



00382
8
**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

**TRANSPORTE ELECTRÓNICO EN
SISTEMAS
CUASIPERIODICOS**

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL GRADO
ACADEMICO DE :
DOCTORA EN CIENCIAS (FÍSICAS)

P R E S E N T A :
VICENTA SÁNCHEZ MORALES

DIRECTOR DE TESIS:
DR. CHUMIN WANG CHEN

pcf

posgrado en ciencias físicas
u n a m

MÉXICO, D.F. 1

2003

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

A la ciencia . . .

2

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

AGRADECIMIENTOS

Al Dr. Chumin Wang Chen, le debo agradecer tantas cosas que su número es incontable. Entre ellas su asesoría en mis estudios de maestría, su invaluable ayuda en la preparación de los exámenes generales para obtener el grado de Maestría, por su orientación, apoyo y contribución en la elaboración de la presente tesis, pero sobre todo por su invaluable amistad.

A la Dra. Julia Tagüeña Parga y al Dr. Oracio Navarro Chávez, miembros de mi comité tutorial, por sus observaciones y sugerencias que hicieron a lo largo de mis estudios doctorales y enriquecieron indudablemente este trabajo.

A los miembros del jurado: Dr. Rafael A. Barrio Paredes, Dr. Gerardo García Naumis, Dr. José Luis Aragón Vera y Dr. Eleuterio Castaño Tostado, por sus comentarios constructivos y su invaluable tiempo que dedicaron a la revisión de esta tesis.

A la Universidad Nacional Autónoma de México, por mi formación académica y por ser mi segundo hogar.

Al Instituto de Investigaciones en Materiales por permitirme utilizar sus instalaciones, servicios bibliográficos y de cómputo, pero sobre todo por la atención recibida de su personal. Además, por el apoyo del complemento de beca.

A la Dirección General de Estudios de Posgrado (DGEP) de la UNAM, por la beca que me otorgó para la realización de mis estudios de doctorado.

Al CONACyT, a la DGAPA y a la DGEP por el apoyo otorgado en los proyectos CONACyT-32148E, DGAPA-IN101701 y PAEP-202307, respectivamente.

A Alejandro López el apoyo moral que me brindó en todo momento.

A mis compañeros Miguel, Raúl, Luis, Rocío, Fernando y Samuel, por su amistad y compañía.

Muy especialmente a mi Madre Juana Morales (en su memoria), espero haber aprendido la fortaleza que demostraba para resolver cualquier problema.

A mi padre Noe Sánchez, a mis hermanos: Rosa, Martina, Ángel, Carmen, Zenaida y Guadalupe, por su apoyo, paciencia, comprensión y cariño que me han brindado.

Los principales resultados de esta tesis se han resumido en las siguientes publicaciones:

1. V. Sánchez, L.A. Pérez, R. Oviedo-Roa y C. Wang,
“Renormalization Approach to the Kubo Formula in
Fibonacci Systems”,
Phys. Rev. B **64**, 174205 (2001).
2. V. Sanchez y C. Wang,
“Exact Results of the Kubo Conductivity in Macroscopic
Fibonacci Systems: A Renormalization Approach”,
J. of Alloys and Compounds **342**, 410 (2002).
3. V. Sanchez y C. Wang,
“Electronic Transport in Quasiperiodic Lattices”,
(aceptado en *J. of the Physical Society of Japan*, 2003)
4. C. Wang, R. Oviedo-Roa, L.A. Pérez y V. Sánchez,
“Electrical Conductivity and Localization in Quasiperiodic
Lattices”,
Ferroelectrics **250**, 305 (2001).
5. C. Wang, R. Oviedo-Roa, V. Sánchez y L.A. Pérez,
“AC Conduction in Quasiperiodic Lattices”,
Mat. Res. Soc. Symp. Proc. **643**, K9.20 (2001).

Resumen

En esta tesis se estudia el transporte electrónico en sistemas cuasiperiódicos por medio de la fórmula de Kubo-Greenwood a temperatura cero dentro del formalismo de enlace fuerte. Hemos desarrollado un nuevo método de renormalización capaz de calcular la conductividad eléctrica en redes de Fibonacci de tamaño macroscópico. En particular, se analiza la conductividad eléctrica dc y ac en las redes de Fibonacci del tipo mixto que varían tanto las auto energías como las integrales de salto, así como las de enlaces. Asimismo, estudiamos los efectos de la condición de frontera en la conducción electrónica. Los resultados para la cadena de Fibonacci mixta muestran que el espectro de conducción ac del estado transparente -con coeficiente de transmisión uno- escala con el inverso del tamaño de sistema, donde la conductividad disminuye al incrementar la frecuencia del campo eléctrico aplicado. En particular, la conductividad ac de los estados no transparentes decae más rápido que la de los estados transparentes. Además, se observa que la conductividad dc oscila periódicamente alrededor del estado transparente, y la amplitud de esta oscilación se incrementa conforme la inhomogeneidad o la diversidad química crece. Un estudio detallado de los efectos de las condiciones de frontera sobre la conductividad ac revela la robustez del estado transparente, contrario a lo observado en otros estados de alta conductividad dc . Por otro lado, para el problema de enlaces el estado transparente se localiza en un centro de fractalidad y su espectro de la conductividad ac decrece conforme se incrementa la inhomogeneidad del sistema. Más aún, dicho espectro ya no presenta mínimos bien definidos como en el caso mixto y también escala con el inverso del tamaño del sistema, excepto por una función que depende de la diversidad química. Sin embargo, para ambos casos la conductividad ac en el límite de bajas frecuencias obedece la regla de decaimiento cuadrático predicha por el modelo de Drude. Asimismo, hemos estudiado las redes bidimensionales cuasiperiódicas como son: las superredes de Fibonacci que son cuasiperiódica en una dirección y periódicas en la otra, y las redes que siguen la secuencia de Fibonacci en ambas direcciones. Los resultados muestran que la presencia de la periodicidad domina los efectos de la cuasiperiodicidad, por lo que las superredes de Fibonacci no serían un buen candidato para la observación de la multifractalidad en la estructura de bandas de conducción. Por otro lado, las redes doblemente cuasiperiódicas de ancho finito tienen una estructura de bandas y brechas energéticas de conducción mejor definidas en comparación con la de superredes de Fibonacci.

Contenido

Introducción	3
1 Cuasiperiodicidad	5
1.1 Definición y métodos de construcción	5
1.2 Aleaciones cuasiperiódicas	10
1.3 Electrones en sólidos	14
1.4 Métodos de renormalización	18
2 Transporte Electrónico	21
2.1 Modelo de Drude	22
2.2 Ecuación de Boltzmann	24
2.3 Conductancia de Landauer	26
2.4 Fórmula de Kubo-Greenwood	28
3 Renormalización en Cadenas de Fibonacci	32
3.1 Redes de Fibonacci	32
3.2 Renormalización para la fórmula de Kubo	33
3.3 El estado transparente	37
3.4 Escalamiento	40
3.5 Condiciones a la frontera	43
3.6 Modelo de enlaces	46
3.7 Centro de fractalidad	47
4 Conductividad en Redes Bidimensionales	50
4.1 Fórmula de Kubo en dos dimensiones	50
4.2 Método de convolución	53
4.3 Superredes de Fibonacci	55
4.4 Redes doblemente cuasiperiódicas	57
Conclusiones	61
A Funciones de Green.	63

B Renormalización en el Problema Mixto	66
C Renormalización en el Problema de Enlaces	75
Referencias	80

Introducción

Las simetrías de un sólido son determinantes para muchas propiedades físicas del mismo. Por ejemplo, los sólidos cristalinos poseen simetría traslacional, la cual determina el comportamiento de sus excitaciones elementales a través del teorema de Bloch. En particular, la restricción de simetrías en un sólido puede ser de diversas formas, por ejemplo, la ausencia de simetría traslacional y/o rotacional en una o más direcciones, la falta de orden de largo alcance, la baja dimensionalidad del sistema y los llamados sistemas desordenados. Con frecuencia existen simetrías ocultas en los sólidos, como sucede en el caso de los cuasicristales que son proyecciones de una estructura periódica desde un espacio de mayor dimensión. El descubrimiento de los cuasicristales [Shechtman, *et al.*, 1984] en la década de los ochentas ofrece una nueva gama de posibilidades en el arreglo atómico y en consecuencia la aparición de los estados críticos que no son extendidos ni localizados sino autosimilares en el espacio real. La formación del orden cuasicristalino se ha atribuido a la aparición de una pseudobrecha energética alrededor de la energía de Fermi, similar al caso de las ondas de densidad de carga, donde la estabilidad estructural se debe a la fuerte correlación electrónica [Peierls, 1955].

Desde el descubrimiento de los cuasicristales se han hecho esfuerzos considerables en el estudio de la localización de las excitaciones [Janot, 1994]. Hoy en día existe consenso que el espectro de los eigenvalores producido por un potencial cuasiperiódico es singularmente continuo y las eigenfunciones asociadas son críticas para sistemas unidimensionales [Sütő, 1994]. Además, la estadística de espaciamiento de niveles muestra una distribución que sigue una ley del inverso de potencia [Machida, *et al.*, 1986] [Geisel, *et al.*, 1991], a diferencia de la distribución tipo Wigner para sistemas ordenados y de la de Poisson para sistemas desordenados. Se ha establecido que el espectro electrónico de las cadenas de Fibonacci -cuasicristal de una dimensión- es un conjunto de Cantor con medida de Lebesgue cero [Kohmoto, *et al.*, 1983]. Por lo tanto, no se espera que la conducción electrónica en estructuras cuasiperiódicas sea balística como en una red periódica, ni difusiva como en una red desordenada [Piéchon, 1996].

En particular, Sutherland [Sutherland, *et al.*, 1987] y Roy [Roy, *et al.*, 1984] desarrollaron métodos de matriz de transferencia para estudiar la resistencia de Landauer de la red de Fibonacci y encontraron que la resistencia cambia con el tamaño del sistema y con la energía. Aldea [Aldea, *et al.*, 1988], Newman [Newman, *et al.*, 1991] y Ding [Ding, *et al.*, 1999] partieron de la analogía de una red de resistencias que simula el flujo de corriente en sólidos, introducida por Miller y Abrahams [Miller, *et al.*, 1960], y encontraron que la conductividad eléctrica a bajas frecuencias depende de la medida espectral del sistema, mientras que para altas frecuencias dicha conductividad es independiente de la secuencia específica de la red. Stephen [Stephen, *et al.*, 1986] estudió las propiedades de transporte de un sistema incommensurado partiendo de que la integral de salto asistida por fonones es dependiente de la temperatura. Roche y Fujiwara [Roche, *et al.*, 1998] encontraron que la dependencia de la conductividad con la temperatura en cuasicristales sigue una ley de potencia a bajas temperaturas, la cual es consistente con los resultados experimentales. Asimismo, E. Maciá y F. Domínguez-Adame reportaron la existencia de los estados transparentes

con coeficiente de transmisión uno en sistemas de Fibonacci mixtos [Maciá, *et al.*, 1996].

Por otro lado, hoy en día con el uso de las modernas computadoras de alta velocidad, se llevan a cabo cálculos numéricos a gran escala obteniendo la estructura de bandas y las eigenfunciones de sistemas con miles de átomos. Sin embargo, el tiempo que consumen estos cálculos crece como el número de grados de libertad del sistema al cubo, por lo que es prácticamente imposible abordar sólidos de escalas realmente macroscópicas a capacidad de cómputo actual. Una alternativa más eficiente para estudiar los sólidos son los métodos del grupo de renormalización, el cual ha tenido éxito en la teoría de fenómenos críticos [Ma, 1973]. La técnica del grupo de renormalización en espacio real ha sido aplicada a sistemas desordenados [Aoki, 1980] [Gonçalves da Silva, *et al.*, 1981] y cuasiperiódicos [Niu, *et al.*, 1986] [Ashraff, *et al.*, 1988] [Barrio, *et al.*, 1990] [Walther, *et al.*, 1997], debido a la ausencia de un teorema de tipo Bloch en estos casos. En particular, los sistemas cuasiperiódicos son muy sensibles a defectos locales [Naumis, *et al.*, 1996] y entonces, es esencial poder abordar sistemas de gran tamaño para minimizar los efectos de frontera. En los últimos años, se han desarrollado procesos de renormalización para estudiar propiedades locales -tales como las densidades de estados- en sistemas cuasiperiódicos [Wang, *et al.*, 1988]. Más aún, el grupo de renormalización se ha utilizado para determinar las propiedades de escalamiento de los espectros [Kohmoto, *et al.*, 1984] así como las de localización [Naumis, 1999]. Sin embargo, el método de renormalización no se ha podido emplear en el análisis del fenómeno de transporte, debido a los complejos procesos involucrados en dicho fenómeno.

En esta tesis se estudia el transporte de electrones dentro del formalismo de Kubo, el cual se basan en la teoría de respuesta lineal y el teorema de fluctuación-disipación [Datta, 1995]. Con el fin de abordar sistemas realmente macroscópicos nos hemos dedicado primeramente al desarrollo de un nuevo método de renormalización para la fórmula de Kubo-Greenwood en redes de Fibonacci. Usando dicho método hemos analizado la conductividad dc y ac en sistemas cuasiperiódicos de una y dos dimensiones y los principales resultados serán presentados en esta tesis.

La presente tesis se organiza de la siguiente forma. En el capítulo I se hace una revisión de los conceptos de la cuasiperiodicidad y los métodos de construcción, así como los antecedentes del grupo de renormalización. En el capítulo II se introducen diferentes métodos para cuantificar el transporte electrónico, tales como la ecuación de Boltzmann, la conductancia de Landauer y la fórmula de Kubo-Greenwood. En el capítulo III se analiza la conductividad eléctrica en redes de Fibonacci unidimensionales empleando el método de renormalización tanto para el problema mixto como para el de enlaces. En el capítulo IV se investiga la conducción de electrones en redes cuasiperiódicas bidimensionales, como son las superredes de Fibonacci y las redes doblemente cuasiperiódicas. Finalmente, se presentan algunas conclusiones de este trabajo de investigación, así como tres apéndices que introducen la función de Green y proporcionan los detalles de los métodos de renormalización.

Capítulo 1

Cuasiperiodicidad

En la década de los ochentas, un descubrimiento importante que modificó la cristalografía tradicional fue el de los cuasicristales, ya que se creía que la simetría cinco es incompatible con el orden de largo alcance. D. Shechtman y sus colaboradores encontraron una nueva fase de la aleación de $Al_{0.86}Mn_{0.14}$ que tiene un patrón de difracción de puntos con simetría icosaedra [Shechtman, *et al.*, 1984], el cual está prohibida para la cristalografía tradicional.

En general, un cristal es una estructura periódica a escala atómica, cuya simetría traslacional debe ser compatible con sus simetrías puntuales. La unión de estos dos grupos de simetrías generan los 14 arreglos periódicos posibles de puntos en un espacio tridimensional, y a estos arreglos se les conoce como redes de Bravais [Kittel, 1996]. La nueva fase de $Al-Mn$ encontrada por Shechtman posee un orden de largo alcance, llamado cuasiperiódico, y un orden orientacional de simetría cinco (icosaedra). Cabe mencionar que desde el descubrimiento de los cuasicristales no se han tenido progresos significativos en la determinación de sus posiciones atómicas, siendo todavía un problema abierto [Jeong, *et al.*, 1997][Cockayne, *et al.*, 1998].

Las primeras muestras de cuasicristales fueron termodinámicamente metaestables, con gran desorden estructural, manifestándose en los picos de difracción. A finales de los ochentas se obtuvieron los cuasicristales termodinámicamente estables, hecho que ha motivado el estudio de las propiedades físicas y estructurales de estos materiales. En particular, la investigación de las excitaciones elementales en cuasicristales ha mostrado que los espectros de eigenvalores son multifractales y las funciones de onda correspondientes no son extendidas ni localizadas, sino críticas [Kohmoto, *et al.*, 1986]. En consecuencia, se espera que el transporte de dichas excitaciones en los cuasicristales sea no convencional.

En este capítulo se introducen la definición de los cuasicristales y los métodos de construcción, así como un breve resumen sobre las aleaciones cuasicristalinas existentes. El comportamiento general de los electrones en sólidos y particularmente en cuasicristales se analizan en la sección III, y finalmente en la sección IV se discute el método de grupos de renormalización.

1.1 Definición y métodos de construcción

Después del descubrimiento de Shechtman, D. Levine y P. Steinhardt encontraron que las estructuras icosaedrales tienen una transformada de Fourier que coincide con el patrón de difracción observado y explicaron cómo la simetría icosaedra puede coexistir con el orden de largo alcance [Levine, *et al.*, 1984]. Asimismo, ellos introdujeron el

término cuasicristal para describir esta nueva fase de simetría.

Hoy en día, se definen los cuasicristales como aquellos arreglos atómicos cuyos patrones de difracción exhiben manchas nítidas con simetrías no cristalográficas, como muestra la figura (I.1). Las manchas nítidas en el patrón de difracción significan que la estructura tiene un orden de largo alcance, mientras que la simetría prohibida implica que el arreglo atómico no puede ser periódico. Es decir, los cuasicristales tienen una bien definida simetría de grupo puntual discreta, similar a los cristales, pero la cual es incompatible con el orden traslacional periódico. Los cuasicristales también se conocen como cristales cuasiperiódicos, ya que los cristales se definen como cualquier sólido que tiene un patrón de difracción esencialmente discreto [Int. Union of Cryst., 1992].

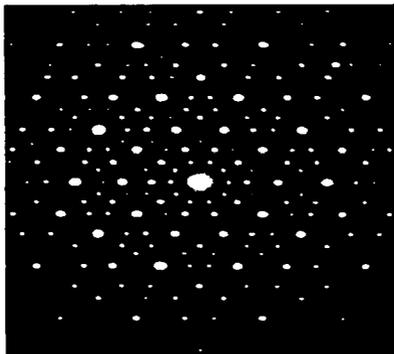


Fig. I.1 Patrón de difracción de un quasicristal con estructura icosaedrad.

Uno de los sistemas cuasiperiódicos unidimensionales más conocidos es la cadena de Fibonacci, la cual puede construirse por varios métodos. Empezaremos con el método de inflación, donde se toman dos diferentes segmentos: uno largo y otro corto, denotados por L y S respectivamente. La regla de construcción es reemplazar S por L y L por LS de la siguiente forma:

Tabla I.1 Secuencia de Fibonacci.

Generación (n)	Secuencia F_n
(1)	$F_1 = L$
(2)	$F_2 = LS$
(3)	$F_3 = LSL$
(4)	$F_4 = LSLLS$
(5)	$F_5 = LSLLSLSL$
⋮	

Nótese que la frecuencia de ocurrencia de L y S en cada generación sigue los números de Fibonacci dados por: $x_n = x_{n-1} + x_{n-2}$, partiendo con $x_0 = 1$ y $x_1 = 2$; lo cual conduce a $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{x_{n+1}}{x_n} = \eta$, donde $\eta = \frac{\sqrt{5}+1}{2}$ es la razón dorada. Este método de inflación puede representarse matricialmente de la siguiente forma

$$\begin{pmatrix} L \\ S \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L \\ S \end{pmatrix}, \quad (1.1)$$

es decir, la regla de sustitución, $L \rightarrow LS$ y $S \rightarrow L$, ha sido resumida en la ecuación (1.1) que es un caso particular de una diversidad de secuencias que se pueden generar por el método de inflación [Lu, et al., 1986].

Otro método de generar la cadena Fibonacci es el de adición, que consiste en unir la generación $n - 1$ con la generación $n - 2$ para obtener la cadena de generación n , es decir, $F_n = F_{n-1} \oplus F_{n-2}$. Por ejemplo, para la generación 4, $LSLLS = LSL \oplus LS$. Cabe mencionar que el método de grupo de renormalización desarrollado para la fórmula de Kubo que se discutirá en el capítulo III se basa directamente en el método de adición.

El tercer método para construir la cadena de Fibonacci es el de corte y proyección, el cual consiste en proyectar los puntos de una red bidimensional que se encuentran en una ventana de ancho finito a un espacio físico unidimensional, como se muestra en la figura (I.2), donde el espacio físico unidimensional (X^{\parallel}) forma un ángulo $\alpha = \text{tg}^{-1}(\eta - 1)$ con respecto a la dirección X de la red cuadrada, donde α debe ser irracional.

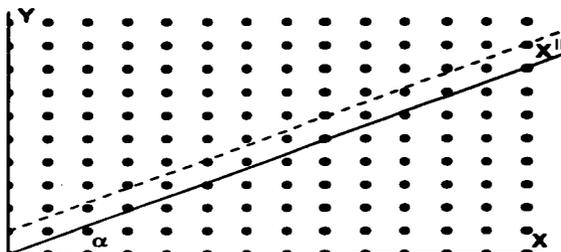


Fig. 1.2 Representación esquemática del método de corte y proyección para la cadena de Fibonacci.

La equivalencia entre el método de inflación y el de adición puede mostrarse de la siguiente forma:

Definimos un operador lineal ϑ ,

$$\vartheta(xy) = \vartheta(x) \oplus \vartheta(y), \quad (1.2)$$

que tiene la propiedad de $\vartheta(S) = L$ y $\vartheta(L) = LS$. Partiendo del método de inflación tenemos que $F_n = \vartheta^n(S)$, es decir, aplicando sucesivamente el operador ϑ se obtiene la secuencia de Fibonacci, esto es,

$$\begin{aligned} F_1 &= \vartheta^1(S) = L, \\ F_2 &= \vartheta^2(S) = \vartheta^1(\vartheta^1(S)) = \vartheta^1(L) = LS, \\ F_3 &= \vartheta^3(S) = \vartheta^1(\vartheta^2(S)) = \vartheta^1(LS) = LSL, \\ &\vdots \end{aligned} \quad (1.3)$$

Por otro lado, se tiene que

$$\vartheta^n(S) = \vartheta^{n-1}(L) = \vartheta^{n-2}(LS) = \vartheta^{n-2}(L) \oplus \vartheta^{n-2}(S) = \vartheta^{n-1}(S) \oplus \vartheta^{n-2}(S), \quad (1.4)$$

en otras palabras, $F_n = F_{n-1} \oplus F_{n-2}$ que es el método de adición.

Hasta aquí hemos visto que el método de inflación conduce al de adición, y el proceso inverso puede probarse partiendo de la existencia del mismo operador lineal (ϑ) y suponiendo que $F_n = F_{n-1} \oplus F_{n-2}$. Por el método de inducción matemática probaremos que la misma secuencia de Fibonacci (F_n) construida por el método de adición puede generarse por aplicación sucesiva del operador ϑ , es decir, $F_n = \vartheta^n(S)$. Como $F_0 = S = \vartheta^0(S)$, $F_1 = L = \vartheta^1(S)$, y $F_2 = F_1 \oplus F_0 = LS = \vartheta^1(L) = \vartheta^2(S)$ por las

propiedades del operador. Ahora supongamos que $F_{n-2} = \vartheta^{n-2}(S)$ y $F_{n-1} = \vartheta^{n-1}(S)$, entonces como $F_n = F_{n-1} \oplus F_{n-2} = \vartheta^{n-1}(S) \oplus \vartheta^{n-2}(S)$ y usando la Ec. (1.4) tenemos que $F_n = \vartheta^n(S)$. Por lo que los métodos de inflación y de adición generan la misma secuencia de Fibonacci.

Los dos métodos discutidos anteriormente generan cadenas cuasiperiódicas finitas, a diferencia del método de corte y proyección que produce una secuencia de Fibonacci infinita, la cual podría mostrarse como sigue: Partimos de una red cuadrada, cuyos puntos pueden caracterizarse por los vectores de posición $\vec{R} = l\hat{x} + m\hat{y}$, siendo l y m números enteros, y \hat{x} y \hat{y} los vectores unitarios de la red. Definimos un operador (\hat{P}) que proyecta los puntos de la red hacia la recta cuya pendiente es η , es decir, $\text{tg}(\alpha) = \eta$, donde α es el ángulo entre la recta y el eje x de la red. Esto es

$$\hat{P}\hat{x} = \cos(\alpha) = \frac{1}{\sqrt{1+\eta^2}} \quad \text{y} \quad \hat{P}\hat{y} = \sin(\alpha) = \frac{\eta}{\sqrt{1+\eta^2}}. \quad (1.5)$$

Los puntos dentro de la banda con ancho vertical uno satisfacen la condición $m = \lceil \eta l \rceil$, donde $\lceil a \rceil$ es el entero mayor y más próximo al número real a . Por lo tanto, los puntos que se encuentran en la banda que se proyectan sobre la recta tienen la siguiente forma

$$R_l = \hat{P}\vec{R} = l \cos \alpha + \lceil \eta l \rceil \sin \alpha = \frac{l}{\sqrt{1+\eta^2}} + \frac{\eta \lceil \eta l \rceil}{\sqrt{1+\eta^2}}. \quad (1.6)$$

Entonces, las distancias entre los puntos proyectados ($L_l = R_l - R_{l-1}$) se muestran en la siguiente tabla:

Tabla 1.2 Puntos proyectados (R_l) y las separaciones entre ellos (L_l) en el método de corte y proyección

l	R_l	L_l	
1	$\cos \alpha + 2 \sin \alpha$		
2	$2 \cos \alpha + 4 \sin \alpha$	$\cos \alpha + 2 \sin \alpha$	L
3	$3 \cos \alpha + 5 \sin \alpha$	$\cos \alpha + \sin \alpha$	S
4	$4 \cos \alpha + 7 \sin \alpha$	$\cos \alpha + 2 \sin \alpha$	L
5	$5 \cos \alpha + 9 \sin \alpha$	$\cos \alpha + 2 \sin \alpha$	L
6	$6 \cos \alpha + 10 \sin \alpha$	$\cos \alpha + \sin \alpha$	S
7	$7 \cos \alpha + 12 \sin \alpha$	$\cos \alpha + 2 \sin \alpha$	L
8	$8 \cos \alpha + 13 \sin \alpha$	$\cos \alpha + \sin \alpha$	S
9	$9 \cos \alpha + 15 \sin \alpha$	$\cos \alpha + 2 \sin \alpha$	L
10	$10 \cos \alpha + 17 \sin \alpha$	$\cos \alpha + 2 \sin \alpha$	L
11	$11 \cos \alpha + 18 \sin \alpha$	$\cos \alpha + \sin \alpha$	S
12	$12 \cos \alpha + 20 \sin \alpha$	$\cos \alpha + 2 \sin \alpha$	L
13	$13 \cos \alpha + 22 \sin \alpha$	$\cos \alpha + 2 \sin \alpha$	L

donde los segmentos cortos (S) y largos (L) se definen como $S = \cos \alpha + \sin \alpha$ y $L = \cos \alpha + 2 \sin \alpha$.

Hasta aquí hemos discutido los métodos de construcción para la red de Fibonacci unidimensional. Para los sistemas de mayor dimensión, por ejemplo la red de Penrose, se puede generar mediante procedimientos análogos a los de Fibonacci. En particular, la red de Penrose puede construirse adicionando los triángulos de Robinson de forma similar al método de adición de Fibonacci [Naumis, *et al.*, 1994]. Por otro lado, el método de inflación puede generalizarse también para la red de Penrose [Janot, 1994]. Así mismo, el método de corte y proyección aplicado a una red cúbica en un hiperespacio de cinco dimensiones genera la red de Penrose en dos dimensiones mediante un procedimiento similar al mostrado en la figura (I.3). Por último, el arreglo icosaedral es el resultado de la proyección de una red cúbica en seis dimensiones hacia un espacio físico de tres dimensiones [Guyot, *et al.*, 1989].

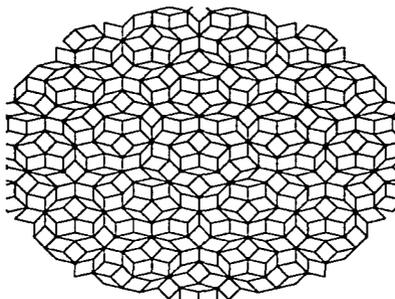


Fig. I.3 Una sección de la red de Penrose.

En la siguiente sección revisaremos las aleaciones cuasicristalinas tanto termodinámicamente estables como metaestables. Así mismo, veremos los materiales cuasiperiódicos construidos artificialmente.

1.2 Aleaciones cuasiperiódicas

Las aleaciones cuasicristalinas pueden producirse por varias técnicas, tales como solidificación rápida, reacciones de estado sólido y condensación de vapor. Estas aleaciones pueden ser termodinámicamente estables o metaestables. Estas últimas se transforman a cristales regulares cuando se calientan y generalmente son fabricadas por solidificación rápida, la cual fue empleada para la obtención del primer cuasicristal de *Al-Mn*. Hoy en día, se conocen cientos de aleaciones cuasicristalinas, sin embargo, el número de muestras de alta calidad estructural es reducido y ellas son importantes para el estudio de los efectos de la cuasiperiodicidad en las propiedades físicas. La tabla siguiente muestra algunas aleaciones con estructura icosaedral y decagonal, las cuales

son ordenadas según su estabilidad estructural [Stadnik, 1999].

Tabla I.3 Aleaciones cuasiperiódicas estables y metaestables (donde *RE* y *TM* indican elementos de tierra rara y metales de transición, respectivamente.)

Estabilidad	Clase <i>Al-TM</i>	Clase <i>Mg-Al-Zn</i>
Metaestable	Fase Icosaedral <i>Al-TM</i> (<i>TM</i> = <i>V</i> , <i>Cr</i> , <i>Mn</i> , <i>Ru</i> , <i>Re</i> , ... <i>Al</i> -(<i>MN</i> , <i>Cr</i> , <i>Fe</i>)-(<i>Si</i> , <i>Ge</i>) <i>Al</i> -(<i>Cu</i> , <i>Pd</i>)- <i>TM</i> (<i>TM</i> = <i>Cr</i> , <i>Mn</i> , <i>Fe</i> , <i>Mo</i> , <i>Ru</i> , <i>Ro</i> , <i>Os</i>) <i>Ga-Pd-Mn</i> Cristalizados por fases amorfas <i>Pd</i> ₆₀ <i>U</i> ₂₀ <i>Si</i> ₂₀ , <i>Al</i> ₇₅ <i>Cu</i> ₁₅ <i>V</i> ₁₀ <i>Al</i> ₅₅ <i>Mn</i> ₂₅ <i>Si</i> ₂₀ <i>Zr</i> _{69.5} <i>Cu</i> ₁₂ <i>Ni</i> ₁₁ <i>Al</i> _{7.5}	Fase Icosaedral <i>Mg-Al</i> -(<i>Zn</i> , <i>Cu</i> , <i>An</i> , <i>Pd</i>) <i>Al-Mg</i> -(<i>Cu</i> , <i>Ag</i>) <i>Ga-Mg-Zn</i> <i>Al-Li</i> -(<i>Cu</i> , <i>Au</i> , <i>Zn</i> , <i>Mg</i>) <i>Zn-Mg-RE</i> (<i>RE</i> = <i>Y</i> , <i>Nd</i> , <i>Sm</i> , <i>Dy</i> , <i>Gd</i> , <i>Er</i> , <i>Ho</i> , <i>Tb</i>) <i>Ti</i> ₄₅ <i>Zr</i> ₃₈ <i>Ni</i> ₁₇
	Fase Decagonal <i>Al-TM</i> (<i>TM</i> = <i>Mn</i> , <i>Co</i> , <i>Fe</i> , <i>Pd</i>) <i>Al</i> -(<i>Cu</i> , <i>Ni</i> , <i>Pd</i>)- <i>TM</i> (<i>TM</i> = <i>Fe</i> , <i>Ru</i> <i>Re</i> , <i>Co</i> , <i>Rh</i> , <i>Ir</i>)	Fase Decagonal <i>Fe</i> ₆₀ <i>Nb</i> ₄₀ <i>Zn-Mg-RE</i> (<i>RE</i> = <i>Y</i> , <i>Dy</i> , <i>Ho</i> , <i>Lu</i> , <i>Tb</i> , <i>Gd</i>)
Estable	Fase Icosaedral <i>Al</i> ₆₃ <i>Cu</i> ₂₅ <i>TM</i> ₁₂ (<i>TM</i> = <i>Fe</i> , <i>Ru</i> , <i>Os</i>) <i>Al</i> ₇₀ <i>Pd</i> ₂₀ <i>TM</i> ₁₀ (<i>TM</i> = <i>Mn</i> , <i>Re</i>) <i>Al</i> ₇₀ <i>Pd</i> ₂₀ <i>V</i> ₅ <i>Co</i> ₅ <i>Al</i> ₇₀ <i>Pd</i> ₂₀ <i>Cr</i> ₅ <i>Fe</i> ₅ <i>Al</i> ₇₀ <i>Pd</i> ₂₀ <i>Mo</i> ₅ <i>Ru</i> ₅ <i>Al</i> ₇₀ <i>Pd</i> ₂₀ <i>W</i> ₅ <i>Os</i> ₅	Fase Icosaedral <i>Al</i> ₅₆ <i>Li</i> ₃₃ <i>Cu</i> ₁₁ <i>Ga</i> ₂₀ <i>Mg</i> ₃₇ <i>Zn</i> ₄₃ <i>Ti</i> ₄₅ <i>Zr</i> ₃₈ <i>Ni</i> ₁₇ <i>Mg</i> ₄₇ <i>Al</i> ₃₈ <i>Pd</i> ₁₅ <i>Zn</i> ₆₀ <i>Mg</i> ₃₀ <i>RE</i> ₁₀ (<i>RE</i> = <i>Y</i> , <i>Dy</i> , <i>Gd</i> , <i>Ho</i> , <i>Tb</i> , <i>Er</i>)
	Fase Decagonal <i>Al</i> ₇₀ <i>Ni</i> _{<i>x</i>} <i>Co</i> _{30-<i>x</i>} (<i>x</i> = 10 - 20) <i>Al</i> ₆₅ <i>Cu</i> ₁₅ <i>Co</i> ₂₀ <i>Al</i> ₇₅ <i>Pd</i> ₁₅ <i>TM</i> ₁₀ (<i>TM</i> = <i>Fe</i> , <i>Ru</i> , <i>Os</i>) <i>Al</i> ₇₀ <i>Pd</i> ₁₃ <i>Mn</i> ₁₇	Fase Decagonal <i>Zn</i> ₆₀ <i>Mg</i> ₃₈ <i>RE</i> ₂ (<i>RE</i> = <i>Y</i> , <i>Dy</i> , <i>Ho</i> , <i>Lu</i> , <i>Tb</i> , <i>Gd</i>)

1.2.1 (a) cuasicristales metaestables.

Estas aleaciones se clasifican de acuerdo a su simetría rotacional, tales como de orden cinco (icosaedral), ocho (octagonal), diez (decagonal) y doce (dodecagonal). Empezaremos con las de fase icosaedral que son principalmente producidas por solidificación rápida ($\sim 10^6 K/s$), por ejemplo *Al*₈₆*Mn*₁₄ dentro del grupo de aleaciones

Al-(Mn, Fe, Cr) [Shechtman, et al., 1984]. Bancel y Heiney estudiaron las aleaciones *Al-(Mn, Re, Cr, Ru, V, W y Mo)*, en las cuales adicionando *Si* o *Ru* en dos de ellas (*Al-Mn* y *Al-Cr*) parecen estabilizar la fase, resultando un aumento de la longitud de correlación espacial. Sus resultados indican que las brechas en la estructura de bandas electrónica creadas por la pseudo zona de Brillouin puede jugar un papel en la estabilización de la fase icosaedral [Bancel, et al., 1986]. Otras aleaciones reportadas son $Mg_{32}(Al, Zn)_{49}$ [Ramachandrarao, et al., 1985], Mg_4Al_6Cu [Sastri, et al., 1986] y $Mg_{32}(Al, Zn, Cu)_{49}$ [Mukhopadhyay, et al., 1986]. Villars y sus colaboradores analizan diagramas estructurales cuánticos, los cuales han sido usados para predecir nuevos cuasicristales basados en un mapeo estructural de compuestos intermetálicos ternarios de la forma $A_xB_yC_z$, donde $x \leq y \leq z$, *B* es un elemento con electrones de valencia *s* por ejemplo *Li, Na, Mg, A y C* son elementos con electrones de valencia *p* tales como *Al, Ga, Ge y Sn* [Villars, et al., 1986]. Estas predicciones han sido confirmadas por el descubrimiento de los nuevos cuasicristales icosaedrales $AuLi_3Al_6$, $Zn_{17}Li_{32}Al_{51}$, $Ga_{16}Mg_{32}Zn_{52}$ y $Ag_{15}Mg_{35}Al_{50}$ [Chen, et al., 1987]. También se obtuvieron algunas aleaciones en el grupo *Ti-TM* [Dong, et al., 1986], así como la aleación *Cu-Cd* [Bendersky, et al., 1987].

Para el caso de los cuasicristales decagonales, la fase decagonal coexiste con la fase icosaedral y se presenta principalmente en los sistemas del grupo *Al-TM*, tales como *Al-Fe, Al-Co, Al-Ni, Al-Pd* y *Al-Rh*. En general, las fases cuasicristalinas se determinan por la configuración electrónica de los elementos de la aleación. Casi todas las aleaciones binarias de fase decagonal contienen un gran cantidad de desorden que es introducido por la solidificación rápida. En cambio, el desorden puede revertirse notablemente cuando se extienden a sistemas ternarios, por ejemplo, *Al-Ni-Fe, Al-Ni-Co* [Tsai, et al., 1989] y *Al-Cu-Co* [He, et al., 1988]. Dicha extensión conduce al descubrimiento de fases decagonales termodinámicamente estables.

Otros cuasicristales metaestables, tales como las aleaciones cuasicristalinas octagonales en dos dimensiones han sido encontradas en *Cr-Ni-Si, V-Ni-Si* [Wang, et al., 1987] y *Mn₄Si* [Cao, et al., 1988]. cuasicristales con fase dodecagonal fueron observados en partículas condensadas de *Cr-Ni* [Ishimasa, et al., 1985], así como en películas delgadas de *Bi-Mn* producidas por vaporización al vacío [Yoshida, et al., 1991].

1.2.2 (b) cuasicristales estables.

Un cuasicristal termodinámicamente estable es un material cuyo estado base estructural es cuasiperiódico independiente del proceso de preparación, es decir, el material puede sufrir tratamientos térmicos sin modificar su orden estructural. El primer cuasicristal estable fue la aleación $Al_{5,1}Li_3Cu$ [Ball, et al., 1985]. Se cree que la participación de *Li* es fundamental para la estabilidad de la aleación, debido a su tamaño atómico. Otras aleaciones icosaedrales estables son *Zn-Mg-Ga* [Ohashi, et al., 1987] y *Mg-Al-Pd* [Koshikawa, et al., 1992]. La segunda generación de cuasicristales icosaedrales

estables fue encontrada en los sistemas $Zn-Mg-RE$ [Luo, *et al.*, 1993]. Estos cuasicristales tienen una excelente calidad estructural y poseen momentos magnéticos debido a los electrones $4f$ localizados en los sitios RE , en los cuales se puede estudiar el magnetismo en redes cuasiperiódicas. Un grupo de cuasicristales estable que exhiben una red icosaedral centrada en las caras son $Zn-Mn-RE$ ($RE = Y, Gd, Tb, Dy, Ho, Er$) [Niikura, *et al.*, 1994][Tsai, *et al.*, 1994], la cual fue observada por primera vez en la clase de $Zn-Mg-Al$.

Los primeros cuasicristales decagonales han sido encontrados en la aleación $Zn-Mg-RE$ ($RE = Y, Dy, Ho, Er, Tm, Lu$) [Sato, *et al.*, 1997]. Estos materiales son altamente anisotrópicos, es decir, periódicos a lo largo de su eje z y cuasiperiódicos con simetría rotacional de décimo orden en el plano perpendicular al eje z . La fase decagonal puede formarse directamente por una reacción de estado sólido entre la fase icosaedral primaria ($Zn_{60}Mg_{30}RE_{10}$) y una fase monoclinica Zn_7Mg_4 , alrededor de los $623K$ [Sato, *et al.*, 1998].

Una forma de explicar la existencia de aleaciones cuasicristalinas estables es por el mecanismo empírico de Hume-Rothery, el cual sugiere que la estabilización de un material ocurre cuando su superficie de Fermi se intersecciona o está cercana a la frontera de la zona de Brillouin. Debido a la interacción entre la red y los electrones de valencia, la energía total electrónica disminuye cuando una brecha o una pseudo-brecha de energía es creada alrededor de la energía de Fermi, y la densidad de estados se incrementa arriba y abajo de esta brecha. Una pseudo-brecha energética se forma cuando la densidad de estados en un intervalo de energía es menor por varios órdenes de magnitud que la de su alrededor, y cuando ésta es cero se denomina brecha. Por lo tanto, dentro del mecanismo de Hume-Rothery la fase estructural del material es estabilizada debido a la reconfiguración electrónica, similar a lo que sucede en la inestabilidad de Peierls [Peierls, 1955]. Uno de los parámetros más importantes para la formación preferencial de la estructura específica es la razón electrón-por-átomo (e/a). En 1994, A. Tsai encontró una regla empírica para los cuasicristales icosaedrales estables de base Al , es decir, $Al-TM$ con $e/a \approx 1.75$ y $Zn-Mn-Al$ con $e/a \approx 2.1$. Esto indica que los cuasicristales icosaedrales estables pueden ser aleaciones de Hume-Rothery.

Los cuasicristales termodinámicamente estables presentan un alto valor de la resistencia eléctrica, la cual se incrementa conforme decrece la temperatura [Poon, 1992], hecho que podría relacionarse con la localización de la energía de Fermi en la pseudo-brecha energética. Para algunos cuasicristales la conductividad eléctrica es más pequeña que el mínimo de la conductividad metálica de Mott para la transición metal-aislante [Kimura, *et al.*, 1991]. En general, la resistividad eléctrica de los cuasicristales se incrementa al mejorar su calidad estructural, contrario a lo que sucede en aleaciones metálicas cristalinas. Las propiedades eléctricas son sensibles a pequeños cambios en la composición de la muestra y a los tratamientos térmicos. El diamagnetismo es observado en los cuasicristales, a pesar de su alta concentración de átomos de metal de transición [Klein, *et al.*, 1991].

Por otro lado, tenemos las superredes cuasiperiódicas que son arreglos atómicos

construidos artificialmente en el laboratorio, por ejemplo, las superredes de Fibonacci que tienen orden cuasiperiódico en una dirección y orden periódico en las otras dos direcciones [Merlin, *et al.*, 1985]. El patrón de difracción de la superred de Fibonacci hecha por la alternación de capas de *GaAs* y *AlAs* muestra un espectro denso de picos que puede caracterizarse por los índices de la red cuadrada, a partir de la cual fue construida la secuencia de Fibonacci [Todd, *et al.*, 1986]. Asimismo, su espectro Raman revela una auto-similaridad del espectro fonónico que es consistente con los resultados teóricos [Wang, *et al.*, 1988]. Las superredes de Fibonacci construidas por materiales ópticos no lineales -tales como *LiTaO₃*, *LiNbO₃* y *KTiOPO₄*- generan con alta eficiencia los segundos y terceros armónicos, debido a que hay más vectores recíprocos proporcionados por el sistema que intervienen en el proceso [Zhu, *et al.*, 1997]. Otra forma de construir arreglos artificiales cuasiperiódicos es por medio de la red de Penrose. Por ejemplo, se calculó la función de Patterson de la transformada de Fourier de las intensidades de los datos de difracción del cuasicristal *Al₆CuLi₃* y se comparó con la calculada teóricamente para la red de Penrose, encontrándose que tanto la posición como la intensidad de los picos coinciden con los resultados experimentales [van Smaalen, 1988]. Por otro lado, para un sistema acústico se han analizado experimentalmente el espectro de eigenvalores, la densidad de estados y las eigenfunciones individuales [He, *et al.*, 1989]. Los sistemas fonónicos pueden ser simulados por circuitos *LC* y los resultados experimentales obtenidos en una red de Penrose concuerdan excelentemente con los predichos teóricamente [Wang, *et al.*, 1993]. Resultados recientes reportan que para los cuasicristales de *ZnMgRE* el arreglo atómico en un plano de simetría diez es interpretado como una red de Penrose decorada por átomos individuales [Abe, *et al.*, 1999].

1.3 Electrones en sólidos

Existen diversos modelos que intentan describir el comportamiento de los electrones en los sólidos cristalinos. Uno de los primeros fue propuesto por P. Drude en 1900, el cual desprecia las interacciones tanto entre los electrones como entre éstos y los iones positivos. Además, dicho modelo es completamente clásico y no toma en cuenta la geometría del sistema, por lo que describe únicamente ciertas propiedades electrónicas en los metales (el modelo será discutido con detalle en el capítulo II). Sommerfeld en 1927 mejoró el modelo de Drude considerando los electrones como partículas cuánticas regidas por la estadística de Fermi-Dirac. Sin embargo, este modelo tampoco es capaz de explicar por qué los materiales presentan propiedades de conducción que varían más de treinta órdenes de magnitud desde un buen conductor hasta un típico aislante. En la década de los treinta del siglo pasado surgió la teoría de bandas, la cual aborda el problema de un solo electrón sometido a un potencial periódico, el cual incluye la distribución periódica de los iones y el potencial promedio aportado por los demás electrones de valencia. Dentro de esta teoría, las funciones de onda electrónicas son las

funciones de Bloch [$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$],

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (1.7)$$

donde $U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ tiene el mismo período (\mathbf{T}) de la red cristalina, es decir, $U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{T})$. Estas funciones son soluciones generales de la ecuación de Schrödinger para un potencial periódico [Kittel, 1996],

$$H\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.8)$$

Un electrón descrito por estas funciones de Bloch tiene la misma posibilidad de estar en todas las celdas unitarias de la red y consecuentemente a estos estados caracterizados por las funciones de Bloch se les denomina estados extendidos.

El potencial que experimenta un electrón en un sólido real es de gran complejidad y las funciones de onda correspondientes no son planas por no ser partículas libres, ni orbitales atómicos por tener movilidad diferente de cero, sino son intermedios de estos dos extremos. Este problema se aborda actualmente por dos aproximaciones diferentes: La aproximación del electrón casi libre y la de amarre fuerte (tight binding). En la primera se considera que la energía total del electrón es mucho mayor que la energía potencial periódica. En estas condiciones, las bandas permitidas son anchas y las prohibidas angostas. En cambio, en la aproximación de amarre fuerte se considera que la energía potencial del electrón representa casi toda la energía. Las funciones de onda y los niveles de energía permitidos de todo el cristal se asemejan a las funciones de onda y los niveles de energía de los átomos aislados, respectivamente. La aplicabilidad de las aproximaciones a diferentes sistemas depende de la naturaleza del sistema en estudio. En particular, el modelo de amarre fuerte tiene la virtud de poder incluir el desorden estructural en una forma natural. El modelo utilizado en esta tesis es el de amarre fuerte por lo que lo describiremos con más detalle a continuación.

1.3.1 Modelo de amarre fuerte

Este modelo se basa en las funciones de Wannier, las cuales son transformadas de Fourier de las funciones de Bloch, localizadas en las posiciones atómicas y son ortonormales entre sí, y forman una base alternativa para las soluciones de la ecuación de Schrödinger [Ashcroft, *et al.*, 1976]. El hamiltoniano de amarre fuerte expresado en esta base ($|j\rangle$) utilizando la notación de Dirac tiene la siguiente forma,

$$H = \sum_j \varepsilon_j |j\rangle \langle j| + \sum_j \sum_{i \neq j} t_{ji} |j\rangle \langle i|, \quad (1.9)$$

donde la auto energía $\varepsilon_j = \langle j| H |j\rangle$ es la energía necesaria para colocar un electrón en el sitio j y la integral de salto $t_{ji} = \langle j| H |i\rangle$ es la amplitud de la probabilidad de transición entre los estados $|i\rangle$ y $|j\rangle$. Estos parámetros son generalmente difíciles de calcular

en forma analítica, debido a que el potencial $V(\mathbf{r})$ contiene interacciones con todos los iones de la red y el apantallamiento por la presencia de los demás electrones. Por simplicidad, consideraremos sólo orbitales s y omitiremos los índices de espín debido a que el hamiltoniano no depende de éste y la función de onda puede escribirse como un producto de la parte espacial y la de espín. En esta tesis analizaremos únicamente el comportamiento espacial de dicha función de onda, la cual puede escribirse como:

$$|\Psi\rangle = \sum_{j=1}^N c_j |j\rangle, \quad (1.10)$$

donde N es el número total de átomos del sistema. Usando las ecuaciones (1.8) (1.9) y (1.10), se tiene que

$$(\varepsilon_j - E) c_j + \sum_{i \neq j} t_{ji} c_i = 0. \quad (1.11)$$

La última ecuación puede escribirse en forma matricial como:

$$(\mathbf{H} - E\mathbf{1}) \mathbf{c} = \mathbf{0}, \quad (1.12)$$

donde $\mathbf{1}$ es la matriz identidad de tamaño $N \times N$, \mathbf{c} es un vector cuyas componentes son los coeficientes c_i y \mathbf{H} es la matriz del hamiltoniano expresado en la Ec. (1.9). En la práctica, los elementos diagonales (ε_j) y fuera de la diagonal (t_{ji}) del hamiltoniano se ajustan a partir de datos experimentales. Por lo tanto, el hamiltoniano de amarre fuerte escrito en segunda cuantización pertenece a los métodos semi-empíricos. Una primera aproximación de este modelo es considerar únicamente los saltos a primeros vecinos, es decir, $t_{ij} \neq 0$ sólo si i y j son vecinos más próximos; esto se conoce como la aproximación de primeros vecinos.

El problema descrito por el hamiltoniano [Ec. (1.9)] puede analizarse de diversas formas; por ejemplo, la diagonalización directa de la ecuación matricial de valores propios [Ec. (1.12)], el empleo de las funciones de Green, el método de la matriz de transferencia, etc. A continuación analizaremos el sistema periódico como el caso límite de los sistemas desordenados.

1.3.2 Cadena periódica

Consideremos una cadena periódica monoatómica y su hamiltoniano [Ec. (1.9)] en la aproximación de primeros vecinos puede escribirse como:

$$H = \varepsilon_0 \sum_j |j\rangle \langle j| + t \sum_{\langle l,j \rangle} |j\rangle \langle l|, \quad (1.13)$$

donde $\langle l, j \rangle$ indica vecinos más próximos. Para sistemas periódico los coeficientes de

expansión (c_j) en la ec. (1.10) tiene la forma,

$$c_j = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ikR_j}, \quad (1.14)$$

ya que todos los sitios tienen la misma probabilidad de encontrar el electrón. Si sustituimos las ecuaciones (1.14), (1.10) y (1.13) en la ec. (1.8), obtenemos:

$$E_k = \varepsilon_0 + t \sum_{(j,0)} e^{ik(R_j - R_0)} = \varepsilon_0 + 2t \cos ka, \quad (1.15)$$

donde R_0 es la coordenada de un sitio arbitrario de la red dado que todos los sitios son equivalentes. Para redes cristalinas simples, tales como la cadena unidimensional, la red cuadrada y la red cúbica simple, existe un intervalo de energías permitidas, llamado *banda de energía*, la cual es simétrica respecto a ε_0 y se extiende desde $\varepsilon_0 - Z|t|$ hasta $\varepsilon_0 + Z|t|$, donde Z es el número de vecinos más próximos. Por consiguiente, $2Z|t|$ es el ancho de la banda. En general, el *teorema de Perron y Frobenius* establece las cotas de la banda de energía para redes cristalinas de cualquier dimensión [Ziman, 1979]:

$$|E_k - \varepsilon_0| = |t| \left| \sum_{l \neq 0} e^{ik \cdot R_l} \right| \leq |t| \sum_{l \neq 0} |e^{ik \cdot R_l}| = Z|t|. \quad (1.16)$$

Cabe mencionar que este teorema *no* asegura que las bandas de energías sean simétricas respecto a ε_0 . Hay redes cristalinas, tales como la red triangular o la *fcc*, que no tienen dicha simetría debido a la frustración de los estados antienlaces [Horiguchi, 1972][Pérez, *et al.*, 1996], es decir, estas redes contienen anillos cuyos números de sitios son impares [Naumis, *et al.*, 1994].

1.3.3 Potencial cuasiperiódico

La teoría de las funciones cuasiperiódicas fue desarrollada como una generalización de las funciones periódicas. En esta teoría una función Ψ , definida sobre todo el espacio real, es cuasiperiódica si y sólo si: para toda $\epsilon > 0$, existe una $\tau(\epsilon, \Psi) \in \mathbb{R}$, tal que $|\Psi(x + \tau) - \Psi(x)| < \epsilon$, para toda x en el dominio de la función [Besicovitch, 1932]. Para el caso periódico se tiene que $\epsilon = 0$ y τ es el período. Las funciones cuasiperiódicas pueden obtenerse a través de la generalización de la transformada de Fourier para funciones multiperiódicas en un espacio de N dimensiones, dadas por:

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_l A_l e^{i \sum_m r_m l a_m x_m}, \quad (1.17)$$

donde r_m son números racionales y a_m son números irracionales y linealmente independientes. De esta forma se puede definir cualquier función cuasiperiódica como la parte diagonal de una función multiperiódica en un espacio de mayor dimensión, es

decir,

$$\phi(x) = \text{diag}[\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)] = \Psi(x, x, \dots, x). \quad (1.18)$$

Un ejemplo de estas funciones es la secuencia de Fibonacci que puede construirse a partir de la función $\phi(x) = \text{sen}(2\pi x) + \text{sen}(2\pi\eta x)$, donde $\eta = \frac{\sqrt{5}+1}{2}$ es la razón dorada. Por lo que a partir de esta propiedad se puede construir estructuras cuasiperiódicas usando el método de corte y proyección.

Para la cadena de Fibonacci se sabe que el espectro de energía es un conjunto de Cantor con medida de Lebesgue igual a cero [Kohmoto, *et al.*, 1984], es decir, el espectro está dividido en infinitas partes y su ancho total de banda es cero. Asimismo, los eigenestados electrónicos son de naturaleza crítica, es decir, no son extendidos ni localizados, sino, son autosimilares en el espacio real [Kohmoto, *et al.*, 1987]. También se ha reportado que los espectros de estos sistemas poseen dimensión fractal [Mookerjee, *et al.*, 1986]. Estados electrónicos críticos han sido sugeridos también para redes cuasicristalinas bidimensionales [Sutherland, 1986].

Para sistemas bidimensionales, por ejemplo la red de Penrose, la ubicación de los átomos puede plantearse desde dos formas: (1) que los átomos estén colocados en los vértices de la red [Aguilera, *et al.*, 1987]. (2) que los átomos estén colocados en el centro de los rombos [Tsunetsugu, *et al.*, 1991]. Para el problema de los vértices Wang y Barrio desarrollaron un método dentro del grupo de renormalización con el fin de analizar la estructura de las bandas electrónicas de cúmulos grandes [Wang, *et al.*, 1992] [Naumis, *et al.*, 1994].

En general, para abordar sistemas de tamaño macroscópico se tienen dos caminos que son el espacio recíproco y el método de renormalización. El primero es inaplicable a los sistemas cuasiperiódicos infinitos debido a la ausencia de la simetría traslacional. Por lo que el grupo de renormalización aplicado al modelo de amarre fuerte convierte el medio más eficiente para el análisis de las excitaciones elementales en cuasicristales. Cabe mencionar que se han estudiado aproximantes racionales de sistemas cuasiperiódicos utilizando el método de supercelda, es decir, se toma una sección finita de un sistema cuasiperiódico infinito e impone condición a la frontera periódica a dicha sección. En consecuencia, se obtienen minibandas en los espectros debido a la simetría traslacional impuesta.

1.4 Métodos de renormalización

Los cálculos numéricos son cada vez mas importantes en la física de materia condensada tanto por la complejidad de los problemas como por el vertiginoso desarrollo de las computadoras. Sin embargo, estos cálculos tienen un alto consumo de tiempo aún para sistemas pequeños del orden de 1000 átomos y es prácticamente imposible abordar sólidos de escalas macroscópicas incluso en un futuro cercano, ya que el problema cuántico se reduce generalmente a diagonalización de matrices y el consumo de tiempo computacional de tal proceso es proporcional al cubo del tamaño del sis-

tema. Una alternativa eficiente para estudiar los sólidos son los métodos del grupo de renormalización, el cual ha tenido éxito en la teoría de fenómenos críticos [Ma, 1973]. Las técnicas de grupo de renormalización en espacio real han sido aplicadas a sistemas desordenados [Aoki, 1980] [Gonçalves da Silva, *et al.*, 1981] y cuasiperiódicos [Niu, *et al.*, 1986]; [Ashraff, *et al.*, 1988]; [Barrio, *et al.*, 1990] y [Walther, *et al.*, 1997], debido a la ausencia de un teorema general de tipo Bloch en estos sistemas. En particular, los cuasiperiódicos son muy sensibles a defectos locales [Naumis, *et al.*, 1996] y entonces, es importante estudiar sistemas de tamaño macroscópico para minimizar los efectos de frontera. En los últimos años, se han desarrollado procesos de renormalización para estudiar propiedades locales -tales como las densidades de estados- en sistemas cuasiperiódicos [Wang, *et al.*, 1988]. Sin embargo, el método de renormalización no se ha podido emplear en el análisis del fenómeno de transporte, debido a los complejos procesos involucrados en dicho fenómeno. En esta tesis se desarrollan métodos del grupo de renormalización para estudiar el transporte de electrones a través de la fórmula de Kubo-Greenwood dentro del formalismo de enlace fuerte a temperatura cero. A continuación haremos una revisión de las ideas básicas del método de grupo de renormalización.

El proceso de renormalización fue introducido originalmente como un método para remover divergencias en la teoría cuántica de campos. Si bien las primeras ideas aparecen en el trabajo de Bogoliubov, el término de "grupo de renormalización" fue introducido por vez primera por Stueckelberg y Petermann en 1953 [Stueckelberg, *et al.*, 1953]. En los años setentas cuando Kenneth Wilson estudió el efecto de electrones dispersados por impurezas magnéticas en un metal, conocido como el problema de Kondo [Wilson, 1975], usando grupo de renormalización en espacio real (GRER). La idea general detrás de los métodos del GRER [Pfeuty, *et al.*, 1982][White, 1992] es que en un sistema con muchos grados de libertad los estados correspondientes a altas energías no son importantes en la descripción de la física de bajas energías del sistema. Esto significa que podemos construir un sistema usando pequeños sub-sistemas, donde sólo los grados de libertad de bajas energías son considerados. Un típico algoritmo del GRER consiste de dos partes: Una parte que pega sub-sistemas para formar un sistema de mayor escala y la otra es donde se desprecia información no importante del sistema. Cabe mencionar que dicho método del GRER es aproximado y da resultados razonables únicamente para estados cercanos al estado base.

Los métodos del grupo de renormalización que se usan en la mecánica estadística clásica [Goldenfeld, 1992][Cardy, 1996] son principalmente métodos de bloques, en los cuales un cúmulo que contiene cierto número de sitios o grados de libertad es reemplazado por un nuevo sitio renormalizado llevando menos grados de libertad efectivos, describiendo las propiedades del mismo. La unión de estos cúmulos renormalizados en grupos formando un nuevo conjunto de ellos el cual es renormalizado también en otro nuevo sitio con grados de libertad efectivos. El método que Wilson utilizó en su trabajo pionero del problema de Kondo [Wilson, 1975], en lugar de unir conjuntos de sitios, añade un sitio a un cúmulo, logrando un crecimiento lineal, en vez de exponencial, con

el número de iteraciones. Hoy en día, muchos algoritmos del GRER siguen usando el método de Wilson para agrandar la red.

En la práctica, durante el proceso de renormalización de la n -ésima etapa, los subsistemas son representados por matrices básicas de los operadores implicados y la unión de estos subsistemas es caracterizada por una matriz de mayor dimensión formada por bloques de las matrices básicas, donde las interacciones entre subsistemas se encuentran en los elementos fuera de las matrices básicas. El paso más importante del proceso de renormalización consiste en reducir esta matriz de la unión a una matriz de dimensión de las básicas, mediante técnicas exactas o aproximadas, como sucede en la mayoría de los casos.

En esta tesis, nuestro sistema es la cadena de Fibonacci. Los subsistemas corresponden a las generaciones anteriores de la misma y la unión se forma usando el método de adición explicado en la sección I.1. El proceso de renormalización que hemos desarrollado es exacto, es decir, reducir el tamaño de la matriz de la unión reteniendo los efectos de todos los grados de libertad a pesar de que muchos de ellos no estarán explícitamente presentes en la matriz efectiva. Los detalles de este proceso se discutirán en la sección III.2.

Capítulo 2

Transporte Electrónico

La conducción electrónica en sólidos no cristalinos es uno de los grandes retos de la física de materia condensada, ya que se combinan dos problemas difíciles de por sí que son fenómenos fuera de equilibrio y el desorden estructural. El transporte electrónico puede modelarse con diversos niveles de sofisticación. Desde inicios del siglo pasado la teoría de conducción electrónica en sistemas con alto grado de degeneración tales como los metales se basa en el modelo de Drude-Sommerfeld, donde el transporte se fundamenta sobre las ecuaciones dinámicas como las de Newton o de Schrödinger. Sin embargo, estas ecuaciones por sí mismas no son suficientes para describir el transporte, independiente de que el transporte sea clásico o cuántico, debido a que las ecuaciones dinámicas son reversibles mientras los procesos de transporte son disipativos e irreversibles. Las teorías de transporte usualmente introducen esta irreversibilidad asumiendo que el sistema de interés está en contacto con un gran reservorio que está siempre en equilibrio termodinámico y continuamente trata de restaurar el equilibrio al sistema a través de interacciones aleatorias. Esto está particularmente claro en la teoría de Landauer [Landauer, 1957 y 1970], donde el sistema está conectado a dos reservorios de electrones como se discutirá en detalle en la sección II.3. Por otro lado, la teoría cuántica de conducción electrónica se basa en las funciones de correlación temporal corriente-corriente para obtener el tensor de conductividad, el cual se conoce como el formalismo de Kubo [Kubo, 1957][Callaway, 1974]. La hipótesis central en dicho formalismo es el límite de respuesta lineal, es decir, se desprecian los efectos del cuadrado del campo eléctrico aplicado cuando dicho campo es mucho menor que el campo interno dentro del sólido. El formalismo de Kubo es una teoría dependiente del tiempo. En cambio, el formalismo de Landauer [Landauer, 1957 y 1970] expresa la conductancia en términos de las propiedades estáticas de dispersión. El desorden inherente presente en un conductor infiere la dispersión de electrones incidentes resultando una fracción de electrones transmitida, la cual es llamada el coeficiente de transmisión y puede ser derivada a través de la mecánica cuántica. Se ha demostrado que bajo ciertas circunstancias los formalismos de Kubo y de Landauer son equivalentes [Economou, *et al.*, 1981].

En general, las propiedades de transporte dependen de los procesos de dispersión microscópicos. Una clasificación de diferentes regímenes de transporte de acuerdo a sus escalas de longitud típicas se presenta a continuación:

Régimen difusivo. La definición estándar de este régimen de transporte es $\lambda_F \ll \ell \ll L \ll \xi$, donde $\lambda_F = h/\sqrt{2m^*E_F}$ es la longitud de onda de Fermi, ℓ es el camino libre medio, L es el tamaño del sistema y ξ es la longitud de localización. Por lo que en este régimen casi todos los estados son extendidos y la conductancia $g \propto L^{d-2}$, donde d es la dimensión.

Régimen localizado. En el régimen localizado el tamaño de sistema excede la longitud de localización $L \gg \xi$. En este régimen la conductancia $g \ll 1$ y decae exponencialmente con el tamaño del sistema, $g \propto \exp(-L/\xi)$, además crece exponencialmente con la temperatura, $g \propto \exp[-(\Delta/k_B T)^{1/2}]$, es decir, la existencia de una energía de activación (Δ) y la conducción es por saltos [Ziman, 1979].

Régimen balístico. En este régimen el tamaño del sistema es más pequeño que el camino libre medio $L < \ell$. En consecuencia, los efectos de la interferencia cuántica son particularmente importantes.

En las subsiguientes secciones discutiremos los diferentes modelos del transporte electrónico.

2.1 Modelo de Drude

El modelo de Drude nos proporciona una descripción del fenómeno de conducción eléctrica dentro del formalismo de la física clásica. Dicho modelo consiste en considerar a un conjunto de electrones con carga eléctrica ($-e$), masa inercial (m) y densidad (n). Las suposiciones básicas del modelo son:

- 1) Se desprecian las interacciones de electrón-electrón y electrón-ión.
- 2) Las colisiones entre electrones son instantáneas y cambian abruptamente la velocidad de los mismos, es decir, ellos no tienen interacción antes ni después de la colisión.
- 3) La existencia de un tiempo de relajación (τ), el cual está relacionado con el tiempo promedio entre dos colisiones consecutivas.
- 4) Se asume que los electrones alcanzan un equilibrio térmico con sus alrededores a través de las colisiones.

De acuerdo a estas suposiciones Drude desarrolló la primera teoría de la conducción electrónica de los metales. A continuación, abordaremos la conductividad *dc* y la *ac*.

2.1.1 Conductividad eléctrica *dc* para metales

En un conductor metálico, si tenemos n electrones por unidad de volumen moviéndose a una velocidad promedio (\mathbf{v}), la densidad de corriente (\mathbf{J}) estará dada por

$$\mathbf{J} = nev. \quad (2.1)$$

En general, los electrones se mueven constantemente en diferentes direcciones con distintas energías cinéticas. En ausencia de campo eléctrico externo la velocidad promedio es cero y no se espera que haya flujo de corriente. En cambio, cuando se aplica un campo eléctrico (\mathbf{E}) los electrones se aceleran a partir de cero durante un tiempo típicamente τ , ya que las colisiones son instantáneas y sin memoria. Por lo tanto, en sólidos

isotrópicos la velocidad promedio de los electrones es

$$\mathbf{v} = -\frac{e}{m}\mathbb{E}\tau. \quad (2.2)$$

De esta manera se deduce la ley de Ohm dentro del modelo de Drude, es decir,

$$\mathbf{J} = \frac{ne^2\tau}{m}\mathbb{E} = \sigma_0 \mathbb{E}, \quad (2.3)$$

donde la conductividad eléctrica *dc* (σ_0) está dada por

$$\sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m}. \quad (2.4)$$

A continuación discutiremos la conductividad eléctrica cuando el campo eléctrico aplicado es dependiente del tiempo.

2.1.2 Conductividad eléctrica *ac* para metales

En la presencia de un campo eléctrico espacialmente uniforme y dependiente del tiempo [$\mathbb{E}(t) = \text{Re}(\mathbb{E}(\omega)e^{-i\omega t})$], el momento promedio de un electrón [$\mathbf{p}(t) = m\mathbf{v} = \text{Re}(\mathbf{p}(\omega)e^{-i\omega t})$] obedece la siguiente ecuación de movimiento, considerando las colisiones como una fuente de fricción [Ashcroft, *et al.*, 1976],

$$\frac{d\mathbf{p}(t)}{dt} = -\frac{\mathbf{p}(t)}{\tau} - e\mathbb{E}(t). \quad (2.5)$$

La transformada de Fourier de la ecuación (2.5) conduce a

$$-i\omega\mathbf{p}(\omega) = -\frac{\mathbf{p}(\omega)}{\tau} - e\mathbb{E}(\omega). \quad (2.6)$$

De la ecuación (2.6) sabemos que la densidad de corriente $\mathbf{J} = -nep/m$ y en este caso $\mathbf{J}(t) = \text{Re}(\mathbf{J}(\omega)e^{-i\omega t})$, entonces,

$$\mathbf{J}(\omega) = \frac{(ne^2/m)\mathbb{E}(\omega)}{(1/\tau) - i\omega} = \sigma(\omega)\mathbb{E}(\omega), \quad (2.7)$$

donde la conductividad dependiente de la frecuencia *ac* [$\sigma(\omega)$] está dada por

$$\sigma(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 - i\omega\tau}, \quad (2.8)$$

es decir, en el límite de bajas frecuencias

$$\text{Re}[\sigma(\omega)] \simeq \sigma_0 - \sigma_0 \tau^2 \omega^2. \quad (2.9)$$

Cabe mencionar que a pesar de las cuatro aproximaciones de Drude antes mencionadas y el fundamento completamente clásico del modelo, las expresiones (2.4) y

(2.8) son todavía ampliamente usadas hoy en día debido a su sencillez y en muchas ocasiones sirven como caso limite, como veremos en la sección III.3.

En general, la dinámica y la disipación están entrelazadas en el fenómeno de transporte y para una descripción cuantitativa se necesita una ecuación que determine la función de distribución de probabilidad fuera de equilibrio. Tal es el caso de la ecuación de Boltzmann que discutiremos a continuación.

2.2 Ecuación de Boltzmann

La función de distribución fuera del equilibrio $[f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)]$ obedece la siguiente ecuación de movimiento

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{trasl} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{col}, \quad (2.10)$$

donde $(\partial f/\partial t)_{trasl}$ y $(\partial f/\partial t)_{col}$ denotan las evoluciones de la función de distribución debido a la traslación en el espacio fase y a las colisiones, respectivamente. Estas derivadas parciales pueden escribirse de la siguiente forma [Ashcroft, *et al.*, 1976]

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{trasl} = -\dot{\mathbf{r}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f - \dot{\mathbf{p}} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f = -\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + e(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H}) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f. \quad (2.11)$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{col} = \sum_{\mathbf{p}'} \{W(\mathbf{p}', \mathbf{p})f(\mathbf{p}') [1 - f(\mathbf{p})] - W(\mathbf{p}, \mathbf{p}')f(\mathbf{p}) [1 - f(\mathbf{p}')]\}, \quad (2.12)$$

donde $W(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ es la probabilidad de transición entre el estado inicial \mathbf{p} y el estado final \mathbf{p}' . El primer término de la suma en la ecuación (2.12) describe los procesos de dispersión en los cuales el electrón sale del estado \mathbf{p} , mientras que el segundo describe el proceso donde el electrón llega al estado \mathbf{p} de los otros estados \mathbf{p}' . El factor $[1 - f(\mathbf{p})]$ se debe al principio de exclusión de Pauli. Por lo tanto, la ecuación de Boltzmann es una ecuación integro-diferencial y es sumamente difícil de resolver en forma general. Comúnmente se introduce el concepto del tiempo de relajación (τ) a la ecuación (2.12), es decir,

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{col} = -\frac{f - f_0}{\tau}, \quad (2.13)$$

donde f_0 es la función de distribución del sistema en el equilibrio. En consecuencia, para el caso estacionario ($df/dt = 0$) y además si f no depende explícitamente del tiempo ($\partial f/\partial t = 0$), la ecuación de Boltzmann puede reescribirse como

$$\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f - e(\mathbb{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H}) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f + \frac{f - f_0}{\tau} = 0. \quad (2.14)$$

En particular, para el análisis de la conductividad eléctrica se parte de un sistema homogéneo en ausencia del campo magnético, es decir $\nabla_{\mathbf{r}} f = \mathbf{0}$ y $\mathbf{H} = \mathbf{0}$, entonces

$$f = f_0 + e\tau \mathbb{E} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f \cong f_0 + e\tau \mathbb{E} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f_0, \quad (2.15)$$

puesto que el campo eléctrico aplicado es mucho menor que el del interior de sólido y en consecuencia se retiene únicamente el término lineal del campo aplicado. Por otro lado, la densidad de corriente (\mathbf{J}) puede escribirse como [Ashcroft, *et al.*, 1976]

$$\mathbf{J} = -\frac{2}{(2\pi)^3} \iiint e \mathbf{v} f d^3k, \quad (2.16)$$

donde el 2 en el numerador se debe al espín. Sustituyendo la expresión (2.15) en la (2.16) se tiene que

$$\mathbf{J} = -\frac{e^2}{4\pi^3} \iiint \tau \mathbf{v} \mathbb{E} \cdot \nabla_{\mathbf{p}} E \frac{\partial f_0}{\partial E} d^3k = \frac{e^2}{4\pi^3} \iint_{S_F} \tau \mathbf{v} \mathbb{E} \cdot \mathbf{v} \frac{dS}{|\nabla_{\mathbf{k}} E|}, \quad (2.17)$$

donde la integral de $f_0 = \{\exp[(E - E_F)/k_B T] + 1\}^{-1}$ no contribuye a la conductividad, la derivada parcial de f_0 con respecto a la energía (E) es aproximadamente una función delta de Dirac [$\partial f_0/\partial E \approx -\delta(E - E_F)$] y la última integral doble se efectúa sobre la superficie de Fermi del sistema. Para materiales isotrópicos, si el campo eléctrico aplicado está en la dirección x , $\mathbb{E} = \mathcal{E}_x \hat{\mathbf{x}}$, entonces se tiene que

$$J_x = \frac{e^2}{4\pi^3} \iint_{S_F} \tau v_x^2 \frac{dS}{|\nabla_{\mathbf{k}} E|} \mathcal{E}_x = \sigma \mathcal{E}_x, \quad (2.18)$$

donde la conductividad eléctrica está dada por

$$\sigma = \frac{e^2}{4\pi^3} \iint_{S_F} \tau v_x^2 \frac{dS}{|\nabla_{\mathbf{k}} E|}, \quad (2.19)$$

y para el caso de electrones libres la ecuación (2.19) se reduce a

$$\sigma = \frac{ne^2 \tau(E_F)}{m}, \quad (2.20)$$

siendo $\tau(E_F)$ el tiempo de relajación evaluado sobre la esfera de Fermi. Nótese que la ecuación (2.20) es extremadamente similar a la de Drude [Ec. (2.4)], excepto que τ no es una constante como se supone en el modelo de Drude.

2.3 Conductancia de Landauer

La conductancia (G) de una muestra tridimensional se relaciona con la conductividad eléctrica (σ) por

$$G = \sigma \frac{W}{L}, \quad (2.21)$$

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

$$G = \frac{2e^2}{h} M T, \quad (2.22)$$

donde M es el número de canales transversales y T es la probabilidad promedio - sobre los M canales- de que un electrón inyectado por un reservorio sea transmitido al otro. La ecuación (2.22) puede deducirse partiendo de un conductor ideal, es decir, sin colisiones ($\tau \rightarrow \infty$). Si adicionalmente el sistema es homogéneo la ecuación (2.14) conduce a que la función de distribución es una constante que puede normalizarse como uno ($f = 1$). Para un solo canal de conducción la corriente puede calcularse partiendo de la ecuación (2.16) como

$$I = -\frac{2}{2\pi} \int e v f dk = -\frac{e}{\pi} \int \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} dk = -\frac{e}{\pi \hbar} \int_{\mu_1}^{\mu_2} dE = -\frac{e(\mu_2 - \mu_1)}{\pi \hbar}, \quad (2.23)$$

donde μ_1 y μ_2 son los potenciales químicos de los reservorios que se conectan al conductor. Ahora bien, sabemos que $\mu_2 - \mu_1 = -eV$, siendo V la diferencia de voltaje aplicado. Por lo tanto,

$$G = \frac{I}{V} = \frac{2e^2}{h}. \quad (2.24)$$

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

$$G = \frac{2e^2}{h} T. \quad (2.25)$$

Si el conductor tiene M canales transversales, la conductancia del sistema está dada por la ecuación (2.22).

Cabe mencionar que en el formalismo de Landauer la distribución del potencial es una consecuencia del flujo de electrones en el conductor, contrario a lo convencional donde se considera a la corriente como una consecuencia del voltaje aplicado. Ahora, si el potencial se promedia sobre una región suficientemente grande para remover las oscilaciones debido a interferencias, la trasmittancia (T) en la ecuación (2.22) se reemplaza por $T/(1 - T)$ [Imry, *et al.*, 1999], esto es,

$$G = \frac{2e^2}{h} M \frac{T}{1 - T}. \quad (2.26)$$

La principal diferencia entre las ecuaciones (2.22) y (2.26) radica en el tipo de saturadores que se conectan al sistema. Si éstos son fuentes de corriente entonces se debe de usar la ecuación (2.26). En cambio, si ellos son conductores perfectos entonces la ecuación (2.22) debe ser utilizada [Economou, *et al.*, 1981]. También, se cree que la ecuación (2.26) determina únicamente la conductancia del sistema, mientras que la ecuación (2.22) evalúa la conductancia del sistema junto con sus contactos [Datta, 1995]. En suma, dentro del formalismo de Landauer la conductancia eléctrica es proporcional a la transmitancia del sistema, la cual discutiremos a continuación.

2.3.1 La Transmitancia

Consideremos una cadena finita de N átomos conectada a dos saturadores periódicos semi-infinitos en sus dos extremos. Las auto energías y las integrales de salto entre los vecinos más cercanos del sistema son respectivamente $\{\epsilon_n\}$ y $\{t_{n,n+1}\}$, y los parámetros de los saturadores son ϵ_0 y t . Dentro del formalismo de amarre fuerte la ecuación de Schrödinger estacionaria [Ec. (1.11)] puede representarse matricialmente de la siguiente manera:

$$\mathbf{C}_{n+1} = \mathbf{T}_n \mathbf{C}_n, \quad (2.27)$$

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

$$\mathbf{T}_n = \begin{pmatrix} \frac{E - \epsilon_n}{t_{n,n+1}} & -\frac{t_{n,n-1}}{t_{n,n+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.28)$$

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

$$\mathbf{C}_n = \begin{pmatrix} c_n \\ c_{n-1} \end{pmatrix}. \quad (2.29)$$

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

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}_N \mathbf{T}_{N-1} \cdots \mathbf{T}_1 = \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix} \quad (2.30)$$

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

$$\Psi_n(k) = \begin{cases} Ae^{ikna} + Be^{-ikna}, & n \leq 1 \\ Ce^{ikna} + De^{-ikna}, & n \geq N \end{cases}. \quad (2.31)$$

Para el caso en el que el electrón incide en el extremo izquierdo ($n = 1$), tenemos que $k > 0$, $A = 1$, $B = r$, $C = \varkappa$ y $D = 0$, donde r y \varkappa son respectivamente las

amplitudes de reflectancia y trasmittancia, las cuales satisfacen la relación

$$|\varkappa|^2 + |r|^2 = 1. \quad (2.32)$$

Por otro lado, la Ec. (2.31) conduce a

$$\begin{pmatrix} \varkappa e^{ik(N+1)a} \\ \varkappa e^{ikNa} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ika} + r e^{-ika} \\ 1 + r \end{pmatrix}. \quad (2.33)$$

Por lo que encontramos [Sütó, 1994]

$$\varkappa = -\frac{2i(\sin ka) e^{-ikNa}}{\tau_{11} e^{-ika} + \tau_{12} - e^{ika}(\tau_{21} e^{-ika} + \tau_{22})}, \quad (2.34)$$

y

$$r = -\frac{\tau_{11} e^{ika} + \tau_{12} - e^{ika}(\tau_{21} e^{ika} + \tau_{22})}{\tau_{11} e^{-ika} + \tau_{12} - e^{ika}(\tau_{21} e^{-ika} + \tau_{22})}, \quad (2.35)$$

donde el vector de onda k se relaciona con E y ε_0 a través de la relación de dispersión de los saturadores [Ec. (1.15)], es decir, $\cos ka = \frac{E - \varepsilon_0}{2t}$. Por lo tanto, la trasmittancia (T) es,

$$T(E) \equiv |\varkappa|^2 = \frac{4 - (E/t)^2}{[\tau_{21} - \tau_{12} + (\tau_{22} - \tau_{11}) E/2t]^2 + (\tau_{22} + \tau_{11})^2 (1 - E^2/4t^2)}, \quad (2.36)$$

la cual está relacionada con la conductancia del sistema dentro del formalismo de Landauer como hemos discutido en la sección anterior.

2.4 Fórmula de Kubo-Greenwood

A mediados de los cincuenta aparecieron las primeras teorías totalmente cuánticas de la conducción electrónica en sólidos, dentro de las cuales la formulación de Kubo ha sido particularmente importante y ampliamente aceptada. Dicha formulación se basan en la teoría de respuesta lineal y el teorema de fluctuación-disipación que relaciona los procesos disipativos fuera de equilibrio con las fluctuaciones térmicas en equilibrio [Datta, 1995]. En esta sección, se deducirá la fórmula de Kubo-Greenwood dentro del formalismo de la función de Green [Oviedo, 2001].

La presencia de un campo eléctrico \mathbb{E} en un sistema induce una densidad de corriente \mathbf{J} . La conductividad eléctrica se define como el coeficiente de la parte lineal (en \mathbb{E}) de \mathbf{J} [Economou, 1983],

$$\mathbf{J}_\alpha(\mathbf{r}, t) = \int_0^\infty dt' \int d\mathbf{r}' \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t') \mathbb{E}_\beta(\mathbf{r}', t - t'), \quad (2.37)$$

donde los subíndices α y β denotan las coordenadas cartesianas y tienen una suma implícita sobre los índices repetidos β . Para materiales isotrópicos supongamos que \mathbb{E} y \mathbf{J} están a lo largo del eje x , así que sólo necesitamos considerar σ_{xx} ; por simplicidad omitiremos los subíndices. Generalmente \mathbb{E} y \mathbf{J} varían lentamente en distancias del orden de ℓ_0 , donde se determina por la condición $\sigma \approx 0$ para $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \gg \ell_0$ (ℓ_0 es la distancia de correlación espacial). En este caso se puede realizar la integración sobre \mathbf{r}' y el promedio sobre \mathbf{r} para obtener

$$\mathbf{J}(t) = \int_0^\infty dt' \sigma(t') \mathbb{E}(t - t'), \quad (2.38)$$

donde

$$\sigma(t') = \frac{1}{\Omega} \int \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t'), \quad (2.39)$$

siendo Ω el volumen del sistema. Considerando la transformada de Fourier de $\sigma(t')$,

$$\sigma(\omega) = \int_0^\infty dt' \sigma(t') e^{i\omega t'}, \quad (2.40)$$

y si $\mathbb{E}(t)$ está dada por

$$\mathbb{E}(t) = F e^{-i\omega t} + F^* e^{i\omega t}, \quad (2.41)$$

tenemos que

$$J(t) = \sigma(\omega) F e^{-i\omega t} + \sigma(-\omega) F^* e^{i\omega t}. \quad (2.42)$$

Para que $J(t)$ sea real requiere que $\sigma(-\omega) = \sigma^*(\omega)$, de donde se sigue que la parte real (imaginaria) σ_1 (σ_2) de σ es una función par (impar) de ω . Éstas son mutuamente dependientes a través de las relaciones del tipo Kramers-Kronig [Economou, 1983].

Ahora, procedamos a obtener una expresión cuántica general de la parte real de la conductividad, $\sigma_1(\omega)$. El promedio temporal de la potencia consumida por el sistema puede escribirse como

$$P = \frac{\Omega}{\Theta} \int_0^\Theta dt \mathbb{E}(t) J(t), \quad (2.43)$$

donde Θ es el período del campo eléctrico externo $[\mathbb{E}(t)]$. Usando las Ecs. (2.41) y (2.42) tenemos que

$$P = \Omega |F|^2 [\sigma(\omega) + \sigma(-\omega)] = 2\Omega |F|^2 \sigma_1(\omega). \quad (2.44)$$

Por otro lado, la potencia promedio puede calcularse multiplicando la energía $[\varepsilon_{\alpha\beta} \equiv \hbar\omega_{\alpha\beta} = E_\beta - E_\alpha > 0]$ que absorbe el sistema durante la transición $|\alpha\rangle \rightarrow |\beta\rangle$, por la razón de transición $p_{\alpha\beta}$, y sumando sobre todas las posibilidades $|\alpha\rangle \neq |\beta\rangle$:

$$P = \sum_{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} p_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} (p_{\alpha\beta} - p_{\beta\alpha}). \quad (2.45)$$

La probabilidad por unidad de tiempo $p_{\alpha\beta}$ está dada por

$$p_{\alpha\beta} = f_{\alpha}(1 - f_{\beta})W_{\alpha\beta}, \quad (2.46)$$

donde $f_{\alpha} \equiv f(E_{\alpha})$ es la distribución de Fermi-Dirac y $W_{\alpha\beta}$ puede obtenerse por la regla de oro de Fermi [Sakurai, 1994] considerando la perturbación $\mathbf{H}' = e \mathbb{E}(t) x$ y la Ec. (2.41),

$$W_{\alpha\beta} = \frac{2\pi}{\hbar} e^2 |F|^2 |\langle \alpha | x | \beta \rangle|^2 \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_{\alpha\beta}). \quad (2.47)$$

Combinando las ecs. (2.45), (2.46), (2.47) y comparando con la Ec. (2.44) obtenemos que

$$\sigma_1(\omega) = \frac{2\pi e^2}{\Omega} \sum_{\alpha\beta} |\langle \alpha | x | \beta \rangle|^2 \omega_{\alpha\beta} (f_{\alpha} - f_{\beta}) \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_{\alpha\beta}), \quad (2.48)$$

donde hemos introducido explícitamente un factor de 2 para tomar en cuenta el espín de los electrones. La Ec. (2.48) se conoce como la fórmula de Kubo-Greenwood para la conductividad eléctrica [Kubo, 1956, 1957][Greenwood, 1958].

Podemos reescribir la expresión (2.48) en términos de los elementos de matriz del operador ,

$$p_x = im[\mathbf{H}x - x\mathbf{H}]/\hbar \quad (2.49)$$

es decir,

$$\langle \alpha | p_x | \beta \rangle = im\omega_{\alpha\beta} \langle \alpha | x | \beta \rangle. \quad (2.50)$$

Por lo tanto,

$$\sigma_1(\omega) = \frac{2\pi e^2}{\Omega m^2} \sum_{\alpha\beta} |\langle \alpha | p_x | \beta \rangle|^2 \frac{(f_{\alpha} - f_{\beta})}{\omega_{\alpha\beta}} \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_{\alpha\beta}). \quad (2.51)$$

Con el fin de expresar la conductividad en términos de la función de Green, reescribamos la Ec. (2.51) como:

$$\begin{aligned} \sigma_1(\omega) &= \frac{2\pi e^2}{\Omega m^2 \hbar \omega} \sum_{\alpha\beta} |\langle \alpha | p_x | \beta \rangle|^2 [f(E_{\alpha}) - f(E_{\beta})] \delta(\hbar\omega - E_{\beta} + E_{\alpha}) \\ &= \frac{2\pi e^2}{\Omega m^2 \hbar \omega} \int_{-\infty}^{\infty} dE \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | p_x | \beta \rangle \langle \beta | p_x | \alpha \rangle [f(E_{\alpha}) - f(E_{\beta})] \times \\ &\quad \times \delta(E - E_{\alpha}) \delta(E + \hbar\omega - E_{\beta}), \end{aligned} \quad (2.52)$$

donde podemos escribir la suma del integrando como:

$$\begin{aligned}
\sum_{\alpha\beta} [\dots] &= \sum_{\alpha\beta\gamma} \langle \beta | \gamma \rangle \langle \gamma | p_x | \alpha \rangle [f(E_\alpha) - f(E_\beta)] \times \\
&\quad \times \delta(E - E_\alpha) \langle \alpha | p_x | \beta \rangle \delta(E + \hbar\omega - E_\beta) \\
&= \sum_{\alpha\beta\gamma} [f(E_\alpha) - f(E_\beta)] \langle \gamma | p_x | \alpha \rangle \delta(E - E_\alpha) \times \\
&\quad \langle \alpha | p_x | \beta \rangle \delta(E + \hbar\omega - E_\beta) \langle \beta | \gamma \rangle.
\end{aligned} \tag{2.53}$$

De la ecuación de la densidad de estados [Ec. (A.13)] que se desarrollará en el apéndice A tenemos la siguiente identidad

$$\sum_{\alpha} \delta(E - E_{\alpha}) |\alpha\rangle \langle \alpha| = -\frac{1}{\pi} \text{Im } G(E), \tag{2.54}$$

la cual nos permite reescribir $\sigma_1(\omega)$ finalmente como

$$\sigma_1(\omega) = \frac{2e^2 \hbar}{\pi \Omega m^2} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{f(E) - f(E + \hbar\omega)}{\hbar\omega} \text{Tr} \{ p_x \text{Im } G(E) p_x \text{Im } G(E + \hbar\omega) \}. \tag{2.55}$$

Esta última expresión se conoce como la fórmula de Kubo-Greenwood, donde la información del sistema se introduce a través de la función de Green escrita dentro del modelo de amarre fuerte. La unidad de conductividad $[\sigma] = m^{2-d} / \Omega^{-1}$, siendo d la dimensionalidad del sistema. Dicha fórmula es el punto de partida de nuestro análisis de la conductividad electrónica en cuasicristales, como se discutirá con detalle en el capítulo III y IV. Cabe mencionar que la fórmula de Kubo general para la conductividad eléctrica puede escribirse como [Elliott, *et al.*, 1974]

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\Omega} \int_0^{\infty} dt \exp(-i\omega t) \exp(-\eta t) \int_0^{\beta} d\lambda \langle J_{\mu}(0) J_{\nu}(t + i\hbar\lambda) \rangle, \tag{2.56}$$

donde $\beta = (k_B T)^{-1}$ y J_{μ} es el operador de densidad de corriente

$$J_{\mu} = \frac{ie}{\hbar} \sum_j \{ t_{\mu, \mu+1} |\mu\rangle \langle \mu + 1| - t_{\mu, \mu-1} |\mu\rangle \langle \mu - 1| \}. \tag{2.57}$$

Para un hamiltoniano armónico, la función de Green de dos partículas siempre puede desacoplarse exactamente en la suma de productos de dos funciones de una partícula, y usando este resultado la ecuación (2.56) conduce a la ecuación (2.55) [Elliott, *et al.*, 1974].

Capítulo 3

Renormalización en Cadenas de Fibonacci

Como hemos visto en el capítulo I, la secuencia de Fibonacci es un ejemplo típico de los cuasicristales. Sabemos que su espectro electrónico es un conjunto de cantor con medida de Lebesgue cero [Kohmoto, *et al.*, 1984] y los correspondientes estados propios son críticos. Por lo que no se espera que la conducción electrónica sea balística como en los sistemas periódicos ni difusiva como en los desordenados. El transporte electrónico en redes cuasiperiódicas es un problema abierto y de gran interés. En particular, la relación entre los estados críticamente localizados y su capacidad de transporte es de gran controversia [Sütö, 1994]. Recientemente, se ha reportado [Maciá, *et al.*, 1996] la existencia de estados transparentes con coeficiente de transmisión uno en sistemas de Fibonacci mixto, es decir, los electrones viajan sin reflexiones, en forma similar a los estados de Bloch. Además, los sistemas cuasiperiódicos son muy sensibles a defectos locales, por lo que, es importante estudiar sistemas de tamaño macroscópico para minimizar los efectos de frontera. Creemos que la técnica más apropiada para estudiar estos sistemas a gran escala es el grupo de renormalización en espacio real, debido a la ausencia de un teorema general de tipo Bloch para estos casos. En este trabajo hemos desarrollado un nuevo método del grupo de renormalización para la fórmula de Kubo-Greenwood en dos tipos de redes de Fibonacci, mixto y de enlaces, como se discute en la siguiente sección. Cabe mencionar que con el fin de aislar los efectos de la cuasiperiodicidad, en esta tesis consideraremos únicamente la banda electrónica s .

3.1 Redes de Fibonacci

En la sección 1.3 vimos el modelo de amarre fuerte, con el cual podemos describir diversos sistemas variando las auto energías (ε_i) y/o a las integrales de salto (t_{ij}) [Ec. (1.9)]. Cuando ε_i y t_{ij} son variables aleatorias no correlacionadas con una distribución de probabilidad uniforme, se describen sistemas desordenados como en el modelo de Anderson. Por el contrario si obedecen una secuencia periódica, se trata de sólidos cristalinos. Para el caso intermedio, los trabajos pioneros en el estudio de sistemas cuasiperiódicos fueron los de Kohmoto [Kohmoto, *et al.*, 1983] y de Ostlund [Ostlund, *et al.*, 1984]. Existen diferentes maneras en modelar una cadena de átomos siguiendo la secuencia de Fibonacci:

- 1.- *Modelo de sitios*, donde las auto energías siguen la secuencia de Fibonacci y las integrales de salto son constantes.
- 2.- *Modelo de enlaces*, en el cual las integrales de salto se arreglan aperiódicamente y las auto energías son ceros.
- 3.- *Modelo mixto*, donde las auto energías varían de acuerdo a la secuencia de

Fibonacci y las integrales de salto dependen de la naturaleza de los átomos vecinos, es decir, podrían ser t_{AA} , t_{AB} , o t_{BA} , siendo $t_{AB} = t_{BA}$.

Los tres modelos de Fibonacci se resumen en la siguiente tabla.

Tabla III.1. Modelos de Fibonacci.

Modelo	auto energía	integral de salto
de sitios	$\varepsilon_A = -\varepsilon_B = \alpha$	$t_{j,j+1} = 1$
de enlaces	$\varepsilon_j = 0$	$t_A \neq t_B$
mixto	$\varepsilon_A = -\varepsilon_B = \alpha$	$t_{AA} \neq t_{AB} = t_{BA} = 1$

Como se ha mencionado anteriormente, la ausencia de la simetría traslacional en los sistemas cuasiperiódicos deshabilita el método del espacio recíproco que se usa tradicionalmente en el cálculo de la estructura de bandas. Por lo que el grupo de renormalización resalta su importancia si se quiere abordar sistemas de tamaño macroscópico, como se notará en las siguientes secciones.

3.2 Renormalización para la fórmula de Kubo

Se sabe que los sistemas aperiódicos son difíciles de abordar en tamaño macroscópico aún dentro de la aproximación de una sola partícula, debido a que el tiempo de cómputo crece como el cubo del tamaño del sistema. Durante los últimos años, se han desarrollado métodos de renormalización que permiten calcular la densidad de estados locales en sistemas cuasiperiódicos macroscópicos [Wang, 1989]. Siguiendo estas ideas hemos desarrollado un nuevo método del grupo de renormalización para calcular la conductividad eléctrica en cadenas de Fibonacci de tamaño macroscópico partiendo de la fórmula de Kubo-Greenwood [Ec. (2.55)], la cual está expresada en términos de las funciones de Green retardada $G^+(E)$ como [Kramer, *et al.*, 1993]:

$$\sigma(\mu, \omega, T) = \lim_{\Omega \rightarrow \infty} \frac{2e^2 \hbar}{\pi \Omega m^2} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{f(E) - f(E + \hbar\omega)}{\hbar\omega} Tr [p \text{Im} G^+(E + \hbar\omega) p \text{Im} G^+(E)]. \quad (3.1)$$

en donde Ω es el volumen del sistema, ω es la frecuencia angular del campo eléctrico externo (\mathbb{E}), $f(E) = \{1 + \exp[(E - \mu)/k_B T]\}^{-1}$ es la función de distribución de Fermi-Dirac con la energía de Fermi μ y la temperatura T , y

$$p = \frac{ima}{\hbar} \sum_j \{t_{j,j+1} |j\rangle \langle j+1| - t_{j,j-1} |j\rangle \langle j-1|\} \quad (3.2)$$

es la proyección del operador de momento en la dirección del \mathbb{E} .

Para una cadena lineal periódica infinita con autoenergías nulas e integrales de salto t , la conductividad de un segmento de N átomos a temperatura cero puede ser calculada

analíticamente y está dada por [Wang, *et al.*, 2001b]

$$\sigma(\mu, \omega) = \frac{8e^2 t^2 a}{\pi(N-1)\hbar^3 \omega^2} \left\{ 1 - (\mu/2t)^2 \right\} \left\{ 1 - \cos \left[(N-1) \frac{\hbar\omega/2|t|}{\sqrt{1 - (\mu/2t)^2}} \right] \right\}, \quad (3.3)$$

donde la longitud del sistema es $\Omega = (N-1)a$. En el límite de $\omega \rightarrow 0$ y $\mu = 0$, la conductividad dc dentro de la banda permitida de energías es

$$\sigma_p = \frac{e^2 a}{\pi \hbar} (N-1), \quad (3.4)$$

la cual conduce a una conductancia finita $g \equiv \sigma_p/(N-1)a = 2e^2/h$ que fué confirmada experimentalmente [De Picciotto, *et al.*, 2001].

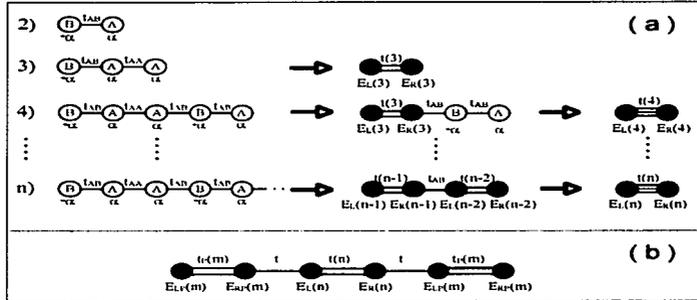


Fig. III.1 (a) Representación esquemática del proceso de renormalización. Los números del lado izquierdo indican las generaciones. La naturaleza de los átomos, sus auto-energías y los parámetros de salto son especificados dentro, debajo y entre los círculos, respectivamente. En el final del proceso se tienen dos átomos efectivos (círculos negros) con una integral de salto efectiva. Existe un paso intermedio en el cual las cadenas renormalizadas de generaciones menores son conectadas a través de una integral salto t_{AB} . (b) Bosquejo de una red mixta de Fibonacci de generación n conectada a dos saturadores periódicos a través de la misma integral de salto t de dichos saturadores.

Para los sistemas cuasiperiódicos, a pesar del conocimiento del grupo de renormalización, la conductividad eléctrica en estos sistemas no ha sido explorada por este camino, debido a los procesos complejos que involucran los fenómenos de transporte. Siguiendo el esquema del grupo de renormalización que se muestra en la figura III.1 (a) encontramos un proceso iterativo para calcular directamente los productos de las

funciones de Green que constituyen la parte fundamental de la fórmula de Kubo-Greenwood [Ec. (3.1)], la cual puede reescribirse a temperatura cero y dentro del formalismo de amarre fuerte como

$$\begin{aligned} \sigma(\mu, \omega) = & -\frac{2e^2 a^2}{\pi \Omega \hbar^2 \omega} \int_{\mu - \hbar \omega}^{\mu} dE \sum_{j,k=1}^{N(n)-1} t_{j,j+1} t_{k,k+1} [2 \operatorname{Im} G_{j+1,k}^+(E_\omega, n) \operatorname{Im} G_{k+1,j}^+(E, n) - \\ & - \operatorname{Im} G_{j+1,k+1}^+(E_\omega, n) \operatorname{Im} G_{k,j}^+(E, n) - \operatorname{Im} G_{j,k}^+(E_\omega, n) \operatorname{Im} G_{k+1,j+1}^+(E, n)], \end{aligned} \quad (3.5)$$

es decir,

$$\begin{aligned} \sigma(\mu, \omega) = & \frac{e^2 a^2}{2\pi \Omega \hbar^2 \omega} \int_{\mu - \hbar \omega}^{\mu} dE [S(E_\omega^+, E^+, n) - S(E_\omega^+, E^-, n) - \\ & - S(E_\omega^-, E^+, n) + S(E_\omega^-, E^-, n)], \end{aligned} \quad (3.6)$$

donde

$$\begin{aligned} S(E_\omega^\nu, E^\beta, n) = & \sum_{j,k=1}^{N(n)-1} t_{j,j+1} t_{k,k+1} [2G_{j+1,k}(E_\omega^\nu) G_{k+1,j}(E^\beta) - \\ & - G_{j+1,k+1}(E_\omega^\nu) G_{k,j}(E^\beta) - G_{j,k}(E_\omega^\nu) G_{k+1,j+1}(E^\beta)], \end{aligned} \quad (3.7)$$

siendo $E^\pm = E \pm i\delta$, $E_\omega = E^\pm + \hbar\omega$, por lo que $E_\omega^\pm = E + \hbar\omega \pm i\delta$ con $\delta \rightarrow 0$. Más aún, como las eigenfunciones son reales para sistemas finitos, es decir, $G_{j,k} = G_{k,j}$, $G^\pm(E) = G(E^\pm)$ y

$$\operatorname{Im} G^+ = (G^+ - G^-)/2i. \quad (3.8)$$

En la ecuación (3.7), ν y β puede ser + o -. Esta suma parcial puede expresarse en términos de la función de Green en los sitios extremos de la cadena de Fibonacci como

$$\begin{aligned}
S(E_\omega^\nu, E^\beta, n) = & A(E_\omega^\nu, E^\beta, n)G_{L,L}(E_\omega^\nu)G_{L,L}(E^\beta) + B(E_\omega^\nu, E^\beta, n)G_{L,R}(E_\omega^\nu)G_{L,R}(E^\beta) + \\
& + C(E_\omega^\nu, E^\beta, n)G_{R,R}(E_\omega^\nu)G_{R,R}(E^\beta) + D(E_\omega^\nu, E^\beta, n)G_{L,L}(E_\omega^\nu)G_{L,R}(E^\beta) + \\
& + D(E^\beta, E_\omega^\nu, n)G_{L,L}(E^\beta)G_{L,R}(E_\omega^\nu) + F(E_\omega^\nu, E^\beta, n)G_{L,L}(E_\omega^\nu)G_{R,R}(E^\beta) + \\
& + F(E^\beta, E_\omega^\nu, n)G_{L,L}(E^\beta)G_{R,R}(E_\omega^\nu) + I(E_\omega^\nu, E^\beta, n)G_{L,R}(E_\omega^\nu)G_{R,R}(E^\beta) + \\
& + I(E^\beta, E_\omega^\nu, n)G_{L,R}(E^\beta)G_{R,R}(E_\omega^\nu) + J(E_\omega^\nu, E^\beta, n)G_{L,L}(E_\omega^\nu) + \\
& + J(E^\beta, E_\omega^\nu, n)G_{L,L}(E^\beta) + K(E_\omega^\nu, E^\beta, n)G_{L,R}(E_\omega^\nu) + \\
& + K(E^\beta, E_\omega^\nu, n)G_{L,R}(E^\beta) + L(E_\omega^\nu, E^\beta, n)G_{R,R}(E_\omega^\nu) + \\
& + L(E^\beta, E_\omega^\nu, n)G_{R,R}(E^\beta) + Z(E_\omega^\nu, E^\beta, n),
\end{aligned} \tag{3.9}$$

donde los sub-índices L y R denotan los átomos extremos de la izquierda y derecha, respectivamente. En la ecuación (3.9) los coeficientes $A(E_1, E_2, n)$, $B(E_1, E_2, n)$, \dots , $Z(E_1, E_2, n)$ que dependen de E_ω^ν , E^β y n , pueden obtenerse iterativamente de los coeficientes correspondientes a las dos generaciones anteriores $n-1$ y $n-2$, como se muestra en el apéndice B para el modelo mixto de Fibonacci y en el apéndice C para el modelo de enlaces. Asimismo, un ejemplo de los detalles de la obtención de los coeficientes se expone en el apéndice B.

Para el caso de la condición a la frontera libre, las funciones de Green $G_{L,L}$, $G_{R,R}$ y $G_{L,R}$ se determinan resolviendo la ecuación de Dyson de dos sitios:

$$\begin{bmatrix} E - E_L(E, n) & t(E, n) \\ t(E, n) & E - E_R(E, n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} G_{L,L} & G_{L,R} \\ G_{L,R} & G_{R,R} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \tag{3.10}$$

Analogamente, en el caso de los saturadores periódicos finitos, los saturadores pueden renormalizarse a sistemas de dos sitios efectivos cada uno, entonces, la ecuación de Dyson que se debe de resolver es de seis sitios como se muestra en la figura III.1(b). Los resultados de $G_{L,L}$, $G_{R,R}$ y $G_{L,R}$ para ambas condiciones a la frontera se muestran en el apéndice B y C para los problemas mixtos y de enlaces, respectivamente. Los saturadores se conectan al sistema por la misma integral de salto de las cadenas periódicas, mostrada en la figura III.1(b). Finalmente, para el caso de saturadores periódicos casi-infinitos con más de 10^{20} átomos cada uno, sólo tenemos que resolver la ecuación de Dyson de cuatro sitios, debido a que la integral de salto efectiva de los saturadores es esencialmente cero. Por otro lado, la densidad de estados total del sistema puede calcularse por medio de un proceso de renormalización como se muestra en la figura III.1 y los resultados se proporcionan en el apéndice B. A continuación se presentan los resultados obtenidos empleando el nuevo método de renormalización.

3.3 El estado transparente

Para el modelo mixto de Fibonacci existen únicamente cuatro tipos de matrices de transferencia que son

$$X = \begin{pmatrix} \frac{E+\alpha}{t_{AB}} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.11)$$

$$Y = \begin{pmatrix} \gamma^{-1} \frac{E-\alpha}{t_{AB}} & -\gamma^{-1} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.12)$$

$$Z = \begin{pmatrix} \frac{E-\alpha}{t_{AB}} & -\gamma \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.13)$$

$$W = \begin{pmatrix} \frac{E-\alpha}{t_{AB}} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.14)$$

donde α ($-\alpha$) es la auto energía del sitio A (B), t_{AA} y $t_{AB} = t_{BA}$ son las integrales de salto y $\gamma = t_{AA}/t_{AB} > 0$. Haciendo uso de estas matrices e imponiendo condiciones de frontera cíclicas, ellos traducen la secuencia atómica $ABAAB\dots$ a la secuencia de matrices de transferencia $\dots XZYXZYXWXZYXW$ describiendo el comportamiento del movimiento del electrón a través de una red de Fibonacci. Renormalizando las matrices de transferencia de acuerdo a un esquema de bloques $R_A \equiv ZYX$ y $R_B \equiv WX$ con determinantes iguales a uno y tomando a $t_{AB} = 1$, el conmutador de las matrices de bloque es

$$[R_A, R_B] = \frac{\alpha(1 + \gamma^2) - E(1 - \gamma^2)}{\gamma} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ E + \alpha & -1 \end{pmatrix} = 0, \quad (3.15)$$

si

$$E = \alpha(1 + \gamma^2)/(1 - \gamma^2). \quad (3.16)$$

Por lo que el producto de las matrices de transferencia del sistema (M) puede escribirse como

$$M(N) = R_A^{N_A} R_B^{N_B}, \quad (3.17)$$

donde N_A y N_B son respectivamente los números de átomos del tipo A y del tipo B y $N_A + N_B = N$.

Por otro lado, las matrices R_A y R_B pueden reescribirse en términos de una R_0 de la siguiente forma [Huang, *et al.*, 1998]

$$R_A = R_0^3 \text{ y } R_B = R_0^2, \quad (3.18)$$

donde

$$R_0 = \begin{pmatrix} \frac{2\alpha\gamma}{1-\gamma^2} & -\gamma \\ \gamma^{-1} & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.19)$$

Entonces se tiene que $M(N) = R_0^N$, la cual puede ser evaluada usando el teorema de Cayley-Hamilton para matrices unitarias [Born, *et al.*, 1965] y en términos de los polinomios de Chebyshev de segunda clase el producto de matrices está dado por

$$M(N) = \frac{1}{\sin \phi} \begin{pmatrix} \sin[(N+1)\phi] & -\gamma \sin(N\phi) \\ \gamma^{-1} \sin(N\phi) & -\sin[(N-1)\phi] \end{pmatrix}, \quad (3.20)$$

donde

$$\sqrt{E^2 - \alpha^2} = 2t \cos(\phi). \quad (3.21)$$

Por lo tanto, la transmitancia [Ec. (2.36)] para el sistema del modelo mixto de Fibonacci conectado a dos saturadores periódicos infinitos es [Maciá, *et al.*, 1996]

$$T(E, N) = \frac{1}{1 + [(1 - \gamma^2)^2 / (4 - E)\gamma^2] \sin^2(N\phi)}, \quad (3.22)$$

de la cual la condición de transmitancia unitaria [$T(E, N) = 1$] es $N\phi = K\pi$. Para el caso de que $\phi = k\pi$, donde N y $k = K/N$ son números enteros, las funciones de onda de los estados transparentes tienen un envolvente periódico [Huang, *et al.*, 1998] y las condiciones de los estados transparentes son la ecuación (3.16) y

$$E^2 - \alpha^2 = 4t^2 \cos^2(k\pi). \quad (3.23)$$

Por otro lado, el transporte electrónico en redes de tamaño finito ($\sim 10^3$) se ha estudiado para $k = 2$ y 3 dentro del modelo mixto de Fibonacci [Oviedo, 2001] y he reproducido los principales resultados de dicho estudio usando el método de renormalización como una verificación del método. A continuación veremos el espectro de conductividad eléctrica dc para $k = 4$.

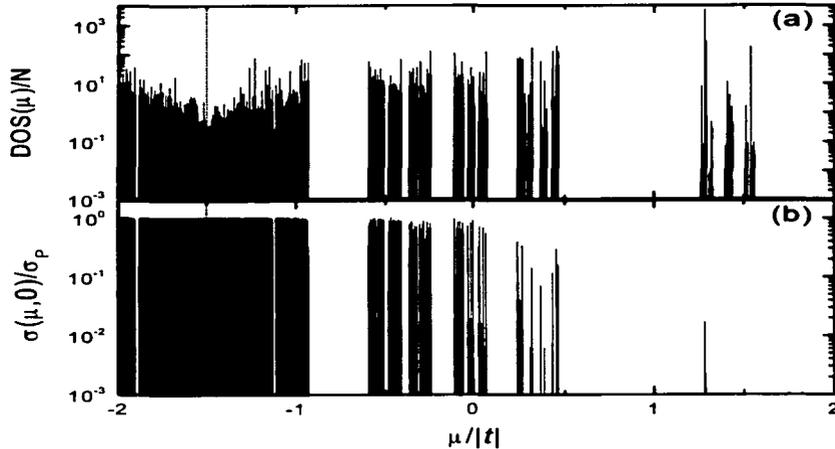


Fig. III.2 (a) Densidad de estados (DOS) y (b) conductividad de Kubo dc normalizada [$\sigma(\mu, 0)/\sigma_P$] para una red mixta de Fibonacci de generación $n = 41$ (267914296 átomos) con $k = 4$, $\alpha = 0.5|t|$ y $\gamma = \sqrt{2}$, conectado a dos saturadores periódicos de 10^{20} átomos con $\alpha = 0$ e integral de salto t . Ambos espectros contienen 10^5 datos y la parte imaginaria de la energía es de $Im(E) = 10^{-11}|t|$. El estado transparente se indica por una línea punteada ($E_T = -1.5|t|$).

En las figuras III.2(a) y III.2(b) se representan respectivamente la densidad de estados (DOS) normalizada y la conductividad eléctrica dc ($\sigma(\mu, 0)/\sigma_P$), ambas en escala logarítmica, para una red mixta de Fibonacci con auto-energía $\alpha = 0.5|t|$, $\gamma = \sqrt{2}$ y generación $n = 41$ ($\sim 10^8$ átomos). El espectro contiene 10^5 datos y los saturadores periódicos semi-infinitos son obtenidos numéricamente usando cadenas de generación $n = 100$, cuyo número de átomos es 10^{20} . La parte imaginaria de la energía en la función de Green es $10^{-11}|t|$. En general, los parámetros de las cadenas periódicas en esta tesis son: la auto energía nula $\alpha_p = 0$ y la integral de salto $t_p = -1.0|t|$. Por otro lado, la energía del estado transparente (E_T) se encuentra en $E_F = -1.5|t|$, la cual se indica por una línea punteada en las figuras. Nótese primero al considerar una red mixta de Fibonacci con 267914296 átomos ($n = 41$), la estructura de bandas multifractal es muy fina y en consecuencia un número finito de datos no puede mostrar las características completas del espectro, tal es el caso del espectro de la conductividad dc alrededor de $\mu = 1.4|t|$, puesto que las minibandas de conducción son más angostas que las de la densidad de estados como ocurre en los sistemas desordenados. Asimismo, se observa

que alrededor del estado transparente ambos espectros presentan un comportamiento casi constante, el cual es analizado a continuación.

3.4 Escalamiento

En esta sección analizaremos el comportamiento de la conductividad eléctrica con el tamaño del sistema. En las figuras III.3(a) y III.3(b) se muestran respectivamente las ampliaciones de la DOS y de la conductividad de Kubo dc alrededor del estado transparente, para las generaciones $n = 6l - 1$ (círculos); $6l, 6l + 1, 6l - 2$ (línea negra); $6l + 2$ (línea gris); y $6l + 3$ (línea gris claro), donde $l = 1, 2, 3, \dots$. Nótese que hay un comportamiento oscilatorio periódico con el mismo período de energía dado por $\Delta = 4.546|t|/(N - 1)$ y está presente en ambos espectros amplificados. El espectro de conductividad dc puede ser reproducido razonablemente bien evaluando la fórmula de transmitancia para el modelo mixto de Fibonacci [Ec. (3.22)], como se muestra en la figura III.3(c), la cual tiene una pequeña diferencia con respecto a la Fig. III.3(b), debido a que las matrices de transferencia casi conmutan para energías cercanas a la del estado transparente E_T , considerando que $N \gg 1$. El comportamiento oscilatorio general puede ser explicado considerando que $N\phi(E_T) = K\pi + (r/k)\pi$, $(\mu - E_T)/|t| \ll 1$ y $\phi(\mu) - \phi(E_T) \ll 1$, donde $r = 0, 1, 2, \dots, k - 1$ y $N = Kk + r$. Así que,

$$\cos \phi(\mu) \simeq \cos \phi(E_T) - [\phi(\mu) - \phi(E_T)] \sin \phi(E_T) \quad (3.24)$$

y

$$\frac{\sqrt{\mu^2 - \alpha^2}}{2|t|} \simeq \frac{\sqrt{E_T^2 - \alpha^2}}{2|t|} \left(1 + 2 \frac{|t|E_T(\mu - E_T)}{E_T^2 - \alpha^2} \frac{1}{|t|} \right). \quad (3.25)$$

Entonces, la definición de $\phi(\mu)$ y $2|t| \cos \phi(\mu) = \sqrt{\mu^2 - \alpha^2}$ conduce a

$$\phi(\mu) - \phi(E_T) \simeq - \frac{E_T}{4|t| \sin \phi(E_T) \cos \phi(E_T)} \frac{(\mu - E_T)}{|t|} = \Lambda \frac{(\mu - E_T)}{|t|}, \quad (3.26)$$

donde $\Lambda \equiv -E_T / \{2|t| \sin[2\phi(E_T)]\}$. En consecuencia, para $N \rightarrow \infty$,

$$T(\mu, N) \rightarrow \left[1 + \frac{(1 - \gamma^2)^2 \sin^2 [\Lambda\varepsilon + \frac{\pi}{k}\pi]}{[4 - (E_T/t)^2] \gamma^2} \right]^{-1}, \quad (3.27)$$

donde $\varepsilon \equiv N(\mu - E_T)/|t|$ y μ en el denominador de la ecuación (3.22) ha sido reemplazada por E_T , porque $(\mu - E_T)/|t| \ll 1$. Observe que la transmitancia o la conductividad es una función oscilante de ε y escala con el inverso del tamaño del sistema en la vecindad del estado transparente. La fase de estas oscilaciones es determinado por r . Para el caso $k = 4$, $\phi(E_T) = \pi/4$. Así que para la generación $n = 6l - 1$, $N(n)$ es

múltiplo de 4 y entonces $r = 0$; para $n = 6l, 6l + 1$ y $6l - 2$, $r = 1$; para $n = 6l + 2$, $r = 2$; y finalmente para $n = 6l + 3$, $r = 3$.

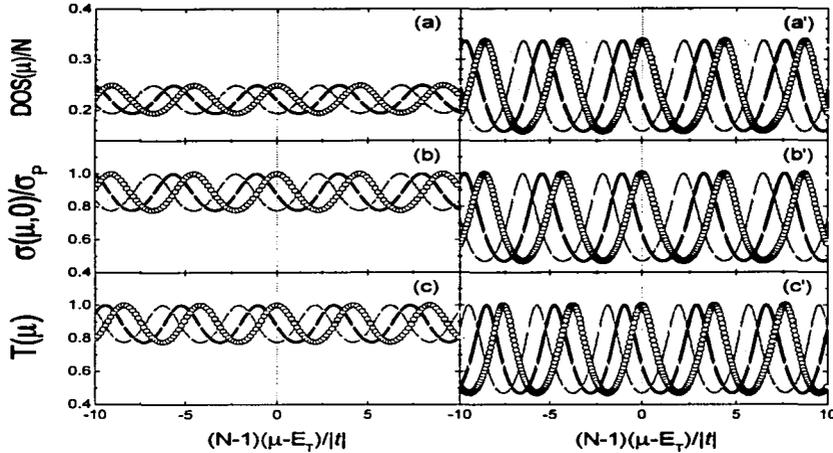


Fig. III.3 Amplificaciones de (a) la densidad de estados (DOS) y (b) la conductividad de Kubo dc (σ) alrededor del estado transparente, para las generaciones $n = 6l - 1$ (círculos); $6l, 6l + 1, 6l - 2$ (línea negra); $6l + 2$ (línea gris); y $6l + 3$ (línea gris claro), para una red mixta de Fibonacci con los mismos parámetros del hamiltoniano como los de la figura III.2, siendo l un número entero. Estos espectros son comparados con aquel obtenido por la evaluación de la ecuación de transmitancia y mostrado en Fig. III.3(c). Los correspondiente espectros para una red mixta de Fibonacci con $\alpha = 0.85|t|$, $\gamma = 1.25\sqrt{2}$ y $E_T = -1.65|t|$, son mostrados en las figuras (a'), (b') y (c').

Además, la amplitud de estas oscilaciones periódicas se incrementa cuando el parámetro de diversidad química (α) del sistema crece, hecho que puede observarse en las figuras III.3(a'), III.3(b') y III.3(c') para una red mixta de Fibonacci con $\alpha = 0.85|t|$, $\gamma = 1.25\sqrt{2}$, y $E_T = -1.65|t|$. Es importante resaltar que el espectro alrededor del estado transparente es invariante ante escala a pesar que el espectro total no lo es.

Con el fin de analizar las propiedades globales del espectro, introducimos el promedio de la conductividad dc de la siguiente forma [Sánchez, *et al.*, 2001]:

$$\langle \sigma(\mu, 0) \rangle = \frac{1}{N_\mu} \sum_{j=1}^{N_\mu} \sigma(\mu_j, 0), \quad (3.28)$$

donde μ_j se elige uniformemente en el intervalo $[-2|t|, 2|t|]$, el cual corresponde a la ventana de transmisión de los saturadores periódicos. El número de energías que contribuyen significativamente al promedio puede ser cuantificado usando la razón de participación de conductividad (CPR) definida por

$$CPR = \frac{\left[\sum_{j=1}^{N_\mu} \sigma^2(\mu_j, 0) \right]^2}{N_\mu \sum_{j=1}^{N_\mu} \sigma^4(\mu_j, 0)} \quad (3.29)$$

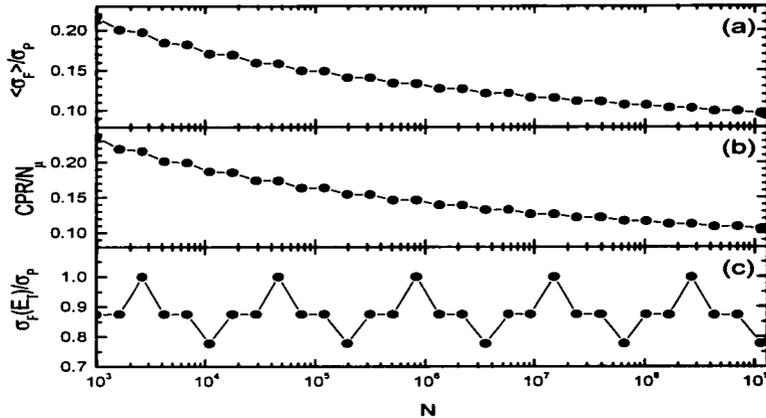


Fig. III.4(a) el promedio de la conductividad dc ($\langle \sigma(\mu, 0) \rangle$), III.4(b) la razón de participación de la conductividad (CPR) y III.4(c) la conductividad dc del estado transparente ($\sigma(E_T, 0)$) como una función del tamaño del sistema para la misma red de Fibonacci de la figura III.2 y $N_\mu = 10^5$.

En las figuras III.4(a), III.4(b), y III.4(c), el promedio de la conductividad dc ($\langle \sigma(\mu, 0) \rangle$), la razón de participación de conductividad (CPR) y la conductividad dc en la energía del estado transparente ($\sigma(E_T, 0)$) son respectivamente graficados como función del tamaño del sistema para $N_\mu = 10^5$ y la misma red mixta de Fibonacci de la figura III.2. Nótese que el promedio de la conductividad decae, lo cual puede estar relacionado a la apertura de brechas cuando la red crece. Esta posible razón ha sido confirmada por el CPR . En contraste al comportamiento monótonamente decreciente, la conductividad

dc evaluada en la energía del estado transparente ($E_T = -1.5|t|$) oscila periódicamente, porque para la red mixta de Fibonacci con $k = 4$ el sistema tiene un coeficiente de transmisión unitario cada seis generaciones, ya que $k = 4$ es divisor de N para las generaciones $n = 6l - 1$, con $l = 1, 2, 3, \dots$ [Huang, *et al.*, 1998]. El comportamiento oscilatorio de la conductividad dc normalizada mostrado en la Fig. III.4(c) es confirmado por la ecuación (3.22), ya que la conductividad dc es proporcional a la transmitancia a través de la fórmula de Landauer y ésta concuerda muy bien con la calculada por medio de la fórmula de Kubo-Greenwood [Oviedo, *et al.*, 2000]. En la siguiente sección discutiremos la conductividad ac y su sensibilidad a las condiciones de frontera será investigada.

3.5 Condiciones a la frontera

Un tema interesante de estudio, es el comportamiento de los estados transparentes bajo perturbaciones, tales como la aplicación de los campos externos oscilantes, ya que la conductividad ac es muy sensible a la naturaleza de la distribución de los valores propios y a la localización de las funciones de onda cercanas a la energía de Fermi. En general, la conductividad ac a temperatura cero no sólo depende de los estados en el nivel de Fermi, sino de la estructura global del espectro [Wang, *et al.*, 2001a]. En figura III.5 se muestra la conductividad ac del estado transparente para tres redes mixtas de Fibonacci con las mismas auto energías e integrales de salto como en la figura III.2, pero diferentes condiciones a la frontera, es decir, sistemas de (a') 4807526976 átomos sin saturadores, (b') 267914296 átomos conectado a dos cadenas periódicas de 2269806340 átomos, y (c') 267914296 átomos saturado por dos cadenas periódicas semi-infinitas de 10^{20} átomos. Las figuras III.5(a), III.5(b) y III.5(c) muestran los resultados obtenidos para un sistema periódico con $\mu = 0$ y las mismas longitudes y condiciones a la frontera como en las figuras III.5(a'), III.5(b') y III.5(c'), respectivamente. Obsérvese que en las figuras III.5(a) y III.5(b) los sistemas incluyendo los saturadores tienen el mismo número total de átomos, entonces los picos de resonancia se ubican en las mismas frecuencias, debido a que los espectros de eigenvalores son los mismos y los picos de resonancia son determinados por la regla de oro de Fermi [Economou, 1983]. Sin embargo, sus amplitudes son muy diferentes, porque la fórmula de Kubo es evaluada sobre longitudes de sistema diferentes. Además, los mínimos de las figuras III.5(b) y III.5(c) parecen estar localizados en los mismos valores de frecuencia excepto que en la figura III.5(c) se observa un comportamiento continuo debido a la presencia de los saturadores casi infinitos. Para el último caso, la conductividad ac está dada por la ecuación (3.3). Todas estas características son esencialmente preservadas para los estados transparentes como se muestra en las figuras III.5(a'), III.5(b') y III.5(c'), excepto por una compresión del espectro debido a la presencia de las brechas energéticas en el espectro de eigenvalores de la red mixta de Fibonacci.

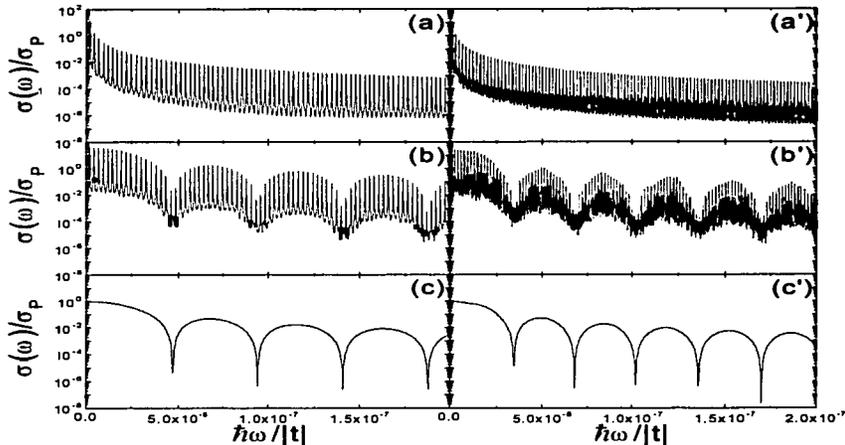


Fig. III.5 Conductividades de Kubo ac del estado transparente ($\mu = E_T$) para tres redes mixtas de Fibonacci con las mismas energías e integrales de salto como los de la figura III.2 pero diferentes condiciones a la frontera, es decir, (a') 4807526976 átomos ($n = 47$) sin saturadores, (b') 267914296 átomos ($n = 41$) conectado a dos cadenas periódicas de 2269806340 átomos y (c) 267914296 átomos saturado por dos cadenas periódicas de 10^{20} átomos. Las figuras (a), (b) y (c) muestran los resultados correspondientes obtenidos para sistemas periódicos con $\mu = 0$.

En la figura III.6, la conductividad de Kubo ac ($\sigma(\mu, \omega)/\sigma_P$) de dos tipos de estados no transparentes se muestra en comparación con la del estado transparente (círculos), tomando los mismos parámetros de la figura III.2. Primero, para las generaciones $n = 6l, 6l + 1$ y $6l + 4$ (triángulos hacia arriba), $n = 6l + 2$ (triángulos hacia abajo) y $n = 6l + 3$ (cuadrados), las conductividades ac son evaluadas en las energías de máxima conductividad dc [ver figura III.3(b)] localizadas en $\mu = E_T - \Delta/4$, $\mu = E_T - \Delta/2$ y $\mu = E_T - 3\Delta/4$, respectivamente, siendo $\Delta = 4.546|t|/(N - 1)$. Obsérvese que estos estados casi-transparentes tienen la misma dependencia de frecuencia excepto que el valor inicial en $\omega = 0$ es estrictamente uno sólo para el estado transparente de generación $n = 6l + 5$. Cabe mencionar que las curvas escalan con el inverso del tamaño del sistema, lo cual está relacionado al escalamiento mostrado en la figura III.3, debido que la conductividad ac a temperatura cero es calculada integrando una vecindad de $\hbar\omega$ alrededor de la energía de Fermi [Ec. (3.1)]. Para el segundo caso de los esta-

dos no transparentes, es decir, de alta conductividad dc con $\mu \neq E_T$ en la misma red mixta de Fibonacci de generación 41 como en la figura III.2, se observa un comportamiento ruidoso para $\mu_1 = -0.591763398|t|$ (línea gris) y $\mu_2 = -0.10860000001|t|$ (línea gris claro), con $\sigma(\mu_1, 0)/\sigma_P = 0.9701$ y $\sigma(\mu_2, 0)/\sigma_P = 0.95$. Es importante remarcar que la conductividad ac de estos estados no es invariante ante cambio de escala y decae mucho más rápido en comparación con la del estado transparente. En general, la conductividad ac no sólo depende del estado en el nivel de Fermi, sino también de la condición de localización de los estados alrededor de este. Una gráfica log-log de la conductividad ac en el límite de bajas frecuencias se muestra en el recuadro de la figura III.6, donde los cálculos fueron realizados usando $Im(E) = 10^{-15}|t|$. Nótese que los estados transparentes y casi transparentes tienen el mismo comportamiento en el límite de bajas frecuencias [$(N-1)\hbar\omega/|t| \ll 1$], la cual sigue la misma relación que en el caso periódico con $\mu = 0$ [ver Ec. (3.3)] [Wang, *et al.*, 2001b],

$$\sigma(0, \omega) = \frac{e^2 a (N-1)}{\pi \hbar} \left\{ 1 - \frac{1}{48} \left[\frac{(N-1)\hbar\omega}{|t|} \right]^2 \right\}, \quad (3.30)$$

excepto por el coeficiente 0.08484 en lugar de 1/48. Asimismo, los coeficientes para los estados no transparentes con μ_1 y μ_2 son 22.3934 y 69.0557, respectivamente. Cabe mencionar que los mayores coeficientes de los estados no transparentes confirman el dramático decaimiento de su conductividad ac cuando un campo eléctrico oscilante es aplicado. Por otro lado, la Ec. (3.30) tiene la misma forma que la Ec. (2.9) de la teoría de Drude discutida en la sección II.1.

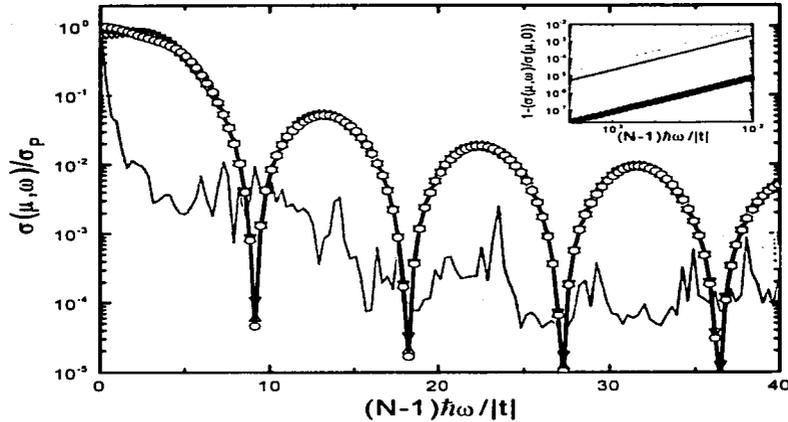


Fig. III.6 Conductividad de Kubo ac con los mismos parámetros de la red mixta de Fibonacci de la figura III.2 pero con $n = 6l, 6l + 1, 6l + 4$ (triángulos hacia arriba), $n = 6l + 2$ (triángulos hacia abajo) y $n = 6l + 3$ (cuadrados) evaluados en $\mu = E_T - \Delta/4, E_T - \Delta/2$ y $E_T - 3\Delta/4$, respectivamente, en comparación con el estado transparente (círculos), donde $\Delta = 4.546|t|/(N-1)$. La conductividad ac de los estados no transparentes con $\mu_1 = -0.591763398|t|$ (línea gris) y $\mu_2 = -0.10860000001|t|$ (línea gris claro) son también mostrados. En el recuadro se presenta una grafica log-log en un régimen de bajas frecuencias.

3.6 Modelo de enlaces

Se ha encontrado la existencia de estados transparentes con transmitancia uno en el modelo mixto de Fibonacci (ver sección III.3). En esta sección vamos a demostrar que para el modelo de enlaces también hay estados transparentes, aún cuando las matrices de transferencia del sistema no conmuten. Partimos de la ecuación de transmitancia dada en la sección II.3, particularmente para $E = 0$ la ecuación (2.36) puede escribirse como

$$T(E = 0) = \frac{4}{(\tau_{21} - \tau_{12})^2 + (\tau_{22} + \tau_{11})^2}, \quad (3.31)$$

donde los elementos de la matriz de transferencia total del modelo de enlaces $(\tau_{i,j})$,

considerando que las auto energías son igual a cero, están dados por

$$\tau_{i,j}(n) = s \left(\left\lfloor \frac{x}{2} \right\rfloor + |i - j| \right) \{ -s(x+1) + \\ + s(x) [-(-1)^{\lfloor \frac{x}{2} \rfloor} s(n+i)\gamma + (-1)^{\lfloor \frac{x}{2} \rfloor} s(n+i-1)\gamma^{-1}] \}, \quad (3.32)$$

donde $i = 1, 2, j = 1, 2, \gamma = t_A/t_B, s(k) = [1 + (-1)^k]/2$, y los números enteros $x = n \bmod 3 \in [0, 2], y = (n+2) \bmod 6 \in [0, 5]$ y $z = (n+5) \bmod 6 \in [0, 5]$. Asimismo, $\lfloor a \rfloor$ es el entero menor y más próximo al número real a . Ahora, sustituyendo cada uno de los términos del producto de las matrices de transferencia en la ecuación (3.31) obtenemos la transmitancia para el modelo de enlaces que sigue una secuencia de Fibonacci

$$T(E=0) = \frac{4}{s(x)(\gamma + \gamma^{-1})^2 + 4s(x+1)}. \quad (3.33)$$

Por lo que la transmitancia es igual a uno cuando $x = 1$, es decir, para generaciones $n = 1, 4, 7, \dots$ existe un estado transparente en el modelo de enlaces a $E = 0$. Este resultado ha sido confirmado por los cálculos numéricos usando el método de renormalización desarrollado especialmente para el modelo de enlaces [ver apéndice C].

3.7 Centro de fractalidad

Para el modelo de enlaces, una amplificación de la conductividad dc a temperatura cero alrededor del estado transparente ($E_T = 0$) se muestra en la figura III.7(c) en comparación con la de una red periódica III.7(a) y la de una red mixta de Fibonacci III.7(b), donde la parte imaginaria de la energía en la función de Green es de $10^{-11}|t|$, las auto-energías de sitio son $\alpha = 0$ y el cociente de los parámetros de salto $\gamma = 1$ para el caso periódico, $\gamma = t_{AA}/t_{BA} = 0.85$ para el caso mixto con $k = 2$, y finalmente $\gamma = t_A/t_B = 0.85$ para el caso de enlaces. Las correspondientes conductividades ac a temperatura cero son mostradas en las figuras III.7(a'), III.7(b') y III.7(c') para el caso periódico, el mixto y el de enlaces, respectivamente. Obsérvese que la conductividad dc para el caso de enlaces no oscila periódicamente como ocurre en el caso periódico y en el mixto. También, los mínimos en el espectro ac no tienden a cero como sucede en las figuras III.7(a') y III.7(b'). Este hecho puede ser debido a que en el problema de enlaces el estado transparente es localizado en un centro de fractalidad [Sánchez, *et al.*, 2003a].

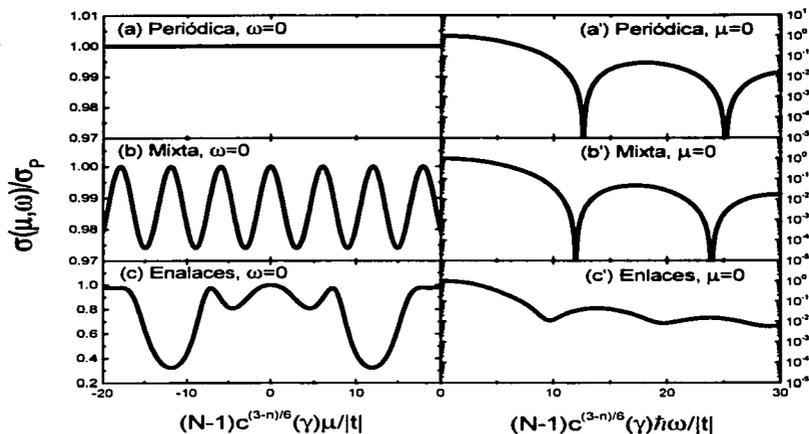


Fig. III.7 Conductividad dc y ac para las redes periódica (a) y (a'), mixta de Fibonacci (b) y (b') y Fibonacci de enlaces (c) y (c'), respectivamente.

Por otro lado, para el caso de enlaces el espectro de conductividad alrededor del estado transparente se escala también con el inverso del tamaño de sistema -como sucede en el caso mixto-, excepto por un factor c que depende de γ y del número de generación n , es decir, $c^{(3-n)/6}(\gamma)$. En particular, $c = 1$ para el caso periódico y el mixto, ya que el estado transparente en el problema de enlaces no está rodeado de estados de alta conductividad como sucede en el caso mixto. Creemos que este factor $c(\gamma)$ podría estar relacionado con la dimensionalidad fraccionaria del espectro de conductividad dc alrededor del estado transparente. En la figura III.8 se muestra el factor $c(\gamma)$ en comparación con la solución analítica [Kohmoto, *et al.*, 1987] de la dimensión fractal de la densidad de estados alrededor de $E = 0$ [$d(\gamma)$]. Nótese la similitud de comportamiento entre $c(\gamma)$ y $d(\gamma)$, a pesar de que la $d(\gamma)$ no es la dimensión fractal del espectro de conductividad dc .

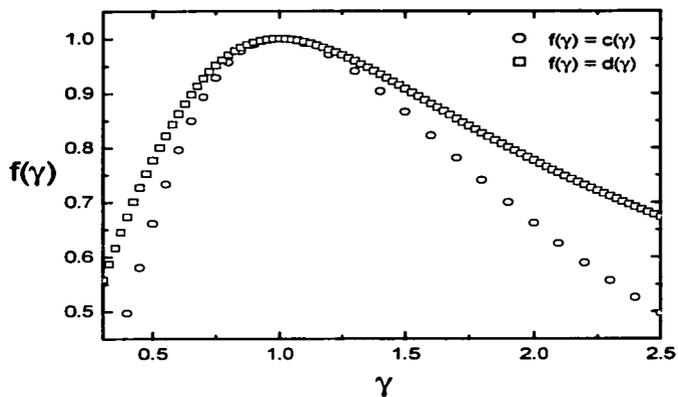


Fig. III.8 Muestra el factor $c(\gamma)$ del modelo de enlaces y la dimensión fractal de densidad de estados $d(\gamma)$.

Capítulo 4

Conductividad en Redes Bidimensionales

Hasta aquí hemos analizado la conducción electrónica en sistemas unidimensionales y sabemos que dicha conducción es extremadamente peculiar por la ausencia de anillos en el sistema, es decir, la falta de caminos alternos para el transporte electrónico cuando existe un defecto local. Por lo que es importante estudiar sistemas más allá de una dimensión, y quizás el caso más simple sería redes bidimensionales. Se ha intentado aplicar las ideas del grupo de renormalización a sistemas cuasiperiódicos bidimensionales y se ha encontrado que todos los sitios de la frontera son necesarios para el proceso de renormalización, por lo que el grado de libertad de dicho proceso crece como el perímetro del sistema [Naumis, *et al.*, 1994]. En este capítulo investigaremos el transporte electrónico en superredes periódicas y cuasiperiódicas, así como redes doblemente cuasiperiódicas, utilizando el método de convolución.

4.1 Fórmula de Kubo en dos dimensiones

La conductividad eléctrica en sistemas bidimensionales puede escribirse dentro del formalismo de Kubo como [Ferry, 1991]

$$\sigma^{2D}(\mu, \omega=0) = \frac{2e^2\hbar}{\pi\Omega m^2} \sum_{rs} \sum_{ijkl} \text{Im}[G_{ij,rs}(\mu)] p_{jk} \text{Im}[G_{kl,rs}(\mu)] p_{li}, \quad (4.1)$$

donde $G_{ij,kl}(\mu) = G(\mathbf{r}_{ik}, \mathbf{r}_{jl}; \mu)$, Ω es el volumen del sistema en dos dimensiones y p_{jk} son elementos de la matriz del operador de momento definida en la ecuación (3.2). Utilizando las relaciones (3.8) y (3.2), la ecuación (4.1) se reescribe como

$$\begin{aligned} \sigma^{2D}(\mu, 0) = & \frac{e^2 a^2}{2\pi\Omega\hbar} \sum_{ijrs} t_{i+1,i} t_{j+1,j} \{ G^+(\mathbf{r}_{i+1r}, \mathbf{r}_{js}; \mu) G^+(\mathbf{r}_{j+1s}, \mathbf{r}_{ir}; \mu) - \\ & - G^+(\mathbf{r}_{ir}, \mathbf{r}_{js}; \mu) G^+(\mathbf{r}_{j+1s}, \mathbf{r}_{i+1r}; \mu) - G^+(\mathbf{r}_{i+1r}, \mathbf{r}_{j+1s}; \mu) G^+(\mathbf{r}_{js}, \mathbf{r}_{ir}; \mu) + \\ & + G^+(\mathbf{r}_{ir}, \mathbf{r}_{j+1s}; \mu) G^+(\mathbf{r}_{js}, \mathbf{r}_{i+1r}; \mu) - G^+(\mathbf{r}_{i+1r}, \mathbf{r}_{js}; \mu) G^-(\mathbf{r}_{j+1s}, \mathbf{r}_{ir}; \mu) + \\ & + G^+(\mathbf{r}_{ir}, \mathbf{r}_{js}; \mu) G^-(\mathbf{r}_{j+1s}, \mathbf{r}_{i+1r}; \mu) + G^+(\mathbf{r}_{i+1r}, \mathbf{r}_{j+1s}; \mu) G^-(\mathbf{r}_{js}, \mathbf{r}_{ir}; \mu) - \\ & - G^+(\mathbf{r}_{ir}, \mathbf{r}_{j+1s}; \mu) G^-(\mathbf{r}_{js}, \mathbf{r}_{i+1r}; \mu) - G^-(\mathbf{r}_{i+1r}, \mathbf{r}_{js}; \mu) G^+(\mathbf{r}_{j+1s}, \mathbf{r}_{ir}; \mu) + \\ & + G^-(\mathbf{r}_{ir}, \mathbf{r}_{js}; \mu) G^+(\mathbf{r}_{j+1s}, \mathbf{r}_{i+1r}; \mu) + G^-(\mathbf{r}_{i+1r}, \mathbf{r}_{j+1s}; \mu) G^+(\mathbf{r}_{js}, \mathbf{r}_{ir}; \mu) - \\ & - G^-(\mathbf{r}_{ir}, \mathbf{r}_{j+1s}; \mu) G^+(\mathbf{r}_{js}, \mathbf{r}_{i+1r}; \mu) + G^-(\mathbf{r}_{i+1r}, \mathbf{r}_{js}; \mu) G^-(\mathbf{r}_{j+1s}, \mathbf{r}_{ir}; \mu) - \\ & - G^-(\mathbf{r}_{ir}, \mathbf{r}_{js}; \mu) G^-(\mathbf{r}_{j+1s}, \mathbf{r}_{i+1r}; \mu) - G^-(\mathbf{r}_{i+1r}, \mathbf{r}_{j+1s}; \mu) G^-(\mathbf{r}_{js}, \mathbf{r}_{ir}; \mu) + \\ & + G^-(\mathbf{r}_{ir}, \mathbf{r}_{j+1s}; \mu) G^-(\mathbf{r}_{js}, \mathbf{r}_{i+1r}; \mu) \}. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Por otro lado, para superredes cuasiperiódicas si el campo eléctrico se aplica en la dirección cuasiperiódica, la función de Green puede expresarse en términos de la transformada de Fourier aprovechando la simetría traslacional en la dirección perpendicular al campo externo, es decir

$$G^+(\mathbf{r}_{ir}, \mathbf{r}_{js}; \mu) = \frac{1}{N_{\perp}} \sum_{k_{\perp}} G^+(x_i, x_j, k_{\perp}; \mu) \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_{ir} - \mathbf{r}_{js})], \quad (4.3)$$

donde x_i es la coordenada de los planos en la dirección del campo aplicado, $\mathbf{k} = (0, k_{\perp})$ y N_{\perp} es el número de átomos en la dirección perpendicular. Ahora utilizando la ecuación (4.3) y la definición de la función delta de Kronecker,

$$\delta_{\mathbf{k},0} = \frac{1}{N_{\perp}} \sum_{\mathbf{R} \in \Omega_{\perp}} \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R})], \quad (4.4)$$

la ecuación (4.2) se expresa como

$$\begin{aligned} \sigma^{2D}(\mu, 0) = & \frac{e^2 a^2}{2\pi\Omega\hbar} \sum_{k_{\perp}} \sum_{ij} t_{i+1,i} t_{j+1,j} \{ G^+(x_{i+1}, x_j, k_{\perp}; \mu) G^+(x_{j+1}, x_i, k_{\perp}; \mu) - \\ & - G^+(x_i, x_j, k_{\perp}; \mu) G^+(x_{j+1}, x_{i+1}, k_{\perp}; \mu) - G^+(x_{i+1}, x_{j+1}, k_{\perp}; \mu) G^+(x_j, x_i, k_{\perp}; \mu) + \\ & + G^+(x_i, x_{j+1}, k_{\perp}; \mu) G^+(x_j, x_{i+1}, k_{\perp}; \mu) - G^+(x_{i+1}, x_j, k_{\perp}; \mu) G^-(x_{j+1}, x_i, k_{\perp}; \mu) + \\ & + G^+(x_i, x_j, k_{\perp}; \mu) G^-(x_{j+1}, x_{i+1}, k_{\perp}; \mu) + G^+(x_{i+1}, x_{j+1}, k_{\perp}; \mu) G^-(x_j, x_i, k_{\perp}; \mu) - \\ & - G^+(x_i, x_{j+1}, k_{\perp}; \mu) G^-(x_j, x_{i+1}, k_{\perp}; \mu) - G^-(x_{i+1}, x_j, k_{\perp}; \mu) G^+(x_{j+1}, x_i, k_{\perp}; \mu) + \\ & + G^-(x_i, x_j, k_{\perp}; \mu) G^+(x_{j+1}, x_{i+1}, k_{\perp}; \mu) + G^-(x_{i+1}, x_{j+1}, k_{\perp}; \mu) G^+(x_j, x_i, k_{\perp}; \mu) - \\ & - G^-(x_i, x_{j+1}, k_{\perp}; \mu) G^+(x_j, x_{i+1}, k_{\perp}; \mu) + G^-(x_{i+1}, x_j, k_{\perp}; \mu) G^-(x_{j+1}, x_i, k_{\perp}; \mu) - \\ & - G^-(x_i, x_j, k_{\perp}; \mu) G^-(x_{j+1}, x_{i+1}, k_{\perp}; \mu) - G^-(x_{i+1}, x_{j+1}, k_{\perp}; \mu) G^-(x_j, x_i, k_{\perp}; \mu) + \\ & + G^-(x_i, x_{j+1}, k_{\perp}; \mu) G^-(x_j, x_{i+1}, k_{\perp}; \mu) \}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

En el límite termodinámico la suma de k_{\perp} en la ecuación (4.5) se convierte en una integral como se muestra a continuación [Ashcroft, *et al.*, 1976]

$$\frac{1}{N} \sum_{k_{\perp}} \rightarrow \frac{1}{1BZ} \int dk_{\perp}, \quad (4.6)$$

donde $1BZ$ es la primera zona Brillouin. Entonces, la ecuación (4.5) puede reescribirse

como

$$\begin{aligned}
\sigma^{2D}(\mu, 0) = & \frac{e^2 a^2}{4\pi^2 \Omega_{\parallel} \hbar} \int dk_{\perp} \sum_{ij} t_{i+1,i} t_{j+1,j} \{ G_{i+1,j}^+(k_{\perp}; \mu) G_{j+1,i}^+(k_{\perp}; \mu) - \\
& - G_{i,j}^+(k_{\perp}; \mu) G_{j+1,i+1}^+(k_{\perp}; \mu) - G_{i+1,j+1}^+(k_{\perp}; \mu) G_{j,i}^+(k_{\perp}; \mu) + \\
& + G_{i,j+1}^+(k_{\perp}; \mu) G_{j,i+1}^+(k_{\perp}; \mu) - G_{i+1,j}^+(k_{\perp}; \mu) G_{j+1,i}^-(k_{\perp}; \mu) + \\
& + G_{i,j}^+(k_{\perp}; \mu) G_{j+1,i+1}^-(k_{\perp}; \mu) + G_{i+1,j+1}^+(k_{\perp}; \mu) G_{j,i}^-(k_{\perp}; \mu) - \\
& - G_{i,j+1}^+(k_{\perp}; \mu) G_{j,i+1}^-(k_{\perp}; \mu) - G_{i+1,j}^-(k_{\perp}; \mu) G_{j+1,i}^+(k_{\perp}; \mu) + \\
& + G_{i,j}^-(k_{\perp}; \mu) G_{j+1,i+1}^+(k_{\perp}; \mu) + G_{i+1,j+1}^-(k_{\perp}; \mu) G_{j,i}^+(k_{\perp}; \mu) - \\
& - G_{i,j+1}^-(k_{\perp}; \mu) G_{j,i+1}^+(k_{\perp}; \mu) + G_{i+1,j}^-(k_{\perp}; \mu) G_{j+1,i}^-(k_{\perp}; \mu) - \\
& - G_{i,j}^-(k_{\perp}; \mu) G_{j+1,i+1}^-(k_{\perp}; \mu) - G_{i+1,j+1}^-(k_{\perp}; \mu) G_{j,i}^-(k_{\perp}; \mu) + \\
& + G_{i,j+1}^-(k_{\perp}; \mu) G_{j,i+1}^-(k_{\perp}; \mu) \}, \tag{4.7}
\end{aligned}$$

donde $G_{i,j}^{\pm}(k_{\perp}; \mu) = G^{\pm}(x_i, x_j, k_{\perp}; \mu)$ y Ω_{\parallel} es el volumen en la dirección paralela al campo. Por otro lado, comparando las ecuaciones (4.7) y (3.5), y teniendo en cuenta la definición (3.8) y $\omega = 0$, la ecuación (4.7) puede escribirse como

$$\sigma^{2D}(\mu, 0) = \frac{1}{2\pi} \int dk_{\perp} \sigma_{\parallel}^{1D}(k_{\perp}; \mu, 0), \tag{4.8}$$

donde

$$\begin{aligned}
\sigma_{\parallel}^{1D}(k_{\perp}; \mu, 0) = & - \frac{2e^2 a^2}{\pi \Omega_{\parallel} \hbar} \sum_{ij} t_{i+1,i} t_{j+1,j} \{ \text{Im } G_{i+1,j}^+(k_{\perp}; \mu) \text{Im } G_{j+1,i}^+(k_{\perp}; \mu) - \\
& - \text{Im } G_{i,j}^+(k_{\perp}; \mu) \text{Im } G_{j+1,i+1}^+(k_{\perp}; \mu) - \\
& - \text{Im } G_{i+1,j+1}^+(k_{\perp}; \mu) \text{Im } G_{j,i}^+(k_{\perp}; \mu) + \\
& + \text{Im } G_{i,j+1}^+(k_{\perp}; \mu) \text{Im } G_{j,i+1}^+(k_{\perp}; \mu) \}. \tag{4.9}
\end{aligned}$$

Por último, partiendo de la simetría traslacional en la dirección perpendicular, la superred cuasiperiódica puede proyectarse a una cadena cuasiperiódica con una contribución adicional a las autoenergías $[2t_{\perp} \cos(k_{\perp} a)]$ [Wang, *et al.*, 1988][Wang, 1989]. Por lo que

$$\sigma^{2D}(\mu, 0) = \frac{1}{2\pi} \int dk_{\perp} \sigma_{\parallel}^{1D}(\mu - 2t_{\perp} \cos(k_{\perp} a), 0). \tag{4.10}$$

En la siguiente sección se calcula la conductividad eléctrica dc de forma analítica para una red periódica.

4.2 Método de convolución

Las superredes cuasiperiódicas bidimensionales pueden construirse por un apilamiento periódico de las cadenas de Fibonacci y su conductividad eléctrica en la dirección cuasiperiódica está dada en la ecuación (4.10). Haciendo un cambio de variable $E = \mu - 2t_{\perp} \cos(k_{\perp}a)$, se tiene que

$$\begin{aligned}\sigma^{2D}(\mu, 0) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk_{\perp} \sigma_{\parallel}^{1D}[\mu - 2t_{\perp} \cos(k_{\perp}a), 0] \\ &= \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{\infty} \sigma_{\parallel}^{1D}(E, 0) DOS_{\perp}^{1D}(\mu - E) dE,\end{aligned}\quad (4.11)$$

donde σ_{\parallel}^{1D} es la conductividad unidimensional en la dirección del campo eléctrico aplicado y DOS_{\perp}^{1D} es la densidad de estados de una cadena periódica, la cual está dada por

$$DOS_{\perp}^{1D}(E) = \frac{\theta(|2t_{\perp}| - |E|)}{\pi \sqrt{4t_{\perp}^2 - E^2}}, \text{ donde } \theta(x) = \begin{cases} 1, & \text{si } x \geq 0 \\ 0, & \text{si } x < 0 \end{cases}.\quad (4.12)$$

Es importante enfatizar que la ecuación (4.11) forma parte de un formalismo general de convolución desarrollado por W.A. y M.K. Schwalm [Schwalm, *et al.*, 1988], el cual afirma que si el hamiltoniano es separable, es decir, $\mathbf{H}_e = \mathbf{H} \otimes \mathbf{I}_{\mathbf{K}} + \mathbf{I}_{\mathbf{H}} \otimes \mathbf{K}$, entonces sus eigenfunciones son un producto de las eigenfunciones de cada hamiltoniano que lo componen (\mathbf{H} , \mathbf{K}) y sus eigenvalores son la suma de los eigenvalores de estos dos hamiltonianos. Además, ellos muestran que la densidad de estados y la conductividad eléctrica se pueden escribir como

$$DOS^{(\mathbf{H}_e)}(E) = \int_{-\infty}^{\infty} DOS^{(\mathbf{H})}(x) DOS^{(\mathbf{K})}(E - x) dx,\quad (4.13)$$

$$\sigma^{(\mathbf{H}_e)}(E) = \int_{-\infty}^{\infty} \sigma^{(\mathbf{H})}(x) DOS^{(\mathbf{K})}(E - x) dx.\quad (4.14)$$

En particular, para el caso de superredes periódicas, considerando $t_{\perp} = t_n = t$ y la Ec. (3.4), obtenemos una expresión analítica de la conductividad dc en redes periódicas de dos dimensiones [Sánchez, *et al.*, 2002]:

$$\sigma^{2D}(\mu, 0) = \sigma_P \int_{-2t}^{2t} \frac{\theta(|2t| - |\mu - E|) dE}{\pi \sqrt{4t^2 - (\mu - E)^2}} = \frac{\sigma_P}{\pi} \cos^{-1} \left(\frac{|\mu| - 2t}{2t} \right) \theta(|4t| - |\mu|).\quad (4.15)$$

Para la conductividad ac , se sustituye la Ec. (3.3) en la integral de la Ec. (4.11) y esta última se calcula numéricamente. En la figura IV.1 se muestra la conductividad ac normalizada en redes periódicas de una (círculos) y dos (triángulos) dimensiones. Nótese que los mínimos profundos de la conductividad ac se presentan sólo en los sistemas

unidimensionales, debido a la interferencia destructiva completa en esas frecuencias y no así en sistemas bidimensionales, en los cuales se presentan mínimos suavizados que no tienden a cero.

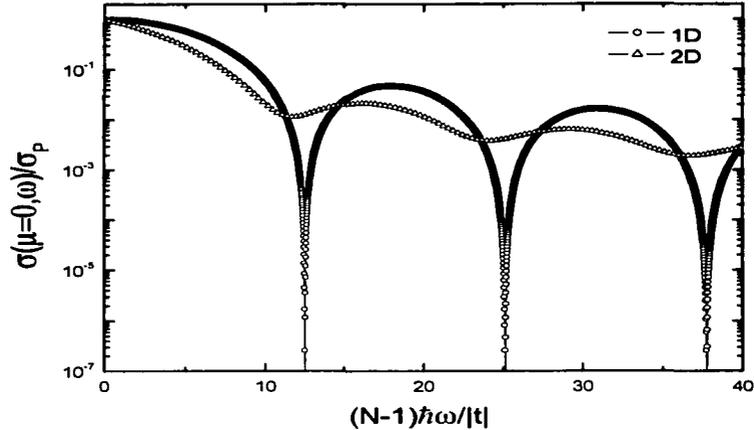


Fig. IV.1 Conductividad ac en sistemas periódicos de una (círculos) y dos (triángulos) dimensiones.

Asimismo, en la figura IV.2 se muestra la conductividad ac de sistemas periódicos de una y dos dimensiones como función de la energía de Fermi (μ) para diferentes cortes de frecuencia, donde se observan oscilaciones drásticas de σ en función de μ para cualquier frecuencia en sistemas de una dimensión y dichas oscilaciones son suavizadas en sistemas bidimensionales.

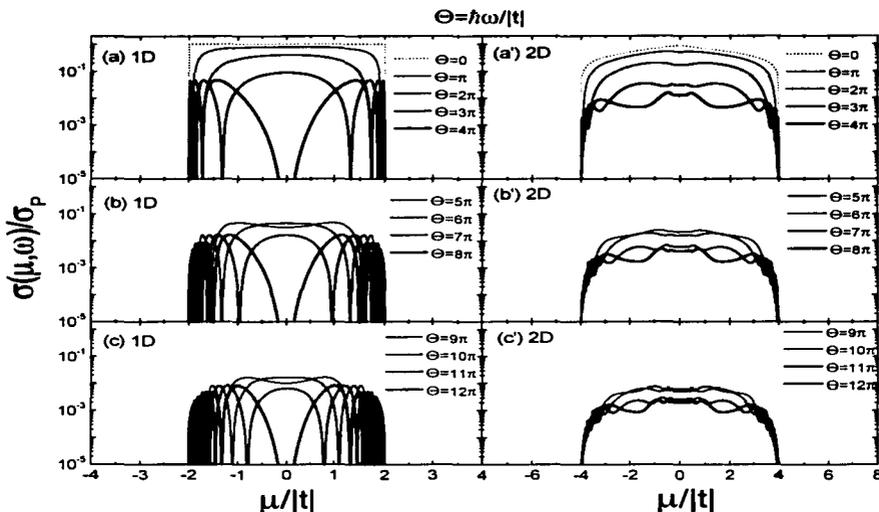


Fig. IV.2 Conductividad σc en sistemas periódicos de una y dos dimensiones para diferentes cortes de frecuencia.

4.3 Superredes de Fibonacci

En esta sección analizaremos la transición de una a dos dimensiones y sus consecuencias en las propiedades como la conductividad de Kubo. Utilizando el método de renormalización, hemos calculado la conductividad eléctrica dc de una red mixta de Fibonacci con $k = 3$, conectada a dos saturadores periódicos con integrales de salto t y auto-energías nulas. La figura IV.3(a) muestra su conductividad de Kubo dc a temperatura cero como una función de la posición de la energía de Fermi, con $\alpha = 0.225|t|$, $t_{AA} = 1.25t$, $t_{AB} = t_{BA} = t$ y $n = 35$. El espectro contiene 800000 datos calculados en cuádruple precisión. La parte imaginaria de la energía en la función de Green es de $10^{-10}|t|$ y la energía del estado transparente se encuentra en $E_T = -1.025|t|$, la cual se indica por una línea punteada. Observe que la estructura de bandas es muy fina en comparación con la obtenida en la referencia [Oviedo, *et al.*, 2000], ya que ahora

el sistema contiene 14930352 átomos para $n = 35$. Un comportamiento casi constante es encontrado en la vecindad del estado transparente. Una ampliificación de esta zona muestra un comportamiento oscilatorio Fig. IV.3(a'), el cual puede obtenerse de la Ec. (3.27). Nótese que el espectro alrededor del estado transparente escala con el inverso del tamaño del sistema. Las figuras IV.3(b), 3(c) y 3(d) muestran la conductividad Kubo dc de una superred mixta de Fibonacci bidimensional, la cual es cuasiperiódica en la dirección del campo aplicado y periódica en la dirección perpendicular. Estas figuras se obtuvieron con los mismos parámetros de la Fig. IV.3(a) variando la integral de salto perpendicular $t_{\perp} = 10^{-4}t$, $t_{\perp} = 10^{-2}t$, y $t = t_{\perp}$. Estos espectros son obtenidos integrando la ecuación (4.11). Obsérvese la transición de dimensionalidad y el suave comportamiento del espectro en Fig. IV.3(d), los cuales revelan la importancia de la dimensionalidad del sistema y sugieren que las superredes de Fibonacci no son un buen candidato para observar experimentalmente las estructuras multifractales de las bandas de conducción [Sánchez, *et al.*, 2002].

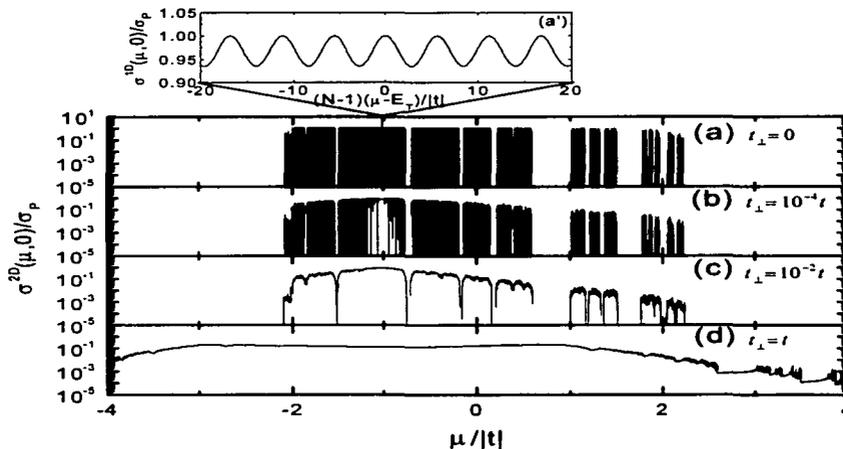


Fig. IV.3 Conductividad de un sistema de Fibonacci mixto bidimensional [(b), (c), y (d)] en comparación con una cadena de Fibonacci mixta (a) tomando los parámetros de $k=3$. En la figura V.3 (a') se muestra una ampliificación alrededor del estado transparente.

4.4 Redes doblemente cuasiperiódicas

En la presente sección investigaremos la conductividad de Kubo en redes bidimensionales doblemente cuasiperiódicas que son redes de Fibonacci de enlaces en ambas direcciones tanto paralela como perpendicular al campo eléctrico aplicado [Sánchez, *et al.*, 2003b]. En la figura IV.4 se muestran los espectros de la conductividad dc en redes doblemente cuasiperiódicas con (a') $n_{\perp} = 2$, (b') $n_{\perp} = 4$ y (c') $n_{\perp} = 6$, en comparación con los de las correspondientes superredes de Fibonacci mostradas en (a), (b) y (c). En todos los casos, los sistemas considerados fueron con $n_{\parallel} = 34$ y $\gamma = 0.7$, y los cálculos fueron realizados con una parte imaginaria de energía de la función de Green en la conductividad dc unidimensional paralela al campo eléctrico externo de $\text{Im}(E)_{\parallel} = 10^{-11}|t|$ y la correspondiente a la densidad de estados en la dirección perpendicular a dicho campo de $\text{Im}(E)_{\perp} = 10^{-3}|t|$. Las gráficas contienen 80000 datos cada una y la integral de la ecuación (4.14) fue realizada con el algoritmo de Simpson y una partición de 60000 puntos. Obsérvese que la estructura de bandas y brechas es más notoria en los espectros de doble cuasiperiodicidad [Fig. IV.4 (a')-(c')], y dicha estructura pierde su definición cuando el ancho del sistema crece.

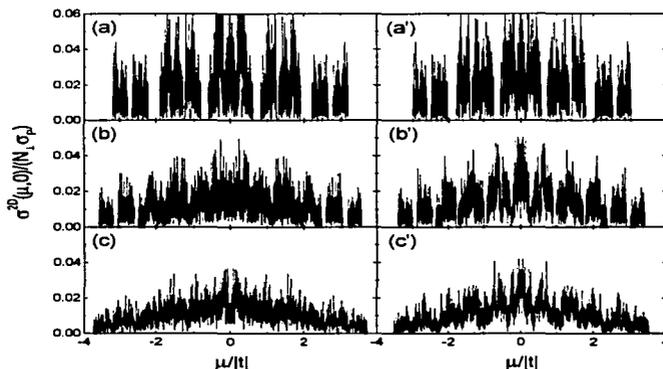


Fig. IV.4 Conductividades dc en superredes de Fibonacci con (a) $n_{\perp}=2$, (b) $n_{\perp}=4$ y (c) $n_{\perp}=6$ en comparación con las de doblemente cuasiperiódicas con (a') $n_{\perp}=2$, (b') $n_{\perp}=4$ y (c') $n_{\perp}=6$. En todos los casos los cálculos se realizaron en el modelo de enlaces con $n_{\parallel}=34$, $\gamma=0.7$, $\text{Im}(E)_{\parallel}=10^{-11}|t|$ y $\text{Im}(E)_{\perp}=10^{-3}|t|$.

Ahora, analizaremos la conductancia (G) que está relacionada con la conductividad

(σ) para sistemas bidimensionales de la forma siguiente [Datta, 1995]

$$G^{2D}(\mu) = \sigma^{2D}(\mu) \frac{L_{\perp}}{L_{\parallel}}, \quad (4.16)$$

donde L_{\perp} y L_{\parallel} es el tamaño del sistema en la dirección perpendicular y paralela al campo eléctrico aplicado, respectivamente. Con el fin de estudiar las propiedades globales de los espectros de la conductancia introducimos el promedio de la misma ($\langle G^{2D}(\mu) \rangle$) como

$$\langle G^{2D}(\mu) \rangle = \frac{\int d\mu G^{2D}(\mu) DOS^{2D}(\mu)}{\int d\mu DOS^{2D}(\mu)}. \quad (4.17)$$

En la Figura IV.5 se muestra el promedio espectral de la conductancia como función del ancho del sistema ($L_{\perp} = N_{\perp}a$) para redes periódicas (círculos), superredes de Fibonacci (cuadrados) y redes doblemente cuasiperiódicas (rombos). La longitud de estos sistemas en la dirección paralela al campo eléctrico es de 165580142 átomos, correspondiente a la generación $n = 40$, conectados a dos saturadores semi-infinitos en sus extremos. Para las redes cuasiperiódicas se ha tomado $\gamma = t_B/t_A = 0.9$. Los cálculos de la densidad de estados y de la conductividad en dos dimensiones se realizan utilizando el método de convolución [Ec. (4.13) y Ec. (4.14)], donde la parte imaginaria de la energía en conductividad eléctrica unidimensional es de $10^{-11}|t|$ y la de la $DOS(E)$ es de $10^{-2}|t|$. Estos valores se eligieron con el fin de poder realizar fácilmente la integral de la ecuación (4.17). Obsérvese que el promedio espectral de la conductancia bidimensional crece linealmente con el ancho del sistema, es decir,

$$\langle G^{2D}(\mu) \rangle = mN_{\perp} + b, \quad (4.18)$$

donde para la red periódica $m = 1.13855$ y $b = 10.02583$, para la superred de Fibonacci $m = 0.33047$ y $b = -3.94034$, y para la red doblemente cuasiperiódica $m = 0.33923$ y $b = -3.06046$. Nótese que los valores obtenidos de b si se comparan con la escala de la gráfica (10^8) son esencialmente cero, y el promedio de conductancia en redes doblemente cuasiperiódicas es mayor que el en superredes de Fibonacci, posiblemente debido a la mayor coherencia en las estructuras doblemente cuasiperiódicas.

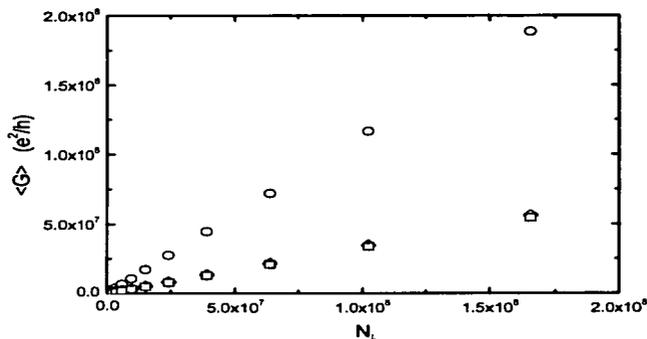


Fig. IV.5 Se muestra el promedio espectral de la conductancia como función del tamaño en la dirección perpendicular al campo eléctrico aplicado en sistemas periódicos (círculos), en superredes de Fibonacci (cuadrados) y en redes doblemente cuasiperiódicas (rombos). El tamaño en la dirección paralela al campo es de 165580142 átomos y $\gamma = 0.9$ para sistemas cuasiperiódicos.

La figura IV.6 muestra el promedio espectral de la conductancia en función del largo del sistema ($L_n = N_n a$) para el caso periódico (círculos), para superredes de Fibonacci (cuadrados) y para redes doblemente cuasiperiódicas (rombos). El ancho de los sistemas en la dirección perpendicular al campo eléctrico aplicado es de 121394 átomos, correspondiente a la generación $n = 25$, y $\gamma = 0.9$ para los sistemas cuasiperiódicos. Las partes imaginarias de la energía son las mismas de la figura IV.5. Obsérvese que el promedio de la conductancia en sistemas periódicos es constante al incrementar el largo del sistema, en cambio para sistemas cuasiperiódicos éste decae exponencialmente siguiendo la siguiente relación

$$\langle G^{2D}(\mu) \rangle = bN_n^m,$$

donde para superred de Fibonacci $m = -0.06961$ y $b = 175.4405081$, y para red doblemente cuasiperiódica $m = -0.06955$ y $b = 177.3739117$. Cabe mencionar que el promedio de la conductancia de las superredes de Fibonacci decaen más rápido que el de las redes doblemente cuasiperiódicas, similar a lo sucedido en la figura IV.5.

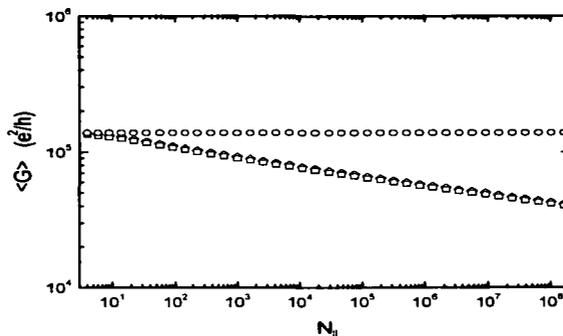


Fig. IV.6 Muestra el promedio espectral de conductancia en función del tamaño en la dirección paralela al campo eléctrico aplicado, para red periódica (círculos), para superredes de Fibonacci (cuadrados) y para redes doblemente cuasiperiódicas (rombos). El tamaño en la dirección perpendicular al campo es de 121394 átomos y $\gamma = 0.9$ en los sistemas cuasiperiódicos.

Por último, los resultados de la conductividad en dos dimensiones requieren más cálculo y análisis. En particular, la conductividad ac en estos sistemas involucra una integral adicional sobre una vecindad de ancho $\hbar\omega/|t|$ alrededor de la energía de Fermi o del potencial químico [Ec. (3.1)]. Los espectros de la figura IV.4 tienen un consumo de tiempo computacional alrededor de 20 horas en una estación de trabajo de Silicon Graphics con un procesador R12000 y generalmente los espectros ac requieren de un tiempo 100 veces mayor que el de conductividad dc . Por lo que la investigación de la conductividad ac en sistemas cuasiperiódicos bidimensionales se encuentra actualmente en proceso.

Conclusiones

En esta tesis hemos estudiado el transporte electrónico en sistemas cuasiperiódicos de una y dos dimensiones dentro del formalismo de amarre fuerte. Para dicho estudio, hemos desarrollado un nuevo método de renormalización para la fórmula de Kubo-Greenwood en redes de Fibonacci, el cual permite analizar la conductividad electrónica de sistemas de tamaño macroscópico. A pesar de la complejidad en la apariencia del método (apéndice B), éste marca un camino para desarrollar nuevos métodos de renormalización, es decir, iterar directamente el producto de la función de Green en lugar de la función de Green misma, como sucede en el de la densidad de estados. Además, hemos obtenido resultados analíticos para sistemas periódicos de una y dos dimensiones, algunos de éstos han sido confirmados recientemente de forma experimental. Asimismo, hemos demostrado la existencia de un nuevo estado transparente en el modelo de enlaces de Fibonacci y dicho estado podría pertenecer a una clase diferente al del modelo mixto, debido a que dicho estado se encuentra en un centro de fractalidad a diferencia del en el modelo mixto que está en una vecindad continua de estados de alta conductividad.

Las conclusiones principales de esta tesis son:

- (1) El grupo de renormalización en el espacio real constituye un método eficiente y exacto para el estudio de los sistemas cuasiperiódicos, dada la ausencia del espacio recíproco.
- (2) La existencia de un nuevo estado transparente ubicado en un centro de fractalidad dentro del modelo de enlaces de Fibonacci.
- (3) El espectro de la conductividad dc alrededor del estado transparente escala con el inverso del tamaño de sistema en el modelo mixto de Fibonacci, a pesar de la ausencia de dicho escalamiento en el espectro completo.
- (4) La presencia de una oscilación periódica de la conductividad dc alrededor del estado transparente y la amplitud de dicha oscilación aumenta cuando crece la inhomogeneidad o la diversidad química del sistema.
- (5) La conductividad ac del estado transparente disminuye oscilatoriamente con la frecuencia y escala con el inverso del tamaño de sistema en el modelo mixto de Fibonacci, contrario al comportamiento de los estados no transparentes.
- (6) El espectro de la conductividad ac es altamente sensible a las condiciones de frontera del sistema.
- (7) La coexistencia de la periodicidad y la cuasiperiodicidad en las superredes de Fibonacci muestra el dominio del espectro continuo sobre el multifractal.
- (8) Las superredes cuasiperiódicas no representan un buen medio para observar experimentalmente la autosimilaridad en la estructura de bandas de conducción.

Con respecto a los sistemas cuasiperiódicos, he encontrado que el ordenamiento atómico de un sólido es decisivo en muchos casos para la estructura electrónica del mismo. En consecuencia, el transporte en los sistemas cuasiperiódicos debe ser completamente nuevo, debido a las simetrías de la red hipercúbica de la cual fue proyectado el cuasicristal. La conductividad eléctrica del estado transparente en las redes de Fibonacci se asemeja a la de los sistemas periódicos revelando el orden de largo alcance, mientras que el transporte eléctrico en los estados no transparentes es similar al de sistemas desordenados debido a la ausencia de la simetría traslacional. Por otro lado, el

modelo de amarre fuerte se basa en las funciones de Wannier y puede incluir la cuasiperiodicidad de forma natural sin requerir de la ayuda del espacio recíproco. Por último, el presente trabajo podría extenderse a sistemas tridimensionales usando el método de convolución, así como al estudio de otras excitaciones (fonones, fotones, etc.) y/o otros fenómenos físicos (Raman, infrarrojo, etc.) aplicando el método del grupo de renormalización en el espacio real. Asimismo, se extendería la investigación al transporte electrónico en sistemas cuasiperiódicos a temperatura finita, incluyendo los efectos de la estadística de Fermi-Dirac y las modificaciones en la función de Green dentro de la fórmula de Kubo-Greenwood. En resumen, durante mis investigaciones doctorales he aprendido parte del quehacer de un científico moderno, que consiste en la revisión bibliográfica, renovación de métodos, programación computacional o realización experimental, análisis de los resultados, presentación en foros internacionales y publicación en revistas de la especialidad.

Apéndice A

Funciones de Green.

Desde un punto de vista puramente matemático, el uso de la función de Green constituye un método auxiliar para la solución de ecuaciones diferenciales inhomogéneas. Sin embargo, desde la perspectiva de la física, la función de Green adquiere una importancia propia, ya que diversas propiedades de los sólidos medibles en el laboratorio, tales como la densidad de estados, la respuesta Raman e infrarrojo, así como el transporte, pueden calcularse a partir de ella [Elliott, *et al.*, 1974]. En esta sección introduciremos la función de Green a partir de su significado físico que se relaciona con la correlación espacial y temporal de una partícula en el sólido.

La función de Green retardada -la causal- en términos de los operadores de creación y aniquilación se define como [Zubarev, 1960]

$$G_{ij}^R(t-t') \equiv \langle\langle a_i(t); a_j^+(t') \rangle\rangle_R \equiv \frac{2\pi}{i\hbar} \theta(t-t') \langle [a_i(t), a_j^+(t')]_+ \rangle, \quad (\text{A.1})$$

donde

$$\theta(t) = \begin{cases} 1 & \text{si } t > 0 \\ 0 & \text{si } t < 0 \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

es la función escalón, $\langle \dots \rangle$ indica el promedio sobre un ensamble gran canónico. La ecuación de movimiento para la función de Green $G_{ij}^R(t)$ es:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle\langle a_i(t); a_j^+(0) \rangle\rangle_R = 2\pi\delta(t) \langle [a_i(t), a_j^+(0)]_+ \rangle + \langle\langle [a_i(t), H]; a_j^+(0) \rangle\rangle_R. \quad (\text{A.3})$$

donde H es el hamiltoniano del electrón independiente que puede escribirse dentro del formalismo de amarre fuerte como

$$H = \sum_i \varepsilon_i a_i^+ a_i + \sum_i \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} a_i^+ a_j. \quad (\text{A.4})$$

Las ecuaciones de movimiento de Heisenberg para estos operadores están dadas por

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_i(t) = [a_i(t), H] = \varepsilon_i a_i(t) + \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} a_j(t). \quad (\text{A.5})$$

Considerando la Ec. (A.5) se tiene que la Ec. (A.3) puede reescribirse como:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G_{ij}^R(t) = 2\pi\delta(t) \langle [a_i(t), a_j^+(0)]_+ \rangle + \varepsilon_i G_{ij}^R(t) + \sum_{\ell} t_{i\ell} G_{\ell j}^R(t). \quad (\text{A.6})$$

Introduciendo la transformada de Fourier de la función de Green como

$$G(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') G(t-t') \exp[iE(t-t')/\hbar] \quad (\text{A.7})$$

en la Ec. (A.6), obtenemos la ecuación de movimiento de $G(E)$:

$$(E - H)G = 1. \quad (\text{A.8})$$

En esta ecuación la energía E debe ser reemplazada por una variable compleja $E + is$ con $s \rightarrow 0$ para eliminar las divergencias de la función de Green. En consecuencia, $G^+(E) \equiv \lim_{s \rightarrow 0^+} G(E + is)$. En la notación de Dirac, la función de Green puede escribirse como

$$G(E) = \sum_n \frac{|n\rangle \langle n|}{E - E_n}, \quad (\text{A.9})$$

donde $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ y $\sum_n |n\rangle \langle n| = 1$.

Usando la identidad [Merzbacher, 1970]

$$\lim_{y \rightarrow 0} \frac{1}{x \pm iy} = P\left(\frac{1}{x}\right) \mp i\pi\delta(x), \quad (\text{A.10})$$

donde $P(z)$ es la parte principal de z , y de la Ec. (A.9), tenemos que:

$$G(E) = P\left(\sum_n \frac{|n\rangle \langle n|}{E - E_n}\right) - i\pi \sum_n \delta(E - E_n) |n\rangle \langle n|. \quad (\text{A.11})$$

Por lo que la traza de la función de Green está dada por

$$\text{Tr}[G(E)] = P\left(\sum_n \frac{1}{E - E_n}\right) - i\pi \sum_n \delta(E - E_n). \quad (\text{A.12})$$

La cantidad $\sum_n \delta(E - E_n)$ es la densidad de estados (DOS) en la energía E , es decir, $DOS(E) dE$ da el número de estados cuyas energías están en el intervalo $[E, E + dE]$. Entonces, de la Ec. (A.12) se obtiene

$$DOS(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}\{\text{Tr}[G(E)]\}, \quad (\text{A.13})$$

ecuación que emplearemos en esta tesis para el cálculo de la densidad de estados en sistemas cuasiperiódicos.

A.0.1 Cadena Periódica Monoatómica

En esta subsección ejemplificaremos el cálculo de la densidad de estados para la cadena monoatómica periódica en el modelo de amarre fuerte. La relación de dispersión de la Ec. (1.15) en el caso unidimensional es

$$E_k = \varepsilon_0 + 2t \cos ka, \quad (\text{A.14})$$

donde ε_0 y t son respectivamente la auto energía y la integral de salto de la cadena periódica monoatómica. Las funciones de onda están dadas por la Ec. (??):

$$|\Psi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ikja} |j\rangle, \quad (\text{A.15})$$

donde N es el número total de átomos en el sistema y las posiciones atómicas $R_j = ja$. Los elementos de matriz de $G(E)$ se obtienen sustituyendo las Ecs. (A.14) y (A.15) en la Ec. (A.9):

$$\langle \ell | G(E) | m \rangle = \sum_k \frac{\langle \ell | \Psi_k \rangle \langle \Psi_k | m \rangle}{E - E_k} = \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk \frac{e^{ika(\ell-m)}}{E - \varepsilon_0 - 2t \cos ka}. \quad (\text{A.16})$$

Evaluando esta integral y empleando la Ec. (A.13), encontramos la densidad de estados [Economou, 1983]:

$$DOS(E) = -\frac{N}{\pi} \text{Im} \{ \langle 0 | G(E) | 0 \rangle \} = \frac{N}{\pi} \frac{\theta(2t - |E - \varepsilon_0|)}{\sqrt{4t^2 - (E - \varepsilon_0)^2}}, \quad (\text{A.17})$$

donde $\theta(x)$ es la función escalón definida en la Ec. (A.2).

Apéndice B

Renormalización en el Problema Mixto

Como se discute en el capítulo III, la fórmula de Kubo-Greenwood puede escribirse en términos de las sumas parciales $S(E_1^\alpha, E_2^\beta, n)$, definidas en la ecuación (3.6). Éstas pueden expresarse como un polinomio cuadrático de las funciones de Green evaluadas en los extremos del sistema, como se muestra en la ecuación (3.9), donde los coeficientes son iterativamente dados por

$$A(E_1, E_2, n) = - [A_c(E_1, E_2, n) - A_c(E_2, E_1, n)]^2, \quad (\text{B.1})$$

$$B(E_1, E_2, n) = 2 [A_c(E_1, E_2, n) - A_c(E_2, E_1, n)] [B_c(E_2, E_1, n) - B_c(E_1, E_2, n)] + 2 [C_c(E_1, E_2, n) - D_c(E_2, E_1, n)] [C_c(E_2, E_1, n) - D_c(E_1, E_2, n)], \quad (\text{B.2})$$

$$C(E_1, E_2, n) = - [B_c(E_1, E_2, n) - B_c(E_2, E_1, n)]^2, \quad (\text{B.3})$$

$$D(E_1, E_2, n) = 2 [A_c(E_1, E_2, n) - A_c(E_2, E_1, n)] [D_c(E_2, E_1, n) - C_c(E_1, E_2, n)], \quad (\text{B.4})$$

$$F(E_1, E_2, n) = - [C_c(E_1, E_2, n) - D_c(E_2, E_1, n)]^2, \quad (\text{B.5})$$

$$I(E_1, E_2, n) = 2 [B_c(E_1, E_2, n) - B_c(E_2, E_1, n)] [D_c(E_2, E_1, n) - C_c(E_1, E_2, n)], \quad (\text{B.6})$$

$$J(E_1, E_2, n) = J(E_1, E_2, n-1) + \eta_1^2(E_1, n) [\theta_2(E_2, n) C(E_1, E_2, n-1) + L(E_1, E_2, n-1)] + \eta_1(E_1, n) [\theta_2(E_2, n) I(E_1, E_2, n-1) + K(E_1, E_2, n-1) + V_u(E_1, E_2, n)] + \theta_2(E_2, n) F(E_1, E_2, n-1) + \kappa_1^2(E_1, n) [\theta_1(E_2, n) A(E_1, E_2, n-2) + J(E_1, E_2, n-2)] + \kappa_1(E_1, n) [\eta_1(E_1, n) \theta_3(E_2, n) A_o(E_1, E_2, n) + \theta_3(E_2, n) B_o(E_2, E_1, n) + W_u(E_2, E_1, n)], \quad (\text{B.7})$$

$$\begin{aligned}
K(E_1, E_2, n) = & \theta_2(E_2, n)\kappa_2(E_1, n)[2\eta_1(E_1, n)C(E_1, E_2, n-1) + I(E_1, E_2, n-1)] + \\
& + \kappa_2(E_1, n)[2\eta_1(E_1, n)L(E_1, E_2, n-1) + K(E_1, E_2, n-1) + \\
& + V_u(E_1, E_2, n)] + \theta_1(E_2, n)\kappa_1(E_1, n)[2\eta_2(E_1, n)A(E_1, E_2, n-2) + \\
& + D(E_2, E_1, n-2)] + \kappa_1(E_1, n)[2\eta_2(E_1, n)J(E_1, E_2, n-2) + \\
& + K(E_1, E_2, n-2) + Y_u(E_2, E_1, n)] + \theta_3(E_2, n)C_o(E_2, E_1, n) + \\
& + \theta_3(E_2, n)[\kappa_2(E_1, n)\kappa_1(E_1, n) + \eta_2(E_1, n)\eta_1(E_1, n)]A_o(E_1, E_2, n) + \\
& + \eta_2(E_1, n)[\theta_3(E_2, n)B_o(E_2, E_1, n) + W_u(E_2, E_1, n)] + \\
& + \eta_1(E_1, n)[\theta_3(E_2, n)D_o(E_1, E_2, n) + X_u(E_1, E_2, n)], \tag{B.8}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
L(E_1, E_2, n) = & L(E_1, E_2, n-2) + \eta_2^2(E_1, n)[\theta_1(E_2, n)A(E_1, E_2, n-2) + \\
& + J(E_1, E_2, n-2)] + \eta_2(E_1, n)[\theta_1(E_2, n)D(E_2, E_1, n-2) + \\
& + K(E_1, E_2, n-2) + Y_u(E_2, E_1, n)] + \theta_1(E_2, n)F(E_2, E_1, n-2) + \\
& + \kappa_2^2(E_1, n)[\theta_2(E_2, n)C(E_1, E_2, n-1) + L(E_1, E_2, n-1)] + \\
& + \kappa_2(E_1, n)[\eta_2(E_1, n)\theta_3(E_2, n)A_o(E_1, E_2, n) + \theta_3(E_2, n)D_o(E_1, E_2, n) + \\
& + X_u(E_1, E_2, n)], \tag{B.9}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z(E_1, E_2, n) = & Z(E_1, E_2, n-1) + Z(E_1, E_2, n-2) + Z_u(E_1, E_2, n) + Z_u(E_2, E_1, n) + \\
& + \theta_1(E_1, n)[\theta_1(E_2, n)A(E_1, E_2, n-2) + J(E_1, E_2, n-2)] + \\
& + \theta_2(E_1, n)[\theta_2(E_2, n)C(E_1, E_2, n-1) + L(E_1, E_2, n-1)] + \\
& + \theta_1(E_2, n)J(E_2, E_1, n-2) + \theta_2(E_2, n)L(E_2, E_1, n-1) + \\
& + \theta_3(E_1, n)\theta_3(E_2, n)A_o(E_1, E_2, n), \tag{B.10}
\end{aligned}$$

donde E_1 y E_2 pueden ser E_ω^ν o E^β , y

$$\theta_1(E, n) = [E - E_R(E, n-1)] / \gamma_F(E, n), \tag{B.11}$$

$$\theta_2(E, n) = [E - E_L(E, n-2)] / \gamma_F(E, n), \tag{B.12}$$

$$\theta_3(E, n) = t_{AB} / \gamma_F(E, n), \tag{B.13}$$

$$\gamma_F(E, n) = [E - E_R(E, n-1)][E - E_L(E, n-2)] - t_{AB}^2, \tag{B.14}$$

$$\kappa_1(E, n) = t(E, n-1)\theta_3(E, n), \tag{B.15}$$

$$\kappa_2(E, n) = t(E, n-2)\theta_3(E, n) \tag{B.16}$$

$$\eta_1(E, n) = t(E, n-1)\theta_2(E, n), \quad (\text{B.17})$$

$$\eta_2(E, n) = t(E, n-2)\theta_1(E, n). \quad (\text{B.18})$$

$$\begin{aligned} A_c(E_1, E_2, n) = & A_c(E_1, E_2, n-1) + \kappa_1(E_1, n)\kappa_1(E_2, n)A_c(E_1, E_2, n-2) + \\ & + \eta_1(E_1, n)\eta_1(E_2, n)B_c(E_1, E_2, n-1) + \eta_1(E_2, n)C_c(E_1, E_2, n-1) + \\ & + \eta_1(E_1, n)D_c(E_1, E_2, n-1) + t_{AB}\kappa_1(E_1, n)\eta_1(E_2, n), \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

$$\begin{aligned} B_c(E_1, E_2, n) = & B_c(E_1, E_2, n-2) + \eta_2(E_1, n)\eta_2(E_2, n)A_c(E_1, E_2, n-2) + \\ & + \kappa_2(E_1, n)\kappa_2(E_2, n)B_c(E_1, E_2, n-1) + \eta_2(E_1, n)C_c(E_1, E_2, n-2) + \\ & + \eta_2(E_2, n)D_c(E_1, E_2, n-2) + t_{AB}\kappa_2(E_2, n)\eta_2(E_1, n), \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

$$\begin{aligned} C_c(E_1, E_2, n) = & \kappa_1(E_1, n)\eta_2(E_2, n)A_c(E_1, E_2, n-2) + \kappa_2(E_2, n)C_c(E_1, E_2, n-1) + \\ & + \eta_1(E_1, n)\kappa_2(E_2, n)B_c(E_1, E_2, n-1) + \kappa_1(E_1, n)C_c(E_1, E_2, n-2) + \\ & + t_{AB}\kappa_2(E_2, n)\kappa_1(E_1, n), \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

$$\begin{aligned} D_c(E_1, E_2, n) = & \kappa_1(E_2, n)\eta_2(E_1, n)A_c(E_1, E_2, n-2) + \kappa_2(E_1, n)D_c(E_1, E_2, n-1) + \\ & + \eta_1(E_2, n)\kappa_2(E_1, n)B_c(E_1, E_2, n-1) + \\ & + \kappa_1(E_2, n)D_c(E_1, E_2, n-2) + t_{AB}\eta_1(E_2, n)\eta_2(E_1, n), \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

$$\begin{aligned} V_u(E_1, E_2, n) = & 2t_{AB}\{\kappa_1(E_1, n)\theta_1(E_2, n)[A_c(E_1, E_2, n-2) - A_c(E_2, E_1, n-2)] + \\ & + \eta_1(E_1, n)\theta_3(E_2, n)[B_c(E_1, E_2, n-1) - B_c(E_2, E_1, n-1)] + \\ & + \theta_3(E_2, n)[C_c(E_1, E_2, n-1) - D_c(E_2, E_1, n-1)] + \\ & + 0.5t_{AB}[\kappa_1(E_1, n)\theta_3(E_2, n) - \eta_1(E_1, n)\theta_1(E_2, n)]\}, \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

$$\begin{aligned} W_u(E_1, E_2, n) = & 2t_{AB}\{\theta_2(E_1, n)\eta_1(E_2, n)[B_c(E_1, E_2, n-1) - B_c(E_2, E_1, n-1)] + \\ & + \theta_2(E_1, n)[D_c(E_1, E_2, n-1) - C_c(E_2, E_1, n-1)] + \\ & + 0.5t_{AB}[\eta_1(E_2, n)\theta_3(E_1, n) - \theta_2(E_1, n)\kappa_1(E_2, n)] + \\ & + \theta_3(E_1, n)\kappa_1(E_2, n)[A_c(E_1, E_2, n-2) - A_c(E_2, E_1, n-2)]\}, \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

$$\begin{aligned}
X_u(E_1, E_2, n) = & 2t_{AB}\{\eta_2(E_1, n)\theta_1(E_2, n) [A_c(E_1, E_2, n-2) - A_c(E_2, E_1, n-2)] + \\
& +\theta_1(E_2, n) [D_c(E_1, E_2, n-2) - C_c(E_2, E_1, n-2)] + \\
& +0.5t_{AB} [\eta_2(E_1, n)\theta_3(E_2, n) - \theta_1(E_2, n)\kappa_2(E_1, n)] + \\
& +\kappa_2(E_1, n)\theta_3(E_2, n) [B_c(E_1, E_2, n-1) - B_c(E_2, E_1, n-1)]\}, \\
\end{aligned} \tag{B.25}$$

$$\begin{aligned}
Y_u(E_1, E_2, n) = & 2t_{AB}\{\kappa_2(E_2, n)\theta_2(E_1, n) [B_c(E_1, E_2, n-1) - B_c(E_2, E_1, n-1)] + \\
& +\theta_3(E_1, n) [C_c(E_1, E_2, n-2) - D_c(E_2, E_1, n-2)] + \\
& +0.5t_{AB} [\kappa_2(E_2, n)\theta_3(E_1, n) - \theta_2(E_1, n)\eta_2(E_2, n)] + \\
& +\theta_3(E_1, n)\eta_2(E_2, n) [A_c(E_1, E_2, n-2) - A_c(E_2, E_1, n-2)]\}, \\
\end{aligned} \tag{B.26}$$

$$\begin{aligned}
Z_u(E_1, E_2, n) = & 2t_{AB}\{\theta_3(E_2, n)\theta_2(E_1, n) [B_c(E_1, E_2, n-1) - B_c(E_2, E_1, n-1)] + \\
& +\theta_3(E_1, n)\theta_1(E_2, n) [A_c(E_1, E_2, n-2) - A_c(E_2, E_1, n-2)] + \\
& +0.5t_{AB} [\theta_3(E_2, n)\theta_3(E_1, n) - \theta_2(E_1, n)\theta_1(E_2, n)]\}, \\
\end{aligned} \tag{B.27}$$

$$\begin{aligned}
A_o(E_1, E_2, n) = & 2 [A_c(E_1, E_2, n-2) - A_c(E_2, E_1, n-2)] [B_c(E_2, E_1, n-1) - \\
& B_c(E_1, E_2, n-1)], \\
\end{aligned} \tag{B.28}$$

$$\begin{aligned}
B_o(E_1, E_2, n) = & 2 [A_c(E_1, E_2, n-2) - A_c(E_2, E_1, n-2)] [C_c(E_2, E_1, n-1) - \\
& -D_c(E_1, E_2, n-1)], \\
\end{aligned} \tag{B.29}$$

$$\begin{aligned}
C_o(E_1, E_2, n) = & 2 [C_c(E_1, E_2, n-2) - D_c(E_2, E_1, n-2)] [C_c(E_2, E_1, n-1) - \\
& -D_c(E_1, E_2, n-1)], \\
\end{aligned} \tag{B.30}$$

$$\begin{aligned}
D_o(E_1, E_2, n) = & 2 [B_c(E_1, E_2, n-1) - B_c(E_2, E_1, n-1)] [C_c(E_2, E_1, n-2) - \\
& -D_c(E_1, E_2, n-2)]. \\
\end{aligned} \tag{B.31}$$

Por otro lado, en las siguientes expresiones la E toma los valores de E_1 o E_2 . La integral efectiva de salto $t(E, n)$ y las auto energías efectivas de los sitios extremos de izquierda y derecha en el procedimiento de renormalización, $E_L(E, n)$ y $E_R(E, n)$, son dadas por

$$E_R(E, n) = E_R(E, n-2) + t^2(E, n-2)[E - E_R(E, n-1)]/\gamma_F(E, n), \quad (\text{B.32})$$

$$E_L(E, n) = E_L(E, n-1) + t^2(E, n-1)[E - E_L(E, n-2)]/\gamma_F(E, n), \quad (\text{B.33})$$

$$t(E, n) = t_{AB} t(E, n-1) t(E, n-2)/\gamma_F(E, n). \quad (\text{B.34})$$

Para el caso de las condiciones a la frontera libres, las funciones de Green del sistema renormalizado son

$$G_{L,L}(E) = [E - E_R(E, n)]/\gamma_G, \quad (\text{B.35})$$

$$G_{R,R}(E) = [E - E_L(E, n)]/\gamma_G, \quad (\text{B.36})$$

$$G_{L,R}(E) = t(E, n)/\gamma_G, \quad (\text{B.37})$$

$$\gamma_G = [E - E_L(E, n)][E - E_R(E, n)] - t^2(E, n), \quad (\text{B.38})$$

y para el caso de que las condiciones de frontera de un saturador finito, ellas son

$$G_{L,L}(E) = \left\{ E - E_L(E, n) - \frac{t^2}{E - E_{RP}(E, m)} - \frac{t^2(E, n)}{E - E_R(E, n) - \frac{t^2}{[E - E_{LP}(E, m)]}} \right\}^{-1}, \quad (\text{B.39})$$

$$G_{R,R}(E) = \left\{ E - E_R(E, n) - \frac{t^2}{E - E_{LP}(E, m)} - \frac{t^2(E, n)}{E - E_L(E, n) - \frac{t^2}{[E - E_{RP}(E, m)]}} \right\}^{-1}, \quad (\text{B.40})$$

$$G_{L,R}(E) = G_{R,R}(E)t(E, n)/\{E - E_L(E, n) - t^2/[E - E_{RP}(E, m)]\}, \quad (\text{B.41})$$

donde m es el número de generación del saturador periódico construido siguiendo un procedimiento de Fibonacci, y sus auto-energías efectivas y las integrales de salto efectivas están dadas por

$$E_{LP}(E, m) = E_{LP}(E, m-1) + t_P^2(E, m-1)(E - E_{LP}(E, m-2))/\gamma_P(E, m), \quad (\text{B.42})$$

$$E_{RP}(E, m) = E_{RP}(E, m-2) + t_P^2(E, m-2)(E - E_{RP}(E, m-1))/\gamma_P(E, m), \quad (\text{B.43})$$

$$t_P(E, m) = t_P(E, m-1)t_P(E, m-2)/\gamma_P(E, m), \quad (\text{B.44})$$

tomando

$$\gamma_P(E, m) = [E - E_{RP}(E, m - 1)][E - E_{LP}(E, m - 2)] - t^2. \quad (\text{B.45})$$

Finalmente, las condiciones iniciales para la iteración de los procedimientos son

$$t(E, 2) = t_{BA}, \quad E_L(E, 2) = -\alpha, \quad E_R(E, 2) = \alpha, \quad (\text{B.46})$$

$$\begin{aligned} t(E, 3) &= t_{AA}t_{BA}/(E - \alpha), \quad E_L(E, 3) = -\alpha + t_{BA}^2/(E - \alpha), \\ E_R(E, 3) &= \alpha + t_{AA}^2/(E - \alpha), \end{aligned} \quad (\text{B.47})$$

$$t_P(E, 2) = t, \quad E_{RP}(E, 2) = E_{LP}(E, 2) = 0, \quad (\text{B.48})$$

$$t_P(E, 3) = t^2/E, \quad E_{LP}(E, 3) = E_{RP}(E, 3) = t_P(E, 3), \quad (\text{B.49})$$

$$A(E_1, E_2, 2) = C(E_1, E_2, 2) = D(E_1, E_2, 2) = I(E_1, E_2, 2) = 0, \quad (\text{B.50})$$

$$J(E_1, E_2, 2) = K(E_1, E_2, 2) = L(E_1, E_2, 2) = Z(E_1, E_2, 2) = 0, \quad (\text{B.51})$$

$$B(E_1, E_2, 2) = 2t_{BA}^2, \quad F(E_1, E_2, 2) = -t_{BA}^2, \quad (\text{B.52})$$

$$A(E_1, E_2, 3) = -[t(E_1, 3) - t(E_2, 3)]^2 t_{BA}^2/t_{AA}^2, \quad (\text{B.53})$$

$$B(E_1, E_2, 3) = 4(t^2(E_1, 3) + t^2(E_2, 3)), \quad (\text{B.54})$$

$$C(E_1, E_2, 3) = -[t(E_1, 3) - t(E_2, 3)]^2 t_{AA}^2/t_{BA}^2, \quad (\text{B.55})$$

$$D(E_1, E_2, 3) = 2[t^2(E_1, 3) - t^2(E_2, 3)] t_{BA}/t_{AA}, \quad (\text{B.56})$$

$$F(E_1, E_2, 3) = -[t(E_1, 3) + t(E_2, 3)]^2, \quad (\text{B.57})$$

$$I(E_1, E_2, 3) = 2[t^2(E_2, 3) - t^2(E_1, 3)] t_{AA}/t_{BA}, \quad (\text{B.58})$$

$$J(E_1, E_2, 3) = -t(E_2, 3)t_{BA}/t_{AA}, \quad (\text{B.59})$$

$$K(E_1, E_2, 3) = 2t(E_2, 3), \quad L(E_1, E_2, 3) = -t(E_2, 3)t_{AA}/t_{BA}, \quad (\text{B.60})$$

$$Z(E_1, E_2, 3) = 0, \quad (\text{B.61})$$

$$\begin{aligned} A_c(E_1, E_2, 2) &= B_c(E_1, E_2, 2) = C_c(E_1, E_2, 2) = 0, \\ D_c(E_1, E_2, 2) &= t_{BA}, \end{aligned} \quad (\text{B.62})$$

$$\begin{aligned} A_c(E_1, E_2, 3) &= t_{BA}^2/(E_1 - \alpha), \quad B_c(E_1, E_2, 3) = t_{AA}^2/(E_2 - \alpha), \\ C_c(E_1, E_2, 3) &= 0, \text{ y} \end{aligned} \quad (\text{B.63})$$

$$D_c(E_1, E_2, 3) = t_{AA}t_{BA}/[E_1 - \alpha] + t_{AA}t_{BA}/[E_2 - \alpha]. \quad (\text{B.64})$$

Para el caso de la *DOS*, el procedimiento de renormalización es mucho mas simple, porque sólo los elementos diagonales de la función de Green son tomados en cuenta, en lugar de los productos de la fórmula de Kubo-Greenwood. En este caso tenemos

$$\begin{aligned} DOS(E) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_j G_{j,j}(E^+) \\ &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \{ D_1(E^+, n)G_{L,L}(E^+) + D_2(E^+, n)G_{R,R}(E^+) + \\ &\quad + D_3(E^+, n)G_{L,R}(E^+) + D_4(E^+, n) \}, \end{aligned} \quad (\text{B.65})$$

donde

$$\begin{aligned} D_1(E^+, N) &= D_1(E^+, N-1) + \kappa_1^2(E^+, n)D_1(E^+, N-2) + \\ &\quad + \eta_1^2(E^+, n)D_2(E^+, N-1) + \eta_1(E^+, n)D_3(E^+, N-1), \end{aligned} \quad (\text{B.66})$$

$$\begin{aligned} D_2(E^+, N) &= D_2(E^+, N-2) + \kappa_2^2(E^+, n)D_2(E^+, N-1) + \\ &\quad + \eta_2^2(E^+, n)D_1(E^+, N-2) + \eta_2(E^+, n)D_3(E^+, N-2), \end{aligned} \quad (\text{B.67})$$

$$\begin{aligned} D_3(E^+, N) &= \kappa_2(E^+, n)D_3(E^+, N-1) + \kappa_1(E^+, n)D_3(E^+, N-2) + \\ &\quad + 2\eta_2(E^+, n)\kappa_1(E^+, n)D_1(E^+, N-2) + \\ &\quad + 2\eta_1(E^+, n)\kappa_2(E^+, n)D_2(E^+, N-1), \end{aligned} \quad (\text{B.68})$$

$$D_4(E^+, N) = D_4(E^+, N-1) + D_4(E^+, N-2) + \theta_1(E^+, n)D_1(E^+, N-2) + \theta_2(E^+, n)D_2(E^+, N-1), \quad (\text{B.69})$$

y las condiciones iniciales son

$$D_1(E^+, 2) = D_2(E^+, 2) = 1, \quad D_3(E^+, 2) = D_4(E^+, 2) = 0, \quad (\text{B.70})$$

$$\begin{aligned} D_1(E^+, 3) &= 1 + \frac{t_{BA}^2}{(E^+ - \alpha)^2}, \quad D_2(E^+, 3) = 1 + \frac{t_{AA}^2}{(E^+ - \alpha)^2}, \\ D_3(E^+, 3) &= \frac{2t_{BA}t_{AA}}{(E^+ - \alpha)^2}, \quad D_4(E^+, 3) = \frac{1}{E^+ - \alpha}. \end{aligned} \quad (\text{B.71})$$

A continuación explicaremos el procedimiento para obtener los coeficientes de la ecuación (3.9). Por ejemplo, el primer coeficiente $A(E_1, E_2, n)$ se calculará en detalle.

De la ecuación (3.6) tomamos uno de los tres términos, el primero, y sólo consideramos la suma sobre un índice j , la cual está definida como:

$$S_c(E_1, E_2, n, k, k+1) \equiv \sum_{j=1}^{N(n)-1} t_{j,j+1} G_{j+1,k}(E_1) G_{k+1,j}(E_2), \quad (\text{B.72})$$

y esto puede ser escrito como:

$$\begin{aligned} S_c(E_1, E_2, n, k, k+1) &= A_c(E_1, E_2, n) G_{1,k}(E_1) G_{k+1,1}(E_2) + \\ &+ B_c(E_1, E_2, n) G_{N(n),k}(E_1) G_{k+1,N(n)}(E_2) + \\ &+ C_c(E_1, E_2, n) G_{1,k}(E_1) G_{k+1,N(n)}(E_2) + \\ &+ D_c(E_1, E_2, n) G_{N(n),k}(E_1) G_{k+1,1}(E_2), \end{aligned} \quad (\text{B.73})$$

donde $A_c(E_1, E_2, n), \dots, D_c(E_1, E_2, n)$ son definidos como los coeficientes del producto de dos funciones de Green que satisfacen la ecuación homogénea de Dyson ($[E - H]G = 0$). La contribución de los términos inhomogéneos son tomados en cuenta en los coeficientes $J(E_1, E_2, n)$, $K(E_1, E_2, n)$, $L(E_1, E_2, n)$, y $Z(E_1, E_2, n)$.

La regla construcción de secuencia de Fibonacci que se discute en el capítulo I conduce a

$$S_c(E_1, E_2, n, k, k+1) = S_c(E_1, E_2, n-1, k, k+1) + S_c(E_1, E_2, n-2, k, k+1) + t_{AB} G_{N(n-1)+1,k}(E_1) G_{N(n-1),k+1}(E_2). \quad (\text{B.74})$$

Así, los coeficientes $A_c(E_1, E_2, n), \dots, D_c(E_1, E_2, n)$ pueden calcularse sustituyendo en

la ecuación anterior las relaciones

$$G_{N(n-1),h}(E) = \eta_1(E, n)G_{1,h}(E) + \kappa_2(E, n)G_{N(n),h}(E) \quad (\text{B.75})$$

$$G_{N(n-1)+1,h}(E) = \kappa_1(E, n)G_{1,h}(E) + \eta_2(E, n)G_{N(n),h}(E), \quad (\text{B.76})$$

donde η_i y κ_i son definidas anteriormente, y h puede ser k o $k + 1$.

Ahora, reescribimos la ecuación 3.6 como

$$S(E_1, E_2, n) = \sum_{k=1}^{N(n)-1} t_{k,k+1} [2S_c(E_1, E_2, n, k, k+1) - S_c(E_1, E_2, n, k+1, k) - S_c(E_2, E_1, n, k, k+1)] \quad (\text{B.77})$$

y tomando sólo el término de $A_c(E_1, E_2, n)$ en cada S_c obtenemos

$$\begin{aligned} S_A(E_1, E_2, n) &\equiv \sum_{k=1}^{N(n)-1} t_{k,k+1} [2A_c(E_1, E_2, n)G_{1,k}(E_1)G_{k+1,1}(E_2) - \\ &\quad - A_c(E_1, E_2, n)G_{1,k+1}(E_1)G_{k,1}(E_2) - \\ &\quad - A_c(E_2, E_1, n)G_{1,k}(E_1)G_{k+1,1}(E_2)] \\ &= [2A_c(E_1, E_2, n) - A_c(E_2, E_1, n)] \sum_{k=1}^{N(n)-1} t_{k,k+1} G_{1,k}(E_1)G_{k+1,1}(E_2) - \\ &\quad - A_c(E_1, E_2, n) \sum_{k=1}^{N(n)-1} t_{k,k+1} G_{1,k+1}(E_1)G_{k,1}(E_2) \\ &= [2A_c(E_1, E_2, n) - A_c(E_2, E_1, n)] [A_c(E_2, E_1, n)G_{1,1}(E_1) \times \\ &\quad \times G_{1,1}(E_2) + \dots] - A_c(E_1, E_2, n) [A_c(E_1, E_2, n) \times \\ &\quad \times G_{1,1}(E_1)G_{1,1}(E_2) + \dots] \\ &= -[A_c(E_1, E_2, n) - A_c(E_2, E_1, n)]^2 G_{1,1}(E_1)G_{1,1}(E_2) + \dots \quad (\text{B.78}) \end{aligned}$$

donde $G_{1,1}(E)$ corresponde a $G_{L,L}(E)$ en la ecuación 3.6, y usamos el hecho que los coeficientes $A_c(E_1, E_2, n), \dots, D_c(E_1, E_2, n)$ no dependen de k . En consecuencia

$$A(E_1, E_2, n) = -[A_c(E_1, E_2, n) - A_c(E_2, E_1, n)]^2. \quad (\text{B.79})$$

El resto de los coeficientes puede obtenerse siguiendo un procedimiento similar.

Apéndice C

Renormalización en el Problema de Enlaces

En esta sección se discuten los coeficientes de renormalización para la fórmula Kubo en el problema de enlaces de una cadena de Fibonacci [ecuación (3.9)]. El cálculo de estos coeficientes se hace de la misma forma que los del problema de Fibonacci mixto mostrados en el apéndice anterior. Por lo que en este caso los coeficientes son

$$A(E_1, E_2, n) = - [A_c(E_1, E_2, n) - A_c(E_2, E_1, n)]^2, \quad (C.1)$$

$$B(E_1, E_2, n) = 2 [A_c(E_1, E_2, n) - A_c(E_2, E_1, n)] [B_c(E_2, E_1, n) - B_c(E_1, E_2, n)] + 2 [C_c(E_1, E_2, n) - D_c(E_2, E_1, n)] [C_c(E_2, E_1, n) - D_c(E_1, E_2, n)], \quad (C.2)$$

$$C(E_1, E_2, n) = - [B_c(E_1, E_2, n) - B_c(E_2, E_1, n)]^2, \quad (C.3)$$

$$D(E_1, E_2, n) = 2 [A_c(E_1, E_2, n) - A_c(E_2, E_1, n)] [D_c(E_2, E_1, n) - C_c(E_1, E_2, n)], \quad (C.4)$$

$$F(E_1, E_2, n) = - [C_c(E_1, E_2, n) - D_c(E_2, E_1, n)]^2, \quad (C.5)$$

$$I(E_1, E_2, n) = 2 [B_c(E_1, E_2, n) - B_c(E_2, E_1, n)] [D_c(E_2, E_1, n) - C_c(E_1, E_2, n)], \quad (C.6)$$

$$J(E_1, E_2, n) = J(E_1, E_2, n-1) + \kappa_1^2(E_1, n)\theta_1(E_2, n)[C(E_1, E_2, n-1) + A(E_1, E_2, n-2) + A_o(E_1, E_2, n)] + \kappa_1^2(E_1, n)[L(E_1, E_2, n-1) + J(E_1, E_2, n-2)] + \theta_1(E_2, n)F(E_1, E_2, n-1) + \kappa_1(E_1, n)K(E_1, E_2, n-1) + \theta_1(E_2, n)\kappa_1(E_1, n)[I(E_1, E_2, n-1) + B_o(E_1, E_2, n)], \quad (C.7)$$

$$\begin{aligned}
K(E_1, E_2, n) = & 2\theta_1(E_2, n)\kappa_1(E_1, n)\kappa_2(E_1, n)[C(E_1, E_2, n-1) + A(E_1, E_2, n-2) + \\
& + A_o(E_1, E_2, n)] + 2\kappa_1(E_1, n)\kappa_2(E_1, n)[L(E_1, E_2, n-1) + \\
& + J(E_1, E_2, n-2)] + \theta_1(E_2, n)\{\kappa_1(E_1, n)[D(E_2, E_1, n-2) + \\
& + D_o(E_2, E_1, n)] + C_o(E_1, E_2, n) + \kappa_2(E_1, n)[I(E_1, E_2, n-1) + \\
& + B_o(E_1, E_2, n)]\} + \kappa_2(E_1, n)K(E_1, E_2, n-1) + \\
& + \kappa_1(E_1, n)K(E_1, E_2, n-2), \tag{C.8}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
L(E_1, E_2, n) = & L(E_1, E_2, n-2) + \kappa_2^2(E_1, n)[\theta_1(E_2, n)[C(E_1, E_2, n-1) + \\
& + A(E_1, E_2, n-2) + A_o(E_1, E_2, n)] + \kappa_2^2(E_1, n)[L(E_1, E_2, n-1) + \\
& + J(E_1, E_2, n-2)] + \theta_1(E_2, n)F(E_2, E_1, n-2) + \\
& + \kappa_2(E_1, n)\{K(E_1, E_2, n-2) + \theta_1(E_2, n)[D(E_2, E_1, n-2) + \\
& + D_o(E_2, E_1, n)]\}, \tag{C.9}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z(E_1, E_2, n) = & Z(E_1, E_2, n-1) + Z(E_1, E_2, n-2) + \theta_1(E_1, n)[L(E_1, E_2, n-1) + \\
& + J(E_1, E_2, n-2)] + \theta_1(E_1, n)\theta_1(E_2, n)[C(E_1, E_2, n-1) + \\
& + A(E_1, E_2, n-2) + A_o(E_1, E_2, n)] + \theta_1(E_2, n)[L(E_2, E_1, n-1) + \\
& + J(E_2, E_1, n-2)], \tag{C.10}
\end{aligned}$$

donde E_1 y E_2 pueden tomar los valores E_{α}^{β} o E^{β} , y

$$\theta_1(E, n) = [E - E_R(E, n-1) - E_L(E, n-2)]^{-1}, \tag{C.11}$$

$$\kappa_1(E, n) = t(E, n-1)\theta_1(E, n), \tag{C.12}$$

$$\kappa_2(E, n) = t(E, n-2)\theta_1(E, n) \tag{C.13}$$

$$\begin{aligned}
A_c(E_1, E_2, n) = & A_c(E_1, E_2, n-1) + \kappa_1(E_1, n)\kappa_1(E_2, n)[A_c(E_1, E_2, n-2) + \\
& + B_c(E_1, E_2, n-1)] + \kappa_1(E_2, n)C_c(E_1, E_2, n-1) + \\
& + \kappa_1(E_1, n)D_c(E_1, E_2, n-1), \tag{C.14}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B_c(E_1, E_2, n) = & B_c(E_1, E_2, n-2) + \kappa_2(E_1, n)\kappa_2(E_2, n)[A_c(E_1, E_2, n-2) + \\
& + B_c(E_1, E_2, n-1)] + \kappa_2(E_1, n)C_c(E_1, E_2, n-2) + \\
& + \kappa_2(E_2, n)D_c(E_1, E_2, n-2), \tag{C.15}
\end{aligned}$$

$$C_c(E_1, E_2, n) = \kappa_1(E_1, n)\kappa_2(E_2, n)[A_c(E_1, E_2, n-2) + B_c(E_1, E_2, n-1)] + \kappa_2(E_2, n)C_c(E_1, E_2, n-1) + \kappa_1(E_1, n)C_c(E_1, E_2, n-2), \quad (C.16)$$

$$D_c(E_1, E_2, n) = \kappa_1(E_2, n)\kappa_2(E_1, n)[A_c(E_1, E_2, n-2) + B_c(E_1, E_2, n-1)] + \kappa_2(E_1, n)D_c(E_1, E_2, n-1) + \kappa_1(E_2, n)D_c(E_1, E_2, n-2), \quad (C.17)$$

$$A_o(E_1, E_2, n) = 2[A_c(E_1, E_2, n-2) - A_c(E_2, E_1, n-2)][B_c(E_2, E_1, n-1) - B_c(E_1, E_2, n-1)], \quad (C.18)$$

$$B_o(E_1, E_2, n) = 2[A_c(E_1, E_2, n-2) - A_c(E_2, E_1, n-2)][C_c(E_2, E_1, n-1) - D_c(E_1, E_2, n-1)], \quad (C.19)$$

$$C_o(E_1, E_2, n) = 2[C_c(E_1, E_2, n-2) - D_c(E_2, E_1, n-2)][C_c(E_2, E_1, n-1) - D_c(E_1, E_2, n-1)], \quad (C.20)$$

$$D_o(E_1, E_2, n) = 2[B_c(E_1, E_2, n-1) - B_c(E_2, E_1, n-1)][C_c(E_2, E_1, n-2) - D_c(E_1, E_2, n-2)]. \quad (C.21)$$

Para las siguientes expresiones E puede ser E_1 or E_2 . La integral efectiva de salto $[t(E, n)]$ y las auto energías efectivas de los sitios extremos de izquierda y derecha de la renormalización del problema de enlace, $E_L(E, n)$ y $E_R(E, n)$, son dadas por

$$E_R(E, n) = E_R(E, n-2) + t^2(E, n-2)\theta_1(E, n), \quad (C.22)$$

$$E_L(E, n) = E_L(E, n-1) + t^2(E, n-1)\theta_1(E, n), \quad (C.23)$$

$$t(E, n) = t(E, n-1)t(E, n-2)\theta_1(E, n). \quad (C.24)$$

Para el caso de las condiciones a la frontera libres, las funciones de Green del sistema renormalizado son

$$G_{L,L}(E) = [E - E_R(E, n)] / \gamma_G, \quad (C.25)$$

$$G_{R,R}(E) = [E - E_L(E, n)] / \gamma_G, \quad (C.26)$$

$$G_{L,R}(E) = t(E, n) / \gamma_G, \quad (C.27)$$

donde $\gamma_G = [E - E_L(E, n)] [E - E_R(E, n)] - t^2(E, n)$. Para el caso de saturadores finitos, ellas son

$$G_{L,L}(E) = \frac{\{E - E_L(E, n) - E_{RP}(E, m) - \frac{t_P^2(E, m)}{E - E_{LP}(E, m)} - \frac{t^2(E, n)}{E - E_R(E, n) - E_{LP}(E, m) - t_P^2(E, m) / [E - E_{RP}(E, m)]}\}^{-1}}{\quad} \quad (C.28)$$

$$G_{R,R}(E) = \frac{\{E - E_R(E, n) - E_{LP}(E, m) - \frac{t_P^2(E, m)}{E - E_{RP}(E, m)} - \frac{t^2(E, n)}{E - E_L(E, n) - E_{RP}(E, m) - t_P^2(E, m) / [E - E_{LP}(E, m)]}\}^{-1}}{\quad} \quad (C.29)$$

$$G_{L,R}(E) = \frac{G_{R,R}(E)t(E, n)}{\{E - E_L(E, n) - E_{RP}(E, m) - t_P^2(E, m) / [E - E_{LP}(E, m)]\}} \quad (C.30)$$

donde m es el numero de generaci3n del saturador peri3dico construido siguiendo un procedimiento de Fibonacci, excepto que todos 3tomos y enlaces son id3nticos. En las 3ltimas ecuaciones las auto energ3as efectivas y las integrales de salto efectivas est3n dadas por

$$E_{LP}(E, m) = E_{LP}(E, m - 1) + t_P^2(E, m - 1) / \gamma_P(E, m), \quad (C.31)$$

$$E_{RP}(E, m) = E_{RP}(E, m - 2) + t_P^2(E, m - 2) / \gamma_P(E, m), \quad (C.32)$$

$$t_P(E, m) = t_P(E, m - 1)t_P(E, m - 2) / \gamma_P(E, m), \quad (C.33)$$

siendo

$$\gamma_P(E, m) = [E - E_{RP}(E, m - 1) - E_{LP}(E, m - 2)]. \quad (C.34)$$

Finalmente, las condiciones iniciales para la iteraci3n de los procedimientos son

$$t(E, 1) = t_A, \quad E_L(E, 1) = E_R(E, 1) = 0, \quad (C.35)$$

$$t(E, 2) = t_A t_B / E, \quad E_L(E, 2) = t_B^2 / E, \quad E_R(E, 2) = t_A^2 / E, \quad (C.36)$$

$$t_P(E, 1) = t, \quad E_{RP}(E, 1) = E_{LP}(E, 1) = 0, \quad (C.37)$$

$$t_P(E, 2) = t^2 / E, \quad E_{LP}(E, 2) = E_{RP}(E, 2) = t_P(E, 2), \quad (C.38)$$

$$A(E_1, E_2, 1) = C(E_1, E_2, 1) = D(E_1, E_2, 1) = I(E_1, E_2, 1) = 0, \quad (C.39)$$

$$J(E_1, E_2, 1) = K(E_1, E_2, 1) = L(E_1, E_2, 1) = Z(E_1, E_2, 1) = 0, \quad (C.40)$$

$$B(E_1, E_2, 1) = 2t_A^2, \quad F(E_1, E_2, 1) = -t_A^2, \quad (C.41)$$

$$A(E_1, E_2, 2) = -[t(E_1, 2) - t(E_2, 2)]^2 t_B^2 / t_A^2, \quad (C.42)$$

$$B(E_1, E_2, 2) = 4[t^2(E_1, 2) + t^2(E_2, 2)], \quad (C.43)$$

$$C(E_1, E_2, 2) = -[t(E_1, 2) - t(E_2, 2)]^2 t_A^2/t_B^2, \quad (C.44)$$

$$D(E_1, E_2, 2) = 2[t^2(E_1, 2) - t^2(E_2, 2)] t_B/t_A, \quad (C.45)$$

$$F(E_1, E_2, 2) = -[t(E_1, 2) + t(E_2, 2)]^2, \quad (C.46)$$

$$I(E_1, E_2, 2) = 2[t^2(E_2, 2) - t^2(E_1, 2)] t_A/t_B, \quad (C.47)$$

$$J(E_1, E_2, 2) = -t(E_2, 2)t_B/t_A, \quad (C.48)$$

$$K(E_1, E_2, 2) = 2t(E_2, 2), \quad (C.49)$$

$$L(E_1, E_2, 2) = -t(E_2, 2)t_A/t_B, \quad (C.50)$$

$$Z(E_1, E_2, 2) = 0, \quad (C.51)$$

$$\begin{aligned} A_c(E_1, E_2, 1) &= B_c(E_1, E_2, 1) = C_c(E_1, E_2, 1) = 0, \\ D_c(E_1, E_2, 1) &= t_A, \end{aligned} \quad (C.52)$$

$$A_c(E_1, E_2, 2) = t_B^2/E_1, \quad (C.53)$$

$$B_c(E_1, E_2, 2) = t_A^2/E_2, \quad (C.54)$$

$$C_c(E_1, E_2, 2) = 0, \text{ y} \quad (C.55)$$

$$D_c(E_1, E_2, 2) = t_A t_B/E_1 + t_A t_B/E_2. \quad (C.56)$$

Por último, cabe mencionar que los procesos de renormalización son extremadamente eficientes computacionalmente, sin embargo, se requiere de cuádruple precisión para abordar sistemas mayores que 10^6 átomos.

Referencias

- [Abe, *et al.*, 1999] Abe E., T. Sato y A.-P. Tsai, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 5269 (1999).
- [Aldea, *et al.*, 1988] A. Aldea y M. Duela, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1672 (1988).
- [Aguilera, *et al.*, 1987] F. Aguilera-Granja, F. Mejía-Lira, J.L. Morán-Lopez y R.G. Barrera, *Phys. Rev. B* **36**, 7342 (1987).
- [Aoki, 1980] H. Aoki, *J. Phys. C* **13**, 3369 (1980).
- [Ashcroft, *et al.*, 1976] N.W. Ashcroft y N.D. Mermin, *Solid State Physics* (Saunders College, 1976).
- [Ashraff, *et al.*, 1988] J.A. Ashraff y R.B. Stinchcombe, *Phys. Rev. B* **37**, 5723 (1988).
- [Ball, *et al.*, 1985] M.D. Ball y D.J. Lloyd, *Scr. Metall.* **19**, 1065 (1985).
- [Bancel, *et al.*, 1986] P.A. Bancel y P.A. Heiney, *Phys. Rev. B* **33**, 7917 (1986).
- [Barrio, *et al.*, 1990] R.A. Barrio y C. Wang, en *Quasicrystal and Incommensurate Structures in Condensed Matter*, editado por M. José-Yacamán, *et al.* p. 448 (World Scientific, Singapore, 1990).
- [Bendersky, *et al.*, 1987] L.A. Bendersky y F.S. Biancaniello, *Scr. Metall.* **21**, 531 (1987).
- [Besicovitch, 1932] A.S. Besicovitch, *Almost Periodic Functions* (Cambridge University Press, London, 1932).
- [Born, *et al.*, 1965] M. Born y E. Wolf, *Principles of Optics* (Pergamon Press 3^{er} Edición, 1965) p. 66.
- [Callaway, 1974] J. Callaway, *Quantum Theory of the Solid State* (Academic Press, New York, 1974)
- [Cao, *et al.*, 1988] W. Cao, H.Q. Ye y K.H. Kuo, *Phys. Status Solidi A* **107**, 511 (1988).
- [Cardy, 1996] J. Cardy, *Scaling and Renormalization in Statistical Physics* (Cambridge University Press, 1996).
- [Chen, *et al.*, 1987] H.S. Chen J.C. Phillips, P. Villars, A.R. Kortan y A. Inoue, *Phys. Rev. B* **35**, 9326 (1987).
- [Cockayne, *et al.*, 1998] E. Cockayne y M. Widom, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 598 (1998).
- [Datta, 1995] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic System*, (Cambridge University Press, London, 1995)
- [De Picciotto, *et al.*, 2001] R. de Picciotto, H.L. Stormer, L.N. Pfeiffer, K.W. Baldwin y K.W. West, *Nature* **411**, 51 (2001).
- [Ding, *et al.*, 1999] J.W. Ding, X.H. Yan y X.C. Fang, *Chin. Phys. Lett.* **16**, 529 (1999).
- [Dong, *et al.*, 1986] C. Dong, K.Z. Hei, L.B. Wang, Q.H. Song, Y.K. Wu y K.H. Kuo, *Scr. Metall.* **20**, 1155 (1986).
- [Economou, *et al.*, 1981] E.N. Economou y C.M. Soukoulis, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 618 (1981).
- [Economou, 1983] E.N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics* (Springer Series in Solid State Sciences, Vol. 7, 1983).
- [Elliott, *et al.*, 1974] R.J. Elliott, J.A. Krumhansl y P.L. Leath, *Rev. Mod. Phys.* **46**, 465 (1974).
- [Ferry, 1991] D.K. Ferry, *Semiconductors* (Macmillan Pub. Co., New York 1991) p. 488.
- [Geisel, *et al.*, 1991] T. Geisel, R. Ketzmerick y G. Petschel, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 1651 (1991).
- [Goldenfeld, 1992] N. Goldenfeld, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group* (Addison-Wesley Publ. Comp., 1992).
- [Goncalves da Silva, *et al.*, 1981] C.E.T. Goncalves da Silva y B. Koiler, *Solid State Comm.* **40**, 215 (1981).
- [Greenwood, 1958] A.D. Greenwood, *Proc. Phys. Soc.* **71**, 585 (1958).
- [Guyot, *et al.*, 1989] P. Guyot, P. Kramer y M. de Boissieu, *Rep. Prog. Phys.* **54**, 1373 (1989).
- [He, *et al.*, 1988] L.X. He, Y.K. Wu y K.H. Kuo, *J. Mater. Sci. Lett.* **7**, 1284 (1988).
- [He, *et al.*, 1989] S. He y J.D. Maynard, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 1888 (1989).
- [Horiguchi, 1972] T. Horiguchi, *J. Math. Phys.* **13**, 1411 (1972)
- [Huang, *et al.*, 1998] X. Huang y C. Gong, *Phys. Rev. B* **58**, 739 (1998).
- [Imry, *et al.*, 1999] Y. Imry y R. Landauer, *Rev. Mod. Phys.* **71**, S306 (1999).

- [Int. Union of Cryst., 1992] International Union of Crystallography, *Acta Cryst. A* **48**, 922 (1992).
- [Ishimasa, et al., 1985] T. Ishimasa, H.U. Nissen y Y. Fukano, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 511 (1985).
- [Janot, 1994] C. Janot, *Quasocrystals A Primer* (Clarendon Press Oxford, 1994).
- [Jeong, et al., 1997] H.-C. Jeong y P.J. Steinhardt, *Phys. Rev. B* **55**, 3520 (1997).
- [Kimura, et al., 1991] K. Kimura y S. Takeuchi, en *Quasicrystals - the State of the Art*, editado por D.P. DiVincenzo y P.J. Steinhardt, p. 313 (World Scientific, Singapore, 1991).
- [Kittel, 1996] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics* (John Wiley & Sons, 1996).
- [Klein, et al., 1991] T. Klein, C. Berger, D. Mayou y F. Cyrot-Lackmann, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2907 (1991).
- [Kohmoto, et al., 1983] M. Kohmoto, L.P. Kadanoff y C. Tang, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1870 (1983).
- [Kohmoto, et al., 1984] M. Kohmoto y Y. Oono, *Phys. Rev. Lett.* **102A**, 145 (1984).
- [Kohmoto, et al., 1986] M. Kohmoto y J.R. Banavar, *Phys. Rev. B* **34**, 563 (1986).
- [Kohmoto, et al., 1987] M. Kohmoto, B. Sutherland y C. Tang, *Phys. Rev. B* **35**, 1020 (1987).
- [Koshikawa, et al., 1992] N. Koshikawa, S. Sakamoto, K. Edagawa y S. Takeuchi, *Jpn. J. Appl. Phys.* **31**, L966 (1992).
- [Kramer, et al., 1993] B. Kramer y A. MacKinnon, *Rep. Prog. Phys.* **56**, 1469 (1993).
- [Kubo, 1956] R. Kubo, *Can. J. Phys.* **34**, 1274 (1956).
- [Kubo, 1957] R. Kubo, *J. Phys. Soc. Japan* **12**, 570 (1957).
- [Landauer, 1957] R. Landauer, *IBM J. Res. Dev.* **1**, 223 (1957).
- [Landauer, 1970] R. Landauer, *Philos. Mag.* **21**, 863 (1970).
- [Landauer, 1992] R. Landauer, *Physica Scripta* **T42**, 110 (1992).
- [Levine, et al., 1984] D. Levine y P.J. Steinhardt, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2477 (1984).
- [Lu, et al., 1986] J.P. Lu, T. Odagaki y J.L. Birman, *Phys. Rev. B* **33**, 4809 (1986).
- [Luo, et al., 1993] Z. Luo, S. Zhang, Y. Tang y D. Zhao, *Scr. Metall.* **28**, 1513 (1993).
- [Ma, 1973] S.-K. Ma, *Rev. Mod. Phys.* **45**, 589 (1973).
- [Machida, et al., 1986] K. Machida y M. Fujita, *Phys. Rev. B* **34**, 7367 (1986).
- [Maciá, et al., 1996] E. Maciá y F. Domínguez-Adame, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 2957 (1996).
- [Merlin, et al., 1985] R. Merlin, K. Bajema, R. Clarke, F.-Y. Juang y P.K. Bhattacharya, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 1768 (1985).
- [Merzbacher, 1970] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics* (John Wiley, 1970).
- [Miller, et al., 1960] A. Miller y E. Abrahams, *Phys. Rev.* **120**, 745 (1960).
- [Mookerjee, et al., 1986] A. Mookerjee y V.A. Singh, *Phys. Rev. B* **34**, 7433 (1986).
- [Mukhopadhyay, et al., 1986] N.K. Mukhopadhyay, G.N. Subbanna, S. Ranganathan y K. Chattopadhyay, *Scr. Metall.* **20**, 525 (1986).
- [Naumis, et al., 1994] G.G. Naumis, R. A. Barrio y C. Wang, *Phys. Rev. B* **50**, 9834 (1994).
- [Naumis, et al., 1996] G.G. Naumis y J.L. Aragón, *Phys. Rev. B* **54**, 15079 (1996).
- [Naumis, 1999] G. Naumis, *Phys. Rev. B* **59**, 11315 (1999).
- [Newman, et al., 1991] M.E.J. Newman y R.B. Stinchcombe, *Phys. Rev. B* **43**, 1183 (1991).
- [Niikura, et al., 1994] A. Niikura, A.P. Tsai, A. Inoue y T. Masumoto, *Philos. Mag. Lett.* **69**, 351 (1994).
- [Niu, et al., 1986] Q. Niu y F. Nori, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 2057 (1986).
- [Ohashi, et al., 1987] W. Ohashi y F. Spaepen, *Nature* **330**, 555 (1987).
- [Ostlund, et al., 1984] S. Ostlund y R. Pandit, *Phys. Rev. B* **29**, 1394 (1984).
- [Oviedo, et al., 2000] R. Oviedo-Roa, L.A Pérez y C. Wang, *Phys. Rev. B* **62**, 13805 (2000).
- [Oviedo, 2001] R. Oviedo Roa, *Correlación y Transporte de Electrones en Sistemas Aperiódicos*,

- (Tesis Doctoral, UNAM, 2001).
- [Peierls, 1955] R. E. Peierls, *Quantum Theory of Solids*, (Oxford University Press, 1955) p. 108.
 - [Pérez, et al., 1996] L.A. Pérez, O. Navarro y C. Wang, *Phys. Rev. B* **53**, 15389 (1996).
 - [Pfeuty, et al., 1982] P. Pfeuty, R. Jullien y K.A. Penson, *Real-Space Renormalization*, Eds. T.W. Burkhardt y J.M.J. van Leeuwen, *Temas de series en Current Physics* **30** (Springer-Verlag, 1982).
 - [Piéchon, 1996] F. Piéchon, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4372 (1996).
 - [Poon, 1992] S.J. Poon, *Adv. Phys.* **41**, 303 (1992).
 - [Ramachandrarao, et al., 1985] P. Ramachandrarao y G.V.S. Sastry, *Pramana* **25**, L225 (1985).
 - [Roche, et al., 1998] S. Roche y T. Fujiwara, *Phys. Rev. B* **58**, 11338 (1998).
 - [Roy, et al., 1984] C.L. Roy y A. Khan, *Phys. Rev. B* **49**, 14979 (1984).
 - [Sakurai, 1994] J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics* (Addison-Wesley Publishing Company, 1994).
 - [Sastry, et al., 1986] G.V.S. Sastry, V.V. Rao, P. Ramachandrarao y T.R. Anantharaman, *Scr. Metall.* **20**, 191 (1986).
 - [Sato, et al., 1997] T.J. Sato, E. Abe y A.P. Tsai, *Jpn. J. Appl. Phys. A* **36**, L1038 (1997).
 - [Sato, et al., 1998] T.J. Sato, E. Abe y A.P. Tsai, *Philos. Mag. Lett.* **77**, 213 (1998).
 - [Sánchez, et al., 2001] V. Sánchez, L.A. Pérez, R. Oviedo-Roa y C. Wang, *Phys. Rev. B* **64**, 174205 (2001).
 - [Sánchez, et al., 2002] V. Sanchez y C. Wang, *J. of Alloys and Compounds* **342**, 410 (2002).
 - [Sánchez, et al., 2003a] V. Sanchez y C. Wang, (aceptado en *J. of the Physical Society of Japan*, 2002).
 - [Sánchez, et al., 2003b] V. Sanchez y C. Wang, será publicado.
 - [Shechtman, et al., 1984] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias y J.W. Chahn, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1951 (1984).
 - [Stadnik, 1999] Z.M. Stadnik, *Physical Properties of Quasicrystals*, (Springer 1999).
 - [Stephen, et al., 1986] M.J. Stephen y E. Akkermans, *Phys. Rev. B* **33**, 3837 (1986).
 - [Stueckelberg, et al., 1953] E.C. Stueckelberg y A. Petermann, *Helv. Phys. Acta* **26**, 499 (1953).
 - [Sutherland, 1986] B. Sutherland, *Phys. Rev. B* **34**, 3904 (1986)
 - [Sutherland, et al., 1987] B. Sutherland y M. Kohmoto, *Phys. Rev. B* **36**, 5877 (1987).
 - [Sütö, 1994] A. Sütö, en *Beyond Quasicrystal*, editado por F. Axel y D. Gratias (Les Editions de Physique, France, 1994) p. 483.
 - [Schwalm, et al., 1988] W.A. Schwalm y M.K. Schwalm, *Phys. Rev. B* **37**, 9524 (1988).
 - [Tsai, et al., 1989] A.-P. Tsai, A. Inoue y T. Masumoto, *Mater Trans. Jpn. Inst. Met.* **30**, 150 (1989).
 - [Tsai, et al., 1994] A.-P. Tsai, A. Niikura, A. Inoue, T. Masumoto, Y. Nishida, K. Tsuda y M. Tanaka, *Philos. Mag. Lett.* **70**, 169 (1994).
 - [Todd, et al., 1986] J. Todd, R. Merlin, R. Clarke, K.M. Mohanty y J.D. Axe, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1157 (1986).
 - [Tsunetsugu, et al., 1991] H. Tsunetsugu, T. Fujiwara, K. Ueda y T. Tokihiro, *Phys. Rev. B* **43**, 8879 (1991).
 - [van Smaalen, 1988] S. van Smaalen, *Phys. Rev. B* **39**, 5850 (1988).
 - [Villars, et al., 1986] P. Villars, J.C. Phillips y H.S. Chen, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 3085 (1986).
 - [Walther, et al., 1997] D. Walther y R. v. Baltz, *Phys. Rev. B* **55**, 8852 (1997).
 - [Wang, et al., 1987] N. Wang, H. Chen y K.H. Kuo, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 1010 (1987).

- [Wang, et al., 1988] C. Wang y R.A. Barrio, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 191 (1988).
- [Wang, 1989] C. Wang, *Quasiperiodicidad en la Física de los Sólidos de Dimensionalidad Restringida* (Tesis Doctoral, UNAM, 1989).
- [Wang, et al., 1992] C. Wang y R.A. Barrio, en *Surface Science*, Springer Proceedings in Physics **62**, editado por F.A. Ponce y M. Cardona, p. 67 (Springer-Verlag, Berlin, 1992).
- [Wang, et al., 1993] C. Wang, R. Fuentes, O. Navarro, R.A. Barrio y R.G. Barrera, *J. of Non-Cryst. Solids* **153**, 586 (1993).
- [Wang, et al., 2001a] C. Wang, R. Oviedo-Roa, L.A. Pérez y V. Sánchez, *Ferroelectrics* **250**, 305 (2001).
- [Wang, et al., 2001b] C. Wang, R. Oviedo-Roa, V. Sánchez y L.A. Pérez, en *Quasicrystals – Preparation, Properties and Applications*, editado por E. Bellin-Ferré, et al., Materials Research Society Symposium Proceedings **643**, K9.20 (2001).
- [White, 1992] S.R. White, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2863 (1992).
- [Wilson, 1975] K. Wilson, *Rev. Mod. Phys.* **57**, 773 (1975).
- [Yoshida, et al., 1991] K. Yoshida y Y Taniguchi, *Philos. Mag. Lett.* **63**, 127 (1991).
- [Zhu, et al., 1997] S.N. Zhu, Y.Y. Zhu y N.B. Ming, *Science* **278**, 843 (1997).
- [Ziman, 1979] J.M. Ziman, *Models of Disorder* (Cambridge University Press, London, 1979).
- [Zubarev, 1960] D.N. Zubarev, *Sov. Phys. Usp.* **3**, 320 (1960).

TESIS CON
 FALLA DE ORIGEN