

## RESÚMENES DE TESIS DOCTORALES

### PROPIEDADES ELECTRÓNICAS Y VIBRACIONALES DE SISTEMAS CUASI-REGULARES

**Antonio Montalbán Cañadas.** Autor

**Víctor Ramón Velasco Rodríguez\*** y

**F. Javier Fernández Velicia.** Directores

*Departamento de Física de los Materiales*

*\*Instituto de Ciencias de Materiales de Madrid (CSIC)*

*Fecha de lectura: 9 de mayo de 2008*

*Calificación: Sobresaliente cum laude por unanimidad*

Los llamados sistemas aperiódicos o cuasi- regulares se encuentran a medio camino entre los sistemas periódicos y los desordenados. Un ejemplo de este tipo de estructuras son los cuasicristales, descubiertos en 1984 por Shechtman y colaboradores, y que se obtienen por solidificación rápida de algunas aleaciones metálicas. Otro ejemplo, más cercano a lo que aquí se desarrolla, son las heteroestructuras cuasi- regulares, formadas por la superposición de capas de dos materiales diferentes A y B, que siguen una secuencia cuasi-regular. La más representativa de estas secuencias es la de Fibonacci. Se parte de los elementos iniciales  $F_0 = B$  y  $F_1 = A$ , el resto de elementos vienen dados por la regla  $F_n = F_{n-1}F_{n-2}$ , de manera que:  $F_2 = AB$ ,  $F_3 = ABA$ ,  $F_4 = ABAAB$ ,  $F_5 = ABAABABA...$

Para el estudio de vibraciones en estos sistemas se considera que existen dos tipos de masas diferentes  $M_A$  y  $M_B$ , que siguen la secuencia correspondiente, y que están unidas por constantes de fuerza  $K_A$ ,  $K_B$  o  $K_1$ , dependiendo de si se encuentran entre dos masas de tipo A, dos de tipo B o una de cada una, respectivamente. Para estudiar el comportamiento de electrones en sistemas cuasi- regulares se supone un modelo equivalente al anterior.

Dos son las propiedades particulares que caracterizan a las estructuras cuasi- regulares. Por un lado, el espectro (que representa qué frecuencias o energías están permitidas o no en estos sistemas) es altamente fragmentado. Es decir, aparecen varias bandas permitidas que se dividen a su vez en varias subbandas, y éstas a su vez en otras subbandas menores, presentado así el espectro ciertos rasgos autosimilares. Por

otro lado, el comportamiento de los desplazamientos atómicos o de las funciones de onda para electrones, se encuentra entre el comportamiento extendido, propio de los sistemas periódicos, y el localizado, propio de los sistemas desordenados. Se habla en este caso de estados críticos, caracterizados por fuerte fluctuaciones con características autosimilares.

En primer lugar se han estudiado sistemas cuasi- regulares unidimensionales, mediante el formalismo de la matriz de transferencia, y se ha caracterizado el espectro de frecuencias y energías para varias secuencias, no solo Fibonacci, sino también otras como Thue-Morse, period-doubling y Rudin-Shapiro. Se ha observado que el valor de los parámetros tiene una influencia sobre las propiedades de los sistemas cuasi- regulares que no se puede despreciar, puesto que modifica la estructura del espectro y condiciona su explicación mediante esquemas de bloques elementales.

La principal aportación en este caso ha sido el estudio de modelos con más de un átomo por tipo de material, de manera que la cadena resultante se asemeja en lo posible a la representación en una dimensión de una heteroestructura real. En esta dirección, se ha dado otro paso más al considerar valores reales para los parámetros, en este caso para un sistema Al/Ag, puesto que estos materiales se han crecido bien de forma experimental gracias a la buena relación entre sus parámetros de red.

Una de las principales novedades ha sido el estudio de sistemas híbridos y compuestos. Algunas de estas estructuras habían sido propuestas ya por otros autores e incluso se han obtenido resultados en el campo de la óptica. Sin embargo, no existen estudios previos sobre el comportamiento de vibraciones en estos sistemas.

Se han considerado tres tipos diferentes de estructuras. En el primero, se supone un bloque cuasi-regular entre dos bloques periódicos, o viceversa. En el segundo, se suponen dos bloques cuasi- regulares iguales crecidos de forma simétrica. En el tercero, también hay dos bloques cuasi- regulares del mismo tipo, pero en uno de ellos se intercambia A por B y viceversa.

La simulación de estos sistemas ofrece algunos resultados interesantes. Por un lado, el espectro de frecuencias de los sistemas híbridos se ve modificado con respecto al que presentaba el bloque cuasi-regular. Esta modificación dependerá del tipo de estructura y del tamaño relativo de los bloques constituyentes. Por otro lado, los desplazamientos atómicos presentan

efectos de confinamiento selectivo en determinadas partes de la estructura. Es decir, ciertas frecuencias quedan confinadas en alguno de los bloques que componen la estructura, o bien quedan localizadas en zonas muy concretas de la misma.

En la Figura 1 se representan los desplazamientos atómicos para la frecuencia  $\omega = 0,4594 \times 10^{14}$  Hz, en un sistema híbrido  $F_{13} - P_{116} - F_{13}$ . Puede apreciarse el confinamiento de los desplazamientos en el bloque central periódico de la estructura.

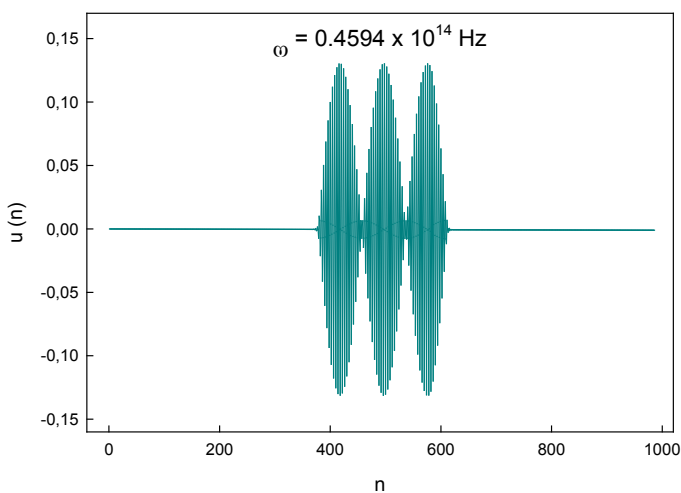


Figura 1: Desplazamientos atómicos a lo largo de una estructura híbrida formada por un bloque periódico, con periodo 116, situado entre dos bloques de Fibonacci de orden 13, con 377 átomos cada uno.

El efecto de confinamiento hace que los sistemas híbridos y compuestos presenten ciertas perspectivas a la hora de fabricar dispositivos para el filtrado y guiado de ondas.

Por último, se ha extendido este sencillo modelo al caso de estructuras multicapas tridimensionales. Utilizando el método de empalme de funciones de Green de superficie (SGFM) se ha calculado el espectro y la densidad local de estados (LDOS), en los puntos de simetría:  $\Gamma$ , X y M.

Por una parte, se ha estudiado el comportamiento de vibraciones en las cuatro secuencias cuasi-regulares más representativas. Los resultados en todas ellas ofrecen diferencias con el caso unidimensional. Principalmente, en tres dimensiones no se observa la estructura jerárquica del espectro que tan claramente aparecía en una dimensión. De esta manera es difícil distinguir entre gaps primarios y secundarios. Las mayores diferencias aparecen en la parte baja del espectro, pues donde los sistemas unidimensionales presentan una serie de bandas y subbandas más o menos bien definidas, los sistemas tridimensionales sólo muestran una gran banda. Esto se puede explicar teniendo en cuenta que en tres dimensiones se tienen modos longitudinales y transversales (estos últimos están ausentes en modelos unidimensionales), de manera que los diferentes gaps se acaban tapando y dando lugar a una sola banda. A frecuencias mayores, donde ya no existen modos transversales y solo están presentes los longitudinales, ambos espectros guardan una cierta similitud.

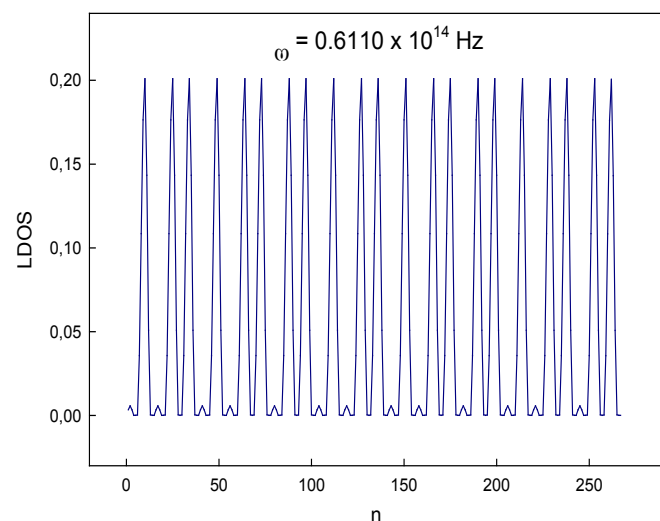
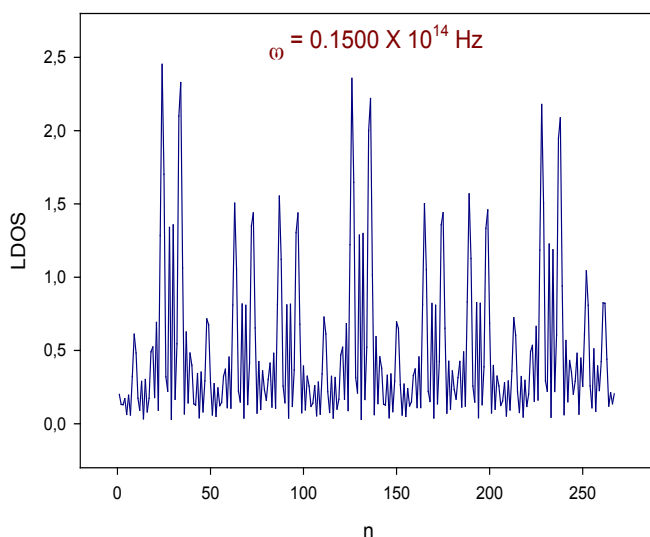


Figura 2: Densidad local de estados (LDOS) para una frecuencia perteneciente a la parte baja del espectro,  $\omega = 0,1500 \times 10^{14}$  Hz, y para otra frecuencia de la parte alta,  $\omega = 0,6110 \times 10^{14}$  Hz, en una multicapa tridimensional de Fibonacci,  $F_{10}$ .

El comportamiento que muestra la LDOS también depende del rango de frecuencias (Figura 2). A frecuencias bajas aparece un patrón bastante irregular con ciertos rasgos autosimilares. Para frecuencias medias y altas la densidad local de estados muestra una serie de picos asociados con ciertos bloques elementales presentes en la estructura.

También se han estudiado estructuras híbridas en tres dimensiones. Aquí resulta muy interesante la presencia del confinamiento selectivo para ciertas frecuencias que aparecía ya en una dimensión. El efecto es apreciable incluso cuando se simulan

sistemas con un tamaño muy reducido, lo que refuerza la robustez del efecto y lo hace más interesante de cara a posibles aplicaciones. Además, es significativo que este fenómeno que se apreciaba en una dimensión siga mostrándose en tres dimensiones y no quede enmascarado por la mayor complejidad del sistema.

**Agradecimientos:** Al Ministerio de Educación y Ciencia, vía los proyectos MAT2004-04643-C03-03 y MAT2006-05122.