



# UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

POSGRADO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES

LOCALIZACIÓN Y TRANSPORTE ELECTRÓNICO EN SISTEMAS  
PERIÓDICOS Y APERIÓDICOS CON IMPUREZAS

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:

DOCTOR EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES

PRESENTA:

FERNANDO SÁNCHEZ RUEDA

TUTOR PRINCIPAL

DRA. VICENTA SÁNCHEZ MORALES  
FACULTAD DE CIENCIAS, UNAM

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR

DRA. MONSERRAT BIZARRO SORDO  
INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN MATERIALES, UNAM

DR. CHUMIN WANG CHEN  
INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN MATERIALES, UNAM

CIUDAD DE MÉXICO, JULIO 2017



Universidad Nacional  
Autónoma de México



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

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

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

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

*Con cariño a mi familia y amigos*

# Agradecimientos

Le agradezco a la *Universidad Nacional Autónoma de México* y al *Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM* por brindarme la oportunidad de realizar mis estudios de doctorado. También, agradezco a la *Facultad de Ciencias, UNAM* y especialmente al *Departamento de Física* por proporcionarme un espacio (cubículo 404) en el cual realicé mi trabajo de investigación.

Le agradezco a mi madre Raquel Rueda y a mi padre Martín F. Sánchez por su gran apoyo incondicional a lo largo de mi vida. A mi hermano Alejandro Sánchez por crecer conmigo.

Le agradezco infinitamente a la *Dra. Vicenta Sánchez Morales* por haberme guiado y motivado a través de esta etapa de mi vida académica.

Al *Dr. Chumin Wang Chen* por el apoyo académico que me ha proporcionado desde el momento que tuve el placer de conocerlo.

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

Agradezco a la *Dra. Lucia Medina*, al *Dr. Oracio Navarro*, al *Dr. Francisco Miguel de Jesús Castro* y al *Dr. Luis Antonio Pérez*, por sus valiosos comentarios que enriquecieron en gran medida este trabajo de tesis.

Le agradezco a mis amigos M. en C. Juan Guillermo Munguía, M. en C. Alejandro Villarreal, M. en C. Mariana Centeno, M. en C. Alessio Palavicini y al Fís. Jorge Pineda por sus consejos y compañía. A mis amigas (2) de la carrera de Física Biomédica por brindarme su amistad. Finalmente, a Luis A. Galeote y Abraham Lima por sus divertidos comentarios.

Agradezco al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por la beca recibida durante mis estudios de doctorado.

Finalmente, agradezco a la *DGAPA* por el apoyo recibido a través del proyecto *PAPIIT IN114916* y a la *DGTIC* por permitirme utilizar la supercomputadora “*Miztli*”, donde se realizaron los resultados numéricos de esta tesis de doctorado.

## Publicaciones:

Las publicaciones derivadas de este trabajo de tesis son las siguientes:

- 1.- Vicenta Sánchez, Fernando Sánchez y Chumin Wang  
"Electronic Transport in Generalized Fibonacci Lattices: A Real-Space Renormalization Approach to the Kubo-Greenwood Formula", *Numerical Methods for Scientific Computations and Advanced Applications*, **1**, 95-98, (2014) ISBN: 978-954-91700-7-8.
- 2.- Vicenta Sánchez, Carlos Ramírez, Fernando Sánchez y Chumin Wang  
"Non-perturbative study of impurity effects on the Kubo conductivity in macroscopic periodic and quasiperiodic lattices", *Physica B* **449**, 121–128, (2014).
- 3.- Chumin Wang, Carlos Ramírez, Fernando Sánchez y Vicenta Sánchez  
"Ballistic Conduction in Macroscopic Non-Periodic Lattices", *Physica Status Solidi B* **252**, No. 6, 1370–1381, (2015).
- 4.- Fernando Sánchez, Vicenta Sánchez y Chumin Wang  
"Renormalization approach to the electronic localization and transport in macroscopic generalized Fibonacci lattices", *Journal of Non-Crystalline Solids* **450**, 194-208, (2016).
- 5.- Vicenta Sánchez, Fernando Sánchez, Carlos Ramírez y Chumin Wang  
"Non-perturbative analysis of impurity effects on the Kubo conductivity of nano to macroscopic structures", *Materials Research Society Advances (MRS advances)* **1**, 1779-1789, (2016).

# Resumen

En esta tesis de investigación mostramos los resultados del estudio del transporte electrónico en redes de Fibonacci generalizado (FG) mediante el formalismo de Kubo-Greenwood a temperatura cero, dentro de la aproximación de amarre fuerte. Hemos desarrollado un nuevo método de renormalización unificado capaz de calcular la conductividad eléctrica DC y AC en redes de FG de tamaño macroscópico. Estudiamos la densidad de estados (*DOS*), la conductividad eléctrica ( $\sigma$ ), la localización de la función de onda mediante el coeficiente de Lyapunov ( $\gamma$ ) y la razón de participación (*PR*) para nueve sistemas de Fibonacci generalizado abordando el problema de enlace; en donde las energías de sitio son constantes en tanto que las integrales de salto son variables y siguen una de las secuencias de FG. También, desarrollamos por primera vez un método de renormalización en espacio real para calcular el *PR* de redes macroscópicas de FG descritas por el Hamiltoniano antes mencionado. Además, con los métodos de renormalización desarrollados analizamos el efecto de las impurezas de sitio y de enlace en la conductividad eléctrica en sistemas periódicos y cuasiperiódicos. Asimismo, estudiamos la conductancia eléctrica en redes bidimensionales cuadradas con un plano de impurezas tipo Fano periódico y no-periódico. Finalmente, analizamos la conductancia eléctrica en nanoalambres de tamaño macroscópico cuyas integrales de salto siguen un ordenamiento tipo FG. Los sistemas estudiados fueron nueve cadenas de Fibonacci generalizado  $(m,n)$  de tamaño macroscópico, con  $m=1, 2, 3$  y  $n=1, 2, 3$ . Al analizar la longitud de localización de la función de onda mediante el *PR*, encontramos que esta medida puede no ser apropiada para redes cuasicristalinas. Demostramos analítica y numéricamente la existencia de estados transparentes para el potencial químico cero en algunas cadenas de FG. En particular, encontramos un estado transparente para  $\mu=0$  en la cadena de FG (2,1) para cualquier generación par y  $\chi=t_A/t_B > 0$ . Sin embargo, el *PR* correspondiente tiene un valor límite de cero, el cual demostramos de forma analítica. Además, nuestros resultados confirman la estrecha relación entre la localización de la función de onda y el transporte electrónico a temperatura cero para sistemas con  $n \neq 1$ . Por ejemplo, la semejanza entre los espectros de la conductividad DC y del coeficiente de Lyapunov. En particular, las cadenas de FG con  $n=1$  presentan autosimilaridad lo que origina un decaimiento como ley

de potencias del promedio espectral de la conductividad y del  $PR$  conforme el número de átomos se incrementa. En contraste, las cadenas de FG con  $n = 2$  y  $n = 3$  presentan zonas de alta conductividad con un comportamiento oscilante, lo cual ocasiona el lento decaimiento de sus promedios espectrales. Además, desarrollamos una expresión analítica para el exponente de Lyapunov para redes periódicas. También, realizamos el primer análisis global de la conductividad AC sobre todo el espectro para cadenas de FG. Encontramos picos resonantes de alta conductividad AC (más de 4 órdenes de magnitud) en comparación con el espectro AC de redes periódicas, cuyo valor promedio crece más rápido en los sistemas no-cuasiperiódicos que en los cuasiperiódicos. Por otra parte, estudiamos el efecto de las impurezas de sitio y de enlace en la conductividad eléctrica DC en cadenas periódicas y cuasiperiódicas. Obtuvimos expresiones analíticas para una y dos impurezas de sitio en una cadena periódica. Además, observamos que la separación entre las impurezas determina el número de máximos del espectro. En particular, encontramos un estado transparente en  $\mu = 0$  cada tres generaciones en cadenas de Fibonacci (1,1) para un número par de impurezas de enlace. También, analizamos la conductancia eléctrica en redes bidimensionales cuadradas, donde por primera vez demostramos de forma analítica que una cinta periódica con un solo plano de impureza Fano presenta un pico de conductancia balística en  $\mu = 0$ . Finalmente, la conductancia eléctrica en nanoalambres de FG es analizada

# Introducción

Las propiedades físicas de cada material están relacionadas con su estructura atómica [Askeland,1998]. En particular, los estados electrónicos pueden ser modificados al introducir un desorden estructural. Dichos estados son extendidos en sistemas periódicos y exponencialmente localizados en sistemas aleatoriamente desordenados en una y dos dimensiones [Abrahams, 1979]. Por otra parte, el grado de localización de la función de onda electrónica en sistemas cuasiperiódicos y aperiódicos no ha sido completamente comprendido.

Actualmente, el estudio de los estados electrónicos en estructuras artificiales es de gran importancia en la física de materia condensada, debido a que estas estructuras nos conducen a descubrir nuevas propiedades físicas que pueden llegar a ser esenciales en dispositivos de escala atómica. Estas estructuras pueden ser multicapas, nanoalambres, nanotubos, heteroestructuras tipo core-shell, etc. En particular, los sistemas cuasiperiódicos y aperiódicos han sido de gran interés a partir del descubrimiento de los cuasicristales [Shechtman, 1984] y más aún desde la obtención de aleaciones cuasiperiódicas de alta calidad. Las redes cuasiperiódicas son proyecciones de estructuras periódicas desde un espacio de mayor dimensión. Dentro de los sistemas cuasiperiódicos más estudiados figura la red de Fibonacci. La cual puede consistir en una cadena de dos tipos de bloques  $A$  y  $B$  con un orden cuasiperiódico que se construye sustituyendo  $A \rightarrow AB$  y  $B \rightarrow A$ . Una generalización de la secuencia de Fibonacci se obtiene mediante la sustitución de  $A \rightarrow A^m B^n$  y  $B \rightarrow A$ , donde  $m$  y  $n$  son números enteros positivos [Macia, 2012]. El símbolo  $A^m$  representa una cadena de  $mA$ 's y de manera análoga para  $B^n$ .

En la presente tesis analizamos de forma detallada el transporte cuántico, el coeficiente de Lyapunov y la razón de participación en redes de Fibonacci generalizado con una longitud macroscópica. En el capítulo 1 hacemos un resumen de los distintos enfoques que se han empleado en el estudio del transporte electrónico, partiendo de un punto de vista clásico hasta llegar a uno cuántico. Dentro de este último, desarrollamos el formalismo de Kubo-Greenwood para estudiar la conductividad eléctrica en sistemas cuyo ordenamiento de sus integrales de salto siguen una secuencia de Fibonacci generalizado (FG). Además, utilizamos el teorema de convolución para estudiar la conductancia en sistemas aperiódicos multidimensionales. Por otra parte,



definimos la localización de la función de onda electrónica a través de los elementos de la matriz de transferencia obtenidas a partir de la ecuación de Schrödinger (coeficiente de Liapunov) como también utilizando el inverso de la razón de participación para estudiar los sistemas de FG.

En el capítulo 2, damos un panorama general de la clasificación de los materiales dependiendo de su arreglo atómico, enfocándonos principalmente en las propiedades y aplicaciones de los sistemas cuasiperiódicos. También, realizamos una síntesis de los métodos empleados para modelar este tipo de estructuras. Y finalmente, definimos detalladamente los sistemas de FG.

En el capítulo 3, mostramos los principales resultados obtenidos para la densidad de estados (*DOS*), transporte electrónico DC, el coeficiente de Lyapunov ( $\gamma^{-1}$ ) y la razón de participación (*PR*) para nueve sistemas de FG. Además, desarrollamos las expresiones analíticas para los estados transparentes (coeficiente de transmisión uno) en diversos sistemas de FG. Más aún, presentamos el promedio espectral de la conductividad eléctrica DC y de la razón de participación en sistemas de FG. También, realizamos un análisis del promedio espectral de la conductividad eléctrica AC para los nueve sistemas de FG. Con respecto a los sistemas multidimensionales, llevamos a cabo un estudio de la conductancia eléctrica en nanocintas y nanotubos cuyas integrales de salto siguen alguna de las secuencias de FG.

Finalmente, presentamos las conclusiones de este trabajo, así como dos apéndices. En el apéndice 1, mostramos las fórmulas de renormalización para la densidad de estados y en el segundo las fórmulas de renormalización para el cálculo del *PR*.

## Índice

Capítulo 1. Transporte Electrónico.....	1
Introducción .....	1
1.1 Modelo de Drude.....	1
1.2 Conductividad eléctrica DC en un metal .....	2
1.3 Fórmula de Landauer .....	4
1.4 Matriz de transferencia.....	7
1.5 Localización .....	9
1.6 Ecuación de Boltzmann .....	10
1.7 Formalismo de Kubo-Greenwood.....	15
Capítulo 2. Estructura Interna de la Materia .....	20
Introducción .....	20
2.1 Sistemas periódicos.....	20
2.2 Sistemas amorfos .....	23
2.3 Sistemas cuasiperiódicos.....	25
2.3.1 Estabilidad cuasicristalina .....	27
2.3.2 Aplicaciones de los cuasicristales.....	28
2.4 Método inflación y adición .....	30
2.5 Fibonacci Generalizado.....	32
Capítulo 3. Resultados.....	36
Introducción .....	36
3.1 Método de renormalización aplicado a la fórmula de Kubo-Greenwood.....	36
3.2 Método de convolución.....	42
3.3 Sistemas unidimensionales: Localización y conductividad DC .....	46
3.4 Conductividad AC.....	53
3.5 Sistemas aperiódicos con impurezas.....	56
3.6 Transporte balístico en cadenas de FG .....	63
3.7 Sistemas tridimensionales: Nanoalambres de Fibonacci Generalizado.....	67
3.8 Nanoalambres aperiódicos con impurezas.....	69

Capítulo 4. Conclusiones.....	75
Apéndices .....	78
Apéndice A: Fórmulas de renormalización para la densidad de estados.....	78
Apéndice B: Fórmulas de renormalización para la razón de participación. ....	82
Referencias .....	84

# Capítulo 1. Transporte Electrónico

## Introducción

Con el aumento en la cantidad de transistores en los procesadores, el doble cada dos años (tendencia descrita por la ley de Moore), se han logrado construir computadoras cada vez más compactas y eficientes. Actualmente existen procesadores con transistores de 14 nm y se espera que para el año 2028 existan de 5 nm [ITRS, 2013]. En estas escalas, los efectos cuánticos se vuelven relevantes y afectan las propiedades eléctricas, magnéticas, térmicas de los materiales. Una de las propiedades más estudiadas es el transporte eléctrico, debido a sus posibles aplicaciones en el desarrollo de la tecnología. Se han utilizado diversas teorías con el propósito de comprender el mecanismo de la conducción eléctrica. Por ejemplo, desde un enfoque clásico se encuentra el modelo de Drude; la ecuación de transporte de Boltzmann usando un semiclásico y desde un punto de vista cuántico el problema de la conductividad eléctrica puede ser estudiado por la teoría de Landauer y el formalismo de Kubo-Greenwood.

### 1.1 Modelo de Drude

La característica más importante de un metal es su alta conductividad eléctrica. Alrededor de 1900, poco después del descubrimiento del electrón por J. J. Thompson, las personas se comenzaron a interesar en comprender el mecanismo de la conducción en metales. El primer trabajo realizado por E. Riecke en 1898 fue rápidamente superado por el de Drude en 1900 [Drude, 1900]. Drude propuso un modelo extremadamente simple que explicaba una ley empírica bien conocida, la ley de Wiedemann-Franz (1853). Esta ley establece que, a una temperatura dada, la razón entre la conductividad térmica y la conductividad eléctrica es la misma para todos los metales [Quinn, 2009]. Las suposiciones básicas de este modelo son [Ashcroft, 1976]:

1. Los metales contienen electrones libres los cuales forman un gas de electrones.

2. En las colisiones, se desprecia la interacción electrón-electrón (aproximación de electrón independiente) y electrón-ion (aproximación de electrón libre.) En ausencia de un campo electromagnético externo cada electrón se mueve en línea recta. Por otra parte, en presencia de un campo externo aplicado cada electrón realiza un movimiento determinado por las leyes de movimiento de Newton, pero despreciando los campos adicionales producidos por otros iones y electrones.
3. Las colisiones son eventos instantáneos que alteran abruptamente la velocidad de un electrón. Se asume que los electrones experimentan una colisión con una probabilidad por unidad de tiempo  $1/\tau$ . Lo cual significa que la probabilidad de que un electrón se someta a una colisión en un intervalo de tiempo infinitesimal, de duración  $dt$ , es  $dt/\tau$ . Donde  $\tau$ , es un valor conocido como tiempo de relajación del sistema o tiempo de colisión, el cual juega un papel fundamental en la teoría de la conducción metálica.
4. Supone que los electrones adquieren un equilibrio térmico con sus alrededores solo a través de sus colisiones. Estas colisiones se asumen para mantener un equilibrio termodinámico local. De una manera simple: inmediatamente después de cada colisión, un electrón sale con una dirección aleatoria y una velocidad adecuada a la temperatura existente en el lugar donde ocurrió la colisión. Así, de la región más caliente, emergerá un electrón más rápido.

En el siguiente apartado, se desarrollará la conductividad eléctrica DC para un metal empleando el modelo de Drude.

## 1.2 Conductividad eléctrica DC en un metal

De acuerdo con la ley de Ohm, el potencial ( $V$ ) en un alambre es directamente proporcional al producto de la resistencia ( $R$ ) por la corriente que fluye en él ( $I$ ), es decir:  $V = IR$ . El modelo de Drude explica este comportamiento y proporciona una estimación del tamaño de la resistencia. La resistividad  $\rho$  está definida como una constante de proporcionalidad entre el campo eléctrico ( $\mathbf{E}$ ) en un punto en el metal y la densidad de corriente ( $\mathbf{j}$ ) que es inducida.

$$\mathbf{E} = \rho \mathbf{j}. \quad (1.1)$$

La  $\mathbf{j}$  es un vector paralelo al flujo de carga, cuya magnitud es la cantidad de carga por unidad de tiempo, que atraviesa un área perpendicular al flujo. Por tanto, si una corriente uniforme  $I$  fluye a través de un alambre de longitud  $L$  y sección transversal  $A$ , la densidad de corriente será  $j = I/A$ . Siendo el potencial a lo largo del alambre  $V = EL$  y usando (1.1) obtenemos  $V = \rho IL/A \Rightarrow R = \rho L/A$ .

Si  $n$  electrones por unidad de volumen se mueven con velocidad  $\mathbf{v}$ , entonces, en un tiempo  $dt$  los electrones avanzarán una distancia  $\mathbf{v}dt$  en la dirección de  $\mathbf{v}$ , así que  $n(\mathbf{v}dt)A$  electrones atraviesan un área  $A$  perpendicular a la dirección de flujo. Por lo tanto, la carga a través de  $A$  en un tiempo  $dt$  será  $-nevAdt$  y por tanto la densidad de corriente es

$$\mathbf{j} = -nev, \quad (1.2)$$

donde  $\mathbf{v}$  es el promedio de la velocidad de los electrones. En ausencia de un campo eléctrico, los electrones se mueven aleatoriamente y el promedio de la velocidad  $\mathbf{v}$  es cero. Por tanto, no hay densidad de corriente neta. En presencia de un campo eléctrico  $\mathbf{E}$ , los electrones se mueven en la dirección opuesta al sentido del campo eléctrico. Esto puede ser calculado como sigue:

$$F = Eq = m \frac{dv}{dt} \quad \Rightarrow \quad v = v_0 - \frac{Eet}{m},$$

siendo  $v_0$  su velocidad en  $t = 0$ . Considerando que un electrón emerge de una colisión en una dirección aleatoria, no habrá una contribución de  $v_0$  a la velocidad promedio de los electrones y el promedio de  $t$  es el tiempo de relajación ( $\tau$ ); así tenemos

$$\mathbf{v}_{prom} = -\frac{e\mathbf{E}\tau}{m}; \quad \mathbf{j} = \left( \frac{ne^2\tau}{m} \right) \mathbf{E}. \quad (1.3)$$

Usando que el inverso de la resistividad es la conductividad  $\sigma = 1/\rho$ :

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}; \quad \sigma = \frac{ne^2\tau}{m}. \quad (1.4)$$

Esto establece un estimado de la conductividad ( $\sigma$ ) en términos de las cantidades que son conocidas con excepción del tiempo de relajación  $\tau$ , el cual

podemos calcular usando las resistividades observadas como  $\tau = m/\rho ne^2$ . Otra forma de abordar este problema es a partir del formalismo de Landauer.

### 1.3 Fórmula de Landauer

En semiconductores, las fluctuaciones de carga cerca de las barreras pueden afectar el potencial cerca de las mismas. También, con el flujo de corriente, la función de distribución en si misma puede ser significativamente perturbada desde el equilibrio. La inhomogeneidad espacial resultante del flujo de corriente alrededor de los obstáculos fue estudiada por Landauer [Landauer, 1957, 1970]. Él consideró un sistema unidimensional en el cual una corriente constante era forzada a fluir a través de una estructura que contenía dispersores, con el objetivo de conocer la distribución resultante del potencial debido a la distribución espacialmente inhomogénea de los dispersores. El resultado en una dimensión es denominado “fórmula de Landauer”, la cual derivaremos para el caso de un solo canal [Ferry, 1997].

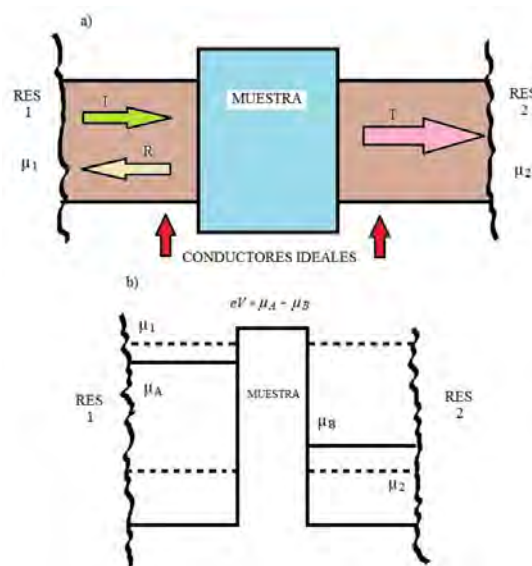


Figura 1 Representación esquemática de la conductancia en una muestra: a) descomposición ideal de la estructura dentro de la muestra donde ocurren las dispersiones y los conductores ideales conectando la muestra a los reservorios en cada lado. b) Redistribución de la carga debida a los reservorios; lo cual origina nuevas energías de Fermi  $\mu_A$  y  $\mu_B$  en el lado izquierdo y derecho respectivamente.

Para empezar, consideraremos el problema general de una barrera para un conductor mostrado en la Figura 1. Conductores ideales conectan la región

dispersora a los reservorios en la izquierda y derecha caracterizados por energías de cuasi-Fermi  $\mu_1$  y  $\mu_2$ , respectivamente, que corresponden a sus densidades electrónicas. Para un determinado sistema unidimensional ideal, la corriente inyectada desde la izquierda y la derecha puede ser escrita como una integral sobre el flujo:

$$I = \frac{2e}{2\pi} \left[ \int_0^\infty dk v(k) f_1(k) T(E) - \int_0^\infty dk' v(k') f_2(k') T(E') \right], \quad (1.5)$$

donde la constante  $2e/2\pi$  es la densidad de estados unidimensional en el espacio  $k$ ,  $v(k)$  es la velocidad,  $T(E)$  es el coeficiente de transmisión,  $f_1$  y  $f_2$  son las funciones de distribución de los reservorios caracterizados por  $\mu_1$  y  $\mu_2$ , respectivamente. La integración se realiza sobre todas las posibles  $k$  y  $k'$  positivas relativas a la dirección de las cargas inyectadas. Si ahora asumimos bajas temperaturas, los electrones son inyectados hasta una energía  $\mu_1$  en el conductor izquierdo e inyectados hasta  $\mu_2$  en el derecho. La integral (1.5) se puede reescribir en función de la energía como,

$$\begin{aligned} I &= \frac{2e}{2\pi} \left[ \int_0^{\mu_1} dE \left( \frac{dk}{dE} \right) v(k) T(E) - \int_0^{\mu_2} dE \left( \frac{dk'}{dE} \right) v(k') T(E) \right] \\ &= \frac{2e}{2\pi\hbar} \int_{\mu_2}^{\mu_1} dE T(E). \end{aligned} \quad (1.6)$$

Si suponemos, que el voltaje aplicado es pequeño (es decir, en el régimen de respuesta lineal) de modo que la dependencia de la energía de  $T(E)$  es depreciable, la corriente se convierte en:

$$I = \left( \frac{2e}{h} \right) T(\mu_1 - \mu_2). \quad (1.7)$$

Como resultado de la transmisión y reflexión alrededor de la barrera, hay una reducción en la densidad de portadores en el lado izquierdo de la barrera y una acumulación de carga en el lado derecho. Asumiendo que permanecemos en el régimen de respuesta lineal, podemos aproximar este rearrreglo de cargas mediante una densidad promedio en los conductores ideales en ambos lados de la estructura dispersiva caracterizada por diferentes energías de Fermi  $\mu_A$  y  $\mu_B$  como se muestra en la Figura 1. La actual caída de voltaje  $V$  a través de la estructura dispersiva está dada por:



$$eV = \mu_A - \mu_B, \quad (1.8)$$

el cual es menor que el voltaje entre los reservorios,  $\mu_1 - \mu_2$ , la diferencia representa una caída de potencial de contacto. Para encontrar esta diferencia de potencial en términos del flujo de corriente a través de la ecuación dada por (1.7), necesitamos escribir la densidad de estados unidimensional para un conductor ideal del lado izquierdo como

$$n_a = \frac{2}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk f_a(E) = \frac{2}{2\pi} \int_0^{\infty} dk [\{2 - T\} f_1(E) + T f_2(E)], \quad (1.9)$$

donde  $f_a(E)$  representa la función de distribución cerca del equilibrio en el conductor izquierdo, caracterizado por una energía de Fermi  $\mu_A$ . La integral sobre  $\pm k$  considera portadores viajando en ambas direcciones. Similarmente, la densidad en el conductor derecho es

$$n_b = \frac{2}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk f_b(E) = \frac{2}{2\pi} \int_0^{\infty} dk [\{2 - T\} f_2(E) + T f_1(E)]. \quad (1.10)$$

Considerando el límite de bajas temperaturas, podemos restar (1.10) a (1.9)

$$2 \int_{\mu_B}^{\mu_A} dE \left( \frac{dk}{dE} \right) = \int_{\mu_2}^{\mu_1} dE \left( \frac{dk}{dE} \right) \{2 - T\} - \int_{\mu_2}^{\mu_1} dE \left( \frac{dk}{dE} \right) T. \quad (1.11)$$

Asumiendo que la diferencia entre las energías de Fermi es suficientemente pequeña podemos despreciar la dependencia de la energía de  $T$  y el inverso de la velocidad,  $dk/dE$ , entonces (1.11) puede ser integrada dando

$$\mu_A - \mu_B = (1 - T)(\mu_1 - \mu_2). \quad (1.12)$$

El número de estados ocupados por arriba de  $\mu_B$  en el lado derecho debido a la inyección desde el lado izquierdo es  $TD(E)(\mu_1 - \mu_B)$ , donde  $D(E)$  es la densidad de estados en la energía correspondiente a las  $k$ 's positivas. El número de estados desocupados por debajo de  $\mu_B$  está dado por  $2D(E)(\mu_B - \mu_2) - TD(E)(\mu_B - \mu_2)$ , los estados debajo de  $\mu_2$  están completamente llenos. A partir de estas ecuaciones podemos escribir

$$T(\mu_1 - \mu_B) = (2 - T)(\mu_B - \mu_2). \quad (1.13)$$

Similarmente, en el lado izquierdo,  $\mu_A$  está definida por

$$(1 + R)(\mu_1 - \mu_A) = (2 - [1 + R])(\mu_A - \mu_2), \quad (1.14)$$

donde el lado izquierdo es el número de estados ocupados por encima de  $\mu_A$  y el lado derecho es el número de estados desocupados por debajo. Combinando las dos últimas ecuaciones nos da la Ec. (1.12), que al sustituirla en la Ec. (1.7) obtenemos

$$I = \left( \frac{2e}{h} \right) \frac{T}{1-T} (\mu_A - \mu_B), \quad (1.15)$$

o en términos de la conductancia usando la Ec. (1.8) obtenemos

$$G = \frac{I}{V} = \left( \frac{2e^2}{h} \right) \frac{T}{1-T} = \left( \frac{2e^2}{h} \right) \frac{T}{R}, \quad (1.16)$$

la cual es finalmente la fórmula de Landauer para un canal [Landauer, 1957, 1970]. Vemos que la conductancia es básicamente el producto de la razón entre el coeficiente de transmisión y el de reflexión en la energía de Fermi y la conductancia fundamental,  $2e^2/h = 7.748 \times 10^{-5}$  mhos. El coeficiente de transmisión puede ser obtenido a partir de la matriz de transferencia total del sistema, dicho formalismo será desarrollado en la siguiente sección.

## 1.4 Matriz de transferencia

Con el objetivo de aislar los efectos cuasicristalinos en las propiedades físicas de las cadenas de FG, consideraremos el Hamiltoniano de amarre fuerte dado por

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} t_{i,j} \{ |i\rangle \langle j| + |j\rangle \langle i| \}, \quad (1.17)$$

donde  $|j\rangle$  representa la función de Wannier del átomo  $j$  con autoenergía nula y  $t_{i,j}$  es la integral de salto entre los primeros sitios vecinos, indicados por  $\langle i,j \rangle$ , las cuales pueden ser  $t_A$  o  $t_B$  arregladas de acuerdo a las secuencias de FG. Por otro lado, la función de onda electrónica  $|\psi\rangle = \sum_j c_j |j\rangle$  satisface la ecuación

estacionaria de Schrödinger, la cual para cadenas periódicas o cuasiperiódicas descritas por el Hamiltoniano de la Ec. (1.17), puede ser escrita como

$$\mathbf{C}_{j+1} = \mathbf{T}_j \mathbf{C}_j \quad (1.18)$$

donde

$$\mathbf{T}_j = \begin{pmatrix} E/t_{j,j+1} & -t_{j,j-1}/t_{j,j+1} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ y } \mathbf{C}_j = \begin{pmatrix} c_j \\ c_{j-1} \end{pmatrix}, \quad (1.19)$$

son respectivamente la matriz de transferencia y el vector amplitud de la función de onda. Los vectores amplitud de los átomos en el inicio y al final de la cadena son relacionados mediante el producto de las matrices de transferencia,

$$\mathbf{T}_N \mathbf{T}(l) \mathbf{T}_1 \equiv \mathbf{T}_N \left( \prod_{j=2}^{N-1} \mathbf{T}_j \right) \mathbf{T}_1 = \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix}, \quad (1.20)$$

donde  $N$  es el número de átomos en la cadena de generación  $l$ .

$$\mathbf{T}(l) = \prod_{j=2}^{N-1} \mathbf{T}_j \quad (1.21)$$

y las matrices de transferencia que conectan al sistema con saturadores periódicos semi-infinitos con autoenergías e integrales de salto  $t$  son

$$\mathbf{T}_1 = \begin{pmatrix} E/t_{1,2} & -t/t_{1,2} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ y } \mathbf{T}_N = \begin{pmatrix} E/t & -t_{N-1,N}/t \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.22)$$

La expresión (1.20) describe la propagación de un electrón a lo largo de una cadena, en donde las funciones de onda tienen la siguiente forma:

$$\psi_n = \begin{cases} Ae^{ikn} + Be^{-ikn} & n \leq 1 \\ Ce^{ikn} + De^{-ikn} & n \geq N \end{cases} \quad (1.23)$$

Para el caso en que el electrón incide del lado izquierdo, tenemos que  $k > 0$ ,  $A=1$ ,  $B=r$ ,  $C=t$  y  $D=0$ , donde  $r$  y  $t$ , es el coeficiente de reflexión y transmisión respectivamente. Los cuales cumplen la relación:  $|r|^2 + |t|^2 = 1$ . Sustituyendo la Ec. (1.23) en la Ec. (1.20) obtenemos

$$\begin{pmatrix} te^{ik(n+1)} \\ te^{ikn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik} + re^{-ik} \\ 1+r \end{pmatrix} \quad (1.24)$$

encontrando que [Sütó, 1994]

$$t = \frac{2i(\sin ka)e^{-ikNa}}{\tau_{11}e^{-ika} + \tau_{12} - e^{ika}(\tau_{21}e^{-ika} + \tau_{22})}, \quad (1.25)$$

y

$$r = \frac{\tau_{11}e^{ika} + \tau_{12} - e^{ika}(\tau_{21}e^{ika} + \tau_{22})}{\tau_{11}e^{-ika} + \tau_{12} - e^{ika}(\tau_{21}e^{-ika} + \tau_{22})}, \quad (1.26)$$

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

$$E - \varepsilon_0 = 2t \cos ka. \quad (1.27)$$

Por lo tanto, la transmitancia ( $T$ ) queda determinada por:

$$T(E) = |t|^2 = \frac{4 - (E/t)^2}{\left[\tau_{21} - \tau_{12} + (\tau_{22} - \tau_{11})E/2t\right]^2 + (\tau_{22} + \tau_{11})^2(1 - E^2/4t^2)} \quad (1.28)$$

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

## 1.5 Localización

Las eigenfunciones para el Hamiltoniano de amarre fuerte de un sistema periódico son ondas de Bloch, extendiéndose uniformemente en toda la red. El desorden aleatorio rompe la simetría de traslación causando algunos eigenestados localizados. Conforme el desorden se incrementa, aumenta la cantidad de estados localizados hasta un valor crítico de desorden, en donde ya no existen estados extendidos y por tanto el material llega a ser un aislante a 0K. Esto es conocido como localización de Anderson [Anderson, 1958]. La localización de los electrones puede ser vista de una manera sencilla como la competencia entre el término del potencial electrostático que tiende a localizar al electrón y la energía cinética del electrón que lo deslocaliza. Cuando el electrón se encuentra en un estado localizado el término electrostático domina [Sutton, 2004].

La localización de la función de onda puede ser analizada mediante el coeficiente de Lyapunov ( $\gamma$ ) y la razón de participación ( $PR$ ). El primero de éstos, fue introducido en la década de 1960 por Furstenberg y Kersten [Ishii, 1973]. Dicho coeficiente se calcula mediante la expresión [Sutto, 1994]

$$\gamma \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\ln \|\mathbf{T}\|}{N}. \quad (1.29)$$

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

$$\|c_N\| \approx \|c_1\| \exp(-N/\xi_0), \quad (1.30)$$

donde  $\xi_0$  es la longitud de localización de la función de onda. Por otro lado, como  $\|c_1\| \approx 1$ , entonces

$$\|c_N\| = \|\mathbf{T}c_1\| \approx \|\mathbf{T}\|. \quad (1.31)$$

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

$$\xi_0 \approx |\gamma^{-1}|. \quad (1.32)$$

Otra manera de calcular la localización es el cálculo de la razón de participación ( $PR$ ). Este concepto fue introducido originalmente por Bell y Dean en 1970 [Bell, 1970] y se define como:

$$PR = \left( \sum_{j=1}^N |c_j(E)|^4 \right)^{-1}, \quad (1.33)$$

El  $PR$  mide la extensión de la función de onda y por lo tanto es una medida adecuada para la localización [Thouless, 1974] [Kramer, 1993]. En general, el inverso de  $\gamma$  es interpretado como la longitud de localización si la función de onda está exponencialmente localizada. Por otro lado, el  $PR$  cuenta el número de átomos que contribuyen a la normalización de la función de onda, es decir,  $PR = N$  para estados totalmente extendidos y  $PR = 1$  para una función de onda con amplitud en solo un átomo.

## 1.6 Ecuación de Boltzmann

Los portadores en un material pueden ser afectados por campos externos, gradientes de temperatura y/o dispersiones originadas por impurezas. Estos efectos deben ser balanceados unos con otros. Tenemos que considerar las

situaciones en que el electrón está siendo acelerado por un campo, pero pierde energía y momento debido a la dispersión. El enfoque más simple a este problema es la *ecuación de transporte* o *ecuación de Boltzmann*. Esta ecuación establece que en cualquier punto y para cualquier valor de  $\mathbf{k}$ , no hay un cambio neto en la función de distribución  $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ , la cual determina la probabilidad de encontrar un electrón en la posición  $\mathbf{r}$ , en el estado  $\mathbf{k}$  y en un tiempo  $t$ . Por lo tanto, la suma de todos los cambios en  $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$  debido a los procesos de difusión, el efecto de los campos y las colisiones es cero, esto es:

$$\left. \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \right|_{\text{difusión}} + \left. \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \right|_{\text{campos}} + \left. \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \right|_{\text{colisiones}} = 0, \quad (1.34)$$

en donde la tasa de cambio de la distribución debida a la difusión es:

$$\left. \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \right|_{\text{difusión}} = -\mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial \mathbf{r}}, \quad (1.35)$$

la cual expresa la ecuación de la continuidad en espacio real en ausencia de fuerzas, campos y colisiones. Para las fuerzas y campos podemos escribir:

$$\left. \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \right|_{\text{campos}} = -\frac{\partial \mathbf{k}}{dt} \cdot \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial \mathbf{k}} \quad (1.36)$$

y de esta manera obtenemos la ecuación de Boltzmann:

$$\left. \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} + \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\partial \mathbf{k}}{dt} \cdot \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial \mathbf{k}} \right|_{\text{colisiones}} = \left. \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} \right|_{\text{colisiones}}, \quad (1.37)$$

la cual incluye las derivadas para todas las variables de la función de distribución en el lado izquierdo y los términos de las colisiones en derecho. La ecuación de Boltzmann es usualmente resuelta usando dos aproximaciones:

1. La perturbación debido a campos y fuerzas externas se supone pequeña para que la función de distribución pueda escribirse como:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = f_0(E) + f_1(\mathbf{r}, \mathbf{k}), \quad (1.38)$$

donde  $f_0(E)$  es la función de distribución en equilibrio (la función de Fermi) la cual depende solamente de la energía  $E$ , mientras que  $f_1(\mathbf{r}, \mathbf{k})$  es la parte perturbativa.

2. El término de colisión en la ecuación de Boltzmann debe ser escrito en la *aproximación del tiempo de relajación* así que el sistema regresa al equilibrio de manera uniforme:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\text{colisiones}} = -\frac{(f - f_0)}{\tau} = -\frac{f_1}{\tau}, \quad (1.39)$$

donde  $\tau$  denota el tiempo de relajación, que en general es función del momento, es decir,  $\tau = \tau(\mathbf{k})$ . La interpretación física del tiempo de relajación es el tiempo asociado a la tasa de retorno a la distribución de equilibrio en ausencia de los campos externos o gradientes térmicos. Al considerar que los campos están desactivados y tomando  $t=0$  nos conducen a

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{(f - f_0)}{\tau}, \quad (1.40)$$

cuya solución es

$$f(t) = f_0 + [f(0) - f_0]e^{-t/\tau}, \quad (1.41)$$

donde  $f_0$  es la distribución de equilibrio y  $f(0)$  la función de distribución en  $t = 0$ . El término de relajación en la ecuación (1.41) sigue un distribución de Poisson indicando que las colisiones relajan la función distribución exponencialmente a  $f_0$  con un tiempo constante  $\tau$ .

Con estas aproximaciones, la ecuación de Boltzmann se resuelve para encontrar la función de distribución que a su vez determina la densidad de portadores y de corriente. La densidad de corriente  $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$  es:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{e}{4\pi^3} \int \mathbf{v}(\mathbf{k}) f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) d^3 k. \quad (1.42)$$

La densidad de portadores  $n(\mathbf{r}, t)$  se obtiene integrando la función de distribución sobre el espacio  $\mathbf{k}$

$$n(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi^3} \int f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) d^3 k. \quad (1.43)$$

La velocidad de los portadores con un momento  $\hbar\mathbf{k}$  está relacionado con la relación de dispersión  $E(\mathbf{k})$ , como:

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}, \quad (1.44)$$

y  $f_0(E)$  la función de distribución de Fermi

$$f_0(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-E_F)/k_B T}}, \quad (1.45)$$

la cual define el estado de equilibrio; donde  $E_F$  es la energía de Fermi y  $k_B$  la constante de Boltzmann.

Para calcular la conductividad eléctrica, consideraremos un campo eléctrico  $\mathbf{E}$  a lo largo de la dirección  $x$ . También, asumiremos que no hay campos magnéticos ni gradientes térmicos. Usando que la densidad de corriente está definida en función del tensor de conductividad  $\boldsymbol{\sigma}$  el cual es evaluado explícitamente en la relación

$$\mathbf{j} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E}, \quad (1.46)$$

de la solución de la Ec. (1.42), empleando  $\mathbf{v}(\mathbf{k})$  de la Ec. (1.44) y la función de distribución  $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ , solución de la ecuación de Boltzmann representada por la Ec. (1.37). El primer término en la ecuación (1.37) desaparece, debido a que el campo eléctrico  $\mathbf{E}$  no tiene dependencia temporal. Para el segundo notamos que:

$$\frac{df}{d\mathbf{r}} = \frac{df_0}{d\mathbf{r}} = \frac{df_0}{dT} \frac{dT}{d\mathbf{r}}. \quad (1.47)$$

Como no hay gradientes térmicos, esta parte no contribuye. El tercer término, puede ser escrito como:

$$\dot{\mathbf{k}} \cdot \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{d\mathbf{k}} = \sum_{\alpha} \dot{\mathbf{k}}_{\alpha} \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{d\mathbf{k}_{\alpha}}, \quad (1.48)$$

donde la expresión de la derecha muestra la suma sobre todas las componentes del vector, obteniendo una contribución, puesto que las ecuaciones de movimiento son:

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = e\mathbf{E} \quad (1.49)$$

y

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{d\mathbf{k}} = \frac{\partial (f_0 + f_1)}{d\mathbf{k}} = \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\partial E}{d\mathbf{k}} + \frac{\partial f_1}{d\mathbf{k}}, \quad (1.50)$$



al considerar la ecuación de Boltzmann linealizada, consideramos solo los términos principales en el campo eléctrico perturbado, así que  $\partial f_1 / d\mathbf{k}$  puede ser despreciado y solo  $(\partial f_0 / \partial E) \hbar \mathbf{v}(\mathbf{k})$  debe ser tomado en cuenta. De esta manera obtenemos la ecuación de Boltzmann linealizada para el caso de un campo eléctrico estático aplicado y sin gradientes térmicos:

$$\dot{\mathbf{k}} \cdot \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{d\mathbf{k}} = \frac{\phi}{\tau} \frac{\partial f_0}{\partial E} = \frac{-f_1}{\tau}, \quad (1.51)$$

de donde

$$f_1 = -\phi \left( \frac{\partial f_0}{\partial E} \right), \quad (1.52)$$

para mostrar la dependencia explícita de  $(\partial f_0 / \partial E)$ . Sustituimos las ecuaciones (1.49) y (1.50) dentro de la Ec. (1.51) obteniendo

$$\left[ \frac{e\mathbf{E}}{\hbar} \left( \frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \right] \cdot [\hbar \mathbf{v}(\mathbf{k})] = \frac{\phi(\mathbf{k})}{\tau} \left( \frac{\partial f_0}{\partial E} \right), \quad (1.53)$$

de esta forma:

$$\phi(\mathbf{k}) = e\tau \mathbf{E} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{k}). \quad (1.54)$$

Por lo que

$$f_1(\mathbf{k}) = -\phi(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0}{\partial E} = -e\tau \mathbf{E} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{k}) \frac{\partial f_0(E)}{\partial E}. \quad (1.55)$$

La densidad de corriente es calculada a partir de la función de distribución  $f(\mathbf{k})$  mediante el cálculo del valor promedio de  $\langle n e \mathbf{v} \rangle$  sobre todo el espacio  $k$ .

$$\mathbf{j} = \frac{1}{4\pi^3} \int e \mathbf{v}(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}) d^3 k = \frac{1}{4\pi^3} \int e \mathbf{v}(\mathbf{k}) f_1(\mathbf{k}) d^3 k \quad (1.56)$$

siendo que

$$\int e \mathbf{v}(\mathbf{k}) f_0(\mathbf{k}) d^3 k = 0. \quad (1.57)$$

La ecuación (1.57) establece que no existe flujo de corriente neta en ausencia de un campo eléctrico aplicado, otra forma de establecer la condición de equilibrio. Sustituyendo  $f_1(\mathbf{k})$  dado por la Ec. (1.55) en (1.56) tenemos:

$$\mathbf{j} = -\frac{e^2 \mathbf{E}}{4\pi^3} \cdot \int \tau \mathbf{v} \mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial E} d^3 k, \quad (1.58)$$

donde en general  $\tau = \tau(\mathbf{k})$  y  $\mathbf{v}$  está dado por la ecuación (1.44). Al comparar la expresión anterior con la Ec. (1.46) vemos que:

$$\boldsymbol{\sigma} = -\frac{e^2}{4\pi^3} \int \tau \mathbf{v} \mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial E} d^3 k, \quad (1.59)$$

siendo  $\boldsymbol{\sigma}$  es un tensor simétrico de rango dos ( $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ ).

## 1.7 Formalismo de Kubo-Greenwood

El desorden tiene un efecto pronunciado sobre las propiedades de transporte que en la densidad de estados (*DOS*). De hecho, la conductividad eléctrica metálica DC es finita y no infinita ( $T = 0K$ ), debido a la presencia del desorden, sin importar lo débil que sea. A medida que el desorden aumenta, se puede producir una transición metal-aislante, es decir, puede prevenir la propagación de los portadores por completo, por tanto, la conductividad sería cero ( $T = 0K$ ). Una herramienta teórica para estudiar la conductividad eléctrica es la fórmula de Kubo-Greenwood dentro del formalismo de las funciones de Green.

La presencia de un campo eléctrico  $\mathbf{E}$  en un sistema induce una densidad de corriente  $\mathbf{j}$ . La conductividad eléctrica se define como el coeficiente de la parte lineal (en  $\mathbf{E}$ ) de  $\mathbf{j}$  [Economou, 2006],

$$\mathbf{j}_\alpha(\mathbf{r}, t) = \int_0^\infty dt' \int d\mathbf{r}' \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t') \mathbf{E}_\beta(\mathbf{r}', t - t'), \quad (1.60)$$

donde los subíndices  $\alpha$  y  $\beta$  denotan las coordenadas cartesianas y tiene una suma implícita sobre los índices repetidos  $\beta$ . Consideraremos que  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{j}$  varían y están a lo largo del eje  $x$ , por lo que solo debemos tomar en cuenta a  $\sigma_{xx}$ . En general tanto  $\mathbf{E}$  como  $\mathbf{j}$  varían lentamente en distancias del orden de  $\ell_0$ , donde  $\ell_0$  se determina por la condición  $\sigma \approx 0$  para  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \gg \ell_0$  ( $\ell_0$  es la distancia de la correlación espacial). En este caso se puede realizar la integración sobre  $\mathbf{r}'$  y el promedio sobre  $\mathbf{r}$  para obtener

$$\mathbf{j}(t) = \int_0^\infty dt' \sigma(t') \mathbf{E}(t-t'), \quad (1.61)$$

donde

$$\sigma(t') = \frac{1}{\Omega} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \sigma(r, r'; t'), \quad (1.62)$$

siendo  $\Omega$  el volumen del sistema. Considerando a  $\sigma(t')$  o su transformada de Fourier

$$\sigma(\omega) = \int_0^\infty dt' \sigma(t') e^{i\omega t'}. \quad (1.63)$$

Si suponemos que  $\mathbf{E}(t)$  está dada por:

$$\mathbf{E}(t) = F e^{-i\omega t} + F^* e^{i\omega t}, \quad (1.64)$$

$$\Rightarrow \mathbf{j}(t) = \int_0^\infty dt' \sigma(t') F e^{-i\omega t} e^{i\omega t'} + \int_0^\infty dt' \sigma(t') F^* e^{i\omega t} e^{-i\omega t'}$$

y usando  $\sigma(\omega)$

$$\Rightarrow \mathbf{j}(t) = F \sigma(\omega) e^{-i\omega t} + F^* \sigma(-\omega) e^{i\omega t}. \quad (1.65)$$

Para que  $\mathbf{j}(t)$  sea real necesitamos que  $\sigma(-\omega) = \sigma^*(\omega)$ , de donde se deduce que la parte real (imaginaria)  $\sigma_1(\sigma_2)$ , de  $\sigma$  es una función par (impar) de  $\omega$ . Estas relaciones son mutuamente dependientes, es decir, conociendo  $\sigma_1$  para  $\omega \neq 0$  uno puede calcular  $\sigma_2$  y en consecuencia  $\sigma(\omega)$ . Estas expresiones son conocidas como *relaciones de Kramers-Kröning*.

Ahora procederemos a obtener una expresión cuántica general para  $\sigma_1(\omega)$ . El promedio temporal de la potencia consumida por el sistema puede escribirse como

$$P = \frac{\Omega}{\Theta} \int_0^\Theta dt \mathbf{E}(t) \mathbf{j}(t), \quad (1.66)$$

donde  $\Theta$  es el período del campo eléctrico externo  $\mathbf{E}(t)$ . Usando las ecuaciones (1.64) y (1.65) tenemos que

$$P = \Omega |F|^2 [\sigma(\omega) + \sigma(-\omega)] = 2\Omega |F|^2 \sigma_1(\omega). \quad (1.67)$$

Así mismo, el promedio de la potencia puede ser calculado multiplicando la energía ( $\varepsilon_{\beta\alpha} \equiv \hbar\omega_{\beta\alpha} = E_\beta - E_\alpha$ ) absorbida por el sistema durante la transición

de  $|\alpha\rangle \rightarrow |\beta\rangle$ , por la razón de transición  $p_{\alpha\beta}$  y sumando sobre todas las posibles transiciones ( $|\alpha\rangle \neq |\beta\rangle$ ):

$$P = \sum_{\alpha\beta} \varepsilon_{\beta\alpha} p_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \varepsilon_{\beta\alpha} (p_{\alpha\beta} - p_{\beta\alpha}), \quad (1.68)$$

donde la probabilidad por unidad de tiempo  $p_{\alpha\beta}$  está dada por:

$$p_{\alpha\beta} = f_{\alpha} (1 - f_{\beta}) W_{\alpha\beta} \quad (1.69)$$

donde  $f_{\nu} = f(E_{\nu})$  la distribución de Fermi-Dirac con  $\nu = \alpha, \beta$  y  $W_{\alpha\beta}$  se obtiene (como la regla de oro de Fermi) considerando la perturbación  $\hat{H}_1 = ex\mathbf{E}(t)$ , dando como resultado

$$W_{\alpha\beta} = \frac{\pi e^2}{\hbar} |F|^2 |\langle \alpha | x | \beta \rangle|^2 \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_{\alpha\beta}). \quad (1.70)$$

Combinando las ecuaciones (1.68), (1.69), (1.70) y comparando con (1.67) obtenemos que:

$$\sigma_1(\omega) = \frac{\pi e^2}{\Omega} \sum_{\alpha\beta} |\langle \alpha | x | \beta \rangle|^2 \omega_{\alpha\beta} (f_{\alpha} - f_{\beta}) \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_{\alpha\beta}), \quad (1.71)$$

donde se introdujo explícitamente un factor de 2 para tomar en cuenta el espín de los electrones. La ecuación (1.71) se conoce como la fórmula de Kubo-Greenwood para la conductividad eléctrica [Kubo, 1956, 1957] [Greenwood, 1958].

Podemos reescribir la expresión (1.71) en términos del momento  $p_x$ ,

$$p_x = m \frac{dx}{dt} = im \frac{\hat{H}x - x\hat{H}}{\hbar}, \quad (1.72)$$

por lo que

$$\langle \alpha | p_x | \beta \rangle = im\omega_{\alpha\beta} \langle \alpha | x | \beta \rangle, \quad (1.73)$$

$$|\langle \alpha | x | \beta \rangle|^2 = \frac{|\langle \alpha | p_x | \beta \rangle|^2}{m^2 \omega_{\alpha\beta}^2}, \quad (1.74)$$

$$\Rightarrow \sigma_1(\omega) = \frac{2\pi e^2}{\Omega} \sum_{\alpha\beta} \frac{|\langle \alpha | p_x | \beta \rangle|^2}{m^2 \omega_{\alpha\beta}^2} \omega_{\alpha\beta} (f_\alpha - f_\beta) \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_{\alpha\beta}), \quad (1.75)$$

reescribiendo la ecuación (1.75) tenemos

$$\begin{aligned} \sigma_1(\omega) &= \frac{2\pi e^2}{\Omega m^2 \hbar \omega} \sum_{\alpha\beta} |\langle \alpha | p_x | \beta \rangle|^2 [f(E_\alpha) - f(E_\beta)] \delta(\hbar\omega - E_\beta + E_\alpha) \\ &= \frac{2\pi e^2}{\Omega m^2 \hbar \omega} \int_{-\infty}^{\infty} dE \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | p_x | \beta \rangle \langle \beta | p_x | \alpha \rangle [f(E_\alpha) - f(E_\beta)] \times \\ &\quad \times \delta(E - E_\alpha) \delta(E + \hbar\omega - E_\beta). \end{aligned} \quad (1.76)$$

Introduciendo  $\sum_{\gamma} |\gamma\rangle \langle \gamma| = 1$  al integrando, obtenemos

$$\begin{aligned} &\sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | p_x | \beta \rangle \langle \beta | p_x | \alpha \rangle [f(E_\alpha) - f(E_\beta)] \delta(E - E_\alpha) \delta(E + \hbar\omega - E_\beta) = \\ &= \sum_{\alpha\beta\gamma} \langle \alpha | p_x | \beta \rangle \langle \beta | \gamma \rangle \langle \gamma | p_x | \alpha \rangle [f(E_\alpha) - f(E_\beta)] \delta(E - E_\alpha) \delta(E + \hbar\omega - E_\beta) \quad (1.77) \\ &= \sum_{\alpha\beta\gamma} [f(E_\alpha) - f(E_\beta)] \langle \gamma | p_x | \alpha \rangle \delta(E - E_\alpha) \langle \alpha | p_x | \beta \rangle \delta(E + \hbar\omega - E_\beta) \langle \beta | \gamma \rangle \end{aligned}$$

y la función de Green puede escribirse de la forma:

$$\sum_{\alpha} \delta(E - E_\alpha) |\alpha\rangle \langle \alpha| = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G^+(E), \quad (1.78)$$

donde  $G^+(E)$  es la función de Green retardada. Así, la ecuación (1.76) es

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\pi^2} \sum_{\gamma} [f(E_\alpha) - f(E_\beta)] \langle \gamma | p_x \text{Im} G^+(E) p_x \text{Im} G^+(E + \hbar\omega) | \gamma \rangle = \\ &= \frac{1}{\pi^2} [f(E) - f(E + \hbar\omega)] \text{Tr} [p_x \text{Im} G^+(E) p_x \text{Im} G^+(E + \hbar\omega)] \end{aligned} \quad (1.79)$$

Finalmente  $\sigma_1(\omega)$  es:

$$\begin{aligned} \sigma_1(\omega) &= \frac{2e^2 \hbar}{\pi \Omega m^2} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{f(E) - f(E + \hbar\omega)}{\hbar\omega} \\ &\quad \times \text{Tr} [p_x \text{Im} G^+(E) p_x \text{Im} G^+(E + \hbar\omega)] \end{aligned} \quad (1.80)$$

La Ec. (1.80) se conoce como la fórmula de Kubo-Greenwood, la unidad de la conductividad  $[\sigma] = m^{2-d} / \Omega^{-1}$ , donde  $d$  es la dimensión del sistema.

Como ya habíamos mencionado, nuestro objetivo es investigar el transporte cuántico en sistemas aperiódicos. Esencialmente existen dos caminos para estudiar este problema; empleando el espacio recíproco o mediante la renormalización en espacio real. El primero se basa en el teorema de Bloch y en primera zona de Brillouin. El segundo consiste en reducir los grados de libertad del sistema, pero conservando su exacta participación en la solución final del problema. Los sistemas de Fibonacci generalizado al ser cuasiperiódicos o no-cuasiperiódicos carecen de espacio recíproco por lo que el método de renormalización es buena opción para estudiarlos. Dicho método está desarrollado en la sección de resultados.

# Capítulo 2. Estructura Interna de la Materia

## Introducción

Existe una relación entre los elementos estructurales de los materiales y sus propiedades eléctricas, magnéticas, térmicas y ópticas. Actualmente, el objetivo de la ciencia de materiales es diseñar, sintetizar y caracterizar materiales cuyas propiedades sean superiores a las de sus componentes originales. Esto se ha logrado mejorando los procesos de fabricación, aumentando la pureza de las muestras o bien añadiendo algunas impurezas. De hecho, la microelectrónica actual se basa en dopar el silicio cristalino con elementos que se encuentran en las columnas III o V de la tabla periódica, originando cambios cualitativos en la naturaleza de sus portadores de carga mediante un dopaje de únicamente una parte por millón. Un avance en la comprensión de la estructura de la materia nos acerca cada vez más al descubrimiento de nuevas tecnologías.

En este capítulo haremos una síntesis de los conceptos básicos de la estructura de los materiales. Definiremos los materiales cristalinos, las redes de Bravais, los materiales amorfos, los materiales cuasiperiódicos y hablaremos de algunas de sus aplicaciones.

### 2.1 Sistemas periódicos

Es usual considerar a los cristales como objetos naturales con características geométricas externas regulares, por ejemplo, los diamantes. Dicha regularidad tiene su origen en la distribución periódica de sus átomos o moléculas a lo largo de toda su estructura [Alloul, 2007].

Existen tres niveles de arreglos atómicos cuando no se consideran imperfecciones en la materia. *Sin orden*, por ejemplo, en gases como el argón, los átomos llenan de manera aleatoria el espacio en el cual están confinados. El *orden de corto alcance* lo muestran aquellos materiales cuyo arreglo espacial de los átomos se extiende solo a los vecinos más cercanos, por ejemplo, cada

molécula de agua en fase vapor tiene un orden de corto alcance debido a los enlaces covalentes entre los átomos de hidrógeno y oxígeno, sin embargo, las moléculas de agua no tienen una organización espacial entre sí; situación similar ocurre en los vidrios cerámicos. Finalmente, el *orden de largo alcance* es una característica de aquellos materiales cuyo arreglo espacial de los átomos se extiende por todo el material, formando un patrón repetitivo denominado red. De aquí surge el concepto de material cristalino.

Un cristal es un arreglo de átomos o moléculas invariante ante translaciones en las tres direcciones espaciales  $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$ . Si se elige un origen  $O$  en el espacio, un cristal puede ser construido en dos pasos [Alloul, 2007]:

1. Producimos una red de puntos respecto de  $O$  mediante todas las translaciones

$$\mathbf{R}_1 = l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2 + l_3 \mathbf{a}_3 \quad (2.1)$$

donde,  $l_1, l_2$  y  $l_3$  son enteros. Este conjunto de puntos (puntos de la red o nodos) constituyen la red cristalina o red de Bravais.

2. Colocamos la base (conjunto de átomos o moléculas) en los puntos de la red y llenamos todo el espacio.

Las redes de Bravais son un arreglo infinito de puntos discretos con una disposición y orientación que es exactamente igual desde cualquier punto de la estructura. Mediante la teoría de grupos se ha demostrado que en una dimensión sólo existe una única red de Bravais, 5 redes en sistemas bidimensionales y 14 modelos distintos de redes en tres dimensiones, agrupadas en siete sistemas cristalinos (ver Figura 2.1).



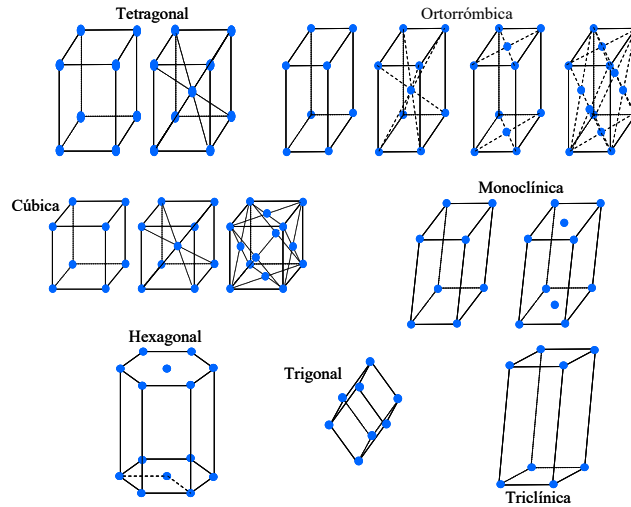


Figura 2.1 Redes de Bravais. Clasificadas en siete sistemas: cúbico (3), tetragonal (2), ortorrómbico (4), monoclinico (2), triclínico (1), trigonal (1) y hexagonal (1).

La red de puntos provee una forma de definir una *celda primitiva*. Dicha celda no es única y es construida a partir de los vectores característicos del sistema, cuyos módulos son los más pequeños posibles. A cada celda primitiva puede asociarse unívocamente un punto de la red. Para obtener la celda primitiva se puede utilizar el método de Wigner-Seitz, el cual consiste en dibujar líneas rectas desde un determinado elemento de la red conectándolo con sus primeros vecinos, luego se trazan líneas rectas que bisectan las primeras líneas dibujadas y finalmente la celda primitiva es el área contenida de la intersección de las bisectrices, ver Figura 2.2. Con la repetición infinita de la celda primitiva es posible obtener toda la estructura cristalina

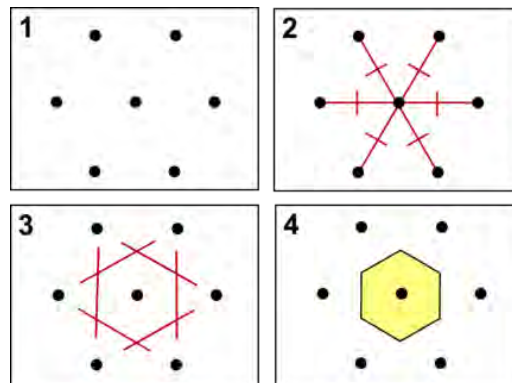


Figura 2.2 Proceso de obtención de una celda de Wigner-Seitz.

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

## 2.2 Sistemas amorfos

Los términos: sólido amorfo, sólido no cristalino, sólido desordenado o vidrio, no tienen ningún significado estructural preciso más allá de la descripción de que la estructura “no es cristalina a una escala significativa” [Kittel, 2005].

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

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

La primera categoría está representada por sólidos tales como polímeros entrecruzados o polímeros orgánicos atácticos (sin orden). La segunda categoría incluye vidrios metálicos (metales amorfos), metaloides, algunos óxidos metálicos y sólidos lineales macromoleculares (polímeros) en los que la disposición atómica es al azar. Cabe señalar que en el vidrio la cristalinidad puede ser desarrollada por el recocido. Los materiales amorfos, presentan espectros de dispersión de rayos X en forma de un halo amorfo y una temperatura de transición vítrea.

Los sólidos amorfos se encuentran entre los materiales más importantes, las aplicaciones van desde el arte hasta la optoelectrónica. Algunas aplicaciones son mostradas en la Tabla I. Los sólidos amorfos se endurecen de forma continua mientras disminuimos la temperatura hasta una temperatura  $T_g$

(temperatura de transición entre el líquido y el sólido). Esto nos permite controlar la viscosidad (y las propiedades de flujo) de la masa fundida y proporciona una ventaja de procesamiento en la preparación de productos formados de vidrio. Por otro lado, un sólido amorfo puede ser usado en lugar de uno cristalino en algunas aplicaciones que tengan que ver con películas delgadas ya que se evitan problemas asociados con las policristalización.

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

Sólido Amorfo	Material	Aplicación	Propiedad
Vidrio	$(\text{SiO}_2)_{0.8}(\text{Na}_2\text{O})_{0.2}$	Vidrios de Ventana	Transparencia, solidez
Vidrio	$(\text{SiO}_2)_{0.9}(\text{Na}_2\text{O})_{0.1}$	Guías de onda de fibra óptica para redes de comunicaciones	Ultra transparencia
Polímero orgánico	Poliestireno	Materiales estructurales "plásticos"	Resistencia, fácil de producir
Vidrio calcogenuro	Se, $\text{As}_2\text{Se}_3$	Xerografía	Fotoconductividad
Semiconductor amorfo	$\text{Te}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$	Elementos de memoria de computadoras	Transformación de amorfo a cristalino vía campo eléctrico
Semiconductor amorfo	$\text{Si}_{0.9}\text{H}_{0.1}$	Celdas solares	Propiedades ópticas fotovoltaicas
Vidrio metálico	$\text{Fe}_{0.8}\text{B}_{0.2}$	Núcleos de transformadores	Ferromagnetismo

Los materiales amorfos como a-Si:H y las películas delgadas de óxidos son clave para los transistores de película delgada, celdas solares. Las películas amorfas de carbono se utilizan de recubrimiento estándar para brocas, válvulas cardíacas y hojas de afeitar. Los vidrios calcogenuros son base de la tecnología de los DVD-R/W y de las computadoras de memoria flash [Wuttig, Waser, 2007]. Como pudimos apreciar existe una gran cantidad de materiales desordenados que tienen aplicación tecnológica que mejoran la vida cotidiana.

Estos materiales presentan un reto para la física de la materia condensada ya que muestran procesos físicos únicos cuya comprensión podría derivar en aplicaciones tecnológicas importantes

Hasta este punto hemos descrito dos formas tradicionales de clasificar a los materiales basándonos en su estructura atómica. Hoy en día conocemos una nueva clasificación en los sólidos que no son ni periódicos ni amorfos, ellos se encuentran en el intermedio entre estas dos formas de ordenamiento y se les llama estructuras complejas, un ejemplo de ellas son los cuasicristales.

## 2.3 Sistemas cuasiperiódicos

El término cuasiperiodicidad se comenzó a emplear en la década de 1930, por el matemático Bohr [Bohr, 1926]. Posteriormente, tras el descubrimiento de los materiales cuasicristalinos por Shechtman en 1982 [Shechtman, 1984], se incrementó el estudio de los sistemas cuasiperiódicos y de esta manera se comenzaron a estudiar los fenómenos asociados con los arreglos aperiódicos de la materia. En las últimas décadas, diseños de nanoestructuras basados en un orden aperiódico de diferentes bloques de construcción están abriendo caminos para prometedoras aplicaciones tecnológicas [Maciá, 2006].

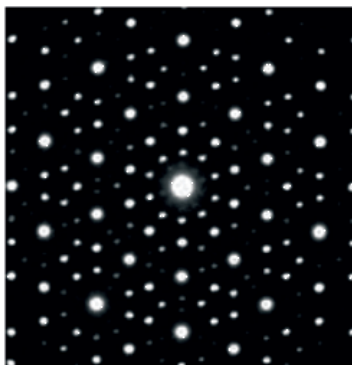


Figura 2.3 Patrón de difracción de la aleación Al-Mn.

En general, los cuasicristales se caracterizan por un perfecto orden de largo alcance, el cual se manifiesta por la aparición de puntos definidos en el patrón de difracción. También, carecen de una periodicidad traslacional

tridimensional, ya que presentan simetrías rotacionales prohibidas para la cristalografía tradicional.

Se han encontrado cuasicristales estables cuyo constituyente principal difiere del aluminio. Por ejemplo, el compuesto binario icosaedral Cd-Ca [Tsai, 2000]. Además, se han producido muestras de alta calidad de cuasicristales estables de compuestos ternarios como Al-Cu-Fe (icosaédrica) [Tsai, 1987], Al-Ni-Co (decagonal) [Tsai, 1989] y Al-Pd-Mn [Tsai, 1990]. Varios grupos han reportado la aparición de las estructuras cuasiperiódicas en líquidos y polímeros también conocidos como cuasicristales suaves [Lifshitz, 2007, Takano, 2004, Zeng, 2004]. También, se ha descubierto una muestra cuasicristalina formada de manera natural en Rusia (Figura 2.4), cuya fase cuasicristalina corresponde a una aleación de Al-Cu-Fe [Bindi, 2009].



Figura 2.4 Cuasicristal natural.

Algunas aleaciones cuasicristalinas contienen elementos conductores, por lo que se supondría que sus propiedades térmicas y de transporte eléctrico serían similares a las de los cristales [Dubois, 2005]. Sin embargo, su comportamiento es similar a los semiconductores y a los materiales desordenados, debido a que presentan una gran resistencia a pequeñas temperaturas y su resistividad disminuye al aumentar la temperatura, lo cual viene acompañado de un incremento en el orden estructural de los materiales. Por otra parte, la conductividad sigue el inverso de la regla de Mathiesen como una función de la temperatura en contraparte con los metales ordinarios [Roche, 1997].

Además, muchos de los cuasicristales basados en aluminio contienen elementos magnéticos como el hierro, cobalto y el níquel, pero muestran propiedades diamagnéticas [Hippert, 2008, Stadnik, 1999]. En cambio, los átomos de manganeso en aleaciones cuasiperiódicas pueden poseer un momento magnético local [Hippert, 2008] y los cuasicristales icosaedrales que

contienen elementos de tierras raras, muestran correlaciones de espín antiferromagnéticas de corto alcance [Sato, 2000a, 2000b].

### 2.3.1 Estabilidad cuasicristalina

A más de tres décadas del descubrimiento de un cuasicristal, las investigaciones se han enfocado en analizar su estructura atómica y sus propiedades físicas. El primer intento exitoso para formar un cuasicristal fue por solidificación rápida, pero ésto originó cuasicristales defectuosos y altamente desordenados. Por esta razón, los cuasicristales fueron considerados como una fase de no-equilibrio relativo con respecto a sus fases cuasicristalinas (aproximantes). Esta situación cambió cuando una serie de cuasicristales estables fue descubierta [Tsai, 1987, 1990, 2000].

Los cuasicristales no son solo estables, sino también altamente ordenados; lo cual nos permite discutir la estabilidad de largo alcance de una estructura cuasiperiódica. Se confirmó empíricamente, a partir de la formación de una serie de aleaciones cuasicristalinas que la concentración de electrones de valencia ( $e/a$ ) es importante para su estabilidad [Tsai, 1999]. También se han observado valores pequeños del coeficiente de calor específico electrónico en una serie de aleaciones cuasicristalinas [Biggs, 1990]. La estructura de bandas calculada para sus fases cuasicristalinas confirma un pseudo-gap en el nivel de Fermi [Fujiwara, 1989]. También, se ha observado teóricamente que la hibridación es un factor dominante en la estabilización de un cuasicristal como en las fases cuasicristalinas [Ishii, 2001].

En general, los cuasicristales se estabilizan esencialmente mediante su estructura electrónica. La razón  $e/a$  es a primera instancia, el criterio más conveniente para entender el mecanismo de estabilización para un gran número de aleaciones. Hume-Rothery y sus colaboradores dedujeron una serie de reglas [Hume-Rothery, 1926] que mostraban que factores favorecen la formación de fases definidas dentro de ciertos rangos de concentraciones para aleaciones binarias  $AB$ . Estas reglas se enuncian a continuación:

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

$$\delta = (r_A - r_B) / r_A, \quad (2.2)$$

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

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

$$e / a = Z_A(1 - c_B) + Z_B c_B, \quad (2.3)$$

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

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

### 2.3.2 Aplicaciones de los cuasicristales

Las técnicas de la metalurgia convencional se han empleado para sintetizar diferentes clases de cuasicristales (QCs), los cuales resisten el tratamiento térmico sin transformarse en cristales convencionales debido al calentamiento. La mayoría de los QCs estables consisten de una mezcla de aluminio con metales de transición, por ejemplo, el hierro, níquel, o el cobalto o metales normales como el Magnesio y el Zinc [Tsai, 1999]. El compuesto ternario dado

por Al-TM (donde TM= Te-Cu o Pd-Mn o Co-Ni o Cu-Ni, etc.) muestra un mejor potencial de utilidad práctica [Dubois, 2005, 2011]. En particular, la aleación icosaedraal Al-Cu-Fe tiene un alto interés comercial debido a su bajo costo.

Las aplicaciones de los cuasicristales pueden ser clasificadas dependiendo del tipo de propiedad que se utilizará [Dubois, 2012]:

- a) Propiedades de transporte: la absorción de luz infrarroja, reduce la adherencia y la fricción, aislamiento térmico y almacenamiento de datos
- b) Reforzamiento mecánico por medio de precipitados *in situ*, o la adición de partículas reforzadas a matrices de metal o polímero.
- c) Propiedades químicas para producir superficies resistentes a la corrosión, catalizadores de bajo costo o medios de almacenamiento de hidrógeno.

Con respecto a las propiedades de transporte, el cuasicristal Al-Cu-Fe exhibe una alta absorción de luz infrarroja, con un coeficiente de reflexión igual a  $R = 0.6$  para bajas frecuencias, lo cual contrasta con el coeficiente asociado con el Al que está muy cerca de la unidad. Esta propiedad puede ser útil en absorbentes de la luz solar como los diseñados por Eisenhammer [Eisenhammer, 1994]. Además, la aleación Al-Cu-Fe tiene propiedades antiadherentes, propiedad que ha sido aprovechada como un recubrimiento cuasicristalino, comercializado por SITRAM bajo la marca comercial de Cybernox. Cabe señalar que su propiedad antiadherente es menor que la del Teflón, pero la dureza de la capa es mayor [Dubois, 1997].

Las barreras térmicas basadas en aleaciones cuasicristalinas reducen la tensión interfacial generada por el ciclo térmico entre el sustrato y el revestimiento. Pueden ser manufacturadas mediante técnicas de pulverización térmica o pulverización catódica con magnetrón, como lo podemos encontrar aplicado en la turbina de un helicóptero. El principal inconveniente de utilizar los QCs proviene que su temperatura de fusión es relativamente baja y su movilidad atómica es significativa. Entonces, debido a su propiedad de aislante



térmico puede ser empleado en motores de combustión, generadores de energía o en general piezas mecánicas que requieren estar en constante movimiento.

La preparación de compuestos de matriz metálica reforzados mediante cuasicristales o complejos intermetálicos han sido de gran interés desde el comienzo de su estudio. La única aplicación comercial exitosa fue la producción de un metal martensítico, el cual ha sido endurecido mediante una precipitación *in situ* de nanopartículas icosaédricas [Lui, 1994], obteniendo excepcionales propiedades mecánicas, que permiten el uso de esta aleación para aplicaciones muy exigentes como las herramientas quirúrgicas.

Respecto a sus potenciales aplicaciones basadas en sus propiedades químicas, estudios en cuasicristales y en aleaciones metálicas complejas bajo condiciones oxidantes o corrosivas, han demostrado que su estructura cristalina específica no tiene prácticamente ninguna influencia en su respuesta a tales ambientes.

Algunas otras aplicaciones de los QCs están siendo exploradas [Dubois, 2005]. Estos incluyen el compuesto Ti-Ni-Zr, el cual muestra un potencial para el almacenamiento de hidrógeno [Kelton, 1997], la catálisis [Yoshimura, 2002], los biomateriales protésicos [Anderson, 2002], amortiguadores ópticos [Eisenhammer, 1997 y 1994].

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

## 2.4 Método inflación y adición

Se han hecho grandes esfuerzos teóricos para estudiar los materiales cuasicristalinos. Para modelar estos sistemas se han empleado diferentes métodos, tales como el de corte y proyección desde un espacio de mayor dimensión, el de adición y el de inflación. En esta sección describiremos los dos últimos métodos.

Consideremos el problema de la cría de conejos, el cual fue tratado por primera vez por el matemático Fibonacci en 1202. En este problema se utilizan

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

$$A \rightarrow AB \text{ y } B \rightarrow A, \quad (2.4)$$

podemos escribir esta misma regla en forma matricial,

$$M_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow M_{ij} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} AB \\ A \end{pmatrix} \rightarrow ABA, \quad (2.5)$$

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

$$M_{ij} \begin{pmatrix} AB \\ A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ABA \\ AB \end{pmatrix} \rightarrow ABAAB. \quad (2.6)$$

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

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

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

$$F_l = F_{l-1} + F_{l-2}. \quad (2.7)$$

Al analizar la forma en que va creciendo el sistema observamos que se puede obtener una nueva generación sumando las dos generaciones anteriores, es decir,

$$f_l = f_{l-1} \oplus f_{l-2}, \quad (2.8)$$

siendo  $f_0=B$  y  $f_1=A$  las condiciones iniciales necesarias para emplear la expresión (2.8). Este es el denominado *método de adición*.

En la Tabla II, compararemos estos últimos métodos con el fin de mostrar que ambas formas son equivalentes.

**Tabla II Métodos de construcción para la secuencia de Fibonacci**

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

Como podemos observar, existe una equivalencia entre el método de inflación y el de adición. Ambos métodos resultan de gran utilidad para generar nuestros sistemas de estudio y de esta manera, analizar la densidad de estados, la conductividad eléctrica en los sistemas de Fibonacci generalizado de tamaño macroscópico. En la siguiente sección describiremos las secuencias de Fibonacci generalizado.

## 2.5 Fibonacci Generalizado

Uno de los sistemas cuasiperiódicos más estudiados es la red de Fibonacci, ya que ésta proporciona un prototipo de estructura para investigar los sistemas cuasiperiódicos y posee estados electrónicos críticamente localizados [Kohmoto, 1987]. Existe una generalización de la secuencia de Fibonacci obtenida mediante la sustitución  $A \rightarrow A^m B^n$  y  $B \rightarrow A$ , donde  $m$  y  $n$  son números enteros positivos. El símbolo  $A^m$  representa una cadena de  $m$   $A$ . La secuencia original de Fibonacci se recupera cuando  $m = n = 1$  y las generalizadas con  $m > 1$  y  $n = 1$  son llamadas reglas preciosas, mientras que las secuencias denominada reglas metálicas son aquellas con  $m = 1$  y  $n > 1$  [Macia, 2012].

Las cadenas de Fibonacci generalizado (FG) pueden ser estudiadas de diferentes formas; usando dos tipos de enlaces (problema de enlaces) [Sánchez, 2004], dos tipos de átomos (problema de sitios) o una combinación de ambos (problema mixto) [Oviedo-Roa, 2000]. En esta investigación estudiamos el problema de enlaces, en donde se considera que los átomos son de la misma

naturaleza con auto-energía nula y dos integrales de salto  $t_A$  y  $t_B$ , las cuales son colocadas siguiendo un ordenamiento tipo FG. Las secuencias de FG ( $S_k$ ) pueden ser generadas mediante el esquema de adición [Oh, 1993, Gumbs, 1995].

$$S_0(m,n) = \{B\}, S_1(m,n) = \{A\}, \text{ y } S_l(m,n) = S_{l-1}^m(m,n) \oplus S_{l-2}^n(m,n) \quad (2.9)$$

donde  $l$  es el índice de la generación,  $m$  y  $n$  enteros positivos arbitrarios que definen el tipo de secuencia  $(m,n)$  de FG. Por ejemplo,  $S_2(2,1) = \{AAB\}$  y  $S_3(2,1) = \{AABAABA\}$ . Las secuencias  $S_l(m,n)$  también pueden ser generadas mediante la regla de sustitución dada por [Fu, 1995, Gumbs, 1995]

$$A \rightarrow A^m B^n \text{ y } B \rightarrow A \quad (2.10)$$

la cual, puede ser reescrita usando la matriz de sustitución ( $\mathbf{M}$ ) como [Macia 2009]

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \rightarrow \mathbf{M} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m & n \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underbrace{AA \cdots A}_m \underbrace{BB \cdots B}_n \\ A \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

La matriz  $\mathbf{M}$  tiene los siguientes eigenvalores ( $\lambda_{\pm}$ )

$$\begin{vmatrix} m - \lambda & n \\ 1 & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda^2 - m\lambda - n = 0 \Rightarrow \lambda_{\pm} = \frac{m \pm \sqrt{m^2 + 4n}}{2}. \quad (2.12)$$

Para  $n=1$ , obtenemos de la ecuación (2.12) que  $\lambda_+ > 1$  y  $|\lambda_-| < 1$ , con lo cual se cumplen las condiciones de Pisot [Cassels, 1957, Macia, 2009]. Más aún, el determinante de  $\mathbf{M}$

$$\begin{vmatrix} m & n \\ 1 & 0 \end{vmatrix} = -n \quad (2.13)$$

es unimodular sí  $n=1$ . Por lo tanto, la correspondiente secuencia es denominada *cuasiperiódica* y presenta un espectro de difracción de Bragg, debido a que satisface tanto las condiciones de Pisot como el determinante igual a uno de  $\mathbf{M}$  [Luck, 1993]. Por el contrario, las secuencias de FG con  $n \neq 1$  no satisfacen las condiciones de Pisot ni el determinante unitario, por lo tanto, éstas no son cuasiperiódicas. Entre las estructuras no cuasiperiódicas, la secuencia de Thue-Morse es también ampliamente estudiada, esta secuencia cumple con las

condiciones de Pisot, pero no la unimodularidad de la matriz de sustitución, en consecuencia, esta secuencia tampoco es cuasiperiódica [Steurer, 2009]

El número total de letras  $A$  y  $B$  en  $S_l(m, n)$  las denotamos como  $F_l(m, n)$  y satisface la relación

$$F_l(m, n) = mF_{l-1}(m, n) + nF_{l-2}(m, n) \quad (2.14)$$

con  $F_0(m, n) = F_1(m, n) = 1$ . En el límite de un tamaño infinito, la razón de  $F_l(m, n)$  para subsecuentes generaciones se define como

$$\tau(m, n) \equiv \lim_{l \rightarrow \infty} \frac{F_{l+1}(m, n)}{F_l(m, n)} \quad (2.15)$$

donde se satisface la ecuación cuadrática  $\tau^2 - m\tau - n = 0$ , cuya solución positiva es

$$\tau(m, n) = \frac{m + \sqrt{m^2 + 4n}}{2} \quad (2.16)$$

De hecho, el número irracional  $\tau(1,1) = (1 + \sqrt{5})/2$  hace referencia a la regla de oro,  $\tau(2,1) = 1 + \sqrt{2}$  a la regla de plata,  $\tau(3,1) = (3 + \sqrt{13})/2$  a la regla de bronce,  $\tau(1,2) = 2$  a la regla de cobre y  $\tau(1,3) = (1 + \sqrt{13})/2$  a la regla de níquel.

**Tabla III Reglas de sustitución y adición para secuencias de FG tipo  $(m, n)$**

	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$
$m = 1$	$A \rightarrow AB$ y $B \rightarrow A$ $S_k = S_{k-1} \oplus S_{k-2}$	$A \rightarrow ABB$ y $B \rightarrow A$ $S_k = S_{k-1} \oplus 2S_{k-2}$	$A \rightarrow AB BB$ y $B \rightarrow A$ $S_k = S_{k-1} \oplus 3S_{k-2}$
$m = 2$	$A \rightarrow AAB$ y $B \rightarrow A$ $S_k = 2S_{k-1} \oplus S_{k-2}$	$A \rightarrow A ABB$ y $B \rightarrow A$ $S_k = 2S_{k-1} \oplus 2S_{k-2}$	$A \rightarrow A ABBB$ y $B \rightarrow A$ $S_k = 2S_{k-1} \oplus 3S_{k-2}$
$m = 3$	$A \rightarrow AAAB$ y $B \rightarrow A$ $S_k = 3S_{k-1} \oplus S_{k-2}$	$A \rightarrow AA ABB$ y $B \rightarrow A$ $S_k = 3S_{k-1} \oplus 2S_{k-2}$	$A \rightarrow AA ABBB$ y $B \rightarrow A$ $S_k = 3S_{k-1} \oplus 3S_{k-2}$

Tanto el método de sustitución y el de adición para las nuevas secuencias de FG con  $m$  y  $n = 1, 2$  o  $3$  analizados en esta tesis están resumidos en la Tabla III. Segmentos de estas cadenas de FG para el problema de enlace están ilustrados en la Figura 2.5, donde las condiciones iniciales fueron  $S_0(m, n) = \{B\}$

y  $S_1(m,n) = \{A\}$ . Note que para dada una generación  $l$ , una cadena de FG de tipo  $(3,3)$  tiene más átomos que una cadena de Fibonacci con  $(1,1)$ .

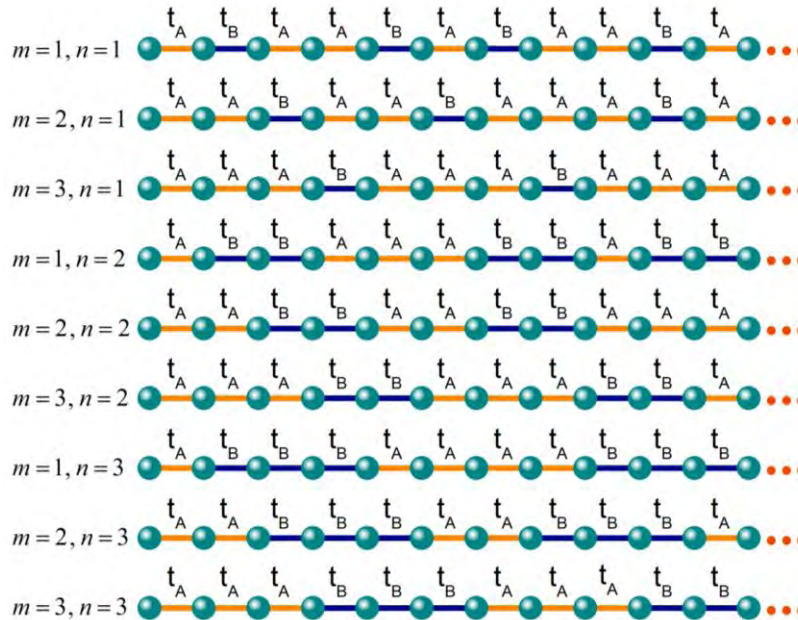


Figura 2.5 Segmentos de las cadenas de Fibonacci generalizado de tipo  $(m,n)$  definidos por la ecuación (2.10) para el problema de enlaces con  $m$  y  $n$  iguales a 1, 2, o 3. Dos diferentes integrales de salto  $t_A$  y  $t_B$  son empleados.

El objetivo de nuestro trabajo es investigar el transporte cuántico en sistemas de aperiódicos con un ordenamiento atómico que sigue una secuencia de FG como las mostradas anteriormente. Las secuencias de FG también pueden ser usadas para generar otro tipo de sistemas denominados redes laberínticas.

# Capítulo 3. Resultados

## Introducción

En esta sección mostraremos los principales resultados del estudio de la conductividad eléctrica en redes de Fibonacci Generalizadas (FG) a través de la fórmula de Kubo-Greenwood. En tanto que la localización de la función de onda fue analizada mediante el exponente de Lyapunov y la razón de participación ( $PR$ ), en dichas redes. Para ello en la sección 3.1 mostraremos el desarrollo del método de renormalización para la fórmula de Kubo-Greenwood para redes de FG y en la sección 3.2, el método de convolución; el cual nos permite estudiar la conductividad eléctrica en nanoalambres cuyo ordenamiento longitudinal sigue una secuencia de FG de tipo  $(m,n)$ . En tanto que las expresiones del método de renormalización aplicado a la razón de participación para cadenas de FG se presentan en el Apéndice B.

### 3.1 Método de renormalización aplicado a la fórmula de Kubo-Greenwood

Partiendo de la fórmula de Kubo-Greenwood que desarrollamos en el capítulo anterior

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

donde  $\Omega$  es el volumen del sistema,  $G^+(E) = G(E + i\eta)$  la función de Green retardada para una partícula,

$$p = (im / \hbar) [H, x] = \sum_j \left\{ t_{j,j+1} |j\rangle \langle j+1| - t_{j,j-1} |j\rangle \langle j-1| \right\}, \quad (3.2)$$

la proyección del operador de momento a lo largo del campo eléctrico aplicado y  $f(E) = \left\{ 1 + \exp[(E - \mu) / k_B T] \right\}^{-1}$  la distribución de Fermi-Dirac con el

potencial químico  $\mu$  y temperatura  $T$ . Sustituyendo el operador de momento en la traza de la ecuación (3.1) obtenemos

$$Tr \left[ p \text{Im} G^+(E + \hbar\omega) p \text{Im} G^+(E) \right] = \langle \ell | \sum_v \left[ t_{v,v+1} |v\rangle \langle v+1| - t_{v,v-1} |v\rangle \langle v-1| \right] \text{Im} G^+(E + \hbar\omega) \times \sum_j \left[ t_{j,j+1} |j\rangle \langle j+1| - t_{j-1,j} |j\rangle \langle j-1| \right] \text{Im} G^+(E) | \ell \rangle, \quad (3.3)$$

considerando  $\langle \ell | v \rangle = \delta_{\ell v}$  y realizando el producto tenemos [se omitió el factor  $(-m^2 a^2 / \hbar^2)$ ]

$$Tr = \sum_v^{N(l)} \sum_j^{N(l)} \left[ t_{v,v+1} t_{j,j+1} \text{Im} G_{v+1,j}^+(E + \hbar\omega) \text{Im} G_{j+1,v}^+(E) - t_{v,v+1} t_{j-1,j} \right. \\ \times \text{Im} G_{v+1,j}^+(E + \hbar\omega) \text{Im} G_{j-1,v}^+(E) - t_{v,v-1} t_{j,j+1} \text{Im} G_{v-1,j}^+(E + \hbar\omega) \\ \left. \times \text{Im} G_{j+1,v}^+(E) + t_{v,v-1} t_{j-1,j} \text{Im} G_{v+1,j}^+(E + \hbar\omega) \text{Im} G_{j-1,v}^+(E) \right]. \quad (3.4)$$

Reescribiendo la expresión (3.4)

$$Tr \left[ p \text{Im} G^+(E + \hbar\omega) p \text{Im} G^+(E) \right] = \sum_{v=1}^{N(l)-1} \left[ 2t_{v,v+1} t_{j,j+1} \text{Im} G_{v+1,j}^+(E + \hbar\omega) \right. \\ \times \text{Im} G_{j+1,v}^+(E) - t_{v,v+1} t_{j,j+1} \text{Im} G_{v+1,j+1}^+(E + \hbar\omega) \text{Im} G_{j,v}^+(E) \\ \left. - t_{v,v+1} t_{j,j+1} \text{Im} G_{v,j}^+(E + \hbar\omega) \text{Im} G_{j+1,v+1}^+(E) \right], \quad (3.5)$$

Siendo que la función de Green retardada  $G^+(E)$  cumple que  $\text{Im} G^+(E) = [G^+(E) - G^-(E)] / 2i$ . Entonces, la traza puede escribirse como

$$Tr = \frac{m^2 a^2}{4\hbar^2} \left[ S(E_\omega^+, E^+, l) + S(E_\omega^-, E^-, l) - S(E_\omega^+, E^-, l) - S(E_\omega^-, E^+, l) \right] \quad (3.6)$$

donde  $E_\omega^\pm = E + \hbar\omega \pm i\eta$ ,  $E^\pm = E \pm i\eta$ ,  $\eta$  la parte imaginaria de la energía y

$$S(E_\omega^\kappa, E^\nu, l) = \sum_{i,j=1}^{N(l)-1} t_{i,i+1} t_{j,j+1} \left[ 2G_{i+1,j}^\kappa(E_\omega) G_{j+1,i}^\nu(E) - G_{i+1,j+1}^\kappa(E_\omega) G_{j,i}^\nu(E) \right. \\ \left. - G_{i,j}^\kappa(E_\omega) G_{j+1,i+1}^\nu(E) \right], \quad (3.7)$$

siendo que  $\kappa$  y  $\nu$  pueden ser + o -. Las sumas parciales  $S(E_\omega^\kappa, E^\nu, l)$  pueden ser expresadas en términos de las funciones de Green de los sitios extremos del sistema como:



$$\begin{aligned}
S(E_\omega^K, E^V, l) = & A_F(E_\omega^K, E^V, l, 1)G_{L,L}(E_\omega^K)G_{L,L}(E^V) + B_F(E_\omega^K, E^V, l, 1) \\
& \times G_{L,R}(E_\omega^K)G_{L,R}(E^V) + C_F(E_\omega^K, E^V, l, 1)G_{R,R}(E_\omega^K)G_{R,R}(E^V) \\
& + D_F(E_\omega^K, E^V, l, 1)G_{L,L}(E_\omega^K)G_{L,R}(E^V) + D_F(E^V, E_\omega^K, l, 1) \\
& \times G_{L,L}(E^V)G_{L,R}(E_\omega^K) + F_F(E_\omega^K, E^V, l, 1)G_{L,L}(E_\omega^K)G_{R,R}(E^V) \\
& + F_F(E^V, E_\omega^K, l, 1)G_{L,L}(E^V)G_{R,R}(E_\omega^K) + I_F(E_\omega^K, E^V, l, 1) \\
& \times G_{L,R}(E_\omega^K)G_{R,R}(E^V) + I_F(E^V, E_\omega^K, l, 1)G_{L,R}(E^V)G_{R,R}(E_\omega^K) \\
& + J_F(E_\omega^K, E^V, l, 1)G_{L,L}(E_\omega^K) + J_F(E^V, E_\omega^K, l, 1)G_{L,L}(E^V) \\
& + K_F(E_\omega^K, E^V, l, 1)G_{L,R}(E_\omega^K) + K_F(E^V, E_\omega^K, l, 1)G_{L,R}(E^V) \\
& + L_F(E_\omega^K, E^V, l, 1)G_{R,R}(E_\omega^K) + L_F(E^V, E_\omega^K, l, 1)G_{R,R}(E^V) \\
& + Z_F(E_\omega^K, E^V, l, 1),
\end{aligned} \tag{3.8}$$

donde los subíndices  $L$ ,  $R$  de las respectivas funciones de Green denotan los átomos extremos izquierdo y derecho. Los coeficientes  $A_F(E_1, E_2, l, 1)$ ,  $B_F(E_1, E_2, l, 1)$ ,  $\dots$ ,  $Z_F(E_1, E_2, l, 1)$  en la ecuación (3.8), siendo  $E_1$  y  $E_2$  ya sean  $E_\omega^K$  o  $E^V$ , son calculados iterativamente para  $k = 2, 3, \dots, l$  por medio de:

$$A_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda) = -[P_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda) - P_\alpha(E_2, E_1, k, \lambda)]^2, \tag{3.9}$$

$$\begin{aligned}
B_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda) = & 2[P_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda) - P_\alpha(E_2, E_1, k, \lambda)][Q_\alpha(E_2, E_1, k, \lambda) \\
& - Q_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda)] + 2[R_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda) - S_\alpha(E_2, E_1, k, \lambda)] \\
& \times [R_\alpha(E_2, E_1, k, \lambda) - S_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda)],
\end{aligned} \tag{3.10}$$

$$C_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda) = -[Q_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda) - Q_\alpha(E_2, E_1, k, \lambda)]^2, \tag{3.11}$$

$$\begin{aligned}
D_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda) = & 2[P_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda) - P_\alpha(E_2, E_1, k, \lambda)] \\
& \times [S_\alpha(E_2, E_1, k, \lambda) - R_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda)],
\end{aligned} \tag{3.12}$$

$$\begin{aligned}
I_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda) = & 2[Q_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda) - Q_\alpha(E_2, E_1, k, \lambda)] \\
& \times [S_\alpha(E_2, E_1, k, \lambda) - R_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda)],
\end{aligned} \tag{3.13}$$

$$\begin{aligned}
J_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda) &= \rho_\alpha(E_2, k, \lambda) F_\beta(E_1, E_2, k, \delta) + \theta_\alpha(E_1, k, \lambda) \\
&\times K_\beta(E_1, E_2, k, \delta) + \theta_\alpha(E_1, k, \lambda) \rho_\alpha(E_2, k, \lambda) \\
&\times \{I_\beta(E_1, E_2, k, \delta) + U_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda) + \theta_\alpha(E_1, k, \lambda) \\
&\times [C_\beta(E_1, E_2, k, \delta) + A_\varepsilon(E_1, E_2, \xi, \zeta) + T_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda)]\} \\
&+ \theta_\alpha^2(E_1, k, \lambda) [L_\beta(E_1, E_2, k, \delta) + J_\varepsilon(E_1, E_2, \xi, \zeta)] \\
&+ J_\beta(E_1, E_2, k, \delta),
\end{aligned} \tag{3.14}$$

$$\begin{aligned}
K_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda) &= 2\rho_\alpha(E_2, k, \lambda) \theta_\alpha(E_1, k, \lambda) \phi_\alpha(E_1, k, \lambda) [C_\beta(E_1, E_2, k, \delta) \\
&+ A_\varepsilon(E_1, E_2, \xi, \zeta) + T_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda)] + \rho_\alpha(E_2, k, \lambda) \\
&\times V_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda) + 2\theta_\alpha(E_1, k, \lambda) \phi_\alpha(E_1, k, \lambda) \\
&\times [L_\beta(E_1, E_2, k, \delta) + J_\varepsilon(E_1, E_2, \xi, \zeta)] + \rho_\alpha(E_2, k, \lambda) \\
&\times \{\theta_\alpha(E_1, k, \lambda) [D_\varepsilon(E_2, E_1, \xi, \zeta) + W_\alpha(E_2, E_1, k, \lambda)] \\
&+ \phi_\alpha(E_1, k, \lambda) [I_\beta(E_1, E_2, k, \delta) + U_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda)]\} \\
&+ \phi_\alpha(E_1, k, \lambda) K_\beta(E_1, E_2, k, \delta) + \theta_\alpha(E_1, k, \lambda) K_\varepsilon(E_1, E_2, \xi, \zeta),
\end{aligned} \tag{3.15}$$

$$\begin{aligned}
L_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda) &= \rho_\alpha(E_2, k, \lambda) F_\varepsilon(E_2, E_1, \xi, \zeta) + \phi_\alpha(E_1, k, \lambda) \\
&\times K_\varepsilon(E_1, E_2, \xi, \zeta) + \rho_\alpha(E_2, k, \lambda) \phi_\alpha(E_1, k, \lambda) \{D_\varepsilon(E_2, E_1, \xi, \zeta) \\
&+ W_\alpha(E_2, E_1, k, \lambda) + \phi_\alpha(E_1, k, \lambda) [C_\beta(E_1, E_2, k, \delta) \\
&+ A_\varepsilon(E_1, E_2, \xi, \zeta) + T_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda)]\} + \phi_\alpha^2(E_1, k, \lambda) \\
&\times [L_\beta(E_1, E_2, k, \delta) + J_\varepsilon(E_1, E_2, \xi, \zeta)] + L_\varepsilon(E_1, E_2, \xi, \zeta),
\end{aligned} \tag{3.16}$$

y

$$\begin{aligned}
Z_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda) &= \rho_\alpha(E_1, k, \lambda) [L_\beta(E_1, E_2, k, \delta) + J_\varepsilon(E_1, E_2, \xi, \zeta)] \\
&+ Z_\beta(E_1, E_2, k, \delta) + \rho_\alpha(E_1, k, \lambda) \rho_\alpha(E_2, k, \lambda) [C_\beta(E_1, E_2, k, \delta) \\
&+ A_\varepsilon(E_1, E_2, \xi, \zeta) + T_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda)] + \rho_\alpha(E_2, k, \lambda) \\
&\times [L_\beta(E_2, E_1, k, \delta) + J_\varepsilon(E_2, E_1, \xi, \zeta)] + Z_\varepsilon(E_1, E_2, \xi, \zeta),
\end{aligned} \tag{3.17}$$

donde el significado de  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\varepsilon$ ,  $\delta$ ,  $\lambda$ ,  $\xi$  y  $\zeta$  están especificados en la Tabla A1 para cada etapa en el proceso de renormalización. Siendo también

$$\rho_\alpha(E_\varphi, k, \lambda) = [z - E_L(E_\varphi, \xi, \zeta) - E_R(E_\varphi, k, \delta)]^{-1} \tag{3.18}$$

$$\theta_\alpha(E_\varphi, k, \lambda) = t_\beta(E_\varphi, k, \delta) \rho_\alpha(E_\varphi, k, \lambda) \tag{3.19}$$

$$\phi_\alpha(E_\varphi, k, \lambda) = t_\varepsilon(E_\varphi, \xi, \zeta) \rho_\alpha(E_\varphi, k, \lambda) \tag{3.20}$$

$$E_L(E_\varphi, k, \lambda) = E_L(E_\varphi, k, \delta) + t_\beta^2(E_\varphi, k, \delta) \rho_\alpha(E_\varphi, k, \lambda) \quad (3.21)$$

$$E_R(E_\varphi, k, \lambda) = E_\varepsilon(E_\varphi, \xi, \zeta) + t_\varepsilon^2(E_\varphi, \xi, \zeta) \rho_\alpha(E_\varphi, k, \lambda) \quad (3.22)$$

$$t_\alpha(E_\varphi, k, \lambda) = t_\beta(E_\varphi, k, \delta) t_\varepsilon(E_\varphi, \xi, \zeta) \rho_\alpha(E_\varphi, k, \lambda) \quad (3.23)$$

$$\begin{aligned} P_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda) &= \theta_\alpha(E_2, k, \lambda) R_\beta(E_1, E_2, k, \delta) + \theta_\alpha(E_1, k, \lambda) \\ &\times S_\beta(E_1, E_2, k, \delta) + P_\beta(E_1, E_2, k, \delta) + \theta_\alpha(E_1, k, \lambda) \\ &\times \theta_\alpha(E_2, k, \lambda) [P_\varepsilon(E_1, E_2, \xi, \zeta) + Q_\beta(E_1, E_2, k, \delta)], \end{aligned} \quad (3.24)$$

$$\begin{aligned} Q_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda) &= \phi_\alpha(E_1, k, \lambda) \phi_\alpha(E_2, k, \lambda) [P_\varepsilon(E_1, E_2, \xi, \zeta) \\ &+ Q_\beta(E_1, E_2, k, \delta)] + Q_\varepsilon(E_1, E_2, \xi, \zeta) + \phi_\alpha(E_1, k, \lambda) \\ &\times R_\varepsilon(E_1, E_2, \xi, \zeta) + \phi_\alpha(E_2, k, \lambda) S_\varepsilon(E_1, E_2, \xi, \zeta), \end{aligned} \quad (3.25)$$

$$\begin{aligned} R_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda) &= \theta_\alpha(E_1, k, \lambda) \phi_\alpha(E_2, k, \lambda) [P_\varepsilon(E_1, E_2, \xi, \zeta) \\ &+ Q_\beta(E_1, E_2, k, \delta)] + \phi_\alpha(E_2, k, \lambda) R_\beta(E_1, E_2, k, \delta) \\ &+ \theta_\alpha(E_1, k, \lambda) R_\varepsilon(E_1, E_2, \xi, \zeta), \end{aligned} \quad (3.26)$$

$$\begin{aligned} S_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda) &= \theta_\alpha(E_2, k, \lambda) \phi_\alpha(E_1, k, \lambda) [P_\varepsilon(E_1, E_2, \xi, \zeta) \\ &+ Q_\beta(E_1, E_2, k, \delta)] + \phi_\alpha(E_1, k, \lambda) S_\beta(E_1, E_2, k, \delta) \\ &+ \theta_\alpha(E_2, k, \lambda) S_\varepsilon(E_1, E_2, \xi, \zeta), \end{aligned} \quad (3.27)$$

$$\begin{aligned} T_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda) &= 2[P_\varepsilon(E_1, E_2, \xi, \zeta) - P_\varepsilon(E_2, E_1, \xi, \zeta)] \\ &\times [Q_\beta(E_2, E_1, k, \delta) - Q_\beta(E_1, E_2, k, \delta)], \end{aligned} \quad (3.28)$$

$$\begin{aligned} U_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda) &= 2[P_\varepsilon(E_1, E_2, \xi, \zeta) - P_\varepsilon(E_2, E_1, \xi, \zeta)] \\ &\times [S_\beta(E_2, E_1, k, \delta) - R_\beta(E_1, E_2, k, \delta)], \end{aligned} \quad (3.29)$$

$$\begin{aligned} V_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda) &= 2[S_\varepsilon(E_1, E_2, \xi, \zeta) - R_\varepsilon(E_2, E_1, \xi, \zeta)] \\ &\times [S_\beta(E_2, E_1, k, \delta) - R_\beta(E_1, E_2, k, \delta)], \end{aligned} \quad (3.30)$$

y

$$\begin{aligned} W_\alpha(E_1, E_2, k, \lambda) &= 2[Q_\beta(E_1, E_2, k, \delta) - Q_\beta(E_2, E_1, k, \delta)] \\ &\times [S_\varepsilon(E_2, E_1, \xi, \zeta) - R_\varepsilon(E_1, E_2, \xi, \zeta)], \end{aligned} \quad (3.31)$$

considerando que  $E_\varphi$  puede tomar los valores  $E_1$  o  $E_2$ .

En tanto, las funciones de Green en los extremos del sistema son las mismas que las mostrados en el Apéndice A, excepto que estas son evaluadas en  $E_\varphi$  en vez de  $z$ , *i.e*,

$$G_{L,L}(E_\varphi) = \left\{ \begin{array}{l} E_\varphi - E_L(E_\varphi, l, 1) - E_P^R(l') - \frac{t_P^2(l')}{E_\varphi - E_P^L(l')} \\ - \frac{t_F^2(E_\varphi, l, 1)}{E_\varphi - E_R(E_\varphi, l, 1) - E_P^L(l') - \frac{t_P^2(l')}{[E_\varphi - E_P^R(l')]} \end{array} \right\}^{-1}, \quad (3.32)$$

$$G_{R,R}(E_\varphi) = \left\{ \begin{array}{l} E_\varphi - E_R(E_\varphi, l, 1) - E_P^L(l') - \frac{t_P^2(l')}{E_\varphi - E_P^R(l')} \\ - \frac{t_F^2(E_\varphi, l, 1)}{E_\varphi - E_L(E_\varphi, l, 1) - E_P^R(l') - \frac{t_P^2(l')}{[E_\varphi - E_P^L(l')]} \end{array} \right\}^{-1}, \quad (3.33)$$

y

$$G_{L,R}(E_\varphi) = \frac{t_F(E_\varphi, l, 1)G_{R,R}(E_\varphi)}{E_\varphi - E_L(E_\varphi, l, 1) - E_P^R(l') - t_P^2(l')/[E_\varphi - E_P^L(l')]} \quad (3.34)$$

Finalmente, las condiciones iniciales son

$$\begin{aligned} A_F(E_1, E_2, 0, 1) &= C_F(E_1, E_2, 0, 1) = D_F(E_1, E_2, 0, 1) = I_F(E_1, E_2, 0, 1) = J_F(E_1, E_2, 0, 1) = 0, \\ K_F(E_1, E_2, 0, 1) &= L_F(E_1, E_2, 0, 1) = Z_F(E_1, E_2, 0, 1) = P_F(E_1, E_2, 0, 1) = Q_F(E_1, E_2, 0, 1) = 0 \\ R_F(E_1, E_2, 0, 1) &= E_L(E_\varphi, 0, 1) = E_R(E_\varphi, 0, 1) = 0, \quad B_F(E_1, E_2, 0, 1) = 2t_B^2, \quad F_F(E_1, E_2, 0, 1) = -t_B^2 \\ , t_F(E_\varphi, 0, 1) &= t_B, \quad S_F(E_1, E_2, 0, 1) = t_B, \quad A_F(E_1, E_2, 1, 1) = C_F(E_1, E_2, 1, 1) = 0 \\ D_F(E_1, E_2, 1, 1) &= I_F(E_1, E_2, 1, 1) = J_F(E_1, E_2, 1, 1) = K_F(E_1, E_2, 1, 1) = L_F(E_1, E_2, 1, 1) = 0, \\ Z_F(E_1, E_2, 1, 1) &= P_F(E_1, E_2, 1, 1) = Q_F(E_1, E_2, 1, 1) = R_F(E_1, E_2, 1, 1) = 0, \quad E_L(E_\varphi, 1, 1) = 0 \\ E_R(E_\varphi, 1, 1) &= 0, \quad B_F(E_1, E_2, 1, 1) = 2t_A^2, \quad F_F(E_1, E_2, 1, 1) = -t_A^2, \quad S_F(E_1, E_2, 1, 1) = t_A \quad \text{y} \\ t_F(E_\varphi, 1, 1) &= t_A. \end{aligned}$$

Los coeficientes desarrollados en esta sección fueron los que utilizamos para analizar el transporte electrónico en sistemas de Fibonacci generalizado de una dimensión. Para llevar a cabo el estudio en sistemas multidimensionales emplearemos el teorema de convolución.

## 3.2 Método de convolución

Para emplear el método de convolución es necesario que el Hamiltoniano del sistema sea separable. A continuación, mostraremos que el Hamiltoniano de amarre fuerte a primeros vecinos en tres dimensiones es separable.

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

Por lo tanto,

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

Como ejemplo, desarrollaremos la función de Green asociada al Hamiltoniano de amarre fuerte en tres dimensiones, la cual está dada como:

$$G_{(r,j,d)(k,l,q)}(z) = \sum_{\alpha,\beta,\gamma} \frac{\langle r|\alpha\rangle \langle \alpha|k\rangle \langle j|\beta\rangle \langle \beta|l\rangle \langle d|\gamma\rangle \langle \gamma|q\rangle}{z - (E_\alpha + E_\beta + E_\gamma)} \quad (3.35)$$

y recordando que la función de Green satisface

$$-\frac{1}{\pi} \text{Im}[G_{lk}(z)] = \sum_{\alpha} \langle l|\alpha\rangle \langle \alpha|k\rangle \delta(E - E_{\alpha}), \quad (3.36)$$

entonces

$$G_{(r,j,d)(k,l,q)}(z + \hbar\omega) = \sum_{\alpha,\beta,\gamma} \frac{\langle r|\alpha\rangle \langle \alpha|k\rangle \langle j|\beta\rangle \langle \beta|l\rangle \langle d|\gamma\rangle \langle \gamma|q\rangle}{z + \hbar\omega - (E_{\alpha} + E_{\beta} + E_{\gamma})} \quad (3.37)$$

Reescribiendo [y considerando  $G_{(r,j,d)(k,l,q)}(z + \hbar\omega) = G(z + \hbar\omega)$ ] la expresión anterior tenemos

$$G(z + \hbar\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\ell \sum_{\alpha,\beta,\gamma} \frac{\langle r|\alpha\rangle \langle \alpha|k\rangle \langle j|\beta\rangle \langle \beta|l\rangle \langle d|\gamma\rangle \langle \gamma|q\rangle}{z + \hbar\omega - (E_{\alpha} + E_{\beta} + \ell)} \delta(\ell - E_{\gamma}) \quad (3.38)$$

usando la Ec. (3.36) la expresión (3.38) toma la forma

$$G(z + \hbar\omega) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta' \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} d\ell \sum_{\alpha,\beta} \frac{\langle r|\alpha\rangle \langle \alpha|k\rangle \langle j|\beta\rangle \langle \beta|l\rangle}{z + \hbar\omega - (E_{\alpha} + E_{\beta} + \ell)} \text{Im}[G_{(d,q)}^{\perp z}(\ell + i\eta')], \quad (3.39)$$

$$G(z + \hbar\omega) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta' \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} d\ell \sum_{\alpha,\beta} \frac{\langle r|\alpha\rangle \langle \alpha|k\rangle}{z + \hbar\omega - (E_{\alpha} + y + \ell)} \langle j|\beta\rangle \langle \beta|l\rangle \times \delta(y - E_{\beta}) \text{Im}[G_{(d,q)}^{\perp z}(\ell + i\eta')] \quad (3.40)$$

$$G(z + \hbar\omega) = \frac{1}{\pi^2} \lim_{\eta', \eta'' \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} d\ell \sum_{\alpha,\beta} \frac{\langle r|\alpha\rangle \langle \alpha|k\rangle}{z + \hbar\omega - (E_{\alpha} + y + \ell)} \text{Im}[G_{(j,l)}^{\perp y}(y + i\eta')] \times \text{Im}[G_{(d,q)}^{\perp z}(\ell + i\eta'')] \quad (3.41)$$

de esta manera,

$$G(z + \hbar\omega) = \frac{1}{\pi^2} \lim_{\eta', \eta'' \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} d\ell G_{(r,k)}^{\parallel}(z + \hbar\omega - y - \ell) \text{Im}[G_{(j,l)}^{\perp y}(y + i\eta')] \times \text{Im}[G_{(d,q)}^{\perp z}(\ell + i\eta'')] \quad (3.42)$$

Recordando que en la fórmula de Kubo-Greenwood, la proyección del operador de momento  $p$  es a lo largo del campo eléctrico aplicado, es decir,  $p_{(r,j,d)(k,l,q)} = p_{rk}^{\parallel} \delta_{jl} \delta_{dq}$ . Sustituyendo la expresión (3.42) en la traza de la fórmula de Kubo-Greenwood se tiene (tomando  $Tr[p \text{Im}G^+(z + \hbar\omega) p \text{Im}G^+(z)] = Tr$ )

$$Tr = \sum_{\substack{r,j,q,k,l,d, \\ f,s,c,u,w,v}} \left\{ p_{(u,w,v)(r,j,q)} \text{Im} \left[ G_{(r,j,q)(k,l,d)}(z + \hbar\omega) \right] \right. \quad (3.43)$$

$$\left. \times p_{(k,l,d)(f,s,c)} \text{Im} \left[ G_{(f,s,c)(u,w,q)}(z) \right] \right\}$$

$$Tr = \sum_{\substack{r,j,q,k,l,d, \\ f,s,c,u,w,v}} p_{ur} \delta_{wj} \delta_{vq} \text{Im} \left[ G_{(r,j,q)(k,l,d)}(z + \hbar\omega) \right] \quad (3.44)$$

$$\times p_{kf} \delta_{ls} \delta_{dc} \text{Im} \left[ G_{(f,s,c)(u,w,q)}(z) \right]$$

$$Tr = \sum_{\substack{r,k,l,d, \\ f,u,w,v}} p_{ur}^{\parallel} \text{Im} \left[ G_{(r,w,v)(k,l,d)}(z + \hbar\omega) \right] p_{kf}^{\parallel} \text{Im} \left[ G_{(f,l,d)(u,w,v)}(z) \right] \quad (3.45)$$

$$Tr = \frac{1}{\pi^4} \sum_{\substack{r,k,l,d, \\ f,u,w,v}} p_{ur}^{\parallel} \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} d\ell \text{Im} G_{(r,k)}^{\parallel}(z + \hbar\omega - y - \ell) \text{Im} \left[ G_{(w,l)}^{\perp y}(y + i\eta') \right] \quad (3.46)$$

$$\times \text{Im} \left[ G_{(v,d)}^{\perp z}(\ell + i\eta'') \right] p_{kf}^{\parallel} \int_{-\infty}^{\infty} dy' \int_{-\infty}^{\infty} d\ell' \text{Im} G_{(f,u)}^{\parallel}(z - y' - \ell')$$

$$\times \text{Im} \left[ G_{(l,w)}^{\perp y}(y' + i\eta') \right] \text{Im} \left[ G_{(d,v)}^{\perp z}(\ell' + i\eta'') \right]$$

$$Tr = \sum_{\substack{r,k,l,d, \\ f,u,w,v}} \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} d\ell \int_{-\infty}^{\infty} dy' \int_{-\infty}^{\infty} d\ell' p_{ur}^{\parallel} \text{Im} G_{(r,k)}^{\parallel}(z + \hbar\omega - y - \ell) p_{kf}^{\parallel} \quad (3.47)$$

$$\times \text{Im} G_{(f,u)}^{\parallel}(z - y' - \ell') \sum_{\beta} \langle w | \beta' \rangle \langle \beta' | l \rangle \delta(y - E_{\beta}) \sum_{\gamma} \langle v | \gamma' \rangle \langle \gamma' | d \rangle \delta(\ell - E_{\gamma})$$

$$\times \sum_{\beta} \langle l | \beta \rangle \langle \beta | w \rangle \delta(y' - E_{\beta'}) \sum_{\gamma} \langle d | \gamma \rangle \langle \gamma | v \rangle \delta(\ell' - E_{\gamma'})$$

$$Tr = \sum_{r,k,f,u} \int_{-\infty}^{\infty} dy' \int_{-\infty}^{\infty} d\ell' p_{ur}^{\parallel} \text{Im} G_{(r,k)}^{\parallel}(z + \hbar\omega - y' - \ell') \quad (3.48)$$

$$\times p_{kf}^{\parallel} \text{Im} G_{(f,u)}^{\parallel}(z - y' - \ell') \sum_{\beta} \delta(y' - E_{\beta}) \sum_{\gamma} \delta(\ell' - E_{\gamma})$$

y siendo que  $DOS^{\perp y}(y') = \sum_{\beta} \delta(y' - E_{\beta})$  y  $DOS^{\perp z}(\ell') = \sum_{\beta} \delta(\ell' - E_{\beta})$ ,

podemos describir la ecuación (3.48) como

$$Tr = \sum_{r,k,f,u} \int_{-\infty}^{\infty} dy' \int_{-\infty}^{\infty} d\ell' p_{ur}^{\parallel} \text{Im} G_{(r,k)}^{\parallel}(z + \hbar\omega - y' - \ell') \quad (3.49)$$

$$\times p_{kf}^{\parallel} \text{Im} G_{(f,u)}^{\parallel}(z - y' - \ell') DOS^{\perp y}(y') DOS^{\perp z}(\ell')$$

Entonces, obtenemos la relación de convolución

$$\sigma^{3D}(E, \omega, T) = \frac{1}{\Omega_{\perp}^y \Omega_{\perp}^z} \int_{-\infty}^{\infty} dy' \int_{-\infty}^{\infty} d\ell' \sigma^{\parallel}(E - y' - \ell', \omega, T) DOS^{\perp y}(y') DOS^{\perp z}(\ell'). \quad (3.50)$$

La ecuación (3.48) también puede reescribirse como

$$\sigma^{3D}(E, \omega, T) = \frac{1}{\Omega_{\perp}^y \Omega_{\perp}^z} \sum_{\beta, \gamma} \sigma^{\parallel}(E - E_{\beta} - E_{\gamma}, \omega, T). \quad (3.51)$$

De esta forma podemos estudiar el transporte eléctrico en sistemas multidimensionales, cuyos enlaces siguen un ordenamiento ya sea periódico o aperiódico de tipo Fibonacci generalizado, en cualquiera de sus direcciones axiales. En la siguiente sección mostraremos los resultados obtenidos para la densidad de estados ( $DOS$ ), la conductividad eléctrica ( $\sigma$ ), el coeficiente de Lyapunov ( $\gamma$ ) y la razón de participación ( $PR$ ) para nueve sistemas de FG de tipo  $(m,n)$  con  $m$  y  $n$  iguales a 1, 2 o 3.



### 3.3 Sistemas unidimensionales: Localización y conductividad DC

Con el objetivo de analizar sistemas macroscópicos de las cadenas de Fibonacci generalizado con una longitud de  $10^8$  átomos, consideramos diferentes generaciones ( $l$ ) para cada tipo ( $m,n$ ) de cadena de FG. Esto se especifica en la Tabla IV.

**Tabla IV Número de átomos en las cadenas tipo ( $m,n$ ) de generación  $l$**

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

En aras de la simplicidad, tomamos una longitud de enlace uniforme ( $a$ ) y la aperiodicidad se introduce a través del orden de las integrales de salto  $t_A$  y  $t_B$ . Dos saturadores semi-infinitos periódicos con auto-energía cero e integrales de salto  $t$  están conectados en los extremos de todas las cadenas de FG. En estos saturadores se consideró una diferencia de fase de  $e^{i\theta}$  entre las amplitudes de las funciones de onda de los sitios vecinos más cercanos, donde  $\theta$  satisface la relación de dispersión  $E = 2t \cos \theta$ . En la Figura 3.1(a)-3.1(l), se muestra el espectro de la densidad de estados ( $DOS$ ), la conductividad DC a temperatura cero [ $\sigma = \sigma(\mu, 0, 0)$ ], el coeficiente de Lyapunov ( $\gamma$ ) y la razón de participación ( $PR$ ) como función del potencial químico ( $\mu$ ) para tres cadenas de FG con  $n = 1$ , auto-energías nulas e integrales de salto  $t_A = 0.8t$  y  $t_B = t$ . Las longitudes de estas cadenas están dadas en la Tabla IV. Se usó una parte imaginaria de la energía de  $\eta = 10^{-5}|t|$  para la  $DOS$  en las Figuras 3.1(a-c),  $\eta = 10^{-15}|t|$  para sus ampliaciones mostradas en las Figuras 3.1(a'-c') y  $\eta = 10^{-13}|t|$  para  $\sigma$  en las Figuras 3.1(d-f). Se han usado 400000 y 1594324 potenciales químicos respectivamente para graficar las Figuras 3.1(a-i) y 3.1(j-l).

Note que todos los espectros de la  $DOS$ ,  $\sigma$ ,  $\gamma$  y  $PR$  muestran el mismo tipo de estructura de bandas y gaps para cada tipo de cadena de FG. En particular, el inverso del coeficiente de Lyapunov ( $\gamma^{-1}$ ) en las Figuras 3.1(g-i), revela una

longitud de localización muy cercana a la de una cadena periódica ( $\gamma_P^{-1}$ ) en cada mini banda. Este comportamiento es confirmado a través de la conductividad eléctrica DC casi balística ( $\sigma_P$ ) para la misma región del espectro, en contraste con los bajos valores del  $PR$ . Incluso estos valores son más pequeños mientras disminuye  $t_A$ , en cambio, los valores de  $\sigma$  y  $\gamma^{-1}$  permanecen casi sin cambio en cada mini banda cuyo ancho disminuye con  $t_A$ . Las ampliificaciones de los espectros alrededor de  $\mu = 0$  en la  $DOS$  son presentadas en las Figuras 3.1(a'-c') y ellas confirman la naturaleza fractal de estos espectros [Kohmoto, 1987].

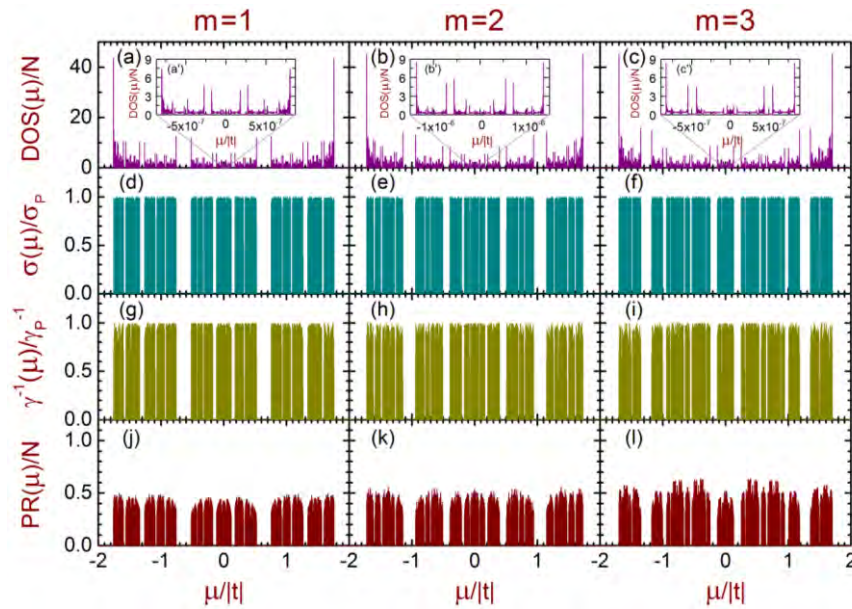


Figura 3.1 Densidad de estados ( $DOS$ ), conductividad eléctrica DC ( $\sigma$ ), coeficiente de Lyapunov ( $\gamma$ ) y la razón de participación ( $PR$ ) como función del potencial químico ( $\mu$ ) para tres cadenas de Fibonacci generalizado con  $n = 1$ , auto-energías nulas e integrales de salto  $t_A = 0.8t$  y  $t_B = t$ .

Cabe señalar, que el espectro obtenido de la  $DOS$  en la Figura 3.1(b) para la regla de plata es muy similar a la estructura de bandas reportada en la Ref. [Thiem, 2011], en donde, el ancho total de la banda es ligeramente mayor que el nuestro siendo que sus integrales de salto fueron  $t_A = t$  y  $t_B = 0.8t$ . Además, la regla de plata usada en la referencia en la Ref. [Thiem, 2011] es un isómero de la empleamos en en este trabajo, es decir, en vez de  $A \rightarrow AAB$  ellos usan una regla de sustitución de  $A \rightarrow ABA$ . De hecho, los tres isómeros de la regla de plata tienen casi el mismo espectro de la  $DOS$ . Sin embargo, la naturaleza de la

localización de sus estados puede ser muy diferente. Por ejemplo, las soluciones analíticas para la transmitancia ( $T$ ) en  $E=0$  son:

$$T(E=0,l) = \begin{cases} 4(\chi^p + \chi^{-p})^{-2}, & \text{for isomer } A \rightarrow AAB \\ 4(\chi^l + \chi^{-l})^{-2}, & \text{for isomer } A \rightarrow ABA \\ 4(\chi^p + \chi^{-p})^{-2}, & \text{for isomer } A \rightarrow BAA \end{cases} \quad (3.52)$$

donde  $\chi = t_A/t_B$ ,  $p = [1 - (-1)^l]/2$  y  $l$  el número de generación. Observe que para el caso en que  $A \rightarrow ABA$  y  $\chi \neq 1$ ,  $T(E=0,l) \rightarrow 0$  cuando  $l \rightarrow \infty$ . Pero para los isómeros  $A \rightarrow AAB$  y  $A \rightarrow BAA$ ,  $T(E=0,l) = 1$  cuando  $l$  es un número par, sin importar el valor de  $\chi$ . Por lo tanto, siempre tenemos un estado transparente en  $E=0$  para estos dos isómeros si consideramos un número de generación par.

En la Figura 3.2 y 3.3 se muestra el espectro de la densidad de estados  $DOS$ , la conductividad DC a temperatura cero ( $\sigma$ ), el coeficiente de Lyapunov ( $\gamma$ ) y la razón de participación ( $PR$ ) como función del potencial químico ( $\mu$ ) para las cadenas de FG con  $n=2$  y  $n=3$ , respectivamente. Los parámetros para los cálculos numéricos son los mismos que en la Figura 3.1, excepto que las longitudes de estas cadenas están dadas en la Tabla IV.

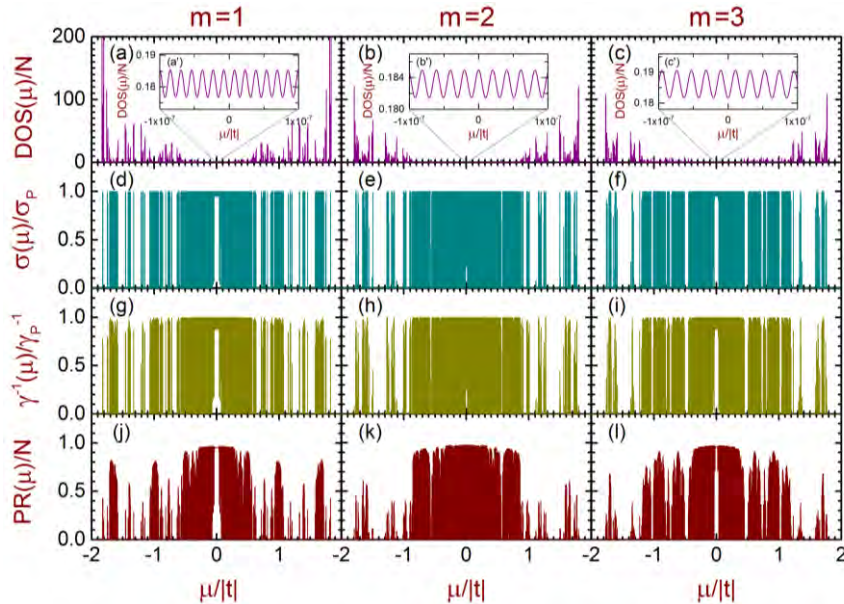


Figura 3.2 Densidad de estados ( $DOS$ ), conductividad eléctrica DC ( $\sigma$ ), coeficiente de Lyapunov ( $\gamma$ ) y la razón de participación ( $PR$ ) en función del potencial químico ( $\mu$ ) para tres cadenas de Fibonacci generalizado con  $n=2$ , con auto-energías nulas e integrales de salto  $t_A = 0.8t$  y  $t_B = t$ .

Note que en las Figuras 3.2(d-f), la conductividad DC alrededor  $\mu = 0$  es casi  $\sigma_p$ , a pesar de tener un mínimo en la *DOS* en la misma región, como se muestra en las Figuras 3.2(a-c). En las Figuras 3.2(a'-c'), se presenta una ampliificación de la *DOS* alrededor de  $\mu = 0$  observándose un comportamiento oscilante, en contraste con el comportamiento fractal presentado en las Figuras 3.1(a'-c') para las cadenas cuasiperiódicas.

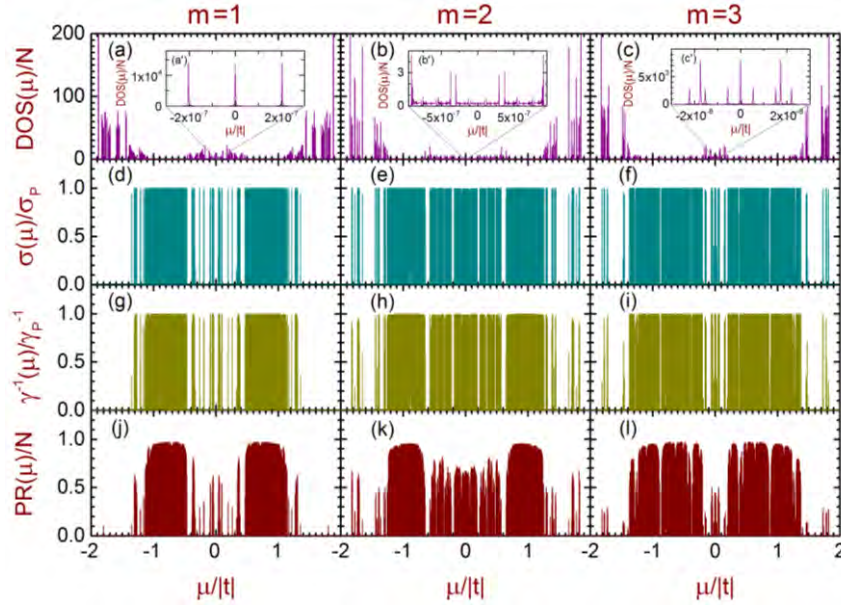


Figura 3.3 Densidad de estados (*DOS*), conductividad eléctrica DC ( $\sigma$ ), coeficiente de Lyapunov ( $\gamma$ ) y la razón de participación (*PR*) en función del potencial químico ( $\mu$ ) para tres cadenas de Fibonacci generalizado con  $n=3$ , auto-energías nulas e integrales de salto  $t_A=0.8t$  y  $t_B=t$ .

En contraste con la Figura 3.2, las zonas de alta conductividad mostradas en las Figuras 3.3(d-f) están localizadas fuera de la región central, correspondiendo nuevamente a pequeños valores de la *DOS* y un comportamiento oscilante es mostrado en las Figuras 3.3(a'-c'). Observemos también que en las Figuras 3.2 y 3.3, los espectros de la conductividad DC (d-f), Lyapunov (g-i) y *PR* (j-l) poseen casi la misma estructura de bandas con zonas alta localización en las mismas regiones de energía. Un análisis más detallado del *PR* para  $n=2$  y  $n=3$  revelan valores prácticamente constantes cuando la integral de salto  $t_A$  decrece, contrario al decaimiento mostrado en el espectro del *PR* de la Figura 3.1. Este hecho confirma la presencia de estados casi extendidos alrededor de  $\mu = 0$  para la regla de bronce (1,2) reportada en al Ref. [Chakrabarti, 1991].



Con el objetivo de analizar el comportamiento global de la conductividad DC ( $\sigma$ ) y de la razón de participación ( $PR$ ), introducimos los promedios espectrales de  $\sigma$  y del  $PR$  los cuales definimos como

$$\langle \sigma \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \sigma(\mu) DOS(\mu) d\mu}{\int_{-\infty}^{\infty} DOS(\mu) d\mu} \quad \text{y} \quad \langle PR \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} PR(\mu) DOS(\mu) d\mu}{\int_{-\infty}^{\infty} DOS(\mu) d\mu} \quad (3.53)$$

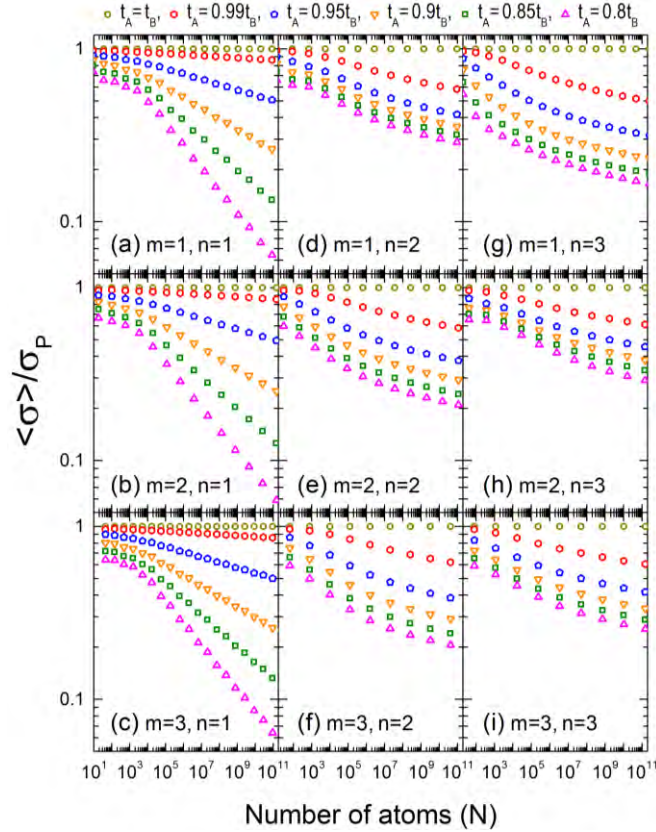


Figura 3.4 Promedio espectral de la conductividad DC  $\langle \sigma \rangle$  versus el número de átomos ( $N$ ) para las nueve cadenas de FG ejemplificadas en la Figura 1, las integrales de salto son  $t_A = t_B$  (círculos amarillo oscuro),  $t_A = 0.99t_B$  (hexágonos rojos),  $t_A = 0.95t_B$  (pentágonos azules),  $t_A = 0.9t_B$  (triángulos invertidos naranja),  $t_A = 0.85t_B$  (cuadrados verdes),  $t_A = 0.8t_B$  (triángulos magenta) y  $t_B = t$ .

Los resultados del  $\langle \sigma \rangle$  como función de la longitud del sistema ( $N$ ) son mostrados en la Figura 3.4 (a-i) para las nueve cadenas de FG de la Figura 2.5 con integrales de salto  $t_A = t_B$  (círculos amarillo oscuro),  $t_A = 0.99t_B$  (hexágonos rojos),  $t_A = 0.95t_B$  (pentágonos azules),  $t_A = 0.9t_B$  (triángulos invertidos naranja),  $t_A = 0.85t_B$  (cuadrados verdes) y  $t_A = 0.8t_B$  (triángulos magenta). La parte imaginaria de la energía fue  $\eta = 10^{-13}|t|$  para la  $\sigma$  y  $\eta = 10^{-5}|t|$  para la

*DOS*. Hay que notar que conforme aumenta la longitud del sistema  $\langle \sigma \rangle$  es constante para el caso periódico y decae siguiendo una ley de potencias para los sistemas cuasiperiódicos con  $n=1$  y esto se puede ser apreciado cuando el tamaño del sistema es suficientemente grande. Para los otros seis sistemas de FG que no satisfacen totalmente el criterio de cuasiperiodicidad de Pisot, el promedio de la conductividad decae más lentamente que para los sistemas cuasiperiódicos, sin llegar a ser constante como en el caso periódico.

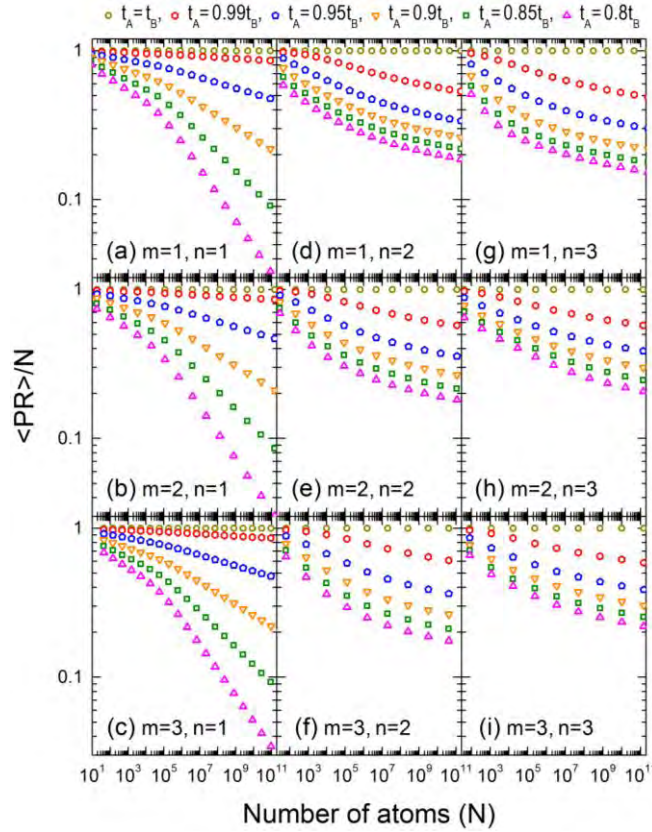


Figura 3.5 Promedio espectral de la razón de participación ( $\langle PR \rangle$ ) versus el número de átomos ( $N$ ) para las nueve cadenas de FG ejemplificadas en la Figura 1 las integrales de salto son  $t_A = t_B$  (círculos amarillo oscuro),  $t_A = 0.99t_B$  (hexágonos rojos),  $t_A = 0.95t_B$  (pentágonos azules),  $t_A = 0.9t_B$  (triángulos invertidos naranja),  $t_A = 0.85t_B$  (cuadrados verdes),  $t_A = 0.8t_B$  (triángulos magenta) y  $t_B = t$ .

La Figura 3.5 muestra el promedio espectral de la razón de participación ( $\langle PR \rangle$ ) como función del número de átomos en el sistema ( $N$ ) para las nueve cadenas de FG de la Figura 2.5. Los cálculos numéricos del  $\langle PR \rangle$  se llevaron a cabo mediante un nuevo método de renormalización desarrollado para la razón de participación para cadenas de FG y es presentado en el Apéndice B. Los parámetros usados en estos cálculos son los mismos que en la Figura 3.4.

Observe que los resultados del  $\langle PR \rangle$  confirman el comportamiento como ley de potencias que se obtuvo para  $\langle \sigma \rangle$  en sistemas cuasiperiódicos y sub-ley de potencias para sistemas no-cuasiperiódicos.

Con el objetivo de realizar un estudio analítico y comparativo del  $PR$  en  $\mu=0$  para las cadenas de FG tipo (1,2) y (2,1), introduciremos la notación  $PR(m,n,l)$  para una cadena de FG de tipo  $(m,n)$  de generación  $l$  evaluada en  $\mu=0$ , donde las matrices de transferencia pueden ser

$$\begin{pmatrix} 0 & -\chi \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -\chi^{-1} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ o } \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.54)$$

con  $\chi = t_A/t_B$ . Por lo tanto, la razón de participación normalizada para la cadena de FG tipo (2,1) de generación  $l = 2k + 1$  con  $N_l$  átomos está dada por

$$PR(2,1,2k+1) = \frac{\left[ \sum_{j=-k}^{k-1} \Lambda_j(l) \chi^{2j} \right]^2}{N_l \sum_{j=-k}^{k-1} \Lambda_j(l) \chi^{4j}}, \quad (3.55)$$

donde  $\Lambda_j(2k+1) = 2\Lambda_j(2k) + \Lambda_j(2k-1) - 2\delta_{j,0}$  y  $\Lambda_{-k}(l) = \frac{1}{2}[3 - (-1)^l]$ . En el límite cuando  $\chi \rightarrow 0$  y  $l \rightarrow \infty$ , tenemos

$$\lim_{\substack{l \rightarrow \infty \\ \chi \rightarrow 0}} PR(2,1,2k+1) = \lim_{l \rightarrow \infty} \frac{\Lambda_{-k}(l)}{N_l} = 0 \quad (3.56)$$

En contraste, el  $PR$  de la cadena de FG tipo (1,2) es

$$PR(1,2,l) = \frac{\left[ \Theta_{-1}(l)\chi^{-2} + \Theta_0(l) + \Theta_1(l)\chi^2 \right]^2}{N_l \left[ \Theta_{-1}(l)\chi^{-4} + \Theta_0(l) + \Theta_1(l)\chi^4 \right]}, \quad (3.57)$$

cuyos coeficientes  $\Theta_{-1}$ ,  $\Theta_0$  y  $\Theta_1$  están dados en Tabla V.

**Tabla V Coeficientes  $\Theta_i$  de los términos  $\chi^i$  en la ecuación (3.57)**

$m = 1, n = 2$	$l$ par	$l$ impar
$\Theta_{-1}(l)$	$2N_{l-2} - N_{l-3} - 1$	$2N_{l-2} - N_{l-3} + 1$
$\Theta_0(l)$	$N_{l-1} - 1$	$N_{l-1} - 2$
$\Theta_1(l)$	$N_{l-3}$	$N_{l-3} - 1$

En el límite cuando  $\chi \rightarrow 0$  y  $l \rightarrow \infty$ , la ecuación (3.57) nos conduce a

$$\lim_{\substack{l \rightarrow \infty \\ \chi \rightarrow 0}} PR(1,2,l) = \lim_{l \rightarrow \infty} \frac{\Theta_{-1}(l)}{N_l} = \lim_{l \rightarrow \infty} \frac{2N_{l-2} + N_{l-3} \mp 1}{N_l} = \frac{3}{8} \quad (3.58)$$

debido a que  $N_l = N_{l-1} + 2N_{l-2} - 2$  y  $\lim_{l \rightarrow \infty} (N_{l+1}/N_l) = 2$ . Los resultados analíticos de las ecuaciones (3.56) y (3.57) confirman los resultados numéricos mostrados en las Figuras 3.1 y 3.2.

### 3.4 Conductividad AC

Como podemos observar en las Figuras 3.1, 3.2 y 3.3, existen muchos picos en el espectro de la conductividad DC ( $\sigma$ ). Si elegimos un potencial químico ( $\mu$ ) localizado entre dos picos sucesivos y un campo eléctrico externo oscilante con  $\hbar\omega$  igual a la diferencia entre esas energías, se obtiene un estado resonante en la conductividad eléctrica AC en nanoalambres segmentados [Sánchez, 2012] y los nanoalambres ramificados [Sánchez, 2015]. En esta sección, analizaremos dicho transporte en cadenas de FG. La figura 3.6 muestra el espectro de la conductividad AC en escala de colores versus el potencial químico ( $\mu$ ) y la frecuencia del campo eléctrico ( $\omega$ ) para las cadenas de FG con  $t_A = 0.8t$ ,  $t_B = t$  (a)  $m=1, n=1$  y  $l=14$ ; (b)  $m=2, n=2$  y  $l=7$ ; (c)  $m=3, n=3$  y  $l=5$ . Los cálculos se llevaron a cabo usando una parte imaginaria de la energía  $\eta = 10^{-15}|t|$  y estas cadenas de FG están conectadas a dos saturadores semi-infinitos con integrales de salto  $t$ .



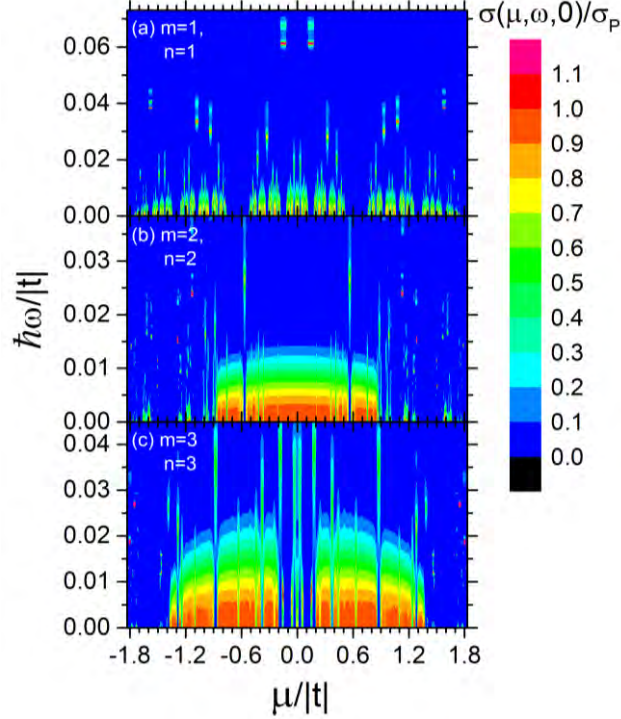


Figura 3.6 Espectro de la conductividad AC (en escala de colores) versus el potencial químico ( $\mu$ ) y la frecuencia ( $\omega$ ) para las cadenas de Fibonacci generalizado con (a)  $m=1$ ,  $n=1$  y  $l=14$ , (b)  $m=2$ ,  $n=2$  y  $l=7$ , (c)  $m=3$ ,  $n=3$  y  $l=5$ .

Observe en la Figura 3.6(a) una estructura de bandas en el límite de bajas frecuencias similar al presentado en la Figura 3.1(d). Para otras frecuencias, se presentan zonas rojas con una conductividad AC más alta que para el caso balístico  $\sigma_p(\mu, \omega, 0)$  de una cadena periódica dada por la ecuación

$$\sigma_p(\mu, \omega, 0) = \frac{8e^2 t^2 a}{\pi(N-1)\hbar^3 \omega^2} \left[ 1 - \left( \frac{\mu}{2t} \right)^2 \right] \left\{ 1 - \cos \left[ \frac{(N-1)\hbar\omega}{2t\sqrt{1 - (\mu/2t)^2}} \right] \right\}. \quad (3.59)$$

Por ejemplo, en la Figura 3.6(a) hay un pico de resonancia de  $\sigma(\mu, \omega, 0) = 1.755\sigma_p$  (barra roja) en  $\hbar\omega = 0.06123246|t|$  para  $0.11738557|t| \leq \mu \leq 0.17861803|t|$  cuya conductividad decae rápidamente con el aumento o la disminución de la frecuencia. Cerca de esta barra roja, hay otro pico de resonancia de  $\sigma(\mu, \omega, 0) = 0.384\sigma_p$  (barra verde) en  $\hbar\omega = 0.06745621|t|$  para  $0.11400161|t| \leq \mu \leq 0.18145782|t|$ . El primero de éstos, es originando por una excitación interbanda entre dos estados de alta conductividad DC en  $E = 0.11738557|t|$  y  $E = 0.17861803|t|$  precisamente

localizados en los bordes de una banda prohibida, mientras que el segundo de ellos es debido a un tercer pico vecino de alta conductividad DC localizado en  $E = 0.11400161|t|$  y  $E = 0.18145782|t|$ . De hecho, hay estados resonantes de conductividad AC cuando  $\hbar\omega$  es igual a la diferencia de energía correspondiente a los picos de conductividad DC separados por un número par de picos en el espectro de la conductividad DC, como se muestra en el Figura 3 de la Ref. [Sánchez, 2015]. Más aún, notemos que en las Figuras 3.6(b) y 3.6(c) hay zonas de color con una conductividad AC entre  $0.2\sigma_p \leq \sigma(\mu, \omega, 0) \leq 0.9\sigma_p$  causadas por las resonancias entre los picos cercanos mostrados en la Figura 3.2(b') y 3.3(c') separados por una energía del orden de  $|t|/N$ , en contraste con los picos agudos en la Figura 3.1(a') los cuales definen las frecuencias de resonancia en la Figura 3.6(a). En general, los estados de resonancia de alta conductividad AC pueden ser encontrados en los extremos de las bandas.

Con el propósito de hacer una comparación general de las resonancias AC en las diferentes cadenas de FG, introducimos el promedio espectral de la conductividad definido como

$$\langle \sigma(\mu, \omega, 0) \rangle = \frac{1}{N_{pk} - 1} \sum_{j=1}^{N_{pk}-1} \sigma(\mu_j, \omega_j, 0), \quad (3.60)$$

donde  $N_{pk}$  es el número total de picos en el espectro de la conductividad DC,  $\mu_j = (E_{j+1} + E_j)/2$  y  $\omega_j = (E_{j+1} - E_j)/\hbar$  es la energía central y la frecuencia de resonancia respectivamente de dos picos sucesivos en la conductividad DC con energías  $E_j$  y  $E_{j+1}$ .

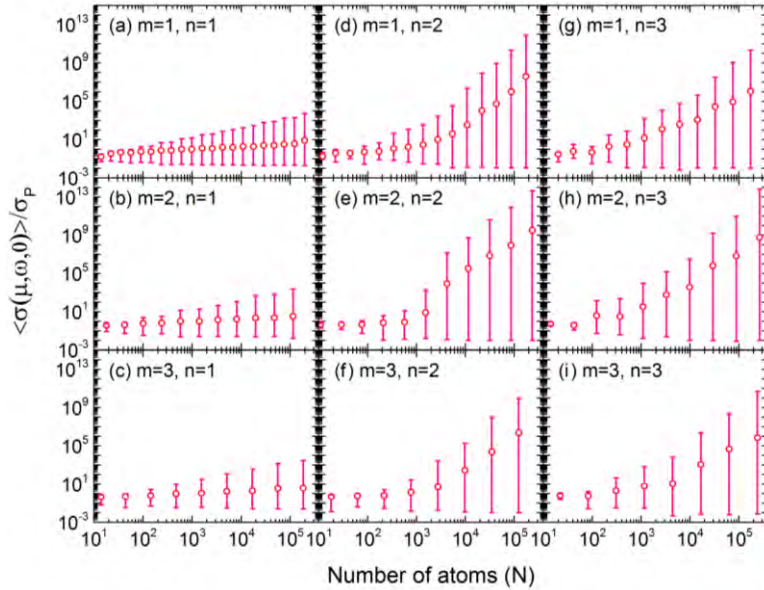


Figura 3.7 Promedio espectral a temperatura cero de la conductividad AC  $\langle \sigma(\mu, \omega, 0) \rangle$  (círculos abiertos) versus el número de átomos ( $N$ ) para nueve sistemas de Fibonacci generalizado del tipo  $(m, n)$ , donde las barras de error indican el valor máximo y el mínimo de la conductividad AC.

La Figura 3.7 muestra  $\langle \sigma(\mu, \omega, 0) \rangle$  (círculos abiertos) versus el número de átomos ( $N$ ) para nueve cadenas de FG, donde las barras de error muestran el valor máximo y el mínimo de la conductividad AC en cada generación ( $l$ ). Observe que  $\langle \sigma(\mu, \omega, 0) \rangle$  crece con el número de átomos y el máximo de la conductividad AC alcanza hasta  $10^{10}$  veces la conductividad balística DC ( $\sigma_p$ ) para las cadenas no-cuasiperiódicas de FG de  $10^5$  átomos. De hecho, a temperatura cero la conductividad balística AC  $\sigma_p(\mu, \omega, 0)$  de las cadenas periódicas están limitadas por  $\sigma_p$ . En general, la conductividad AC más alta fueron obtenidas de la resonancia de los picos más agudos de la conductividad DC.

### 3.5 Sistemas aperiódicos con impurezas

La inclusión de impurezas de forma controlada puede mejorar las propiedades intrínsecas del material o incluso obtener nuevas propiedades. Esto ha hecho, que el diseño de materiales a una escala atómica sea cada vez más importante. En esta sección investigamos el efecto que tienen estas impurezas en la conductividad eléctrica en cadenas periódicas y no periódicas cuyas integrales

de salto siguen la secuencia de Fibonacci. Para nuestro estudio consideramos dos tipos de impurezas, impurezas tipo enlace ( $t_{imp}$ ) y tipo sitio ( $\varepsilon_{imp}$ ); una representación esquemática de estos tipos de impurezas se muestra en la Figura 3.8.

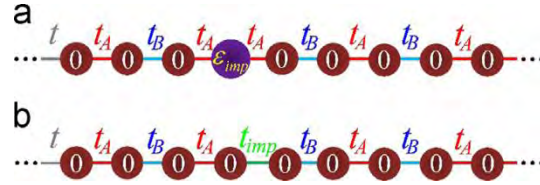


Figura 3.8 Representación esquemática de cadenas de Fibonacci con una impureza de (a) sitio y (b) una impureza de enlace en la cuarta posición.

En la Figura 3.9, la conductividad eléctrica ( $\sigma$ ) versus la energía de Fermi ( $\mu$ ) de una cadena periódica con (a) impurezas tipo sitio de energía  $\varepsilon_{imp} = 0.5|t|$  e (b) impurezas tipo enlace con  $t_{imp} = 0.5t$  es mostrada para los casos de una (líneas rojas) y dos (líneas amarillo oscuro) impurezas. El número de átomos en estas cadenas es de  $N = 433,494,438$ , las cuales están conectadas en sus extremos a saturadores periódicos semi-infinitos con integrales de salto  $t$ . La parte imaginaria de la energía usada fue  $\eta = 10^{-13}|t|$ . En general, el espectro de la conductividad eléctrica ( $\sigma$ ) para una impureza no depende de la posición de la misma. En cambio, para dos impurezas el espectro dependerá de la distancia entre ellas, la cual escogimos que fuese de  $512a$  en la Figura 3.9. La inclusión de una sola impureza disminuye la conductividad, pero este efecto es más evidente cuando la impureza es de tipo enlace. Al considerar dos impurezas y sin importar de que naturaleza sean, el espectro de la conductividad eléctrica es altamente oscilante y la mayor amplitud de dichas oscilaciones se obtiene para el caso de impurezas tipo enlace.

Empleando el formalismo de Landauer mostrado en el capítulo I, donde obtuvimos que el coeficiente de transmisión ( $T$ ) está dado por

$$T(\mu) = \frac{4 - (\mu/t)^2}{\left[ \tau_{21} - \tau_{12} + (\tau_{22} - \tau_{11})\mu/2t \right]^2 + (\tau_{22} + \tau_{11})^2 (1 - \mu^2/4t^2)}, \quad (3.61)$$

donde  $t_{i,j}$  son los elementos de la matriz de transferencia y usando que la matriz de transferencia ( $\tau_{imp}$ ) de una cadena periódica con  $N$  átomos que contiene una sola impureza de sitio con energía  $\varepsilon_{imp}$  cumple con

$$\tau_{imp}(\mu, N) = \tau(\mu, N) - \frac{\varepsilon_{imp}}{t} \tau(\mu, N-1) - \frac{\varepsilon_{imp}}{t} \begin{pmatrix} \tau_{11}(\mu, N-3) & 0 \\ \tau_{11}(\mu, N-4) & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.62)$$

siendo  $\tau(\mu, N)$  la matriz de transferencia de una cadena periódica con  $N$  átomos sin impurezas. Donde los elementos  $\tau_{11}$  de la matriz (3.62) satisfacen la siguiente relación

$$\tau_{11}^2(\mu, N) + \tau_{11}^2(\mu, N-1) - \mu \tau_{11}(\mu, N) \tau_{11}(\mu, N-1) / t = 1. \quad (3.63)$$

Encontramos que la transmitancia de una cadena periódica con  $N$  átomos y una sola impureza de sitio con energía  $\varepsilon_{imp}$  es

$$T(\mu) = \frac{4 - (\mu/t)^2}{4 - (\mu/t)^2 + (\varepsilon_{imp}/t)^2} \quad (3.64)$$

La curva roja en la Figura 3.9 puede ser obtenida por la ecuación (3.64).

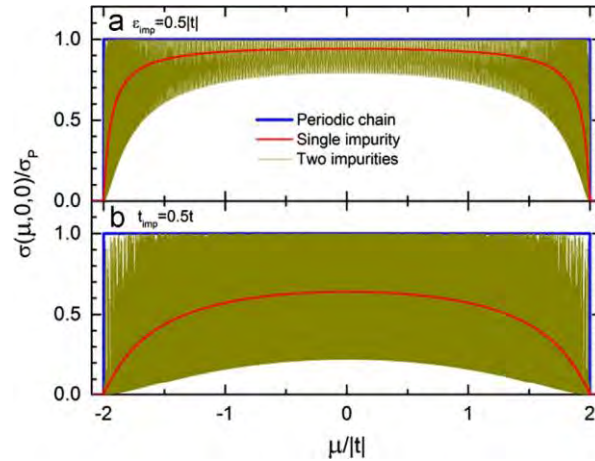


Figura 3.9 Espectros de la conductividad eléctrica ( $\sigma$ ) versus el potencial químico ( $\mu$ ) de una cadena periódica con una impureza (líneas rojas) y dos impurezas (líneas amarillo oscuro) para los casos de impurezas de (a) sitio y (b) enlace.

En los espectros de la conductividad eléctrica para dos impurezas, ya sean de sitio o en de enlace podemos observar que la cantidad de máximos en las oscilaciones es igual al número de átomos que hay entre las impurezas. Este hecho se puede ver en la Figura 3.10 con (a) 5, (b) 13 y (c) 60 átomos entre las

impurezas de sitio con  $\varepsilon_{imp} = 0.5|t|$  y para los casos (d) 6, (e) 16 y (f) 64 átomos entre las impurezas de enlace con  $t_{imp} = 0.5t$ . En todos los casos se consideró el tamaño del sistema y la  $\eta$  igual que en la Figura 3.9. En el caso de las impurezas de sitio, se presenta un espectro asimétrico respecto de  $\mu = 0$ . En contraste con el espectro simétrico que obtuvimos para las impurezas de enlace.

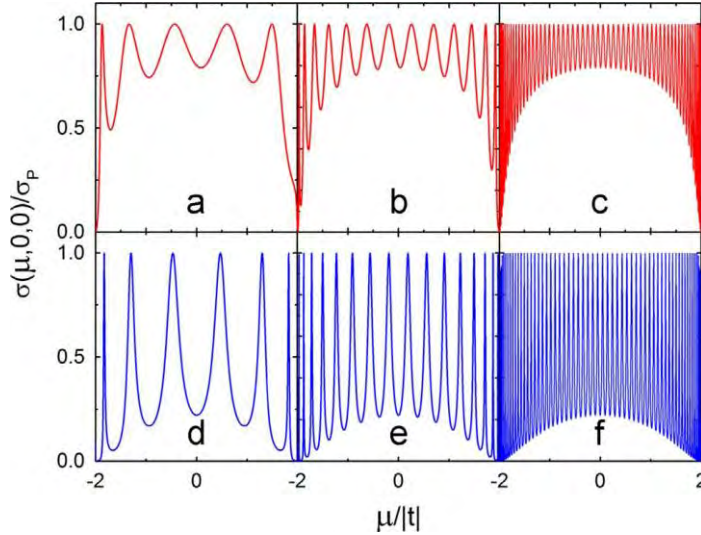


Figura 3.10 Espectros de la conductividad eléctrica ( $\sigma$ ) versus el potencial químico ( $\mu$ ) de una cadena periódica con dos impurezas de sitio separadas por (a) 5, (b) 13 y (c) 60 átomos y dos impurezas de enlace separadas por (d) 6, (e) 16 y (f) 64 átomos, usando los mismos parámetros de la Figura 3.9

Por otro lado, las posiciones de los picos máximos de las oscilaciones en los espectros de la conductividad eléctrica para dos impurezas tipo enlace, dependen del valor de  $t_{imp}$ . En particular, cuando  $t_{imp} \rightarrow 0$ , estos picos están localizados en los eigenvalores de una cadena periódica con  $N_{i \leftrightarrow i}$  átomos, donde  $N_{i \leftrightarrow i}$  es el número de átomos entre las dos impurezas. Para valores finitos de  $t_{imp}$ , las posiciones de los picos obedecen la siguiente relación

$$E_k(t_{imp}, N_{i \leftrightarrow i}) = E_k(0, N_{i \leftrightarrow i}) + a_k(N_{i \leftrightarrow i})t_{imp}^2 + b_k(N_{i \leftrightarrow i})t_{imp}^3, \quad (3.65)$$

donde  $k$  representa cada pico,  $E_k(0, N_{i \leftrightarrow i})$  es el correspondiente eigenvalor de la cadena periódica con  $N_{i \leftrightarrow i}$  átomos,  $a_k(N_{i \leftrightarrow i}) = A_k N_{i \leftrightarrow i}^{-\alpha_k}$  y  $b_k(N_{i \leftrightarrow i}) = B_k N_{i \leftrightarrow i}^{-\beta_k}$ , con  $A_k$ ,  $B_k$ ,  $\alpha_k$  y  $\beta_k$  constantes.



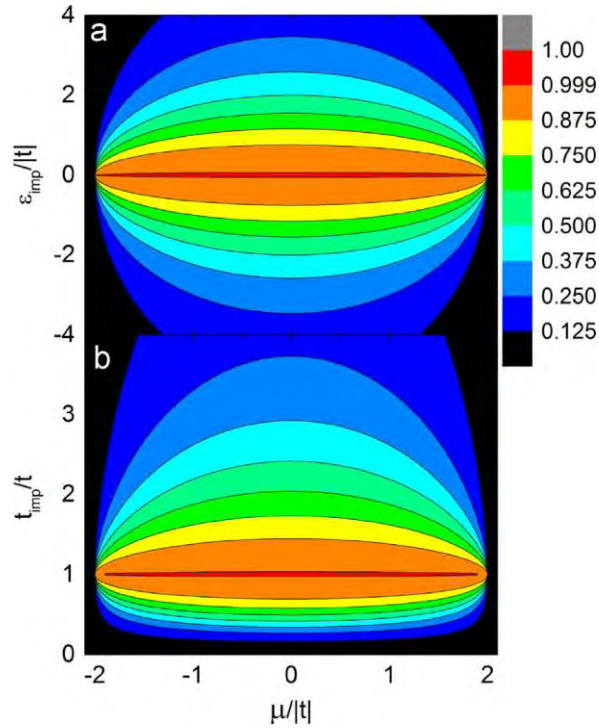


Figura 3.11 Espectros de la conductividad eléctrica ( $\sigma$ ) (en escala de colores) de una cadena periódica con una impureza (a) de sitio y (b) de enlace como función del potencial químico ( $\mu$ ),  $\varepsilon_{imp}$  y  $t_{imp}$  respectivamente, para los mismos sistemas de la Figura 3.9.

En la Figura 3.11, se muestra la dependencia de la conductividad eléctrica ( $\sigma$ ) (en escala de colores) con  $\varepsilon_{imp}$  y  $t_{imp}$  en el caso de una impureza para los mismos sistemas de la Figura 3.9. Observemos que el espectro de la conductividad en la Figura 3.11(a) es simétrico respecto de  $\varepsilon_{imp} = 0$  para el caso de impureza de sitio y asimétrica alrededor de  $t_{imp} = t$  para las impurezas de enlace. Note que la conductividad es nula para  $t_{imp}$  cercana a cero.

Para el caso en que tenemos dos impurezas, la Figura 3.12 muestra la dependencia de la conductividad eléctrica ( $\sigma$ ) en función de  $\varepsilon_{imp}$ ,  $t_{imp}$  y del potencial químico ( $\mu$ ) en (a) de sitio y (b) de enlace, para los mismos sistemas de las Figuras 3.10 b) y e) respectivamente. Observe que el espectro de la Figura 3.12(a) es asimétrico respecto del potencial químico cero, contrario a la simetría observada en la Figura 3.12(b), la cual se torna asimétrica respecto a  $t_{imp} = t$ .

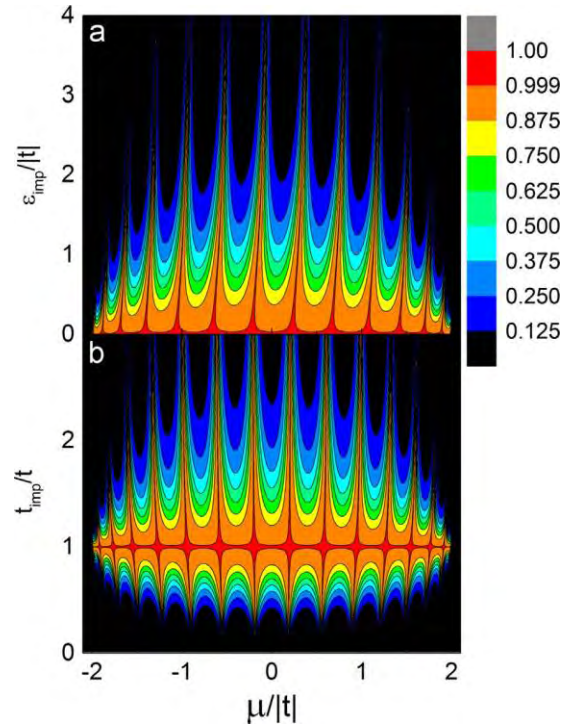


Figura 3.12 Espectros de la conductividad eléctrica ( $\sigma$ ) (en escala de colores) de una cadena periódica con dos impurezas (a) de sitio y (b) de enlace como función del potencial químico ( $\mu$ ),  $\varepsilon_{imp}$  y  $t_{imp}$  respectivamente, para los mismos sistemas de la Figura 3.10(b) y 3.10(e).

Hasta el momento mostramos los resultados del estudio la conductividad eléctrica ( $\sigma$ ) en cadenas periódicas con una o dos impurezas de tipo sitio y enlace. Ahora analizaremos el efecto que tienen dichas impurezas en la conductividad eléctrica ( $\sigma$ ) en cadenas de Fibonacci. Por ello, la Figura 3.13 muestra los espectros de la conductividad eléctrica ( $\sigma$ ) de las cadenas de Fibonacci con integrales de salto  $t_A = 0.9t$ ,  $t_B = t$  y (a) una impureza de sitio, (b) dos impurezas de sitio separadas por 512 átomos, (c) dos impurezas de sitio separadas por 1024 átomos en líneas rojas, (d) una impurezas de enlace, (e) dos impurezas de enlace separadas por 512 átomos y (f) dos impurezas de enlace separadas por 1024 átomos en líneas azules; usando la misma  $N$  y  $\eta$  de la Figura 3.9 y  $\varepsilon_{imp} = |t|$  o  $t_{imp} = 0.3t$ . Todos los espectros se comparan con el de una cadena de Fibonacci sin impurezas (líneas grises) para los mismos valores de  $t_A$  y  $t_B$ . Observemos que los espectros de las impurezas de sitio son asimétricos respecto de  $\mu = 0$ , lo cual es incluso notable para el caso de una impureza de sitio en la Figura 3.13(a). En general, la disminución de la



conductividad es menor para el caso de las impurezas de sitio que para las de enlace.

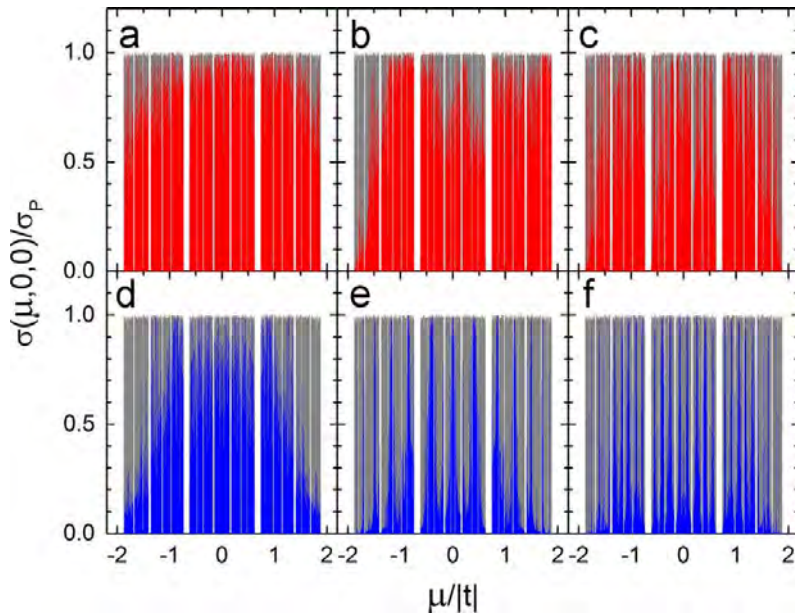


Figura 3.13 Espectro de la conductividad eléctrica ( $\sigma$ ) versus el potencial químico ( $\mu$ ) para una cadena de Fibonacci con (a)-(c) impurezas de sitio (líneas rojas) y (d)-(f) impurezas de enlace (líneas azules). En (a y d) una impureza, (b y e) dos impurezas separadas por 512 átomos y (c y f) dos impurezas separadas por 1024 átomos. Ambas comparadas con el espectro de la cadena de Fibonacci sin impurezas (línea gris). Todos los sistemas tienen  $t_A = 0.9t$  y  $t_B = t$ .

En la literatura se ha reportado que en sistemas unidimensionales cuyas integrales de salto siguen una secuencia de Fibonacci, presentan un estado transparente (coeficiente de transmisión igual a uno) en potencial químico  $\mu = 0$  cada seis generaciones [Sánchez, 2004]. Este hecho no se conserva cuando incluimos impurezas de sitio o de enlace al sistema. En particular, las impurezas de sitio siempre destruyen el estado transparente para  $\mu = 0$  en cadenas de Fibonacci de enlaces. En cambio, las impurezas de enlace destruyen el estado transparente solo cuando el número de ellas es impar para cualquier valor de la integral de salto  $t_{imp}$ ; mientras que un número par de ellas hace que el estado transparente se presente cada tres generaciones cuando  $t_{imp} = t_B$  sustituye a un enlace  $t_A$ . Este hecho puede ser verificado, observando que los elementos de la matriz de transferencia  $(i, j)$  como función de la generación  $(n)$  pueden ser escritos como:

$$\begin{aligned} \tau_{i,j}(n) = & (-1)^{k+i} \left[ \gamma^{f(k)} \frac{t_{imp}}{t_B} \right]^{(j-i)} \delta_{3,i+j} \delta_{x,2} \\ & + \left\{ (-1)^{k+1} \left[ \gamma^{f(k)} \frac{t_{imp}}{t_A} \right]^{(3-2i)} \delta_{x,0} - \left( \frac{t_{imp}}{t_B} \right)^{(3-2i)} \delta_{x,1} \right\} \delta_{0,i-j} \end{aligned} \quad (3.66)$$

donde  $x = k(\text{mod}3)$ ,  $f(n) = 1 - (-1)^k$  y  $\gamma = t_A/t_B$ . Por lo tanto, el coeficiente de transmisión es:

$$T(0) = \frac{4}{\left[ \frac{\gamma^{-f(k)} t_{imp}}{t_B} + \frac{t_B \gamma^{f(k)}}{t_{imp}} \right]^2 \delta_{x,2} + \left[ \frac{\gamma^{f(k)} t_{imp}}{t_A} + \frac{t_A \gamma^{-f(k)}}{t_{imp}} \right]^2 \delta_{x,0} + \left[ \frac{t_{imp}}{t_B} + \frac{t_B}{t_{imp}} \right]^2 \delta_{x,1}}. \quad (3.67)$$

De (3.67) podemos ver que  $T(\mu=0, k) = 1$  cuando  $t_{imp} = t_B$  y  $x = 1$ .

### 3.6 Transporte balístico en cadenas de FG

El transporte electrónico sin dispersión es aquel que tiene un coeficiente de transmisión uno. A estos estados se les conoce como estados transparentes, cuya conductividad eléctrica es  $\sigma = \sigma_p$ . En esta sección, mostraremos numérica y analíticamente la existencia de este tipo de transporte electrónico en sistemas de FG para sistemas cuyo número de átomo se muestran en la Tabla VI.

La Figura 3.14 muestra los picos de alta conductividad con  $\sigma(\mu, 0, 0) \geq 0.9999999999999999 \sigma_p$  en el espacio de los potenciales químicos ( $\mu$ ) y  $t_A/t_B$  para las cadenas de FG de la Tabla VI. Observe la existencia de muchos estados de alta conductividad localizados en  $\mu/|t| = \pm t_A/t_B$  para las cadenas de FG con  $n=3$  y  $m=3$ , así como en  $\mu/|t| = \pm 0.71 t_A/t_B$  para  $n=4$  y  $m=4$ . En la Figura 3.15,  $\sigma(\mu=0, 0, 0)$  en función del número de generación ( $k$ ) para 16 tipos de cadenas de FG es mostrado para  $t_A = 0.8t$  (círculos solidos rojos) y  $t_A = 0.5t$  (círculos abiertos azules). Por ejemplo, los estados transparentes aparecen cada seis generaciones en la Figura 3(b), 3(d), 3(j) y 3(l) y están presentes en todas las generaciones de la Figura 3(f), 3(h), 3(p) y 3(r). Finalmente, no hay estados transparentes para  $\mu=0$  en las Figuras 3(e), 3(g),

3(i), 3(k), 3(o) y 3(q). Pruebas analíticas de estos estados transparentes son presentados en la siguiente sección.

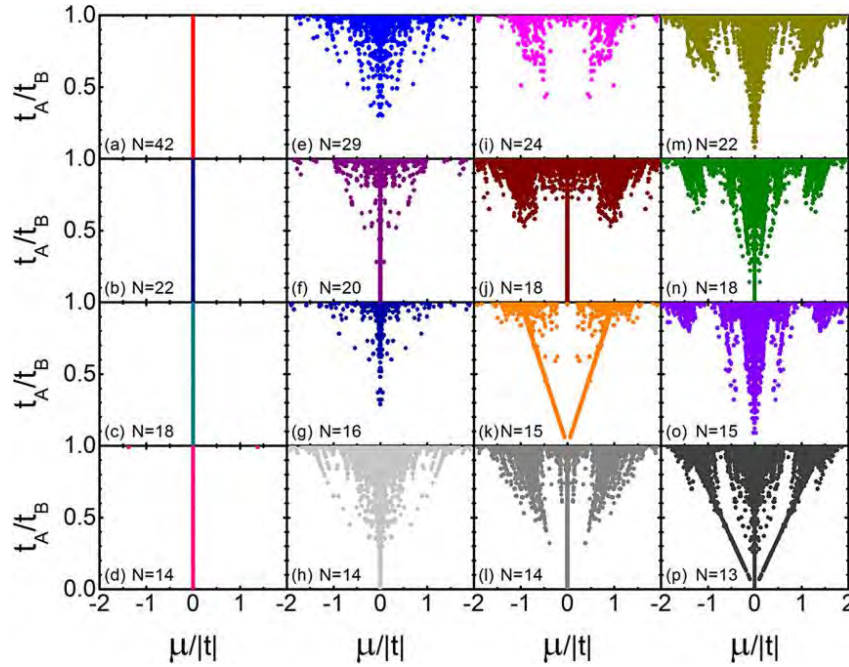


Figura 3.14 Estados de alta conductividad con  $\sigma(\mu, 0, 0) \geq 0.999999999999\sigma_p$  como función del potencial químico ( $\mu$ ) y las integrales de salto  $t_A$  para las cadenas de FG mostradas en la Tabla VI.

**Tabla VI** Números de átomos ( $N$ ) y generación ( $k$ ) de las cadenas de FG

	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 4$
$m=1$	433494438 ( $k=42$ )	357913942 ( $k=29$ )	315732482 ( $k=24$ )	235418370 ( $k=21$ )
$m=2$	318281040 ( $k=23$ )	268377089 ( $k=20$ )	581130734 ( $k=19$ )	234029057 ( $k=17$ )
$m=3$	239244623 ( $k=17$ )	253841390 ( $k=16$ )	187869862 ( $k=15$ )	429496730 ( $k=15$ )
$m=4$	165580142 ( $k=14$ )	352738177 ( $k=14$ )	678529304 ( $k=14$ )	250597377 ( $k=13$ )

Un camino alternativo para calcular la conductividad en sistemas unidimensionales es mediante la fórmula de Landauer dada por  $\sigma_L(\mu) = \sigma_p T$ , donde  $T$  es la transmitancia [Imry, 1999]. Como vimos en la sección 1.5 (matriz de transferencia), la ecuación de Schrödinger para el Hamiltoniano de amarre fuerte puede ser escrita como:

$$\begin{pmatrix} c_{n+1} \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu & -t_{n,n-1} \\ t_{n,n+1} & t_{n,n+1} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_n \\ c_{n-1} \end{pmatrix} = \mathbf{T}_n \begin{pmatrix} c_n \\ c_{n-1} \end{pmatrix}, \quad (3.68)$$

donde  $\mathbf{T}_n$  es la matriz de transferencia y  $c_n$  es la amplitud de la función de onda en el sitio  $n$ . Para cadenas conectadas a dos guías semi-infinitas periódicas con integrales de salto  $t$  y auto-energías nulas, la transmitancia ( $T$ ) en términos del producto de las matrices de transferencia, con elementos  $\tau_{i,j} = (\prod_{s=1}^N \mathbf{T}_s)_{i,j}$ , está dado por

$$T(\mu) = \frac{4 - (\mu/t)^2}{\left[ \tau_{21} - \tau_{12} + (\tau_{22} - \tau_{11})\mu/2t \right]^2 + (\tau_{22} + \tau_{11})^2 (1 - \mu^2/4t^2)} \quad (3.69)$$

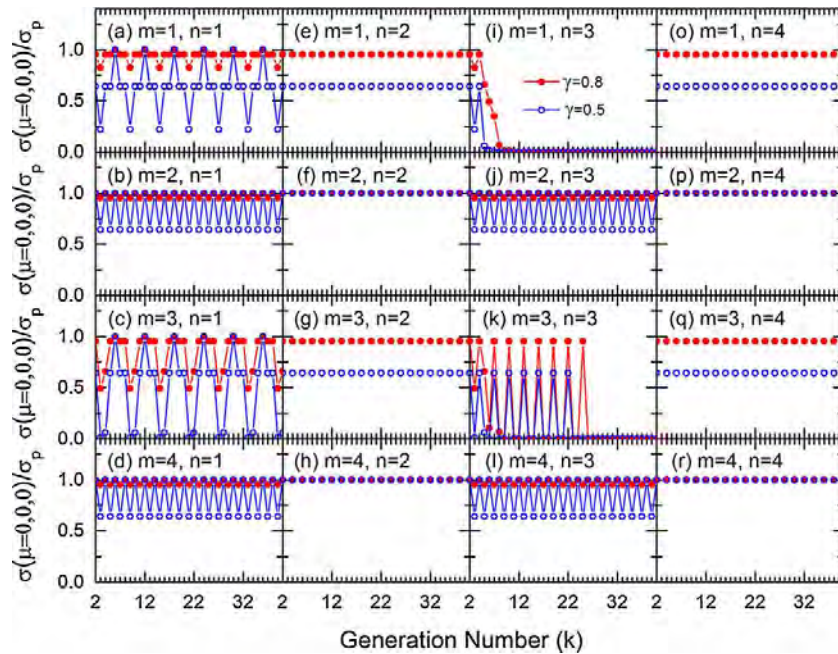


Figura 3.15 Conductividad DC en  $\mu=0$  como función del número de generación ( $k$ ) para cadenas de FG con  $t_A = 0.8t$  (círculos sólidos rojos) y  $t_A = 0.5t$  (círculos abiertos azules)

Para los estados en  $\mu=0$  de ocho tipos de cadenas de FG, los elementos  $\tau_{i,j}$  están dados en la Tabla VII, donde  $p(v) = [(-1)^v - 1]/2$ . Notemos que hay un estado transparente para todas las generaciones en las primeras cuatro cadenas de FG de la Tabla VII, mientras que los estados transparentes en  $\mu=0$  aparecen para las cuatro últimas cadenas de FG solo si la generación es par.

**Tabla VII Elementos  $\tau_{i,j}$  y transmitancia para las cadenas de FG**

$(m,n)$	$\tau_{i,j}$	Transmitancia [ $T(\mu=0)$ ]
(2,2) (2,4) (4,4)	$\tau_{i,j}(k) = \begin{cases} (-1)^i & \text{si } i \neq j \\ 0 & \text{si } i = j \end{cases}$	1
(4,2)	$\tau_{i,j}(k) = \begin{cases} (-1)^j & \text{si } i \neq j \\ 0 & \text{si } i = j \end{cases}$	
(2,1) (4,3)	$\tau_{i,j}(k) = \begin{cases} s\gamma^{p(k)(-1)^i} & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases}$	4
(2,3) (4,1)	$\tau_{i,j}(k) = \begin{cases} -\gamma^{p(k)(-1)^i} & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases}$	$[\gamma^{p(k)} + \gamma^{-p(k)}]^2$

Más aún, para el sistema  $m=1=n$  y generación  $k$  obtuvimos que los elementos  $\tau_{i,j}$  de la matriz de transferencia son

$$\tau_{i,j}(k) = -vf(i+j) \left[ p(v)\theta(k)\gamma^{[1+\theta(k)]\theta(i)} + f(v)\gamma^{\theta(i)} \right] - (j-i)\theta(k) \left( 1 - \left\lfloor \frac{v}{2} \right\rfloor \right) \gamma^{\theta(k)(j-i)} \quad (3.70)$$

Entonces el coeficiente de transmisión es

$$T(0) = 4 \left[ f(v)(\gamma + \gamma^{-1})^2 + [1 - (-1)^v] \{ \gamma^{1+\theta(k)} + \gamma^{-[1+\theta(k)]} \}^2 / 2 \right]^{-1}, \quad (3.71)$$

donde  $f(v) = [1 + (-1)^v]/2$ ,  $v = (k-2) \bmod(3) \in [0,2]$  y  $\theta(i) = (-1)^{i+1}$ .

También, para el sistema ( $m=3, n=1$ ) de generación  $k$  se tiene que

$$\tau_{i,j}(k) = -vf(i+j) \left[ p(v)\gamma^b + \frac{f(v)}{2}\theta(k)\gamma^{\theta(i)d} \right] - \gamma^{-\theta(c)} |j-i| \left\lfloor \frac{1-v}{2} \right\rfloor \theta(c) \quad (3.72)$$

y el coeficiente de transmisión en  $\mu=0$  es

$$T(0) = 4 \left\{ \left[ \left( \left\lfloor \frac{1-v}{2} \right\rfloor \right)^2 (\gamma + \gamma^{-1})^2 + v^2 \left[ -p(v)(\gamma^{-2[1+\theta(k)]} + \gamma^{2[1+\theta(k)]}) + \frac{f(v)(\gamma^d + \gamma^{-d})}{2} \right] \right] \right\}^{-2} \quad (3.73)$$



donde  $b = -4\theta(i)p(k)$ ,  $c = k + 1 - j$  y  $d = 3f(k) - p(k)$ . Las ecuaciones (3.71) y (3.73) indican que estos sistemas presentan un estado transparente en  $\mu = 0$  cada 6 generaciones.

### 3.7 Sistemas tridimensionales: Nanoalambres de Fibonacci Generalizado

El transporte electrónico en nanoalambres aperiódicos con una sección transversal finita pueden ser estudiados por medio del método de renormalización mas convolución para la fórmula de Kubo-Greenwood. Su conductividad eléctrica ( $\sigma$ ) se expresa como [Sánchez, 2004]

$$\sigma(\mu, \omega, T) = \frac{1}{\Omega_{\perp}} \sum_{\beta} \sigma^{\parallel}(\mu - E_{\beta}, \omega, T), \quad (3.74)$$

donde  $\sigma^{\parallel}$  es la conductividad eléctrica del subsistema paralelo;  $\Omega_{\perp}$  y  $E_{\beta}$  son respectivamente el volumen y las eigen-energías del subsistema perpendicular. La conductancia eléctrica se escribe como  $g(\mu, \omega, T) \equiv \sigma(\mu, \omega, T) \Omega_{\perp} / \Omega_{\parallel}$ , donde  $\Omega_{\parallel}$  es la longitud del nanoalambre en la dirección longitudinal. Por ejemplo, un nanoalambre con una sección trasversal periódica de  $9 \times 9$  átomos se muestra en la Figura 3.16, cuyas integrales de salto  $t_A$  y  $t_B$  a lo largo de la dirección longitudinal del nanoalambre fueron ordenadas siguiendo la secuencia de la regla de cobre con  $m = 1$  y  $n = 2$ .

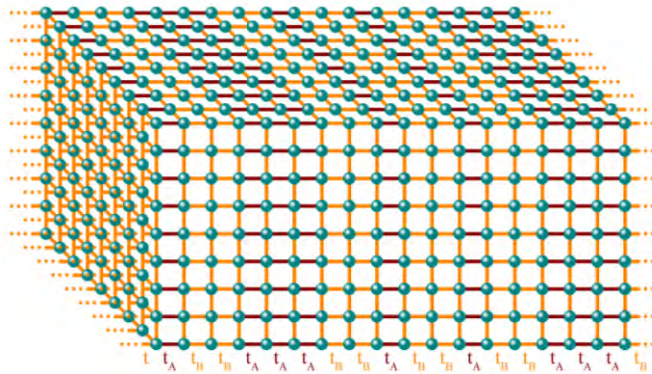


Figura 3.16 Bosquejo de un segmento de nanoalambre con una sección transversal periódica de  $9 \times 9$  átomos, cuyas integrales de salto  $t_A$  y  $t_B$  a lo largo de su dirección longitudinal, siguen la secuencia de la regla de cobre.

La conductancia DC a temperatura cero ( $g$ ) como función del potencial químico ( $\mu$ ) es presentado en la Figura 3.17 para nueve nanoalambres de FG con una sección transversal de  $9 \times 9$  átomos (ver Figura 3.16), en donde las integrales de salto en la dirección longitudinal siguen las secuencias mostradas en la Figura 2.5. Las longitudes de estos nanoalambres están especificadas en la Tabla IV y los parámetros del Hamiltoniano son  $t_A = 0.8t$ ,  $t_B = t$  y autoenergías nulas. La parte imaginaria de la energía es  $\eta = 10^{-15}|t|$  y las Figuras 3.17 fueron graficadas usando un barrido de 120000 potenciales químicos. El espectro de conductancia eléctrica  $g$ , normalizado por el cuanto de conductancia  $g_0 \equiv 2e^2/h$ , de los nanoalambres de FG son comparados con el espectro de conductancia de un nanoalambre periódico con la misma sección transversal (líneas grises). Observe la cuantización de la conductancia, en donde la altura del escalón en unidades de  $g_0$  en  $\pm(|E_\beta| + 2|t|)$  es la degeneración de  $E_\beta$ . En particular, la altura máxima de un escalón es de  $9g_0$ , localizada en  $\mu = \pm 2|t|$ , siendo la sección transversal de  $9 \times 9$  átomos. Además, la integral  $\int_{-\infty}^{\infty} g(\mu, 0, 0) d\mu$  de este espectro escalonado es  $324g_0|t|$ , debido a que cada uno de los 81 canales de conducción provee un área constante de  $4g_0|t|$  donde quiera que este colocado. Cuando los arreglos de las integrales de salto siguen una secuencia cuasiperiódica a lo largo de la dirección longitudinal, la conductancia es significativamente más pequeña respecto al caso periódico. En general, los nanoalambres no cuasiperiódicos con  $n > 1$  tienen una mayor conductancia eléctrica que los cuasiperiódicos con  $n = 1$ , en consistencia con los resultados del promedio espectral de un solo canal de la Figura 3.4. De hecho, tienen largos intervalos de  $\mu$  con  $g(\mu, 0, 0) > 0$ , en contraste con el valor mínimo cercano a cero de  $g$  sobre todo el espectro para los nanoalambres cuasiperiódicos, lo cual puede estar relacionado a que el espectro de eigenvalores es un conjunto de Cantor con medida de Lebesgue cero para cadenas cuasiperiódicas con desorden de sitio [Damanik, 1998]. Finalmente, las inserciones de la Figura 3.17 muestran la evolución del espectro de la conductancia eléctrica cuando la amplitud del desorden de enlace en los nanoalambres de FG aumenta. Observe el rápido desvanecimiento del espectro

de la conductancia de los nanoalambres cuasiperiódicos en comparación con el espectro de conductancia de los no cuasiperiódicos.

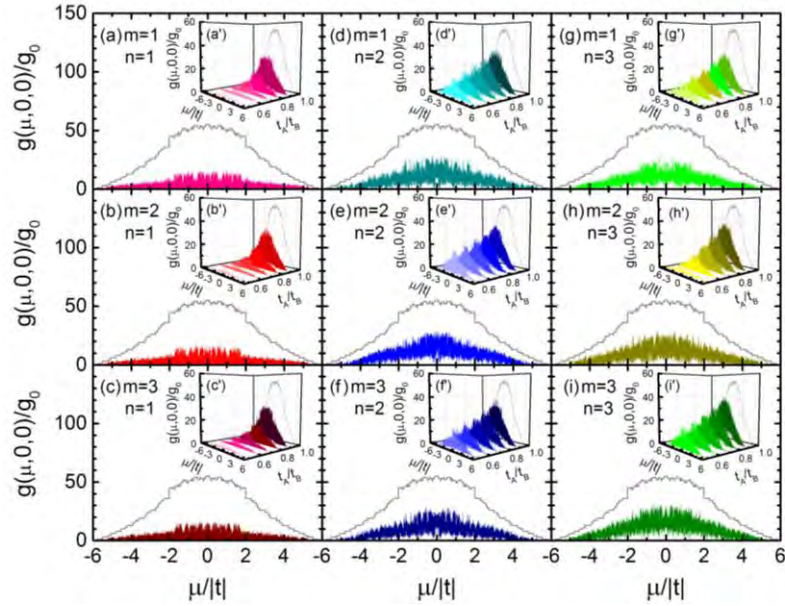


Figura 3.17 Conductancia eléctrica ( $g$ ) versus el potencial químico ( $\mu$ ) para nueve nanoalambres de FG de tipo  $(m, n)$  con una sección transversal de  $9 \times 9$  átomos,  $t_A = 0.8t$ ,  $t_B = t$ , auto-energías nulas, donde el arreglo longitudinal de las integrales de salto siguen las secuencias de la Figura 2.5. Este espectro es comparado con el de un nanoalambre periódico con la misma sección transversal (líneas grises).

### 3.8 Nanoalambres aperiódicos con impurezas

Ahora analizaremos la conductancia eléctrica ( $g$ ) en sistemas tridimensionales con impurezas, es decir, a un nanoalambre periódico añadiremos planos de impurezas. Todos los nanoalambres analizados en esta sección tienen la misma integral de salto  $t$  en los planos transversales. En la Figura 3.18, la conductancia eléctrica de un nanoalambre periódico con  $N = 433,494,438 \times 6 \times 6$  átomos es mostrada, usando  $\eta = 10^{-15} |t|$ , para los casos de (a) un plano de impurezas de sitio, (b) dos planos de impurezas de sitio, (c) un plano de impurezas de enlace y (d) dos planos de impurezas de enlace, considerando respectivamente  $\varepsilon_{imp} = 0.2|t|$  (líneas azules),  $0.3|t|$  (líneas verdes),  $0.4|t|$  (líneas amarillo oscuro),  $0.5|t|$  (líneas magenta),  $0.6|t|$  (líneas naranja),  $0.7|t|$  (líneas violetas)



o  $t_{imp} = 0.7t$  (líneas violetas),  $0.6t$  (líneas naranja),  $0.5t$  (líneas magenta),  $0.4t$  (líneas amarillo oscuro),  $0.3t$  (líneas verdes),  $0.2t$  (líneas azules). También mostramos el espectro para un nanoalambre periódico mostrado en líneas grises. Notemos que al introducir un solo plano de impurezas tanto de sitio como de enlace el espectro de un sistema periódico es suavizado y decrece conforme  $\varepsilon_{imp}$  crece o  $t_{imp}$  disminuye. Este efecto se observa con mayor facilidad cuando la naturaleza de la impureza es de enlace. En cambio, cuando tenemos dos planos de impurezas de sitio, el espectro es más pequeño respecto del mostrado en la Figura 3.18(a) para un solo plano de impurezas.

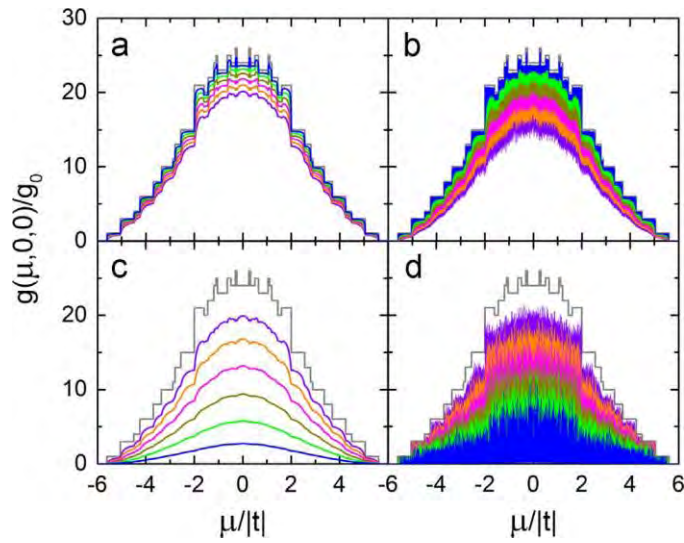


Figura 3.18 Conductancia eléctrica ( $g$ ) versus el potencial químico ( $\mu$ ) para nanoalambre periódico de  $N = 433,494,438$  átomos para los casos de (a) un plano de impurezas de sitio, (b) dos planos de impurezas de sitio, (c) un plano de impurezas de enlace y (d) dos planos de impurezas de enlace, considerando respectivamente  $\varepsilon_{imp} = 0.2|t|$  (líneas azules),  $0.3|t|$  (líneas verdes),  $0.4|t|$  (líneas amarillo oscuro),  $0.5|t|$  (líneas magenta),  $0.6|t|$  (líneas naranja),  $0.7|t|$  (líneas violetas); o  $t_{imp} = 0.7t$  (líneas violetas),  $0.6t$  (líneas naranja),  $0.5t$  (líneas magenta),  $0.4t$  (líneas amarillo oscuro),  $0.3t$  (líneas verdes),  $0.2t$  (líneas azules) y  $\eta = 10^{-15}|t|$ .

La Figura 3.19 muestra la conductancia eléctrica ( $g$ ) en función del potencial químico ( $\mu$ ) variando la energía de la impureza ( $\varepsilon_{imp}$ ) de  $0$  a  $4|t|$ , para los mismo nanoalambres de la Figura 3.18 con (a) un plano de impurezas de sitio, dos planos de impurezas de sitio separadas por (b) 13 átomos y (c) 60 átomos. Observemos que el espectro de la conductancia es asimétrico respecto de  $\mu = 0$  para los casos de dos planos de impurezas de sitio. Así mismo la cuantización de la conductancia es destruida si la distancia entre los planos de impurezas

aumenta o  $\varepsilon_{imp}$  se incrementa. Cuando el número de planos de impurezas de sitio es mayor que uno, el espectro de la conductancia llega a estar compuesto por muchos picos delgados, obsérvese que las líneas negras en las Figuras 3.19(b) y 3.19(c). Para los valores negativos de  $\varepsilon_{imp}$ , siempre obtenemos un espectro antisimétrico con respecto de  $\varepsilon_{imp} = 0$ .

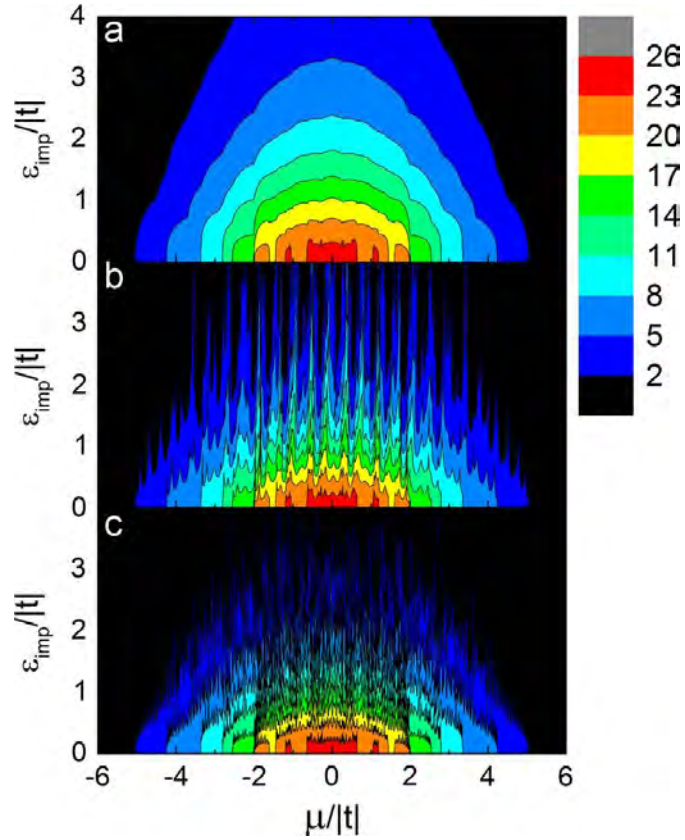


Figura 3.19 Conductancia eléctrica ( $g$ ) como función del potencial químico ( $\mu$ ) y de  $\varepsilon_{imp}$ , para un nanoalambre periódico con (a) un plano de impurezas de sitio, dos planos de impurezas de sitio separados por (b) 13 átomos y (c) 60 átomos.

Para el caso de impurezas de enlace de la Figura 3.20, presentamos resultados similares a los mostrados en la Figura 3.19 para un nanoalambre con (a) un plano de impurezas de enlace, dos planos de impurezas de enlace separadas por (b) 16 átomos y (c) 64 átomos, cuyas integrales de salto ( $t_{imp}$ ) varían entre 0 y  $3t$ . En contraste con la Figura 3.19, el espectro de la conductancia es simétrica respecto de  $\mu = 0$ . Además, la conductancia disminuye más rápidamente cuando  $t_{imp}/t < 1$  que para  $t_{imp}/t > 1$ . Al igual que para el caso de planos de impurezas de sitio en la Figura 3.19, la cuantización de la conductancia

desaparece rápidamente cuando el número de planos de impurezas o la distancia entre dichos planos se incrementa.

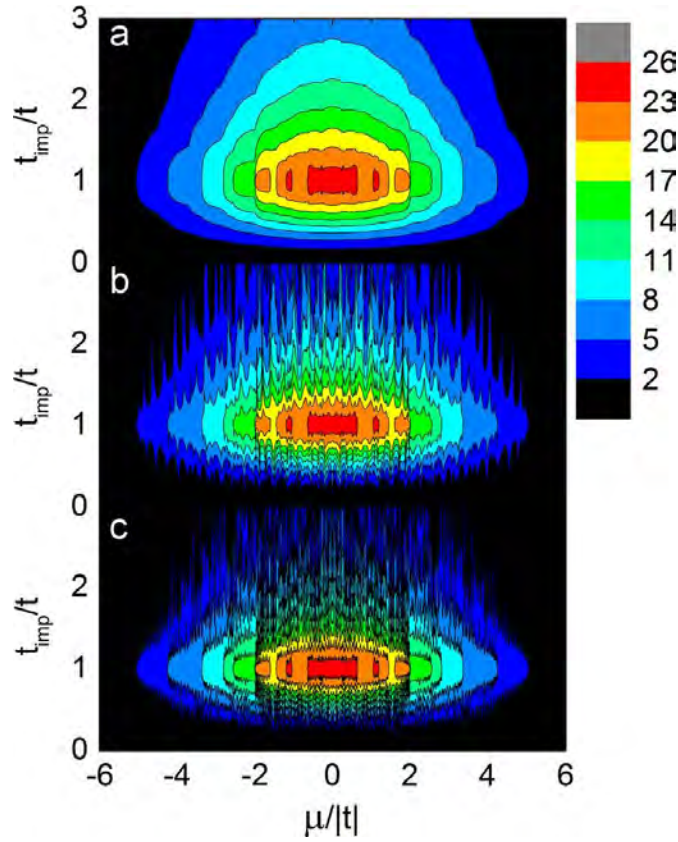


Figura 3.20 Conductancia eléctrica ( $g$ ) como función del potencial químico ( $\mu$ ) y de  $t_{imp}$ , para un nanoalambre periódico con (a) un plano de impurezas de enlace, dos planos de impurezas de enlace separados por (b) 13 átomos y (c) 60 átomos.

Más aún, extendimos nuestro estudio a nanoalambres cuasiperiódicos. En la Figura 3.21, se muestra el espectro de la conductancia para un nanoalambre de  $N = 433494438 \times 6 \times 6$  átomos, donde las integrales de salto fueron  $t_A = 0.9t$  y  $t_B = t$  a lo largo del eje longitudinal que sigue una secuencia de Fibonacci,  $\eta = 10^{15}|t|$ , un plano de impurezas de sitio con (a)  $\varepsilon_{imp} = 0.5|t|$ , (b)  $\varepsilon_{imp} = 1.5|t|$ , dos planos de impurezas de sitio separadas por 64 átomos con (c)  $\varepsilon_{imp} = 0.5|t|$  y (d)  $\varepsilon_{imp} = 1.5|t|$ . Estos espectros son comparados con los espectros de un nanoalambre periódico (línea azul) y de Fibonacci sin impurezas (línea gris). Observemos que estos espectros de conductancia siempre son asimétricos para cualquier número de impurezas. Más aún, la conductancia disminuye cuando  $\varepsilon_{imp}$  se incrementa.

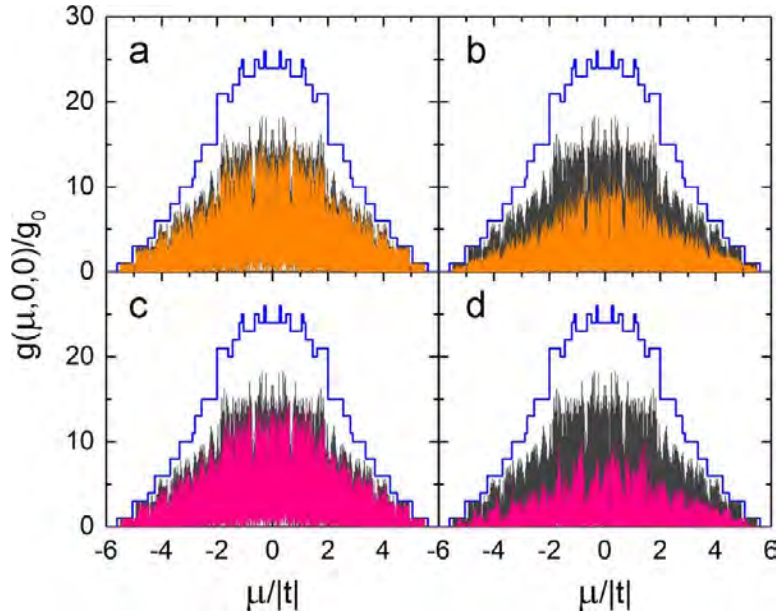


Figura 3.21 Conductancia eléctrica ( $g$ ) como función del potencial químico ( $\mu$ ) para un nanoalambre cuyo arreglo longitudinal sigue un ordenamiento tipo Fibonacci que contiene un plano de impurezas de sitio con (a)  $\varepsilon_{imp} = 0.5|t|$ , (b)  $\varepsilon_{imp} = 1.5|t|$ , dos planos de impurezas de sitio separadas por 64 átomos con (c)  $\varepsilon_{imp} = 0.5|t|$  y (d)  $\varepsilon_{imp} = 1.5|t|$ , en comparación con la el espectro de la conductancia para un nanoalambre periódico (líneas azules) y un nanoalambre tipo Fibonacci sin impurezas.

Además, analizamos el caso de planos de impurezas de enlace en nanoalambres cuasiperiódicos. La Figura 3.22 muestra el espectro de conductancia de un nanoalambre que contiene un plano de impurezas de enlace con (a)  $t_{imp} = 0.5t$ , (b)  $t_{imp} = 0.3t$ , dos planos de impurezas de enlace separadas por 64 átomos con (c)  $t_{imp} = 0.5t$ , (d)  $t_{imp} = 0.3t$ . Para nuestros cálculos empleamos los mismos parámetros que en la Figura 3.19. Los espectros son comparados con los obtenidos para un nanoalambre periódico (línea azul) y un nanoalambre cuasiperiódico (línea gris) sin impurezas. Observemos que la conductancia decrece rápidamente cuando  $t_{imp}$  disminuye para cualquier número de impurezas.

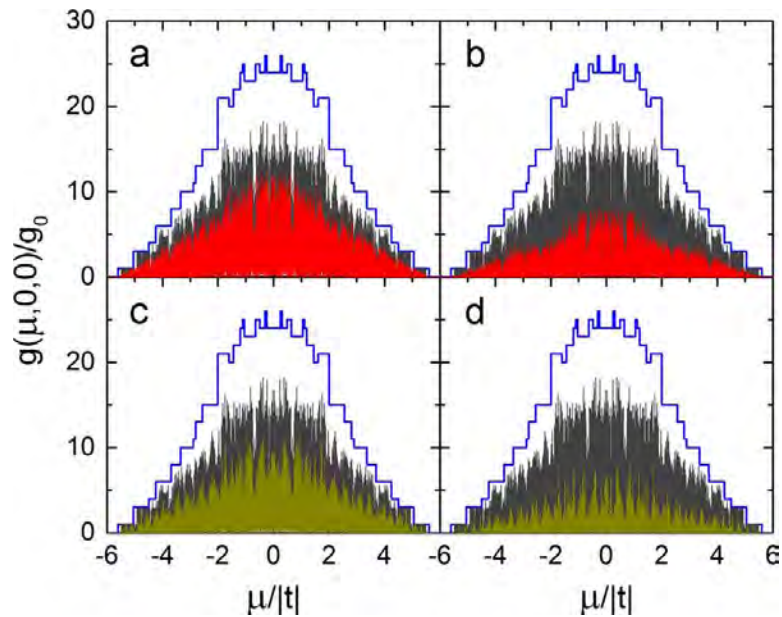


Figura 3.22 Conductancia eléctrica ( $g$ ) como función del potencial químico ( $\mu$ ) para un nanoalambre cuyo arreglo longitudinal sigue un ordenamiento tipo Fibonacci que contiene un plano de impurezas de enlace con (a)  $t_{imp} = 0.5t$ , (b)  $t_{imp} = 0.3t$ , dos planos de impurezas de sitio separadas por 64 átomos con (c)  $t_{imp} = 0.5t$  y (d)  $t_{imp} = 0.3t$ , en comparación con la el espectro de la conductancia para un nanoalambre periódico (líneas azules) y un nanoalambre tipo Fibonacci sin impurezas.

También debemos mencionar que mientras la separación entre los planos de impurezas de enlace es mayor, la disminución de la conductancia es más lenta. La inclusión de los planos de impureza de enlace con  $t_{imp}/t < 1$  tiene un efecto más fuerte sobre el espectro de la conductancia en un nanoalambre tipo Fibonacci que la adición de impurezas de sitio, como ocurría en los nanoalambre periódicos.



## Capítulo 4. Conclusiones

En esta tesis estudiamos el efecto de la aperiodicidad en el transporte electrónico AC y DC en sistemas de Fibonacci generalizado (FG) de tamaño macroscópico mediante la fórmula de Kubo-Greenwood dentro de la aproximación de amarre fuerte. Asimismo, analizamos la localización de la función de onda a través del exponente de Lyapunov y de la razón de participación ( $PR$ ). Para ello, desarrollamos un nuevo método de renormalización en espacio real capaz de calcular el  $PR$  de una cadena de FG de tamaño macroscópico descrita a través del Hamiltoniano de amarre fuerte. Más aún, realizamos por primera vez una extensión y unificación del método de renormalización aplicado a la fórmula de Kubo-Greenwood para analizar el transporte electrónico de cualquier sistema de FG. Además, realizamos el primer análisis del promedio espectral de la conductividad AC para nueve sistemas de FG, encontrando estados resonantes cuyas conductividades superan ampliamente a la de sus correspondientes sistemas periódicos. Obtuvimos expresiones analíticas que demuestran la existencia de estados transparentes en cadenas de FG para un potencial químico cero. Asimismo, demostramos un nuevo estado transparente en sistemas bidimensionales con ordenamiento cuasiperiódico e impurezas tipo Fano. A continuación, enlistamos las principales conclusiones de este trabajo.

- 1.-Se confirma la estrecha relación entre la localización de la función de onda y el transporte electrónico a temperatura cero, con excepción de los estados críticamente localizados.
- 2.-El análisis del  $PR$ , sugiere que esta medida puede no ser apropiada para redes cuasicristalinas.
- 3.-El promedio espectral de la conductividad eléctrica y del  $PR$  muestran un decaimiento que sigue una ley de potencias conforme el número de átomos se incrementa en los sistemas cuasiperiódicos. En contraste, para los sistemas de FG con  $n = 2$  y  $n = 3$  el promedio espectral decae más lentamente.
- 4.-Obtuvimos una expresión analítica para el coeficiente de Lyapunov en cadenas periódicas.

- 5.-En los espectros de la conductividad DC, encontramos estados transparentes para los sistemas de FG con  $n = 1$ , si  $m$  es par cada dos generaciones o cada seis generaciones si  $m$  es impar. Estas cadenas son cuasiperiódicas debido a que cumplen la condición de Pisot y la unimodularidad de la matriz de sustitución. Para cadenas con  $n \neq 1$ , hay estados transparentes en  $\mu = 0$  para todas las generaciones si  $n$  y  $m$  son pares y cada dos generaciones si  $n$  es impar y  $m$  es par. Mas aún, se presentan estados de alta conductividad con  $\sigma(\mu, 0, 0) \geq 0.9999999999999999\sigma_p$  en  $\mu = \pm t_A$  para cadenas de FG con  $n = m = 3$  o  $4$ .
- 6.-Dedujimos una ecuación analítica para la conductividad eléctrica DC para el caso en el que el sistema tiene una impureza.
- 7.-El análisis de la conductividad eléctrica para dos impurezas revela que la posición relativa entre ellas es esencial y tiene un efecto global en su espectro de conductividad.
- 8.-En el espectro de la conductividad AC encontramos estados resonantes cuya conductividad es extremadamente alta (más de cuatro ordenes de magnitud) en comparación a la de los sistemas periódicos.
- 9.-Las energías y frecuencias del campo eléctrico donde se presentan estas resonancias están estrechamente relacionadas con la longitud del sistema. Estas frecuencias de resonancia son la diferencia de eigenvalores del sistema, es decir, cuando el desorden cuasiperiódico o aperiódico se presenta, estos picos ocurren a diversas frecuencias y alcanzan altos valores en el espectro AC. También, encontramos que este comportamiento es independiente de la escala del sistema, por lo que lo encontramos en una, dos y tres dimensiones.
- 10.-Mediante un análisis del espectro de la conductividad AC, obtuvimos que se requieren de dos impurezas ya sean de sitio o de enlace para que las resonancias aparezcan
- 11.- Las resonancias en el espectro de conductancia AC se incrementan, cuando el parámetro de aperiodicidad se incrementa. Esto se debe al aumento en la cantidad de minibandas en el espectro de la conductividad DC.

- 12.-Para investigar nanoalambres o nanoestructuras con ordenamientos cuasiperiódicos y/o aperiódicos, aplicamos los métodos de renormalización más convolución en espacio real.
- 13.-Demostramos de forma analítica y numérica la existencia de un nuevo estado transparente para nanocintas cuasiperiódicas con un plano de impurezas tipo Fano en  $\mu = 0$ .
- 14.-La conductancia eléctrica en nanoalambres con un ordenamiento periódico en su dirección longitudinal presenta un espectro cuantizado, como es reportado de forma experimental y este desaparece cuando consideremos un ordenamiento cuasiperiódico en su dirección longitudinal, sin importar el ordenamiento de su sección transversal.
- 15.-Los métodos de renormalización resultan ser eficientes y exactos para el cálculo del transporte electrónico y localización de sistemas cuasiperiódicos y no-cuasiperiódicos en espacio real.

Con esto en mente, proponer y caracterizar estructuras artificiales con distintos tipos de impurezas es de gran importancia. Mas aún, si el sistema al cual se le agragarán impurezas es cuasiperiódico, podemos obtener novedosas propiedades y/o nuevos comportamientos, que pueden llegar a ser empleados en la mejora de la tecnología actual. Como trabajo a futuro, se planea extender el método de renormalización más convolución a sistemas con multigrados de libertad por sitio, con el fin de poder aplicar dicho método a materiales no cristalinos mediante modelos cuánticos más realistas



# Apéndices

## Apéndice A: Fórmulas de renormalización para la densidad de estados

Para una cadena de Fibonacci generalizado (FG) de tipo  $(m, n)$  con dos tipos de integrales de salto  $t_A$  y  $t_B$  la densidad de estados (DOS) de generación  $l$  evaluada para la energía  $E$  en términos de la función de Green ( $G$ ) puede ser escrita como en la referencia [Sánchez, 2004],

$$\begin{aligned} DOS(E, l) &= -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} \sum_{j=1}^{N(l)} G_{j,j}(z) \\ &= -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} \left[ A_F(l, 1) G_{L,L}(z) + B_F(l, 1) G_{R,R}(z) + C_F(l, 1) G_{L,R}(z) + D_F(l, 1) \right], \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

donde  $z = E + i\eta$ ,  $N(l)$  es el número total de átomos en la cadena de FG de generación  $l$  y los coeficientes  $A, B, C$  y  $D$  son calculados iterativamente a través de dos etapas de renormalización, como ha sido resumido esquemáticamente en la Figura A1, por lo que

$$\begin{aligned} A_\alpha(k, \lambda) &= A_\beta(k, \delta) + \theta_\alpha^2(k, \lambda) [A_\varepsilon(\xi, \zeta) + B_\beta(k, \delta) - 1] + \theta_\alpha(k, \lambda) C_\beta(k, \delta) \\ B_\alpha(k, \lambda) &= B_\varepsilon(\xi, \zeta) + \phi_\alpha^2(k, \lambda) [A_\varepsilon(\xi, \zeta) + B_\beta(k, \delta) - 1] + \phi_\alpha(k, \lambda) C_\varepsilon(\xi, \zeta) \\ C_\alpha(k, \lambda) &= \phi_\alpha(k, \lambda) C_\beta(k, \delta) + \theta_\alpha(k, \lambda) C_\varepsilon(\xi, \zeta) + 2\theta_\alpha(k, \lambda) \phi_\alpha(k, \lambda) \\ &\quad \times [A_\varepsilon(\xi, \zeta) + B_\beta(k, \delta) - 1] \\ D_\alpha(k, \lambda) &= D_\beta(k, \delta) + D_\varepsilon(\xi, \zeta) + [A_\varepsilon(\xi, \zeta) + B_\beta(k, \delta) - 1] / [z - E_R(k, \delta) - E_L(\xi, \zeta)] \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

siendo,

$$\begin{cases} \theta_\alpha(k, \lambda) = t_\beta(k, \delta) / [z - E_R(k, \delta) - E_L(\xi, \zeta)] \\ \phi_\alpha(k, \lambda) = t_\varepsilon(\xi, \zeta) / [z - E_R(k, \delta) - E_L(\xi, \zeta)] \\ E_L(k, \lambda) = E_L(k, \delta) + t_\beta^2(k, \delta) / [z - E_R(k, \delta) - E_L(\xi, \zeta)] \\ E_R(k, \lambda) = E_\varepsilon(\xi, \zeta) + t_\varepsilon^2(\xi, \zeta) / [z - E_R(k, \delta) - E_L(\xi, \zeta)] \\ t_\alpha(k, \lambda) = t_\beta(k, \delta) t_\varepsilon(\xi, \zeta) / [z - E_R(k, \delta) - E_L(\xi, \zeta)] \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

y el significado de  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\varepsilon$ ,  $\delta$ ,  $\lambda$ ,  $\xi$  y  $\zeta$  están dados en la Tabla A1, donde el valor de  $\alpha$  determina el significado de los subsecuentes parámetros.

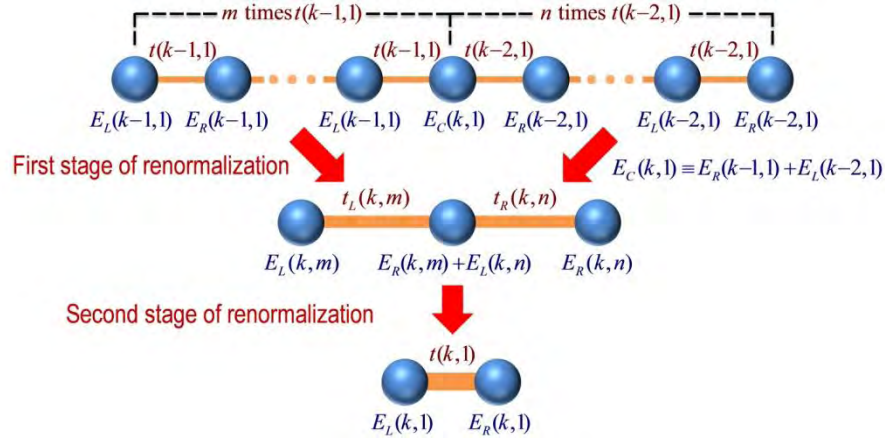


Figura A1. Representación esquemática de las dos etapas del procedimiento de renormalización para las cadenas de Fibonacci generalizado de tipo  $(m,n)$

Para una cadena de FG de generación  $k$ , el procedimiento de renormalización consiste en usar las mismas ecuaciones (A.2)-(A.3) y los siguientes pasos: (1) calcular iterativamente los coeficientes  $A_L(k-1,j)$ ,  $B_L(k-1,j)$ ,  $C_L(k-1,j)$  y  $D_L(k-1,j)$  para  $j = 2, 3, \dots, m$ , (2) calcular iterativamente  $A_R(k-2,j)$ ,  $B_R(k-2,j)$ ,  $C_R(k-2,j)$  y  $D_R(k-2,j)$  para  $j = 2, 3, \dots, n$ , y (3) usar los resultados del procedimiento de renormalización del segmento del lado izquierdo y del lado derecho para calcular  $A_F(k,1)$ ,  $B_F(k,1)$ ,  $C_F(k,1)$  y  $D_F(k,1)$  de generación  $k$ . Este cálculo debe ser repetido para  $k=2, 3, \dots, l$  con el propósito de determinar la *DOS* de una cadena de FG de tipo  $(m,n)$  y generación  $l$ .

Tabla A1. Significado de los símbolos en la ecuación (A.2)							
Etapa	$\alpha$	$\beta$	$\varepsilon$	$\delta$	$\lambda$	$\xi$	$\zeta$
Primera	$L$	$L$	$F$	$j-1$	$j$	$k-1$	$1$
	$R$	$R$				$k-2$	
Segunda	$F$	$L$	$R$	$m$	$1$	$k$	$n$

Las condiciones iniciales para las ecuaciones (A.2)-(A.3) son  $t_F(0,1) = t_B$ ,  $A_F(0,1) = B_F(0,1) = 1$ ,  $C_F(0,1) = D_F(0,1) = 0$ ,  $E_L(0,1) = E_R(0,1) = 0$ ,  $A_F(1,1) = 1$ ,  $B_F(1,1) = 1$ ,  $C_F(1,1) = D_F(1,1) = 0$ ,  $t_F(1,1) = t_A$  y  $E_L(1,1) = E_R(1,1) = 0$ .

Cuando el sistema está conectado a dos guías periódicas, las funciones de Green en los átomos extremos están dadas por:

$$G_{L,L}(z) = \left\{ \begin{array}{l} z - E_L(l,1) - E_P^R(l') - \frac{t_P^2(l')}{z - E_P^L(l')} \\ - \frac{t_F^2(l,1)}{z - E_R(l,1) - E_P^L(l') - \frac{t_P^2(l')}{[z - E_P^R(l')]} \end{array} \right\}^{-1}, \quad (\text{A.4})$$

$$G_{R,R}(z) = \left\{ \begin{array}{l} z - E_R(l,1) - E_P^L(l') - \frac{t_P^2(l')}{z - E_P^R(l')} \\ - \frac{t_F^2(l,1)}{z - E_L(l,1) - E_P^R(l') - \frac{t_P^2(l')}{[z - E_P^L(l')]} \end{array} \right\}^{-1} \quad (\text{A.5})$$

y

$$G_{L,R}(z) = \frac{t_F(l,1)G_{R,R}(z)}{z - E_L(l,1) - E_P^R(l') - t_P^2(l')/[z - E_P^L(l')]}, \quad (\text{A.6})$$

donde  $l'$  es el número de generación para estas guías periódicas construidas siguiendo el procedimiento de renormalización para FG con  $m=n=1$  y  $t_A=t_B=t$ , cuyas auto-energías e integrales de salto efectivas son:  $E_P^L(l') = E_P^L(l'-1) + t_P^2(l'-1)\gamma_P$ ,  $E_P^R(l') = E_P^R(l'-2) + t_P^2(l'-2)\gamma_P$  y  $t_P(l') = t_P(l'-1)t_P(l'-2)\gamma_P$ , siendo  $\gamma_P = [z - E_P^R(l'-1) - E_P^L(l'-2)]^{-1}$ .

Con el objetivo de ilustrar el procedimiento para obtener las fórmulas de renormalización podemos tomar la etapa media de la Figura A1 como un sistema inicial, cuya DOS puede ser escrita desde la ecuación (A.1) como

$$\begin{aligned} DOS(E,l) &= -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} \left[ \sum_{j=1}^{mN(l-1)} G_{j,j}(z) + \sum_{j=mN(l-1)}^{N(l)} G_{j,j}(z) - G_{C,C}(z) \right] \\ &= -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} \left[ \begin{array}{l} A_L(l,m)G_{L,L}(z) + B_L(l,m)G_{C,C}(z) + C_L(l,m)G_{L,C}(z) \\ + D_L(l,m) + A_R(l,n)G_{C,C}(z) + B_R(l,n)G_{R,R}(z) \\ + C_R(l,n)G_{C,R}(z) + D_R(l,n) - G_{C,C}(z) \end{array} \right], \quad (\text{A.7}) \end{aligned}$$

donde los elementos de las funciones de Green satisfacen la ecuación de Dyson dada por

$$\begin{pmatrix} z-E_L(l,m) & -t_L(l,m) & 0 \\ -t_L(l,m) & z-E_C(l,1) & -t_R(l,n) \\ 0 & -t_R(l,n) & z-E_R(l,n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{L,L}(z) & G_{L,C}(z) & G_{L,R}(z) \\ G_{C,L}(z) & G_{C,C}(z) & G_{C,R}(z) \\ G_{R,L}(z) & G_{R,C}(z) & G_{R,R}(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.8})$$

En otras palabras,

$$G_{C,X}(z) = \frac{\delta_{C,X}}{z-E_C(l,1)} + \frac{t_L(l,m)}{z-E_C(l,1)} G_{L,X}(z) + \frac{t_R(l,n)}{z-E_C(l,1)} G_{R,X}(z), \quad (\text{A.9})$$

donde  $X = L, C$  o  $R$ , y  $E_C(l,1) = E_R(l,m) + E_L(l,n)$ . Siendo las funciones de Green una matriz simétrica derivada de un Hamiltoniano simétrico, ecuación (A.9) para  $X = C$  puede ser reescrita mediante la misma ecuación para  $X = L$  y  $X = R$  como

$$G_{C,C}(z) = [z-E_C(l,1)]^{-1} + \theta_F^2(l,1)G_{L,L}(z) + \phi_F^2(l,1)G_{R,R}(z) + 2\theta_F(l,1)\phi_F(l,1)G_{L,R}(z). \quad (\text{A.10})$$

Sustituyendo las ecuaciones (A.9) y (A.10) en (A.7), uno obtiene

$$\begin{aligned} DOS(E,l) = & -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} \{ A_L(l,m)G_{L,L}(z) + [B_L(l,m) + A_R(l,n) - 1] \\ & \times [[z-E_C(l,1)]^{-1} + \theta_F^2(l,1)G_{L,L}(z) + \phi_F^2(l,1)G_{R,R}(z) \\ & + 2\theta_F(l,1)\phi_F(l,1)G_{L,R}(z)] + D_L(l,m) + B_R(l,n)G_{R,R}(z) + D_R(l,n) \\ & + C_L(l,m)[\theta_F(l,1)G_{L,L}(z) + \phi_F(l,1)G_{R,L}(z)] + C_R(l,n)[\theta_F(l,1)G_{L,R}(z) \\ & + \phi_F(l,1)G_{R,R}(z)] \} \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

la cual nos conduce a la ecuación (A.2). Por otra parte, sustituyendo la ecuación (A.9) en (A.8), esto llega a ser

$$\begin{pmatrix} z-E_L(l,1) & -t_F(l,1) \\ -t_F(l,1) & z-E_R(l,1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{L,L}(z) & G_{L,R}(z) \\ G_{R,L}(z) & G_{R,R}(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.12})$$

donde la integral de salto renormalizada  $t_F(l,1)$  y las auto-energías  $E_L(l,1)$  y  $E_R(l,1)$ , están dadas en la ecuación (A.3).

## Apéndice B: Fórmulas de renormalización para la razón de participación.

Siendo que la función de onda de un electrón ( $|\Psi\rangle$ ) puede ser escrita como una combinación lineal de las funciones de Wannier ( $|j\rangle$ ) del átomo  $j$ ,  $|\Psi\rangle = \sum_j c_j |j\rangle$ , la razón de participación ( $PR$ ) para una función de onda no normalizada está dada por

$$PR = \frac{\left(\sum_j |c_j|^2\right)^2}{\sum_j |c_j|^4} \quad (\text{B.1})$$

y su denominador puede ser expresado en términos de las amplitudes de las funciones de onda en los sitios extremos,  $c_L$  y  $c_R$ , como

$$\begin{aligned} \sum_j |c_j|^4 = & I_F(l,1) |c_L|^4 + J_F(l,1) |c_R|^4 + K_F(l,1) |c_L|^2 |c_R|^2 + L_F(l,1) [c_L^2 c_R^{*2} \\ & + c_R^2 c_L^{*2}] + P_F(l,1) |c_L|^2 (c_L c_R^* + c_R c_L^*) + Q_F(l,1) |c_R|^2 (c_L c_R^* + c_R c_L^*), \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

donde  $I_F(l,1)$ ,  $J_F(l,1)$ ,  $K_F(l,1)$ ,  $L_F(l,1)$ ,  $P_F(l,1)$  y  $Q_F(l,1)$  son los coeficientes de renormalización para el  $PR$ . Análogamente, la condición de normalización de la función de onda  $|\Psi\rangle$  puede ser expresada como

$$1 = \sum_j |c_j|^2 = R_F(l,1) |c_L|^2 + S_F(l,1) |c_R|^2 + U_F(l,1) [c_L c_R^* + c_R c_L^*]. \quad (\text{B.3})$$

Siguiendo un procedimiento de renormalización similar al explicado para la  $DOS$  al final del Apéndice A, pero usando la ecuación de Schrödinger en vez de la ecuación de Dyson, los coeficientes de renormalización para el  $PR$  de una cadena de FG tipo  $(m,n)$  de generación  $l$  puede ser iterativamente calculada para  $k = 2, 3, \dots, l$  por medio de

$$\begin{aligned} I_\alpha(k, \lambda) = & I_\beta(k, \delta) + \theta_\alpha^3(k, \lambda) \{ \theta_\alpha(k, \lambda) [J_\beta(k, \delta) + I_\varepsilon(\xi, \zeta) - 1] + 2Q_\beta(k, \delta) \} \\ & + 2\theta_\alpha(k, \lambda) P_\beta(k, \delta) + \theta_\alpha^2(k, \lambda) [K_\beta(k, \delta) + 2L_\beta(k, \delta)], \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

$$\begin{aligned} J_\alpha(k, \lambda) = & J_\varepsilon(\xi, \zeta) + \phi_\alpha^3(k, \lambda) \{ \phi_\alpha(k, \lambda) [J_\beta(k, \delta) + I_\varepsilon(\xi, \zeta) - 1] + 2P_\varepsilon(\xi, \zeta) \} \\ & + 2\phi_\alpha(k, \lambda) Q_\varepsilon(\xi, \zeta) + \phi_\alpha^2(k, \lambda) [K_\varepsilon(\xi, \zeta) + 2L_\varepsilon(\xi, \zeta)], \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

$$K_\alpha(k, \lambda) = \theta_\alpha^2(k, \lambda) \{4\phi_\alpha^2(k, \lambda)[J_\beta(k, \delta) + I_\varepsilon(\xi, \zeta) - 1] + K_\varepsilon(\xi, \zeta) + 4\phi_\alpha(k, \lambda)P_\varepsilon(\xi, \zeta)\} + \phi_\alpha^2(k, \lambda)[K_\beta(k, \delta) + 4\theta_\alpha(k, \lambda)Q_\beta(k, \delta)], \quad (\text{B.6})$$

$$L_\alpha(k, \lambda) = \theta_\alpha^2(k, \lambda) \{\phi_\alpha^2(k, \lambda)[J_\beta(k, \delta) + I_\varepsilon(\xi, \zeta) - 1] + L_\varepsilon(\xi, \zeta) + \phi_\alpha(k, \lambda)P_\varepsilon(\xi, \zeta)\} + \phi_\alpha^2(k, \lambda)[L_\beta(k, \delta) + \theta_\alpha(k, \lambda)Q_\beta(k, \delta)], \quad (\text{B.7})$$

$$P_\alpha(k, \lambda) = \theta_\alpha^3(k, \lambda) \{2\phi_\alpha(k, \lambda)[J_\beta(k, \delta) + I_\varepsilon(\xi, \zeta) - 1] + P_\varepsilon(\xi, \zeta)\} + \phi_\alpha(k, \lambda)P_\beta(k, \delta) + \theta_\alpha(k, \lambda)\phi_\alpha(k, \lambda) \{[K_\beta(k, \delta) + 2L_\beta(k, \delta)] + 3\theta_\alpha(k, \lambda)Q_\beta(k, \delta)\}, \quad (\text{B.8})$$

$$Q_\alpha(k, \lambda) = \phi_\alpha^3(k, \lambda) \{2\theta_\alpha(k, \lambda)[J_\beta(k, \delta) + I_\varepsilon(\xi, \zeta) - 1] + Q_\beta(k, \delta)\} + \theta_\alpha(k, \lambda)Q_\varepsilon(\xi, \zeta) + \theta_\alpha(k, \lambda)\phi_\alpha(k, \lambda) \{[K_\varepsilon(\xi, \zeta) + 2L_\varepsilon(\xi, \zeta)] + 3\phi_\alpha(k, \lambda)P_\varepsilon(\xi, \zeta)\}, \quad (\text{B.9})$$

$$R_\alpha(k, \lambda) = R_\beta(k, \delta) + \theta_\alpha^2(k, \lambda)[S_\beta(k, \delta) + R_\varepsilon(\xi, \zeta) - 1] + 2\theta_\alpha(k, \lambda)U_\beta(k, \delta) \quad (\text{B.10})$$

$$S_\alpha(k, \lambda) = S_\varepsilon(\xi, \zeta) + \phi_\alpha^2(k, \lambda)[S_\beta(k, \delta) + R_\varepsilon(\xi, \zeta) - 1] + 2\phi_\alpha(k, \lambda)U_\varepsilon(\xi, \zeta) \quad (\text{B.11})$$

$$U_\alpha(k, \lambda) = R_\beta(k, \delta) + \theta_\alpha(k, \lambda) \{\phi_\alpha(k, \lambda)[S_\beta(k, \delta) + R_\varepsilon(\xi, \zeta) - 1] + U_\varepsilon(\xi, \zeta)\} + \phi_\alpha(k, \lambda)U_\beta(k, \delta), \quad (\text{B.12})$$

donde,  $\theta_\alpha$  y  $\phi_\alpha$  están dadas en la ecuación (A.3) mientras que el significado de  $\alpha, \beta, \varepsilon, \delta, \lambda, \xi$  y  $\zeta$  se especifica en la Tabla A1.

Las condiciones iniciales para la renormalización de  $PR$  son  $I_F(0,1) = J_F(0,1) = 1$ ,  $K_F(0,1) = L_F(0,1) = P_F(0,1) = Q_F(0,1) = 0$ ,  $R_F(0,1) = 1$ ,  $S_F(0,1) = 1$ ,  $U_F(0,1) = 0$ ,  $E_L(0,1) = 0$ ,  $E_R(0,1) = 0$ ,  $t_F(0,1) = t_B$ ,  $I_F(1,1) = 1$ ,  $J_F(1,1) = 1$ ,  $K_F(1,1) = L_F(1,1) = P_F(1,1) = Q_F(1,1) = 0$ ,  $R_F(1,1) = S_F(1,1) = 1$ ,  $U_F(1,1) = 0$ ,  $E_L(1,1) = E_R(1,1) = 0$  y  $t_F(1,1) = t_A$ .

# Referencias

- [Abrahams, 1979] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello, T.V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 673 (1979).
- [Anderson, 1958] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958).
- [Alloul, 2007] H. Alloul, *Introduction to the physics of electrons in solids* (Springer, 2007).
- [Ashcroft, 1976] N. W. Ashcroft y N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Saunders College Publishing, 1976).
- [Bell, 1970] R. J. Bell, P. Dean. *Discuss. Faraday Soc.* **50**, 55 (1970).
- [Bindi, 2009] L. Bindi, P.J. Steinhardt, N. Yao, y P.J. Lu, *Science* **324**, 1306, (2009).
- [Bohr, 1926] H. Bohr, *Acta Math.* **45**, 29 (1926).
- [Borland, 1963] R. E. Borland *Proc. R. Soc. Lond. A* **274**, 529 (1963)
- [Büttiker, 1985] R. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer, y S. Pinhas, *Phys. Rev. B* **31**, 6207 (1985).
- [Cassels, 1957] J. W. S. Cassels, *An Introduction to Diophantine Approximation* (Cambridge University Press, Cambridge, 1957).
- [Datta, 1995] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, (Cambridge University Press, London, 1995).
- [DiMarcio, 1981] E.A. DiMarcio, *Equilibrium theory of glasses*. (In Annals of the New York Academy of Sciences; O'Reilly, J.M., Goldstein, M., Eds.; Publ. New York Academy of Sciences: New York, NY, USA **371**, 1981).
- [Dubois, 2005] J. M. Dubois, *Useful Quasicrystals*. (World Scientific, Singapore London, 2005).

- [Dubois, 2011] J. M. Dubois, *Fundamentals and Applications* (Wiley, Weinheim, 2011).
- [Dubois, 2011] J. M. Dubois, *Chem. Soc. Rev.* **41**, 6760 (2012).
- [Economou, 2006] E.N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics* (Springer Series in Solid-State Sciences, **7**, 2006).
- [Eisenhammer, 1994] T. Eisenhammer y M. Lazarov, German Patent n1 4425140, (1994). T. Eisenhammer, *Thin Solid Films.* **1**, 270 (1995).
- [Eisenhammer, 1997] T. Eisenhammer, *New Horizons in Quasicrystals: Research and Applications* (Ed A.I. Goldman *et al.* Singapore: World Scientific, 1997).
- [Fu, 1995] X. Fu, Y. Liu, Z. Guo, P. Zhou, and X. Huang, *Phys. Rev. B* **51**, 3910 (1995).
- [Fujiwara, 1989] T. Fujiwara, *Phys. Rev. B*, **40**, 942 (1989).
- [Gumbs, 1988] G. Gumbs and M.K. Ali, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1081 (1988); M. Holzer, *Phys. Rev. B* **38**, 1709 (1988); M. Severin y R. Riklund, *Phys. Rev. B* **39**, 10 362 (1989); M. Severin, M. Dulea, y R. Riklund, *Phys. Rev. B* **1**, 8851 (1989); S. Sil, S.N. Karmakar, y R.K. Moitra, *Phys. Rev. B.* **48**, 4192 (1993); J.X. Zhong, T. Xie, J.Q. You, y J.R. Yan, *Z. Phys. B: Condens. Matter* **87**, 223 (1992).
- [Gumbs, 1995] G. Gumbs, G.S. Dubey, A. Salman, B.S. Mahmoud and D. Huang, *Phys. Rev. B* **52**, 210 (1995).
- [Greenwood, 1958] A.D. Greenwood, *Proc. Phys. Soc.* **71**, 585 (1958).
- [Hippert, 2008] F. Hippert y J. J. Prejean. *Philosophical Magazine*, **88**, 2175 (2008).
- [Hume-Rothery, 1926] W. Hume-Rothery, *J. Inst. Met.* **35**, 295 (1926).
- [Imry, 1999] Y. Imry y R. Landauer, *Rev. Mod. Phys.* **71**, S306 (1999).
- [Ishii, 2001] Y. Ishii, T. Fujiwara, *Phys. Rev. Lett.* **87** (2001).



- [ITRS, 2013] The international technology roadmap for semiconductor conductors, Executive summary (2013).
- [Kelton, 1997] K. F. Kelton, A. M. Viano, R. M. Stroud, E. H. Majzoub, P. C. Gibbons, S. T. Misture, A. I. Goldman y M. J. Kramer. *New Horizons in Quasicrystals: Research and Applications* (Ed. A. I. Goldman *et.al.* Singapore: World Scientific, 1997).
- [Kohmoto, 1983] M. Kohmoto, L.P. Kadanoff, y C. Tang, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1870 (1983).
- [Kohmoto, 1987] M. Kohmoto, L.P. Kadanoff, y C. Tang, *Phys. Rev. B* **35**, 1020 (1987).
- [Kolář, 1990] M. Kolář y M.K. Ali, *Phys. Rev. B* **41**, 7108 (1990).
- [Kubo, 1956] R. Kubo, *Can. J. Phys.* **34**, 1274 (1956).
- [Kubo, 1957] R. Kubo, *J. Phys. Soc. Japan* **12**, 570 (1957).
- [Kramer, 1993] B. Kramer y A. MacKinnon, *Rep. Prog. Phys.* **56**, 1469 (1993).
- [Landauer, 1957] R. Landauer, *IBM J. Res. Dev.* **1**, 223 (1957).
- [Landauer, 1970] R. Landauer, *Phil. Mag.* **21**, 863 (1970).
- [Maciá, 2006] E. Maciá. *Rep. Prog. Phys.* **69**, 397 (2006).
- [Maciá, 2009] E. Maciá, *Aperiodic Structures in Condensed Matter: Fundamentals and Applications* (CRC Press, Boca Raton, 2009) p. 132.
- [Maciá, 2012] E. Maciá, *Rep. Prog. Phys.* **75**, 036502 (2012).
- [Matsuda, 1970] H. Matsuda y K. Ishii. *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **45**, 56 (1970).
- [Matsubara, 1991] H. Matsubara, S. Ogawa, K. Kinoshita, K. Kishi, S. Takeuchi, K. Kimura y S. Suga, *J. Jpn. Appl. Phys.* **30**, L389 (1991).

- [Merlin, 1985] R. Merlin, K. Bajema, R. Clarke, F.Y. Juang, P.K. Bhattacharya, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 1768 (1985).
- [Mott, 1961] N. Mott y W. D. Twose *Adv. Phys.* **10**, 107 (1961).
- [Lifshitz, 2007] R. Lifshitz y H. Diamant. *Philosophical Magazine* **87**, 3021 (2007).
- [Luck, 1993] J.M. Luck, C. Godreche, A. Janner y T. Janssen. *Journal of Physics A: Mathematical and General* **26**, 1951 (1993).
- [Lui, 1994] P. Liu, A. P. Stigenberg and J. O. Nilsson, *Scr.Metall. Mater.* **31**, 249 (1994).
- [Oh, 1993] G.Y. Oh y M.H. Lee, *Phys. Rev. B* **48**, 12465 (1993).
- [Ostlund, 1993] S. Ostlund, R. Pandit, D. Rand, H. J. Schellnhuber, y E. Siggia, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1873 (1983).
- [Oviedo-Roa, 2000] R. Oviedo-Roa, L.A. Pérez, y C. Wang, *Phys. Rev. B* **62**, 13 805 (2000).
- [Quinn, 2009] J. J. Quinn. *Solid states physics* (Springer, 2009).
- [Roche, 1997] S. Roche, G. Trambly de Laissardiére, y D. Mayou. *Journal of Mathematical Physics* **38**, 1794 (1997).
- [Sánchez, 2004] V. Sánchez y C. Wang, *Phys. Rev. B* **70**, 144207 (2004).
- [Sato, 2000a] T. J. Sato, H. Takakura, A. P. Tsai, K. Ohoyama, K. Shibata, y K. H. Andersen. *Materials Science and Engineering A* **294**, 481 (2000).
- [Sato, 2000b] T.J. Sato, H. Takakura, A.P. Tsai, K. Shibata, K. Ohoyama, y K.H. Andersen. *Phys. Rev. B* **61**, 476 (2000).
- [Shechtman, 1984] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, y J.W. Cahn. *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1951 (1984).
- [Sire, 1989] C. Sire, *Europhys. Lett.*, **10**, 483 (1989).

- [Stadnik, 1999] Z. M. Stadnik, *Physical Properties of Quasicrystals*. (Springer, Berlin Heidelberg New York, 1999).
- [Sütő, 1994] A. Sütő, en *Beyond Quasicrystal*, editado por F. Axel y D. Gratias (Les Editions de Physique, France, 1994) p. 483.
- [Takano, 2004] A. Takano, S. Wada, S. Sato, T. Araki, K. Hirahara, T. Kazama, S. Kawahara, Y. Isono, A. Ohno, N. Tanaka y Y. Matsushita. *Macromolecules* **37**, 9941 (2004).
- [Thiem, 2011] S. Thiem, *Eur. Phys. J. B* **83**, 415 (2011).
- [Thouless, 1974] D. J. Thouless, *Phys. Rep.* **13C**, 93 (1974).
- [Tsai, 1987] A. P. Tsai, A. Inoue, y T. Masumoto, *Jpn. J. Appl. Phys.* **26** 1505 (1987).
- [Tsai, 1989] A. P. Tsai, A. Inoue, Y. Bizen y T. Masumoto, *Acta Met.* **37** 1443 (1989).
- [Tsai, 1990] A. P. Tsai, Y. Yokoyama, A. Inoue y T. Masumoto, *Mater. Trans. Japan Inst. Met.* **31**, 98 (1990).
- [Tsai, 1999] A. P. Tsai. *Physical Properties of Quasicrystals*. (Springer Series in Solid-State Physics, 1999).
- [Tsai, 2000] A. P. Tsai, J. Guo, E. Abe, H. Takakura y T. Sato. *Nature* **408**, 537 (2000).
- [Thouless, 1974] D. J. Thouless, *Phys. Rep.* **13**, 93 (1974).
- [Wegner, 1980] F. Wegner *Z. Physik B* **36**, 209 (1980).
- [Yoshimura, 2002] M. Yoshimura y A. P. Tsai *J. Alloys Compounds* **342**, 451 (2002).
- [Zeng, 2004] X. Zeng, G. Ungar, Y. Liu, V. Percec, A.E. Dulcey y J.K. Hobbs, *Nature* **428**, 157 (2004).