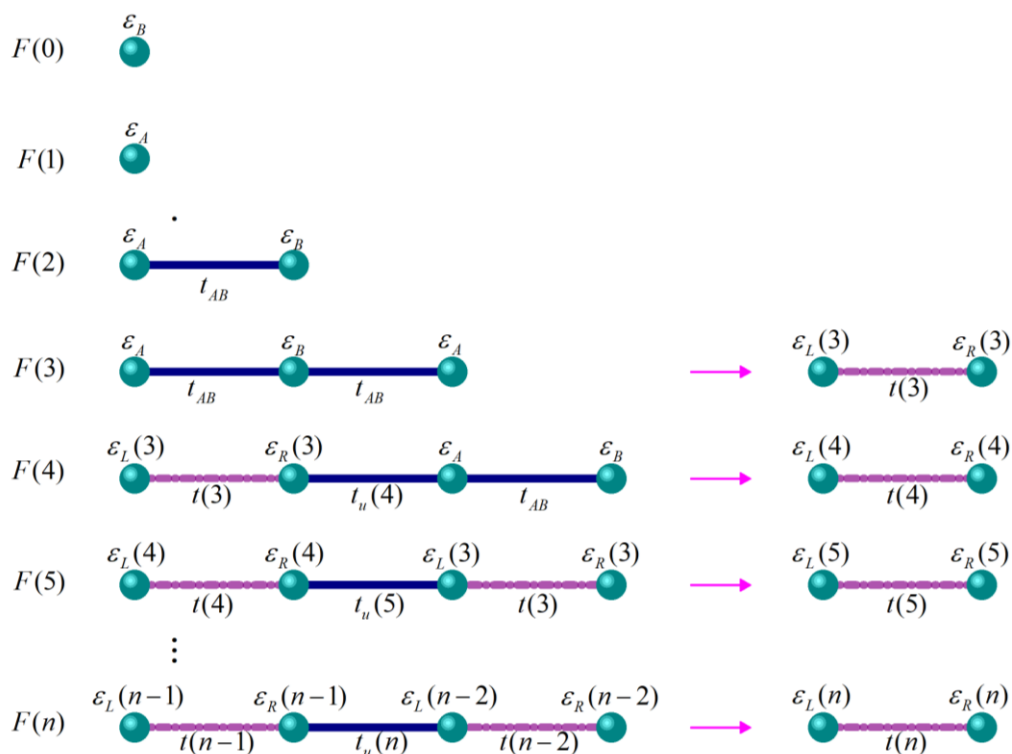


Figura 3.2. Esquema de renormalización para una cadena de Fibonacci.

Con esto, dentro de la fórmula de Kubo-Greenwood, la función de Green dependerá de la generación a tratar, lo que permite reescribir la conductividad a temperatura cero, dentro del formalismo de amarre fuerte como

$$\sigma(\mu, \omega) = \frac{e^2 a^2}{2\pi\Omega\hbar^2\omega} \int_{\mu-\hbar\omega}^{\mu} dE [S(E_{\omega}^+, E^+, n) - S(E_{\omega}^+, E^-, n) - S(E_{\omega}^-, E^+, n) + S(E_{\omega}^-, E^-, n)], \quad (72)$$

donde  $E^{\pm} = E \pm i\eta$ ,  $E_{\omega}^{\pm} = E + \hbar\omega \pm i\eta$  con  $\eta \rightarrow 0^+$ , y

$$S(E_{\omega}^{\nu}, E^{\kappa}, n) = \sum_{j,k=1}^{N(n)-1} t_{j,j+1} t_{k,k+1} [2G_{j+1,k}(E_{\omega}^{\nu})G_{k+1,j}(E^{\kappa}) - G_{j+1,k+1}(E_{\omega}^{\nu})G_{k,j}(E^{\kappa}) - G_{j,k}(E_{\omega}^{\nu})G_{k+1,j+1}(E^{\kappa})], \quad (73)$$

siendo  $\kappa$  y  $\nu$  los signos  $+$  y  $-$ . Estas sumas parciales,  $S(E_{\omega}^{\nu}, E^{\kappa}, n)$ , pueden escribirse en términos de la función de Green evaluada en los sitios extremos de la cadena como

$$\begin{aligned} S(E_{\omega}^{\nu}, E^{\kappa}, n) = & A(E_{\omega}^{\nu}, E^{\kappa}, n)G_{L,L}(E_{\omega}^{\nu})G_{L,L}(E^{\kappa}) \\ & + B(E_{\omega}^{\nu}, E^{\kappa}, n)G_{L,R}(E_{\omega}^{\nu})G_{L,R}(E^{\kappa}) \\ & + C(E_{\omega}^{\nu}, E^{\kappa}, n)G_{R,R}(E_{\omega}^{\nu})G_{R,R}(E^{\kappa}) \\ & + D(E_{\omega}^{\nu}, E^{\kappa}, n)G_{L,L}(E_{\omega}^{\nu})G_{L,R}(E^{\kappa}) \\ & + D(E^{\kappa}, E_{\omega}^{\nu}, n)G_{L,L}(E^{\kappa})G_{L,R}(E_{\omega}^{\nu}) \\ & + F(E_{\omega}^{\nu}, E^{\kappa}, n)G_{L,L}(E_{\omega}^{\nu})G_{R,R}(E^{\kappa}) \\ & + F(E^{\kappa}, E_{\omega}^{\nu}, n)G_{L,L}(E^{\kappa})G_{R,R}(E_{\omega}^{\nu}) \\ & + I(E_{\omega}^{\nu}, E^{\kappa}, n)G_{L,R}(E_{\omega}^{\nu})G_{R,R}(E^{\kappa}) \\ & + I(E^{\kappa}, E_{\omega}^{\nu}, n)G_{L,R}(E^{\kappa})G_{R,R}(E_{\omega}^{\nu}) \\ & + J(E_{\omega}^{\nu}, E^{\kappa}, n)G_{L,L}(E_{\omega}^{\nu}) + J(E^{\kappa}, E_{\omega}^{\nu}, n)G_{L,L}(E^{\kappa}) \\ & + K(E_{\omega}^{\nu}, E^{\kappa}, n)G_{L,R}(E_{\omega}^{\nu}) + K(E^{\kappa}, E_{\omega}^{\nu}, n)G_{L,R}(E^{\kappa}) \\ & + L(E_{\omega}^{\nu}, E^{\kappa}, n)G_{R,R}(E_{\omega}^{\nu}) + L(E^{\kappa}, E_{\omega}^{\nu}, n)G_{R,R}(E^{\kappa}) \\ & + Z(E_{\omega}^{\nu}, E^{\kappa}, n), \end{aligned} \quad (74)$$

donde los subíndices  $L$  y  $R$ , denotan los átomos extremos de la izquierda (left) y derecha (right) respectivamente. Los coeficientes  $A(E_1, E_2, n)$ ,  $B(E_1, E_2, n)$ , ...,  $Z(E_1, E_2, n)$  con  $E_1$  y  $E_2$  siendo  $E_{\omega}^{\nu}$  o  $E^{\kappa}$ , pueden ser iterados a partir de las generaciones anteriores  $n-1$  y  $n-2$ , como se muestra en el Apéndice A.

Adicionalmente, en el caso de condiciones libres en la frontera, los elementos de la matriz de Green deberán determinarse resolviendo la ecuación para dos sitios:

$$\begin{bmatrix} E - E_L(E, n) & t(E, n) \\ t(E, n) & E - E_R(E, n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} G_{L,L} & G_{L,R} \\ G_{L,R} & G_{R,R} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (75)$$

mientras que, si se tienen saturadores, éstos pueden renormalizarse a un sistema de dos sitios efectivos, por lo que la ecuación anterior deberá resolverse para seis sitios.

### 3.3 DOS para redes triangulares

El método de renormalización

$$\begin{aligned} DOS(E, N) = & -\frac{1}{\pi} \text{Im}\{A(N)G_{11}(E) + B(N)G_{22}(E) + C(N)G_{33}(E) \\ & + D(N)G_{44}(E) + F(N)G_{21}(E) + I(N)G_{31}(E) \\ & + I(N)G_{31}(E) + J(N)G_{41}(E) + K(N)G_{32}(E) \\ & + L(N)G_{42}(E) + Q(N)G_{43}(E) + Z(N)\} \end{aligned} \quad (76)$$

donde los coeficientes  $A, B, C, D, F, I, J, K, L, Q$  y  $Z$  están dados en el apéndice B, mientras que

$$\begin{aligned} G_{11}(E) = & X_{DR}(E)[X_{IR}(E)X_{DR}(E) - Y_{IDR}^2(E)] \\ & * \{[X_{LR}(E)X_{DR}(E) - Y_{LDR}^2(E)][X_{IR}(E)X_{DR}(E) - Y_{IDR}^2(E)] \\ & - [Y_{LDR}(E)X_{DR}(E) + Y_{IDR}(E)Y_{LDR}(E)][Y_{LIR}(E)X_{DR}(E) \\ & + Y_{IDR}(E)Y_{LDR}(E)]\}^{-1}, \end{aligned} \quad (77)$$

$$G_{21}(E) = G_{11}(E) \frac{Y_{LIR}(E)X_{DR}(E) + Y_{IDR}(E)Y_{LDR}(E)}{X_{IR}(E)X_{DR}(E) - Y_{IDR}^2(E)} \quad (78)$$

$$\begin{aligned} G_{22}(E) = & \frac{X_{DR}(E)}{[X_{IR}(E)X_{DR}(E) - Y_{IDR}^2(E)]} \\ & + G_{21}(E) \frac{Y_{LIR}(E)X_{DR}(E) + Y_{IDR}(E)Y_{LDR}(E)}{X_{IR}(E)X_{DR}(E) - Y_{IDR}^2(E)}, \end{aligned} \quad (79)$$

$$G_{31}(E) = G_{11}(E) \frac{Y_{LDR}(E)}{X_{DR}(E)} + G_{21}(E) \frac{Y_{IDR}(E)}{X_{DR}(E)}, \quad (80)$$

$$G_{32}(E) = G_{21}(E) \frac{Y_{LDR}(E)}{X_{DR}(E)} + G_{22}(E) \frac{Y_{IDR}(E)}{X_{DR}(E)}, \quad (81)$$

$$G_{33}(E) = \frac{1}{X_{DR}(E)} + G_{31}(E) \frac{Y_{LDR}(E)}{X_{DR}(E)} + G_{32}(E) \frac{Y_{IDR}(E)}{X_{DR}(E)}, \quad (82)$$

$$G_{41}(E) = \mu_{LR}(E)G_{11}(E) + \mu_{IR}(E)G_{21}(E) + \mu_{DR}(E)G_{31}(E), \quad (83)$$

$$G_{42}(E) = \mu_{LR}(E)G_{21}(E) + \mu_{IR}(E)G_{22}(E) + \mu_{DR}(E)G_{32}(E), \quad (84)$$

$$G_{43}(E) = \mu_{LR}(E)G_{31}(E) + \mu_{IR}(E)G_{32}(E) + \mu_{DR}(E)G_{33}(E), \quad (85)$$

$$G_{44}(E) = \frac{1}{[E - E_R(N)]} + \mu_{LR}(E)G_{41}(E) + \mu_{IR}(E)G_{42}(E) + \mu_{DR}(E)G_{43}(E), \quad (86)$$

donde los valores de  $\mu_{LR}(E)$ ,  $\mu_{IR}(E)$ ,  $\mu_{DR}(E)$ ,  $X_{DR}(E)$ ,  $X_{LR}(E)$ ,  $X_{IR}(E)$ ,  $Y_{LDR}(E)$ ,  $Y_{LIR}(E)$  y  $Y_{IDR}(E)$  están dados en el apéndice B.

Con el objetivo de comparar nuestros resultados con la literatura, la Figura 3.3 muestra el espectro de densidad de estados para un sistema triangular sin impurezas.

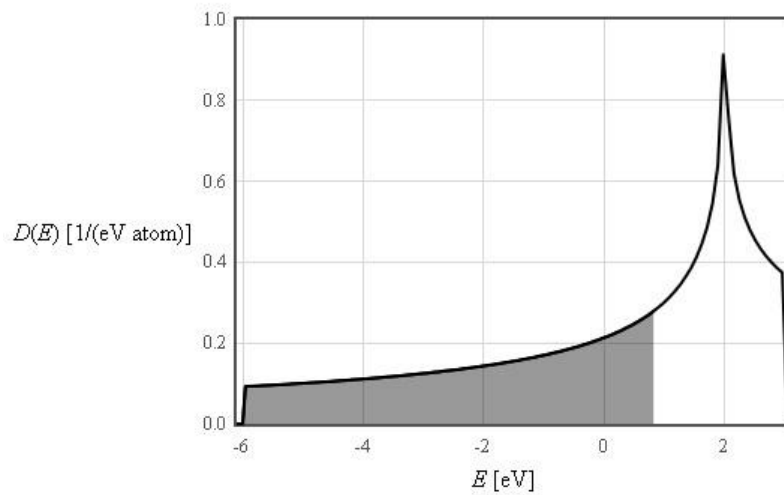


Figura 3.3 Densidad de estados para un sistema triangular periódico sin impurezas (Olsen, 1981).

### 3.4 DOS para redes hexagonales

Para las redes hexagonales se utilizan esencialmente las mismas ecuaciones que en el caso triangular, así como los valores de los coeficientes dados en el apéndice B, modificando la energía de sitio en ciertas posiciones, lo cual, al “borrar” algunos puntos, nos da como resultado una red hexagonal. Nuevamente, buscando un punto de comparación, la Figura 3.4 presenta la densidad de estados de una red hexagonal periódica sin impurezas mostrada en la literatura.

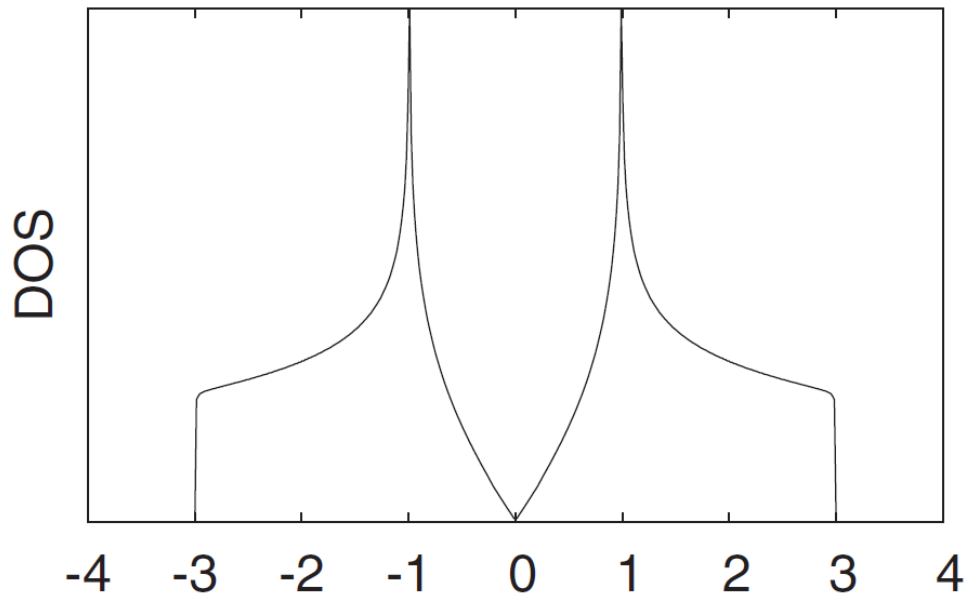


Figura 3.4 Densidad de estados para un sistema hexagonal periódico sin impurezas (Olsen, 1981).

## 4 Densidad de Estados

En este capítulo se presenta un análisis de la densidad de estados para sistemas triangulares y hexagonales, a través de los resultados obtenidos con el método de Renormalización en Espacio Real. El objetivo de este trabajo es estudiar la densidad de estados y los efectos que las impurezas generan en ésta en sistemas de tamaño macroscópico, del orden de  $10^8$  átomos en una de sus direcciones, sin mayor aproximación que el Hamiltoniano de Amarre Fuerte.

### 4.1 Red Triangular

En esta sección se presenta la densidad de estados para sistemas triangulares. La Figura 4.1 muestra el espectro de *DOS* para una placa bidimensional triangular periódica donde no hay impurezas (gris) o una impureza de tipo Fano aparece únicamente en las últimas dos generaciones (37 y 38) con magnitud de sitio  $E_0 = 1.0$  (naranja),  $E_0 = 2.0$  (azul) y  $E_0 = 3.0$  (rosa) y energía de salto  $t_F = 1.0$ . Es posible notar en este punto que la densidad de estados sin impurezas es igual a la reportada en la literatura (Figura 3.3), por lo que nuestro método reproduce fielmente resultados conocidos, mientras que la densidad de estados con impureza genera un segundo pico, mientras que en  $E_0 = 3.0$  aparece una banda prohibida que originalmente no existía. Para observar mejor la aparición de este gap, la Figura 4.2 presenta la *DOS* en múltiples sistemas donde la impureza tipo Fano aparece desde la generación 6 hasta la 38, modificando entre ellas, la magnitud de la energía de sitio, que en estos casos será (a)  $E_0 = 3.0$ , (b)  $E_0 = 3.2$ , (c)  $E_0 = 3.4$  y (d)  $E_0 = 3.6$ . Aquí se puede notar, que la banda prohibida crece al aumentar la energía de sitio de las impurezas tipo Fano.

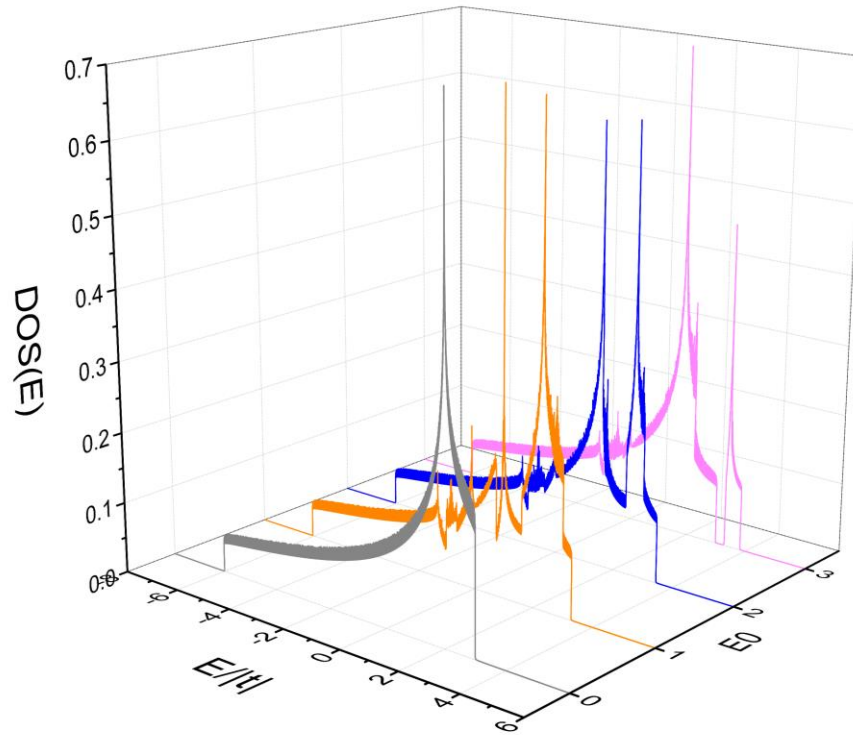


Figura 4.1. Densidad de estados para un sistema triangular sin impurezas (gris), y tres con impureza tipo Fano en la generación 38 y 39, teniendo  $E_0 = 1.0$  (naranja),  $E_0 = 2.0$  (azul) y  $E_0 = 3.0$  (rosa).

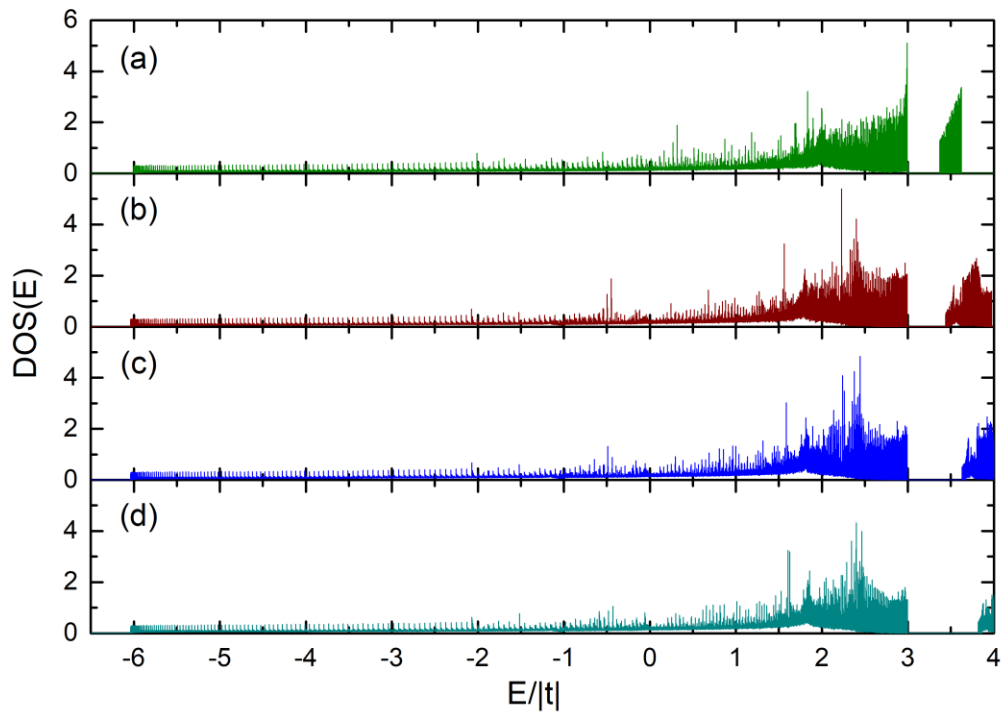


Figura 4.2 Densidad de estados para un sistema triangular con impureza tipo Fano donde  $E_0$  vale (a) 3.0, (b) 3.2, (c) 3.4 y (d) 3.6.



Manteniendo los parámetros  $E_0 = 3.0$  y con la impureza tipo Fano presentándose únicamente en las últimas dos generaciones (37 y 38), la Figura 4.3 varía la integral de salto ( $t_F = 0.5$  y  $t_F = 1.0$ ) en la impureza tipo Fano. Donde puede notarse que, al igual que al aumentar la energía de sitio, la banda prohibida crece al crecer  $t_F$ . Finalmente, la Figura 4.4 compara dos sistemas donde todos los parámetros son los mismos ( $E_0 = 3.0$  y  $t_F = 1.0$ ) con generación máxima 38, pero variando la generación a partir de la cual comienzan a aparecer las impurezas tipo Fano, siendo estas (a)  $n_{def} = 6$  y (b)  $n_{def} = 12$ . Mientras mayor sea el valor  $n_{def}$ , mayor será el número de impurezas en el sistema. En esta figura es posible notar que, al aumentar la cantidad de Fanos, pero manteniendo el resto de los parámetros fijos, la banda prohibida que aparece, no se modifica, pero el espectro en general aumenta de magnitud, es decir, los sitios posibles en las bandas disponibles son más al tener mayor número de impurezas, mientras que la banda prohibida se mantiene, aún cuando la cantidad de impurezas es considerablemente mayor.

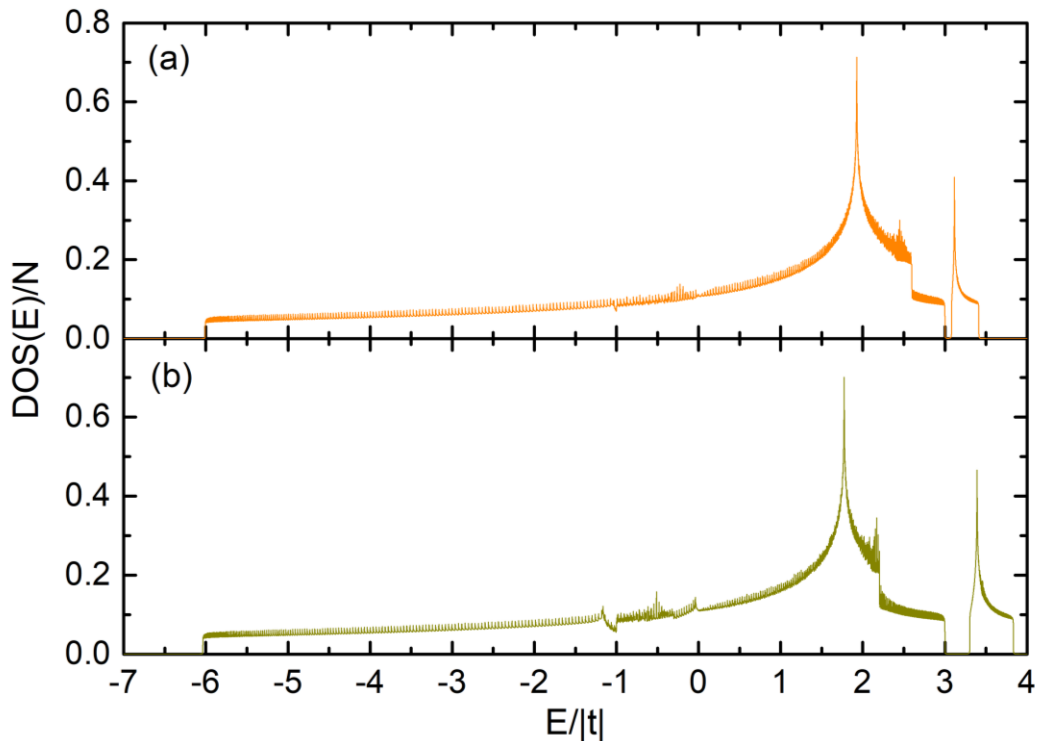


Figura 4.3. Densidad de estados para red triangular con impureza, tomando (a)  $t_F = 0.5$  y (b)  $t_F = 1.0$

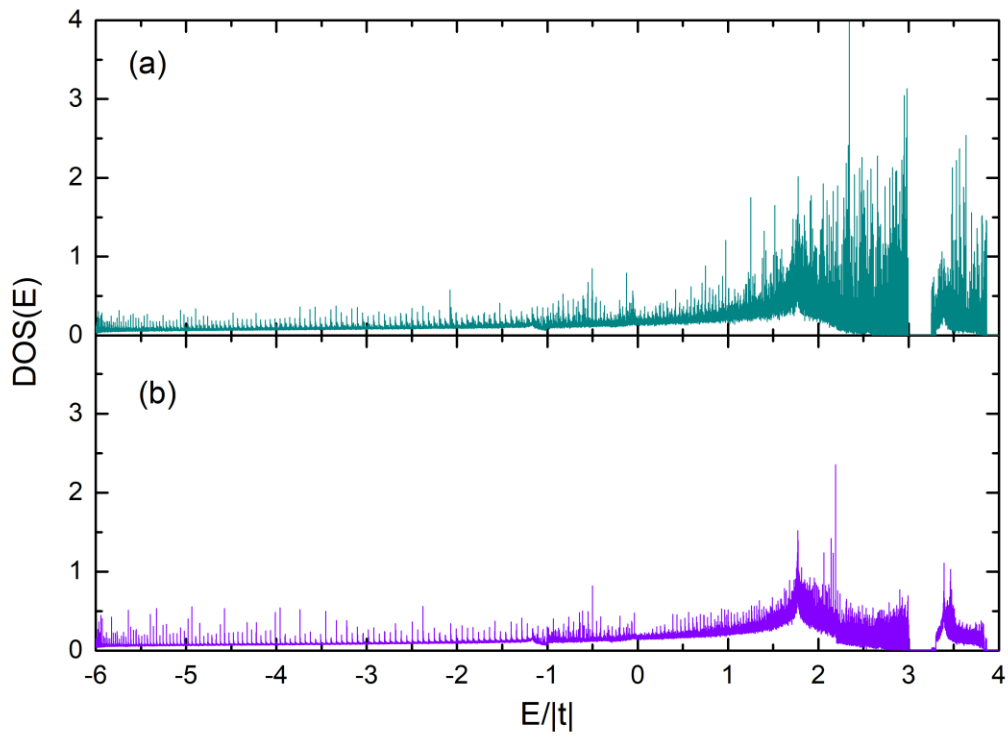


Figura 4.4. Densidad de estados para red triangular con impureza tipo Fano, que tiene  $E_0 = 3.0$  y  $t_F = 1.0$ , tomando (a)  $n_{def} = 6$  y (b)  $n_{def} = 12$

## 4.2 Red Hexagonal

En esta sección se exponen los resultados obtenidos para la densidad de estados de sistemas hexagonales. La Figura 4.5 indica la *DOS* para sistemas con generación máxima 38 sin impurezas (gris) y con impureza Fano con  $t_F = 1.0$  en las últimas generaciones, donde la energía de sitio de la impureza es  $E_0 = 1.0$  (rosa),  $E_0 = 2.0$  (violeta) y  $E_0 = 3.0$  (verde). Esta figura reproduce el resultado obtenido en la literatura (Figura 3.4), por otro lado, es posible notar que el punto prohibido que aparece en el espectro sin impurezas, se vuelve una banda prohibida, además de la aparición de una segunda banda prohibida en la parte positiva del espectro, la cual aumenta su amplitud y al crecer  $E_0$ . Adicionalmente, en la Figura 4.6 se observa la densidad de estados para sistemas hexagonales donde la impureza tipo Fano aparece desde la generación 6 hasta la 38, modificando entre ellas, la magnitud de la energía de sitio, que en estos casos será (a)  $E_0 = 3.0$ , (b)  $E_0 = 3.2$ , (c)  $E_0 = 3.4$  y (d)  $E_0 = 3.6$ , manteniendo fijo  $t_F = 1.0$ . Aquí el espectro se mantiene similar entre las cuatro, sin embargo, la banda prohibida crece al aumentar el valor de  $E_0$ , aún teniendo la misma cantidad de impurezas.

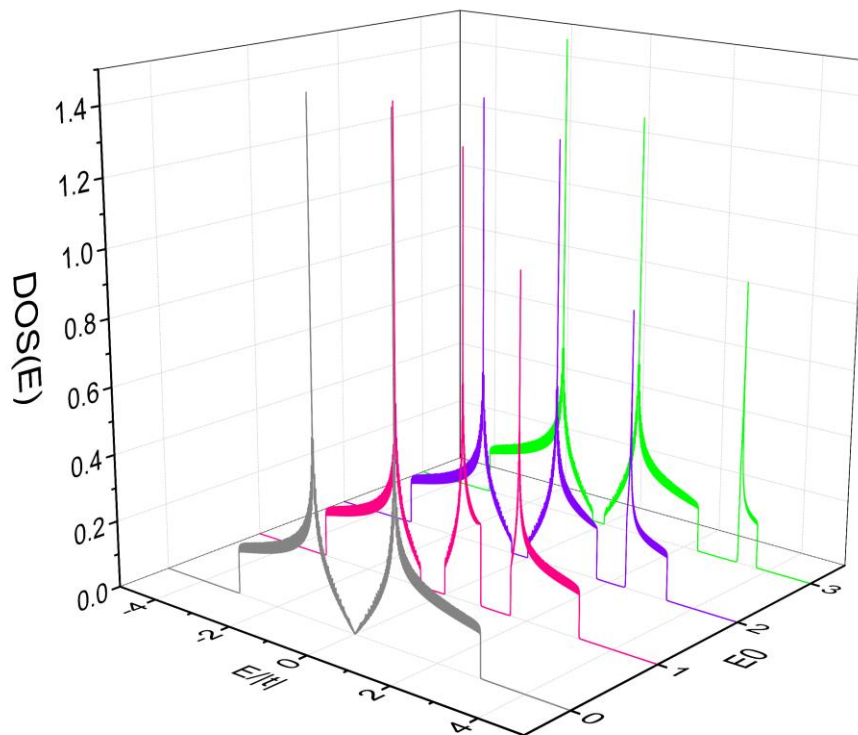


Figura 4.1. Densidad de estados para un sistema hexagonal sin impurezas (gris), y tres con impureza tipo Fano en la generación 38 y 39, teniendo  $E_0 = 1.0$  (rosa),  $E_0 = 2.0$  (violeta) y  $E_0 = 3.0$  (verde).

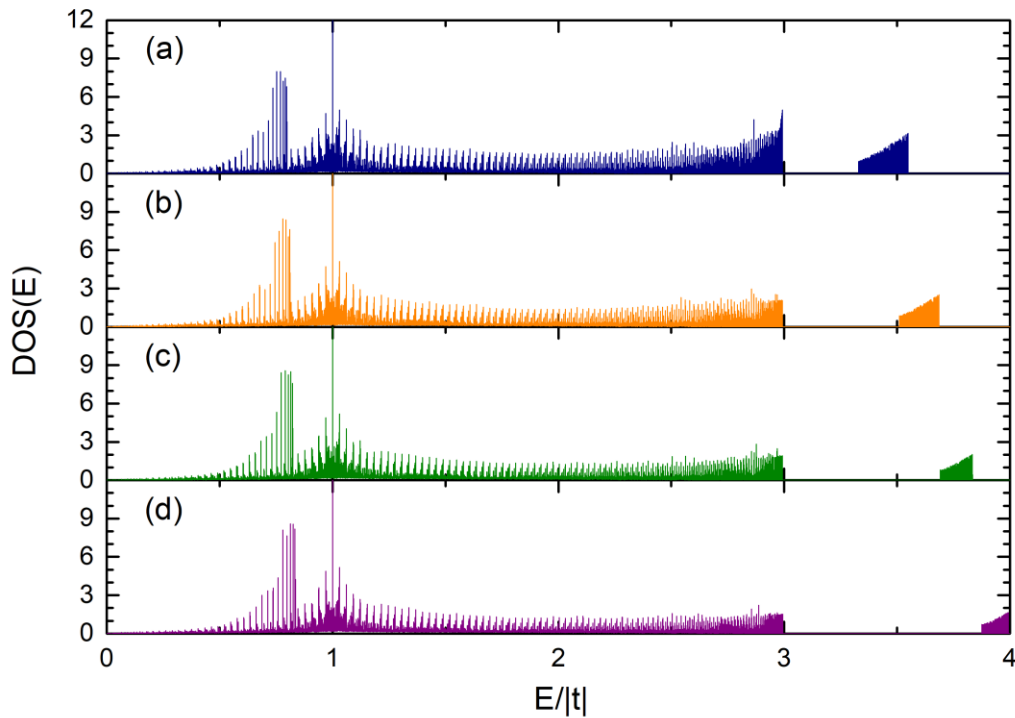


Figura 4.6 Densidad de estados para un sistema hexagonal con impureza tipo Fano donde  $E_0$  vale (a) 3.0, (b) 3.2, (c) 3.4 y (d) 3.6.

Manteniendo los parámetros  $E_0 = 3.0$  y con la impureza tipo Fano presentándose únicamente en las últimas dos generaciones (37 y 38), la Figura 4.7 varía la integral de salto ( $t_F = 0.5$  y  $t_F = 1.0$ ) en la impureza tipo Fano para un sistema hexagonal. Donde puede notarse que, al igual que con la energía de sitio, la banda prohibida crece al crecer  $t_F$ . Por último, la Figura 4.8 compara dos sistemas donde todos los parámetros son los mismos ( $E_0 = 3.0$  y  $t_F = 1.0$ ) con generación máxima 38, pero variando la generación a partir de la cual comienzan a aparecer las impurezas tipo Fano, siendo estas (a)  $n_{def} = 6$  y (b)  $n_{def} = 12$ . Aquí, al igual que en el caso triangular, el aumento en la cantidad de impurezas no modifica la amplitud de la banda prohibida ni su posición, sin embargo, la cantidad de estados disponibles aumenta con las impurezas.

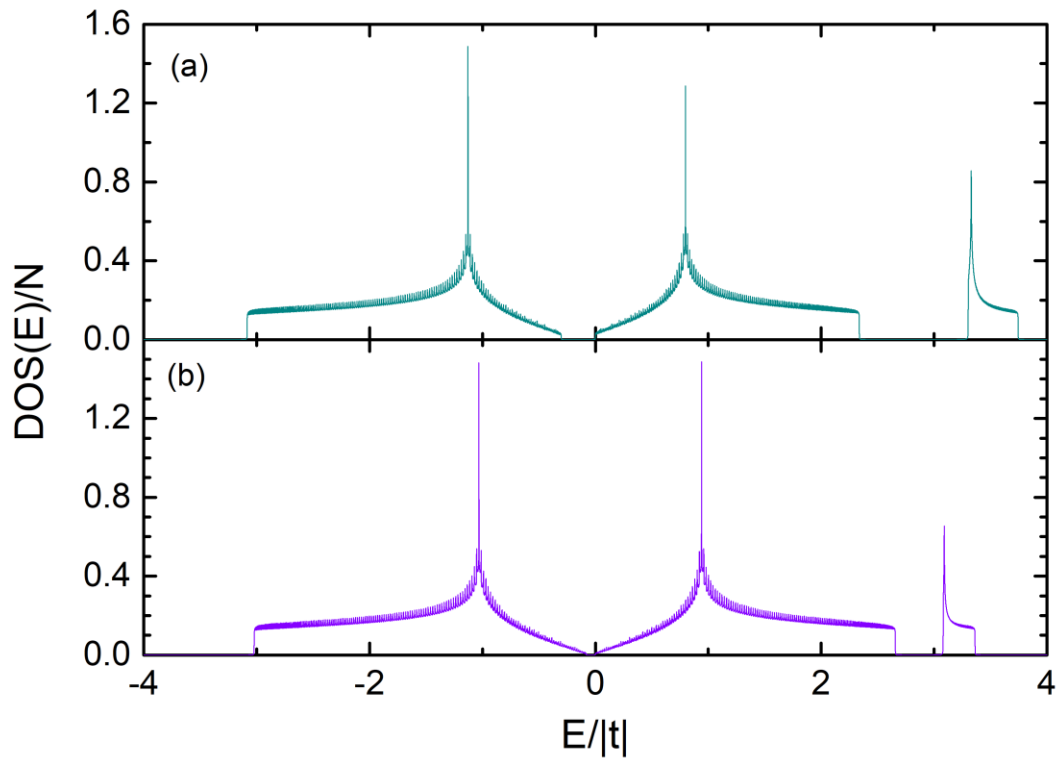


Figura 4.7. Densidad de estados para red hexagonal con impureza, tomando (a)  $t_F = 0.5$  y (b)  $t_F = 1.0$

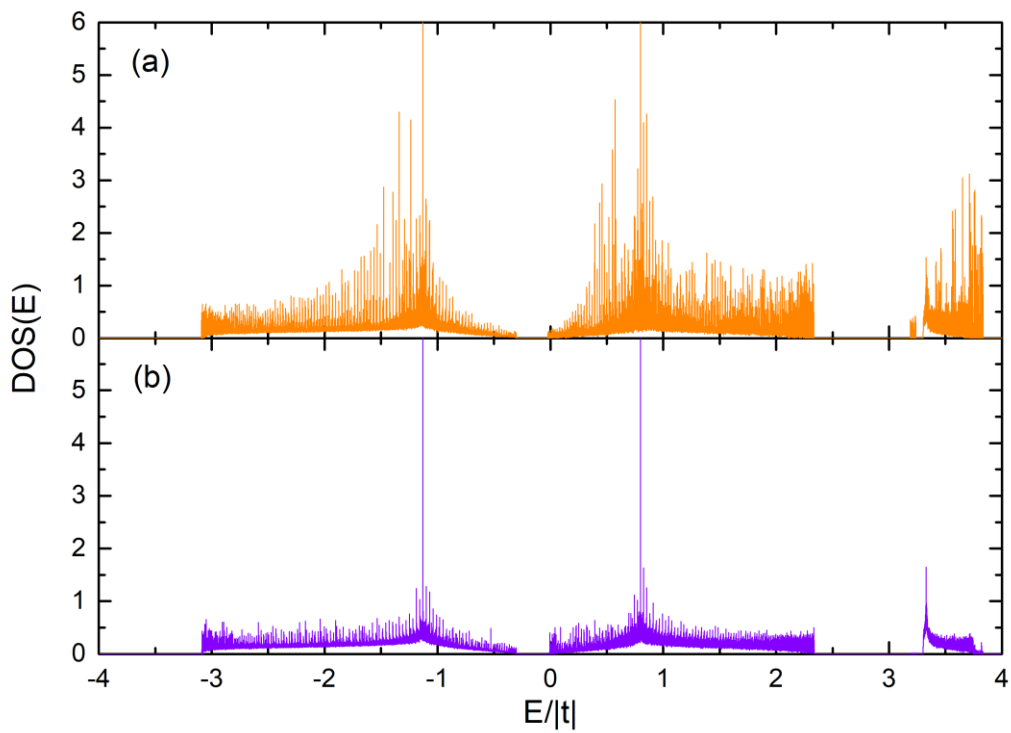


Figura 4.8. Densidad de estados para un sistema hexagonal con impurezas tipo Fano, que tiene  $E_0 = 3.0$  y  $t_F = 1.0$ , tomando (a)  $n_{def} = 6$  y (b)  $n_{def} = 12$

## 5 Conductividad de Kubo-Greenwood

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 transporté son enteramente diferentes en dichos sistemas, debido a la localización de las excitaciones. En la presente sección se muestran los resultados obtenidos para el transporte electrónico en redes cúbicas con impurezas tipo Fano.

En la figura 5.1 se presenta una res cuadrada periódica conectada a dos saturadores periódicos y con un plano de impurezas tipo Fano.

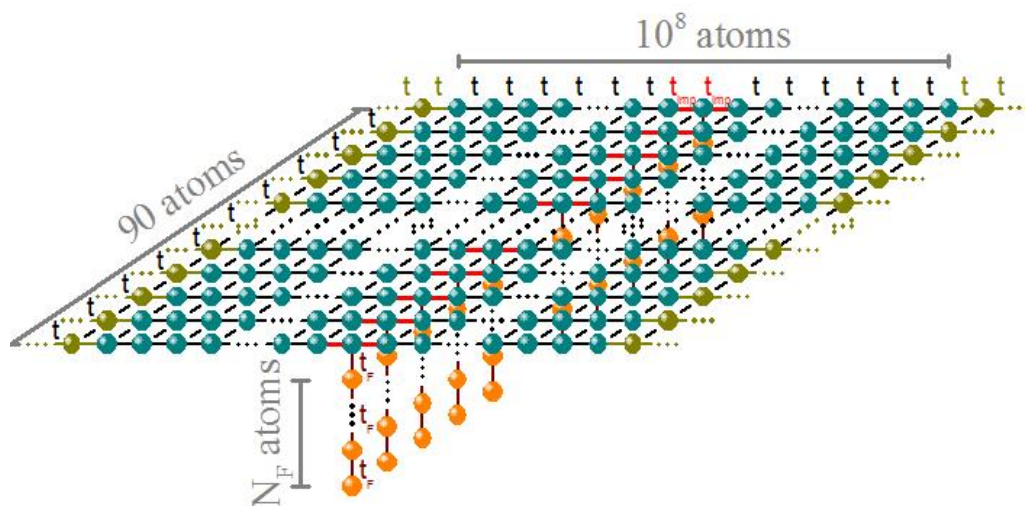


Figura 5.1 Red cuadrada periódica con dos saturadores y un plano de impurezas tipo Fano

En la figura 5.2 se presenta el espectro de la conductancia eléctrica en función de las energía y de la variación de las integrales de salto de la impureza para una red cuadrada bidimensional periódica de  $10^8 \times 90$  átomos con un plano de impurezas Fano, el cual contiene 5 átomos por cadena y una parte imaginaria de la energía  $\eta = 10^{-15} |t|$ . Las autoenergías de las impurezas Fano consideradas fueron a)  $\varepsilon_F = -|t|$ , b)  $\varepsilon_F = -0.1|t|$ , c)  $\varepsilon_F = |t|$  y d)  $\varepsilon_F = 0.1|t|$ . Obsérvese que cuando la autoenergía es cercana a la integral de salto de la red cuadrada periódica el espectro de la conductancia eléctrica empieza a formar pseudo-gap. Además, al ir variando la energía de salto de la impureza los escalones de cuantización se destruyen en todos los casos.

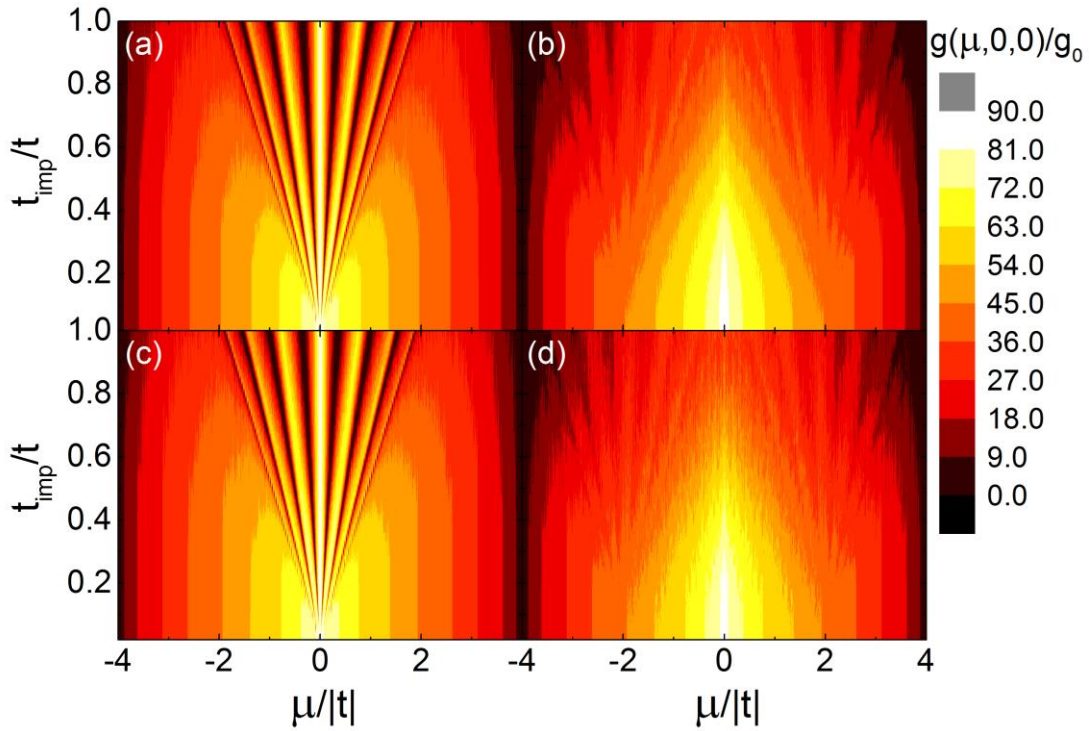


Figura 5.2 Conductancia eléctrica en función de la energía para una red cuadrada de 90 átomos transversales y  $10^8$  átomos longitudinales.

En la figura 5.3 presentamos el espectro de transmitancia en función de la energía y de la variación de las autoenergías de la impureza tipo sitio para una red de  $10^8 \times 35$  átomos y los mismos parámetros que la fig. 5.2. Nótese que el incremento en la energía de impureza destruye la cuantización del espectro hasta desvanecerlo. Al considerara un plano de impurezas de sitio el espectro deja de ser simétrico y no abre gap como en el caso de impurezas tipo Fano.

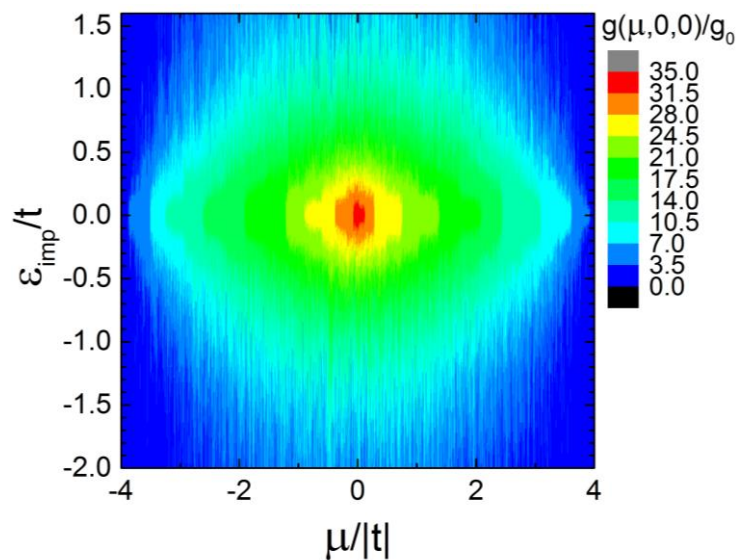


Figura 5.3 Conductancia eléctrica en función de la energía para una red cuadrada periódica y variando la energía de sitio de las impurezas Fano.

Si la red cuadrada unimos sus extremos tenemos un nanotubo el cual es presentado en la figura 5.4.

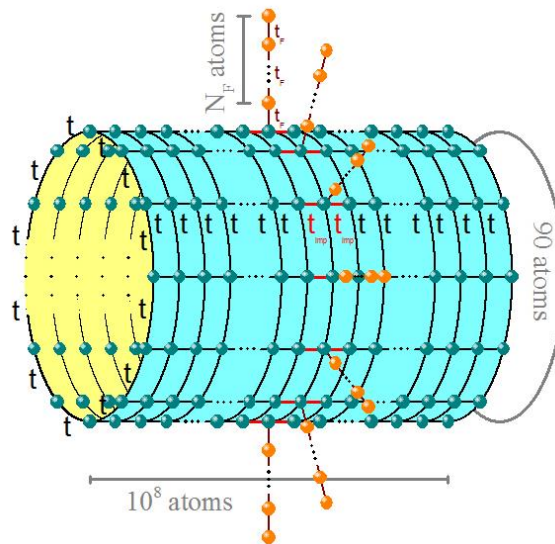


Figura 5.4 Nanotubo periódico con impurezas tipo Fano.

En la figura 5.5 se presenta el espectro de conductancia versus la energía y la variación de la energía de sitio de la cadena de impurezas tipo Fano para un nanotubo periódico (a y c) y cuasiperiódico (b y d) con  $10^8 \times 130$  átomos. Se variaron las integrales de salto del nanotubo alrededor de la impureza (a y b)  $t_{imp} = t$  y (c y d)  $t_{imp} = 1.2t$ . La parte imaginaria de la energía fue la misma que la figura 5.2. Obsérvese que al ir variando la autoenergía de la impureza se destruye la cuantización en los sistemas periódicos y en los cuasiperiódicos tiende más rápido a cero los picos de conductancia.

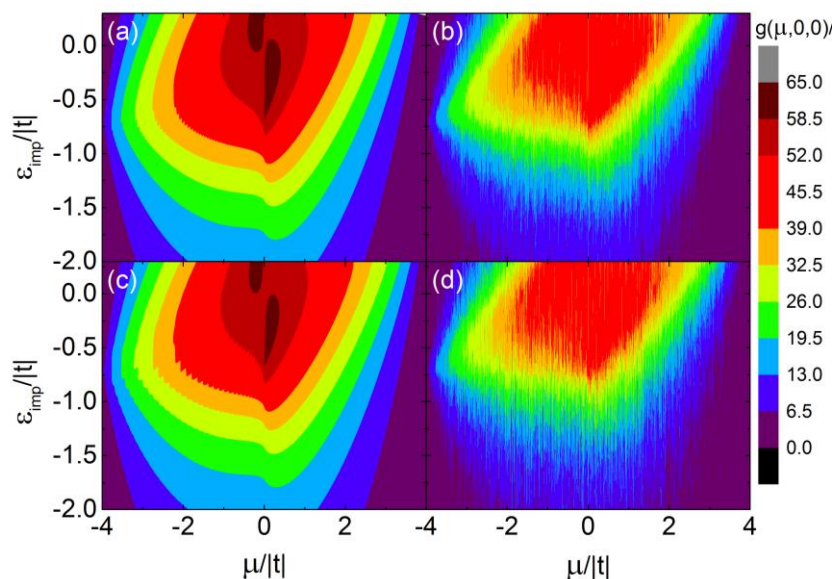


Figura 5.5 Conductancia eléctrica versus energía y energía de sitio de la impureza para un nanotubo periódico (a y c) y cuasiperiódico (b y d).



## 6 Conclusiones

En esta tesis hemos estudiado la densidad de estados y el transporte electrónico en sistemas aperiódicos de dos dimensiones dentro del formalismo de amarre fuerte. Para dicho estudio desarrollamos nuevos métodos de renormalización en el espacio real para la densidad de estados en sistemas triangulares y hexagonales con impurezas. Además, extendimos el método de renormalización para la fórmula de Kubo-Greenwood en redes cuadradas con impurezas Fano. Todos estos métodos nos permitieron 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 demostrar la existencia de estados de conducción balística al introducir impurezas a los sistemas de dos dimensiones.

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 bidimensionales con impurezas, dada la ausencia del espacio recíproco.
- 2) Los nuevos métodos de renormalización en redes triangulares y hexagonales, nos permite estudiar el efecto de las impurezas de energía de sitio, integral de salto o ramificadas en la densidad de estados de sistemas con tamaño de decenas de átomos hasta macroscópicos.
- 3) Se analizó el porcentaje de impurezas que se pueden incluir en la red triangular o hexagonal para modificar el espectro de la densidad de estados, ya que esta es una cantidad extensiva.
- 4) Se crea un pseudogap en la densidad de estados de una red triangular cuando el porcentaje de impurezas es mayor a 0.01%.
- 5) Se obtiene una nueva brecha de densidad de estados en las redes triangulares y hexagonales cuando son incluidas impurezas tipo Fano.
- 6) Con el porcentaje de impurezas tipo Fano se puede variar el ancho del gap en la región central del espectro de densidad de estados para una red hexagonal.
- 7) Se obtuvo la cuantización del espectro de conductancia cuando el ordenamiento de sus átomos es periódico en la dirección longitudinal.
- 8) La variación de la integral de salto en las impurezas destruye en menor grado el espectro de conductancia eléctrica en redes cuadradas periódicas en comparación con la variación de las energías de sitio de estas impurezas.
- 9) Se encontró un estado transparente para diferentes longitudes de átomos de los planos de impurezas tipo Fano en las redes cuadradas.

10) En las redes ordenadas cuasiperiódicamente el efecto de las impurezas tipo Fano destruye rápidamente el espectro de conductancia eléctrica.

Por último, el presente trabajo podría extenderse a investigar el transporte electrónico por medio de la fórmula de Kubo-Greenwood en sistemas triangulares o hexagonales 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 A: Renormalización de Kubo-Greenwood

$$\begin{aligned} Tr[p \operatorname{Im}G^+(E + \hbar\omega)p \operatorname{Im}G^+(E)] \\ = S(E_\omega^+, E^+, n) - S(E_\omega^+, E^-, n) - S(E_\omega^-, E^+, n) \\ + S(E_\omega^-, E^-, n), \end{aligned} \quad (87)$$

$$A(E_1, E_2, n) = -[A_c(E_1, E_2, n) - A_c(E_2, E_1, n)]^2, \quad (88)$$

$$\begin{aligned} B(E_1, E_2, n) = 2[A_c(E_1, E_2, n) - A_c(E_2, E_1, n)][B_c(E_2, E_1, n) \\ - B_c(E_1, E_2, n)] \\ + 2[C_c(E_1, E_2, n) - D_c(E_2, E_1, n)][C_c(E_2, E_1, n) \\ - D_c(E_2, E_1, n)], \end{aligned} \quad (89)$$

$$C(E_1, E_2, n) = -[B_c(E_1, E_2, n) - B_c(E_2, E_1, n)]^2 \quad (90)$$

$$\begin{aligned} D(E_1, E_2, n) = 2[A_c(E_1, E_2, n) - A_c(E_2, E_1, n)][D_c(E_2, E_1, n) \\ - C_c(E_1, E_2, n)], \end{aligned} \quad (91)$$

$$F(E_1, E_2, n) = -[C_c(E_1, E_2, n) - D_c(E_2, E_1, n)]^2, \quad (92)$$

$$\begin{aligned} I(E_1, E_2, n) = 2[B_c(E_1, E_2, n) - B_c(E_2, E_1, n)][D_c(E_2, E_1, n) \\ - C_c(E_1, E_2, n)], \end{aligned} \quad (93)$$

$$\begin{aligned} J(E_1, E_2, n) = J(E_1, E_2, n-1) + \theta_0(E_2, n)F(E_1, E_2, n-1) \\ + \theta_1(E_1, n)K(E_1, E_2, n-1) \\ + \theta_1^2(E_1, n)\theta_0(E_2, n)[C(E_1, E_2, n-1) + A(E_1, E_2, n-2) \\ + A_o(E_1, E_2, n)] \\ + \theta_0(E_2, n)\theta_1(E_1, n)[I(E_1, E_2, n-1) + B_o(E_1, E_2, n)] \\ + \theta_1^2(E_1, n)[L(E_1, E_2, n-1) + J(E_1, E_2, n-2)], \end{aligned} \quad (94)$$

$$\begin{aligned} K(E_1, E_2, n) = 2\theta_0(E_2, n)\theta_1(E_1, n)\theta_2(E_1, n)[C(E_1, E_2, n-1) \\ + A(E_1, E_2, n-2) + A_o(E_1, E_2, n)] \\ + \theta_0(E_2, n)C_o(E_1, E_2, n) \\ + 2\theta_1(E_1, n)\theta_2(E_1, n)[L(E_1, E_2, n-1) \\ + J(E_1, E_2, n-2)] \\ + \theta_0(E_2, n)\{\theta_1(E_1, n)[D(E_2, E_1, n-2) + D_o(E_2, E_1, n)] \\ + \theta_2(E_1, n)[I(E_1, E_2, n-1) + B_o(E_1, E_2, n)]\} \\ + \theta_2(E_1, n)K(E_1, E_2, n-1) + \theta_1(E_1, n)K(E_1, E_2, n-2), \end{aligned} \quad (95)$$

$$\begin{aligned} L(E_1, E_2, n) = L(E_1, E_2, n-2) + \theta_0(E_2, n)F(E_2, E_1, n-2) \\ + \theta_2(E_1, n)K(E_1, E_2, n-2) \\ + \theta_2^2(E_1, n)\theta_0(E_2, n)[C(E_1, E_2, n-1) + A(E_1, E_2, n-2) \\ + A_o(E_1, E_2, n)] \\ + \theta_0(E_2, n)\theta_2(E_1, n)[D(E_2, E_1, n-2) + D_o(E_1, E_2, n)] \\ + \theta_2^2(E_1, n)[L(E_1, E_2, n-1) + J(E_1, E_2, n-2)], \end{aligned} \quad (96)$$

$$\begin{aligned}
Z(E_1, E_2, n) = & \theta_0(E_1, n)[L(E_1, E_2, n-1) + J(E_1, E_2, n-2)] \\
& + Z(E_1, E_2, n-1) + Z(E_1, E_2, n-2) \\
& + \theta_0(E_1, n)\theta(E_2, n)[C(E_1, E_2, n-1) + (E_1, E_2, n-2)] \\
& + A_o(E_1, E_2, n) \\
& + \theta_0(E_2, n)[L(E_2, E_1, n-1) + J(E_2, E_1, n-2)],
\end{aligned} \tag{97}$$

donde

$$\theta_0(E, n) = [E - E_R(E, n-1) - E_L(E, n-2)]^{-1}, \tag{98}$$

$$\theta_1(E, n) = t(E, n-1)\theta_0(E, n), \quad \theta_2(E, n) = t(E, n-2)\theta_0(E, n) \tag{99}$$

$$\begin{aligned}
A_c(E_1, E_2, n) = & A_c(E_1, E_2, n-1) \\
& + \theta_1(E_1, n)\theta_1(E_2, n)[A_c(E_1, E_2, n-2) \\
& + B_c(E_1, E_2, n-1)] + \theta_1(E_2, n)C_c(E_1, E_2, n-1) \\
& + \theta_1(E_1, n)D_c(E_1, E_2, n-1),
\end{aligned} \tag{100}$$

$$\begin{aligned}
B_c(E_1, E_2, n) = & B_c(E_1, E_2, n-2) \\
& + \theta_2(E_1, n)\theta_2(E_2, n)[A_c(E_1, E_2, n-2) \\
& + B_c(E_1, E_2, n-1)] + \theta_2(E_1, n)C_c(E_1, E_2, n-2) \\
& + \theta_2(E_2, n)D_c(E_1, E_2, n-2),
\end{aligned} \tag{101}$$

$$\begin{aligned}
C_c(E_1, E_2, n) = & \theta_1(E_1, n)\theta_2(E_2, n)[A_c(E_1, E_2, n-2) \\
& + B_c(E_1, E_2, n-1)] + \theta_2(E_2, n)C_c(E_1, E_2, n-1) \\
& + \theta_1(E_1, n)C_c(E_1, E_2, n-2),
\end{aligned} \tag{102}$$

$$\begin{aligned}
D_c(E_1, E_2, n) = & \theta_1(E_2, n)\theta_2(E_1, n)[A_c(E_1, E_2, n-2) \\
& + B_c(E_1, E_2, n-1)] + \theta_2(E_1, n)D_c(E_1, E_2, n-1) \\
& + \theta_1(E_2, n)D_c(E_1, E_2, n-2),
\end{aligned} \tag{103}$$

$$\begin{aligned}
A_o(E_1, E_2, n) = & 2[A_c(E_1, E_2, n-2) \\
& - A_c(E_2, E_1, n-2)][B_c(E_2, E_1, n-1) \\
& - B_c(E_1, E_2, n-2)],
\end{aligned} \tag{104}$$

$$\begin{aligned}
B_o(E_1, E_2, n) = & 2[A_c(E_1, E_2, n-2) \\
& - A_c(E_2, E_1, n-2)][D_c(E_2, E_1, n-1) \\
& - C_c(E_1, E_2, n-1)],
\end{aligned} \tag{105}$$

$$\begin{aligned}
C_o(E_1, E_2, n) = & 2[D_c(E_1, E_2, n-2) \\
& - C_c(E_2, E_1, n-2)][D_c(E_2, E_1, n-1) \\
& - C_c(E_1, E_2, n-1)],
\end{aligned} \tag{106}$$

$$\begin{aligned}
D_o(E_1, E_2, n) = & 2[B_c(E_1, E_2, n-1) \\
& - B_c(E_2, E_1, n-1)][D_c(E_2, E_1, n-2) \\
& - C_c(E_1, E_2, n-2)],
\end{aligned} \tag{107}$$

con  $E = E_1$  ó  $E_2$ , mientras que la integral de salto efectiva,  $t(E, n)$ , y las autoenergías efectivas de los sitios extremos derecho ( $E_R$ ) e izquierdo ( $E_L$ ) están dadas por:

$$t(E, n) = t(E, n - 1)t(E, n - 2)'(E_1, E_2, n)\theta_0(E, n), \quad (108)$$

$$E_L(E, n) = E_L(E, n - 1) + t^2(E, n - 1)\theta_0(E, n), \quad (109)$$

$$E_R(E, n) = E_R(E, n - 2) + t^2(E, n - 2)\theta_0(E, n). \quad (110)$$

## Apéndice B: DOS para red triangular y hexagonal

$$\begin{aligned}
 A(N) = A(N-1) + \frac{[\alpha_2(N)I(N-1) + \gamma_1(N)J(N-1)]}{\alpha_1(N)} \\
 + \{\alpha_2^2(N)C(N-2) + [D(N-1) + A(N-2) - 1]\gamma_1^2(N) \\
 + \gamma_1(N)\alpha_2(N)Q(N-1) + \alpha_6^2(N)B(N-2) \\
 + \alpha_6(N)\gamma_1(N)F(N-2)\}/\alpha_1^2(N), \quad (111)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 B(N) = B(N-1) + \frac{[\alpha_3(N)K(N-1) + \gamma_2(N)L(N-1)]}{\alpha_1(N)} \\
 + \{\alpha_3^2(N)C(N-1) + [D(N-1) + A(N-2) - 1]\gamma_2^2(N) \\
 + \gamma_2(N)\alpha_3(N)Q(N-1) + \alpha_7^2(N)B(N-2) \\
 + \alpha_7(N)\gamma_2(N)F(N-2)\}/\alpha_1^2(N), \quad (112)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 C(N) = C(N-2) + \frac{[\alpha_8(N)K(N-2) + \gamma_3(N)I(N-2)]}{\alpha_1(N)} \\
 + \{\alpha_4^2(N)C(N-1) + [D(N-1) + A(N-2) - 1]\gamma_3^2(N) \\
 + \gamma_3(N)\alpha_4(N)Q(N-1) + \alpha_8^2(N)B(N-2) \\
 + \alpha_8(N)\gamma_3(N)F(N-2)\}/\alpha_1^2(N), \quad (113)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 D(N) = D(N-2) + \frac{[\alpha_9(N)L(N-2) + \gamma_4(N)J(N-2)]}{\alpha_1(N)} \\
 + \{\alpha_5^2(N)C(N-1) + [D(N-1) + A(N-2) - 1]\gamma_4^2(N) \\
 + \gamma_4(N)\alpha_5(N)Q(N-1) + \alpha_9^2(N)B(N-2) \\
 + \alpha_9(N)\gamma_4(N)F(N-2)\}/\alpha_1^2(N), \quad (114)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 F(N) \\
 = \frac{[\alpha_3(N)I(N-1) + \gamma_2(N)J(N-1) + \alpha_2(N)K(N-1) + \gamma_1(N)L(N-1)]}{\alpha_1(N)} \\
 + \{2\alpha_2(N)\alpha_3(N)C(N-1) + 2[D(N-1) + A(N-1) - 1]\gamma_1(N)\gamma_2(N) \\
 + [\gamma_1(N)\alpha_3(N) + \gamma_2(N)\alpha_2(N)]Q(N-1) + 2\alpha_6(N)\alpha_7(N)B(N-2) \\
 + [\gamma_1(N)\alpha_7(N) + \gamma_2(N)\alpha_6(N)]F(N-2)\}/\alpha_1^2(N) + F(N-1), \quad (115)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 I(N) \\
 = \frac{[\alpha_4(N)I(N-1) + \gamma_3(N)J(N-1) + \gamma_1(N)I(N-2) + \alpha_6(N)K(N-2)]}{\alpha_1(N)} \\
 + \{2\alpha_2(N)\alpha_4(N)C(N-1) + 2[D(N-1) + A(N-2) - 1]\gamma_1(N)\gamma_3(N) \\
 + [\gamma_1(N)\alpha_4(N) + \gamma_3(N)\alpha_2(N)]Q(N-1) + 2\alpha_6(N)\alpha_8(N)B(N-2) \\
 + [\gamma_1(N)\alpha_8(N) + \gamma_3(N)\alpha_6(N)]F(N-2)\}/\alpha_1^2(N), \quad (116)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 J(N) \\
 = \frac{[\alpha_4(N)I(N-1) + \gamma_4(N)J(N-1)\gamma_1(N)J(N-2) + \alpha_6(N)L(N-2)]}{\alpha_1(N)} \\
 + \{2\alpha_2(N)\alpha_5(N)C(N-1) + 2[D(N-1) + A(N-2) - 1]\gamma_1(N)\gamma_4(N) \\
 + [\gamma_1(N)\alpha_5(N) + \gamma_4(N)\alpha_2(N)]Q(N-1) + 2\alpha_6(N)\alpha_9(N)B(N-2) \\
 + [\gamma_1(N)\alpha_9(N) + \gamma_4(N)\alpha_6(N)]F(N-2)\}/\alpha_1^2(N), \quad (117)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& K(N) \\
&= \frac{[\alpha_4(N)K(N-1) + \gamma_3(N)L(N-1) + \gamma_2(N)I(N-2) + \alpha_7(N)K(N-2)]}{\alpha_1(N)} \\
&+ \{2\alpha_3(N)\alpha_4(N)C(N-1) + 2[D(N-1) + A(N-2) - 1]\gamma_2(N)\gamma_3(N) \\
&+ [\gamma_2(N)\alpha_4(N) + \gamma_3(N)\alpha_3(N)]Q(N-1) + 2\alpha_7(N)\alpha_8(N)B(N-2) \\
&+ [\gamma_2(N)\alpha_8(N) + \gamma_3(N)\alpha_7(N)]F(N-2)\}/\alpha_1^2(N), \tag{118}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& L(N) \\
&= \frac{[\alpha_5(N)K(N-1) + \gamma_4(N)L(N-1) + \gamma_2(N)J(N-2) + \alpha_7(N)L(N-2)]}{\alpha_1(N)} \\
&+ \{2\alpha_3(N)\alpha_5(N)C(N-1) + 2[D(N-1) + A(N-2) - 1]\gamma_2(N)\gamma_4(N) \\
&+ [\gamma_2(N)\alpha_5(N) + \gamma_4(N)\alpha_3(N)]Q(N-1) + 2\alpha_7(N)\alpha_9(N)B(N-2) \\
&+ [\gamma_2(N)\alpha_9(N) + \gamma_4(N)\alpha_7(N)]F(N-1)\}/\alpha_1^2(N), \tag{119}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& Q(N) \\
&= Q(N-2) \\
&+ \frac{[\gamma_4(N)I(N-2) + \gamma_3(N)J(N-2) + \alpha_9(N)K(N-2) + \alpha_8(N)L(N-2)]}{\alpha_1(N)} \\
&+ \{2\alpha_4(N)\alpha_5(N)C(N-1) + 2[D(N-1) + A(N-2) - 1]\gamma_3(N)\gamma_4(N) \\
&+ [\gamma_3(N)\alpha_5(N) + \gamma_4(N)\alpha_4(N)]Q(N-1) + 2\alpha_8(N)\alpha_9(N)B(N-2) \\
&+ [\gamma_3(N)\alpha_9(N) + \gamma_4(N)\alpha_8(N)]F(N-2)\}/\alpha_1^2(N), \tag{120}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z(N) &= Z(N-1) + Z(N-2) \\
&+ \{\theta_4(N)C(N-1) + [D(N-1) + A(N-2) - 1]\theta_1(N) \\
&+ \theta_2(N)Q(N-1) + \theta_5(N) + \theta_5(N)B(N-2) \\
&+ \theta_3(N)F(N-2)\}/\alpha_1(N), \tag{121}
\end{aligned}$$

donde

$$E_M(N) = E_R(N-1) + E_L(N-2) - E_A, \tag{122}$$

$$\theta_1(N) = [E - E_I(N-2)][E - E_D(N-1)] - T_S^2, \tag{123}$$

$$\theta_2(N) = [E - E_I(N-1)]T_{DR}(N-1) + T_{LI}(N-2)T_S, \tag{124}$$

$$\theta_3(N) = [E - E_D(N-1)]T_{LI}(N-2) + T_{DR}(N-1)T_S, \tag{125}$$

$$\theta_4(N) = [E - E_I(N-2)][E - E_M(N)] - T_{LI}^2(N-2), \tag{126}$$

$$\theta_5(N) = [E - E_D(N-1)][E - E_M(N)] - T_{DR}^2(N-1), \tag{127}$$

$$\theta_6(N) = [E - E_M(N)]T_S + T_{DR}(N-1)T_{LI}(N-2), \tag{128}$$

$$\alpha_1(N) = [E - E_M(N)]\theta_1(N) - T_{DR}(N-1)\theta_2(N) - T_{LI}(N-2)\theta_3(N), \tag{129}$$

$$\alpha_2(N) = T_{LD}(N-1)\theta_4(N) + T_{LR}(N-1)\theta_2(N), \tag{130}$$

$$\alpha_3(N) = T_{ID}(N-1)\theta_4(N) + T_{IR}(N-1)\theta_2(N), \tag{131}$$

$$\alpha_4(N) = T_{LD}(N-2)\theta_2(N) + T_{ID}(N-1)\theta_6(N), \quad (132)$$

$$\alpha_5(N) = T_{LR}(N-2)\theta_2(N) + T_{IR}(N-2)\theta_6(N), \quad (133)$$

$$\alpha_6(N) = T_{LR}(N-1)\theta_3(N) + T_{LD}(N-1)\theta_6(N), \quad (134)$$

$$\alpha_7(N) = T_{IR}(N-1)\theta_3(N) + T_{ID}(N-1)\theta_6(N), \quad (135)$$

$$\alpha_8(N) = T_{ID}(N-2)\theta_5(N) + T_{LD}(N-2)\theta_3(N), \quad (136)$$

$$\alpha_9(N) = T_{IR}(N-2)\theta_5(N) + T_{LR}(N-2)\theta_3(N), \quad (137)$$

$$\gamma_1(N) = T_{LR}(N-2)\theta_1(N) + T_{LD}(N-1)\theta_2(N), \quad (138)$$

$$\gamma_2(N) = T_{IR}(N-1)\theta_1(N) + T_{ID}(N-1)\theta_2(N), \quad (139)$$

$$\gamma_3(N) = T_{LD}(N-2)\theta_1(N) + T_{ID}(N-2)\theta_3(N), \quad (140)$$

$$\gamma_4(N) = T_{LR}(N-2)\theta_1(N) + T_{IR}(N-2)\theta_3(N), \quad (141)$$

$$E_L(N) = E_L(N-1) + \frac{[\gamma_1(N)T_{LR}(N-1) + \alpha_2(N)T_{LD}(N-1)]}{\alpha_1(N)}, \quad (142)$$

$$E_I(N) = E_I(N-1) + \frac{[\gamma_2(N)T_{IR}(N-2) + \alpha_3(N)T_{ID}(N-1)]}{\alpha_1(N)}, \quad (143)$$

$$E_D(N) = E_D(N-2) + \frac{[\gamma_3(N)T_{LD}(N-2) + \alpha_8(N)T_{ID}(N-2)]}{\alpha_1(N)}, \quad (144)$$

$$E_R(N) = E_R(N-2) + \frac{[\gamma_4(N)T_{LR}(N-2) + \alpha_9(N)T_{IR}(N-2)]}{\alpha_1(N)}, \quad (145)$$

$$T_{LI}(N) = T_{LI}(N-1) + \frac{[\gamma_1(N)T_{IR}(N-1) + \alpha_2(N)T_{ID}(N-1)]}{\alpha_1(N)}, \quad (146)$$

$$T_{LD}(N) = \frac{[\gamma_1(N)T_{LD}(N-1) + \alpha_6(N)T_{ID}(N-2)]}{\alpha_1(N)}, \quad (147)$$

$$T_{LR}(N) = \frac{[\gamma_1(N)T_{LR}(N-2) + \alpha_6(N)T_{IR}(N-2)]}{\alpha_1(N)}, \quad (148)$$

$$T_{ID}(N) = \frac{[\gamma_2(N)T_{LD}(N-2) + \alpha_7(N)T_{ID}(N-2)]}{\alpha_1(N)}, \quad (149)$$

$$T_{IR}(N) = \frac{[\gamma_2(N)T_{LR}(N-2) + \alpha_7(N)T_{IR}(N-2)]}{\alpha_1(N)}, \quad (150)$$



$$T_{DR}(N) = T_{DR}(N-2) + \frac{[\gamma_3(N)T_{LR}(N-2) + \alpha_8(N)T_{IR}(N-2)]}{\alpha_1(N)}, \quad (151)$$

utilizando las siguientes condiciones iniciales para las primeras dos generaciones:

$$\begin{aligned} E_L(1) &= E_A, & E_I(1) &= E_{imp}, & E_D(1) &= 0, & E_R(1) &= E_A, \\ T_{LI}(1) &= t_A, & T_{LD}(1) &= t_S, & T_{LR}(1) &= 0, \\ T_{ID}(1) &= t_A, & T_{IR}(1) &= t_S, & T_{DR}(1) &= t_A, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A(1) &= B(1) = C(1) = D(1) = 1, \\ F(1) &= I(1) = J(1) = K(1) = L(1) = K(1) = L(1) = Q(1) = Z(1) = 0, \end{aligned}$$

$$E_M(2) = E_R(1) + E_L(1) - E_A,$$

$$\begin{aligned} \theta_1(2) &= [E - E_I(1)][E - E_D(1)] - t_S^2, \\ \theta_2(2) &= [E - E_I(1)]T_{DR}(1) + T_{LI}(1)t_S, \\ \theta_3(2) &= [E - E_D(1)]T_{LI}(1) + T_{DR}(1)t_S, \\ \theta_4(2) &= [E - E_I(1)][E - E_M(2)] - T_{LI}^2(1), \\ \theta_5(2) &= [E - E_D(1)][E - E_M(2)] - T_{DR}^2(1), \\ \theta_6(2) &= [E - E_M(2)]t_S + T_{DR}(1)T_{LI}(1), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \alpha_1(2) &= [E - E_M(2)]\theta_1(2) - T_{DR}(1)\theta_2(2) - T_{LI}(1)\theta_3(2), \\ \alpha_2(2) &= T_{LD}(1)\theta_4(2) + T_{LR}(1)\theta_2(2), \\ \alpha_3(2) &= T_{ID}(1)\theta_4(2) + T_{IR}(1)\theta_2(2), \\ \alpha_4(2) &= T_{LD}(1)\theta_2(2) + T_{ID}(1)\theta_6(2), \\ \alpha_5(2) &= T_{LR}(1)\theta_2(2) + T_{IR}(1)\theta_6(2), \\ \alpha_6(2) &= T_{LR}(1)\theta_3(2) + T_{LD}(1)\theta_6(2), \\ \alpha_7(2) &= T_{IR}(1)\theta_3(2) + T_{ID}(1)\theta_6(2), \\ \alpha_8(2) &= T_{ID}(1)\theta_5(2) + T_{LD}(1)\theta_3(2), \\ \alpha_9(2) &= T_{IR}(1)\theta_5(2) + T_{LR}(1)\theta_3(2), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \gamma_1(2) &= T_{LR}(1)\theta_1(2) + T_{LD}(1)\theta_2(2), \\ \gamma_2(2) &= T_{IR}(1)\theta_1(2) + T_{ID}(1)\theta_2(2), \\ \gamma_3(2) &= T_{LD}(1)\theta_1(2) + T_{ID}(1)\theta_3(2), \\ \gamma_4(2) &= T_{LR}(1)\theta_1(2) + T_{IR}(1)\theta_3(2), \end{aligned}$$

$$E_L(2) = E_L(1) + \frac{[\gamma_1(2)T_{LR}(1) + \alpha_2(2)T_{LD}(1)]}{\alpha_1(2)},$$

$$E_I(2) = E_I(1) + \frac{[\gamma_2(2)T_{IR}(1) + \alpha_3(2)T_{ID}(1)]}{\alpha_1(2)},$$

$$E_D(2) = E_D(1) + \frac{[\gamma_3(2)T_{LD}(1) + \alpha_8(2)T_{ID}(1)]}{\alpha_1(2)},$$

$$E_R(2) = E_R(1) + \frac{[\gamma_4(2)T_{LR}(1) + \alpha_9(2)T_{IR}(1)]}{\alpha_1(2)},$$

$$T_{LI}(2) = T_{LI}(1) + \frac{[\gamma_1(2)T_{IR}(1) + \alpha_2(2)T_{ID}(1)]}{\alpha_1(2)},$$

$$T_{LD}(2) = \frac{[\gamma_1(2)T_{LD}(1) + \alpha_6(2)T_{ID}(1)]}{\alpha_1(2)},$$

$$T_{LR}(2) = \frac{[\gamma_1(2)T_{LR}(1) + \alpha_6(2)T_{IR}(1)]}{\alpha_1(2)},$$

$$T_{ID}(2) = \frac{[\gamma_2(2)T_{LD}(1) + \alpha_7(2)T_{ID}(1)]}{\alpha_1(2)},$$

$$T_{IR}(2) = \frac{[\gamma_2(2)T_{LR}(1) + \alpha_7(2)T_{IR}(1)]}{\alpha_1(2)},$$

$$T_{DR}(2) = T_{DR}(1) + \frac{[\gamma_3(2)T_{LR}(1) + \alpha_8(2)T_{IR}(1)]}{\alpha_1(2)},$$

$$A(2) = A(1) + \frac{[\alpha_2(2)I(1) + \gamma_1(2)J(1)]}{\alpha_1(2)} + \frac{\{\alpha_2^2(2)C(1) + [D(1) + A(1) - 1]\gamma_1^2(2)\}}{\alpha_1^2(2)} \\ + \frac{[\gamma_1(2)\alpha_2(2)Q(1) + \alpha_6^2(2)B(1) + \alpha_6(2)\gamma_1(2)F(1)]}{\alpha_1^2(2)},$$

$$B(2) = B(1) + \frac{[\alpha_3(2)K(1) + \gamma_2(2)L(1)]}{\alpha_1(2)} + \frac{\{\alpha_3^2(2)C(1) + [D(1) + A(1) - 1]\gamma_2^2(2)\}}{\alpha_1^2(2)} \\ + \frac{[\gamma_2(2)\alpha_3(2)Q(1) + \alpha_7^2(2)B(1) + \alpha_7(2)\gamma_2(2)F(1)]}{\alpha_1^2(2)},$$

$$C(2) = C(1) + \frac{[\alpha_8(2)K(1) + \gamma_3(2)I(1)]}{\alpha_1(2)} + \frac{\{\alpha_4^2(2)C(1) + [D(1) + A(1) - 1]\gamma_3^2(2)\}}{\alpha_1^2(2)} \\ + \frac{[\gamma_3(2)\alpha_4(2)Q(1) + \alpha_8^2(2)B(1) + \alpha_8(2)\gamma_3(2)F(1)]}{\alpha_1^2(2)},$$

$$D(2) = D(1) + \frac{[\alpha_9(2)L(1) + \gamma_4(2)J(1)]}{\alpha_1(2)} + \frac{\{\alpha_5^2(2)C(1) + [D(2) + A(1) - 1]\gamma_4^2(2)\}}{\alpha_1^2(2)} \\ + \frac{[\gamma_4(2)\alpha_5(2)Q(1) + \alpha_9^2(2)B(1) + \alpha_9(2)\gamma_4(2)F(1)]}{\alpha_1^2(2)},$$

$$F(2)$$

$$= F(1) + \frac{[\alpha_3(2)I(1) + \gamma_2(2)J(1) + \alpha_2(2)K(1) + \gamma_1(2)L(1)]}{\alpha_1(2)} \\ + \frac{\{2\alpha_2(2)\alpha_3(2)C(2) + 2[D(1) + A(1) - 1]\gamma_1(2)\gamma_2(2) + 2\alpha_6(2)\alpha_7(2)B(1)\}}{\alpha_1^2(2)} \\ + \frac{\{[\gamma_1(2)\alpha_3(2) + \gamma_2(2)\alpha_2(2)]Q(1) + [\gamma_1(2)\alpha_7(2) + \gamma_2(2)\alpha_6(2)]F(1)\}}{\alpha_1^2(2)}.$$

$$\begin{aligned}
I(2) &= \frac{[\alpha_4(2)I(1) + \gamma_3(2)J(1) + \gamma_1(2)I(1) + \alpha_6(2)K(1)]}{\alpha_1(2)} \\
&+ \frac{\{2\alpha_2(2)\alpha_4(2)C(1) + 2[D(1) + A(1) - 1]\gamma_1(2)\gamma_3(2) + 2\alpha_6(2)\alpha_8(2)B(1)\}}{\alpha_1^2(2)} \\
&+ \frac{\{[\gamma_1(2)\alpha_4(2) + \gamma_3\alpha_2(2)]Q(1) + [\gamma_1(2)\alpha_8(2) + \gamma_3(2)\alpha_6(2)]F(1)\}}{\alpha_1^2(2)},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
J(2) &= \frac{[\alpha_5(2)I(1) + \gamma_4(2)J(1) + \gamma_1(2)J(1) + \alpha_6(2)L(1)]}{\alpha_1(2)} \\
&+ \frac{\{2\alpha_2(2)\alpha_5(2)C(1) + 2[D(1) + A(1) - 1]\gamma_1(2)\gamma_4(2) + 2\alpha_6(2)\alpha_9(2)B(1)\}}{\alpha_1^2(2)} \\
&+ \frac{\{[\gamma_1(2)\alpha_5(2) + \gamma_4(2)\alpha_2(2)]Q(1) + [\gamma_1(2)\alpha_9(2) + \gamma_4(2)\alpha_6(2)]F(1)\}}{\alpha_1^2(2)},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
K(2) &= \frac{[\alpha_4(2)K(1) + \gamma_3(2)L(1) + \gamma_2(2)I(1) + \alpha_7(2)K(1)]}{\alpha_1(2)} \\
&+ \frac{\{2\alpha_3(2)\alpha_5(2)C(1) + 2[D(1) + A(1) - 1]\gamma_2(2)\gamma_4(2) + 2\alpha_7(2)\alpha_8(2)B(1)\}}{\alpha_1^2(2)} \\
&+ \frac{\{[\gamma_2(2)\alpha_4(2) + \gamma_3(2)\alpha_3(2)]Q(1) + [\gamma_2(2)\alpha_8(2) + \gamma_3(2)\alpha_7(2)]F(1)\}}{\alpha_1^2(2)},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
L(2) &= \frac{[\alpha_4(2)K(1) + \gamma_4(2)L(1) + \gamma_2(2)J(1) + \alpha_7(2)K(1)]}{\alpha_1(2)} \\
&+ \frac{\{2\alpha_4(2)\alpha_5(2)C(1) + 2[D(1) + A(1) - 1]\gamma_2(2)\gamma_4(2) + 2\alpha_7(2)\alpha_9(2)B(1)\}}{\alpha_1^2(2)} \\
&+ \frac{\{[\gamma_2(2)\alpha_5(2) + \gamma_4(2)\alpha_3(2)]Q(1) + [\gamma_2(2)\alpha_9(2) + \gamma_4(2)\alpha_7(2)]F(1)\}}{\alpha_1^2(2)},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Q(2) &= Q(1) + \frac{[\gamma_4(2)I(1) + \gamma_3(2)J(1) + \alpha_9(2)K(1) + \alpha_8(2)L(1)]}{\alpha_1(2)} \\
&+ \frac{\{2\alpha_4(2)\alpha_5(2)C(1) + 2[D(1) + A(1) - 1]\gamma_3(2)\gamma_4(2) + 2\alpha_8(2)\alpha_9(2)B(1)\}}{\alpha_1^2(2)} \\
&+ \frac{\{[\gamma_2(2)\alpha_5(2) + \gamma_4(2)\alpha_4(2)]Q(1) + [\gamma_3(2)\alpha_9(2) + \gamma_4(2)\alpha_8(2)]F(1)\}}{\alpha_1^2(2)},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z(2) &= 2Z(1) + \frac{\{\theta_4(2)C(1) + [D(1) + A(1) - 1]\theta_1(2)\}}{\alpha_1(2)} \\
&+ \frac{[\theta_2(2)Q(1) + \theta_5(2)B(1) + \theta_3(2)F(1)]}{\alpha_1(2)},
\end{aligned}$$

Por otro lado, los siguientes valores complementan los coeficientes de la densidad de estados

$$\mu_{LR}(E) = \frac{T_{LR}(N)}{[E - E_R(N)]}, \quad (152)$$

$$\mu_{IR}(E) = \frac{T_{IR}(E)}{[E - E_R(N)]}, \quad (153)$$

$$\mu_{DR}(E) = \frac{T_{DR}(E)}{[E - E_R(N)]}, \quad (154)$$

$$X_{DR}(E) = E - E_D(N) - T_{DR}(N)\mu_{DR}(E), \quad (155)$$

$$X_{LR}(E) = E - E_L(N) - T_{LR}(N)\mu_{LR}(E), \quad (156)$$

$$X_{IR}(E) = E - E_I(N) - T_{IR}(N)\mu_{IR}(E), \quad (157)$$

$$Y_{LDR}(E) = T_{LD}(N) + T_{DR}(N)\mu_{LR}(E), \quad (158)$$

$$Y_{LIR}(E) = T_{LI}(N) + T_{IR}(N)\mu_{LR}(E), \quad (159)$$

$$Y_{IDR}(E) = T_{ID}(N) + T_{DR}(N)\mu_{IR}(E). \quad (160)$$

## Bibliografía

- A.K. Geim, K. N. (2007). The rise of graphene. *Nat. Mater.*, 183.
- Ando, K. (1999). Mechanism for deformation of wood as a honeycomb structure I: Effect of anatomy on the initial deformation process during radial compression. *Japan Wood Science*, 120-126.
- Aragón, J. (1994). La Estructura Atómica de los Cuasicristales. *Revista Mexicana de Física*, 339-365.
- Ashcroft, N. (1976). *Solid State Physics*. Orlando: Harcourt College Publishers.
- Bhattacharya, P. (2011). *Comprehensive Semiconductor Science and Technology*. Ann Arbor: Elsevier Science.
- Boustani, I. (1997). Systematic ab initio investigation of bare boron clusters: Determination of the geometry and electronic structures of B<sub>n</sub>. *Physical Review B*, 426-438.
- Bruce Averill, P. E. (2006). *Chemistry: Principles, Patterns, and Applications*. London: Prentice Hall College.
- Bruijn, N. d. (1981). Algebraic Theory of Penrose's Non-Periodic Tilings of the Plane. *Indagationes Mathematicae*, 39-52.
- Chen, G. (2005). *Nanoscale Energy Transport and Conversion*. NYC: Oxford.
- D.L. McDowell, A. W. (2004). In-plane stiffness and yield strength of periodic metal honeycombs. *Journal of Engineering Materials and Technology, Transactions of the ASME*, 137-156.
- Datta, S. (1995). *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Indiana: Cambridge University Press.
- Dunlap, R. (1997). *The Golden Ratio and Fibonacci Numbers*. Singapore: World Scientific Publishing Co.
- Economou, E. (1981). Static Conductance and Scaling Theory of Localization in One Dimension. *Physical Review Letters*, 618.
- Economou, E. (2005). *Green's Functions in Quantum Physics*. Berlin: Springer.
- Fan, T. (2001). *Mathematical Theory of Elasticity of Quasicrystals and Its Applications*. Beijing: Springer.
- Ferry, D. (2008). Nanowires in Nanoelectronics. *Science*, 579-580.
- Greenwood, D. (1958). The Boltzmann Equation in the Theory of Electrical Conduction in Metals. *Proceedings of the Physical Society*, 585.
- Gu, H. (2018). Experimental study of modulus, strength and toughness of 2D triangular lattices. *International Journal of Solids and Structures*, 207-216.
- Janot, C. (1997). *Quasicrystals. A Primer*. Oxford University Press.
- K. Novoselov, A. G. (2004). Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, 666-669.
- Kind, H. (2002). Nanowire Ultraviolet Photodetectores and Optical Switches. *Advance Materials*, 158-160.
- Kittel, C. (2005). *Introduction to Solid State Physics*. Berkeley: John Wiley & Sons, Inc.
- Landauer, R. (1992). Conductance from Transmission: Common Sense Points. *Physica Scripta*, 110-114.
- Martínez, J. (2006). *Nanotechnology for Microelectronics and Optoelectrics*. Oxford: European Materials Research Society Series.

- Naumis, G. G. (2007). Simetrías Exóticas: de Cuasicristales y Otros Sistemas Políticamente Incorrectos. *Revista Iberoamericana de Física*, 10-17.
- Neamen, D. (2003). *Semiconductor Physics and Devices: Basic Principles*. Boston: McGraw-Hill.
- Neil W. Ashcroft, D. M. (1976). *Solid State Physics*. Orlando, USA: Saunders College.
- Nelson, S. (2019, Enero 21). *Twinning, Polymorphism, Polytypism*. Retrieved from Tulane: <https://www.tulane.edu/~sanelson/eens211/twinning.htm>
- Olsen, J. L. (1981). *Metals: Phonon States. Electron States and Fermi Surfaces · Phonon States of Elements. Electron States and Fermi Surfaces of Alloys*. Springer.
- Penrose, R. (1974). The Role of Aesthetics in Pure and Applied Mathematical Research. *Bulletin of the Institute of Mathematics and Its Applications*, 266-271.
- Sakurai, J. (2017). *Modern Quantum Mechanics*. Philadelphia: Cambridge University Press.
- Sánchez, F., Sánchez, V., & Wang, C. (2018). Ballistic transport in aperiodic Labyrinth tiling proven through a new convolution theorem. *The European Physical Journal B*, 132.
- Sánchez, V., & Wang, C. (2004). Application of renormalization and convolution methods to the Kubo-Greenwood formula in multidimensional Fibonacci systems. *Physical Review B*, 144207.
- Scott, T. (2014). *On the Origin of Fibonacci Sequence*. Aachen: MacTutor History of Mathematics.
- Shahtahmasebi, N. (2005). The Electronic Properties of a Fibonacci Chain. *Iranian Journal of Physics Research*, 71-76.
- Shechtman, D. (1984). Metallic Phase with Long-Range Orientational Order and No Translational Symmetry. *Physical Review Letters*, 1951-1954.
- Steinhardt, P. J. (1984). Quasicrystals: A New Class of Ordered Structures. *Physical Review Letters*, 2477-2481.
- Subotic, B. (1994). Electron-Diffraction and Infrared-Spectroscopy of Amorphous Aluminosilicate Gels. *Studies in surface science and catalysis* (pp. 259-266). Zagreb: Elsevier Science.
- Sun, T. (2014). Roughness-Controlled Copper Nanowires and Cu Nanowires-Ag Heterostructures: Synthesis and Their Enhanced Catalysis. *Journal of Materials Chemistry*, 18583-18592.
- Süto, A. (1994). Schrödinger difference equation with deterministic ergodic potentials. In F. Axel, *Beyond Quasicrystals* (pp. 481-549). Springer.
- Sze, S. (1981). *Physics of Semiconductor Devices*. New York City: John Wiley & Sons.
- White, S. (1992). Density matrix formulation for quantum renormalization groups. *Physical Review Letters*, 2863-2866.
- Y. Imry, R. L. (1999). Conductance Viewed as Transmission. *Reviews of Modern Physics*, 306-312.
- Zhai, H. (2003). Hydrocarbon analogues of boron clusters — planarity, aromaticity and antiaromaticity. *Nature Materials*, 827-833.