

Università degli Studi di Milano
Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali
Corso di laurea in Fisica

**STUDIO DELLE PROPRIETÀ DI LOCALIZZAZIONE
SU CATENE QUASIPERIODICHE
MEDIANTE GRUPPO DI RINORMALIZZAZIONE
NELLO SPAZIO REALE**

Codice P.A.C.S. 05.50.T

Tesi di laurea in Fisica

di

Alberto Sergio Cattaneo

Matricola n. 367491

Relatore:

Prof. Luciano Girardello

L. Girardello

Correlatore:

Prof. Vincenzo Benza

Vincenzo Benza

Anno Accademico 1989/90

INTRODUZIONE

Misure sperimentali^[SBGC] su di una lega di Al - Mn, effettuate nel 1984, hanno mostrato una figura di diffrazione con intensità concentrate in picchi disposti secondo la simmetria icosaedrica, che non è tra quelle cristallografiche. Successivamente sono state trovate altre leghe che esibiscono figure di diffrazione con simmetrie non cristallografiche.

Le tradizionali strutture amorfe e cristalline si sono trovate in difficoltà nello spiegare questo nuovo fenomeno. Modelli basati su strutture costituite da più celle elementari disposte secondo un ordine traslazionale quasiperiodico hanno riscosso notevole consenso, anche se sono stati avanzati dei dubbi circa la lunghezza di correlazione di tale ordine.

Le linee di indagine teorica sono sostanzialmente due: lo studio della stabilità di queste strutture e lo studio delle proprietà spettrali di un sistema elettronico o fononico definito su di esse. La separazione naturalmente non è così netta; infatti lo studio delle proprietà spettrali di un sistema elettronico o fononico è decisamente importante anche in relazione a problemi di stabilità energetica.

Un modello basato sull'approssimazione di tight-binding conduce in questi sistemi ad un'Hamiltoniano di hopping decisamente non banale caratterizzato, nei problemi in due o più dimensioni, dall'aver un numero di coordinazione variabile; vale a dire il numero di link che connettono ogni sito ai suoi primi vicini dipende dal sito stesso e ciò avviene in maniera quasiperiodica.

Ci si è posti in questa tesi l'obiettivo di studiare un sistema unidimensionale quasiperiodico (la catena di Fibonacci) in cui si introduce di fatto un numero di coordinazione variabile "accendendo" alcune interazioni a secondi vicini secondo la stessa legge di quasiperiodicità che definisce la catena in esame.

Il lavoro è strutturato come segue. Il primo capitolo è dedicato alla descrizione delle strutture quasiperiodiche e delle loro figure di diffrazione. Si accenna alla loro struttura nello spazio reale, alle proprietà di autosimilarità ed alle regole di inflazione ad esse connesse. Vengono introdotti i due principali metodi usati per descrivere questi modelli: il metodo della proiezione ed il metodo duale generalizzato.

L'ultima parte del capitolo è dedicata alla stabilità energetica di tali strutture rispetto alle eccitazioni fasoniche, modi idrodinamici connessi alle fluttuazioni nell'ordinamento quasiperiodico.

Per ulteriori informazioni di carattere generale si rimanda alla tesi di V. Callegaro^[Cal] ed all'introduzione dell'accurata raccolta di articoli fatta da Steinhardt ed Ostlund^[SO].

Nel secondo capitolo si introducono l'approssimazione di tight-binding ed i problemi di hopping su reticoli. Nella prima parte si accenna ai problemi periodici unidimensionali e bidimensionali, in cui la simmetria traslazionale permette di risolvere il problema col metodo della trasformata di Fourier. Si illustra anche come in alternativa si possa trattare il problema unidimensionale via matrice di trasferimento.

Si passa quindi all'analisi del problema bidimensionale su reticolo quadrato in presenza di campo magnetico, introdotto con la sostituzione di Peierls-Onsager. Lavorando nel gauge di Landau, ci si può ridurre ad un problema unidimensionale; quest'ultimo è di tipo quasiperiodico quando il flusso del campo magnetico attraverso la cella elementare misurato in unità naturali ($\frac{hc}{e}$) è irrazionale.

Si descrivono quindi i problemi di hopping su quasireticoli. Nel caso unidimensionale viene presentata la tecnica della trace map, che è applicabile a tutte le catene generate da regole di inflazione e con interazioni a primi vicini. Vengono quindi passati in rassegna alcuni risultati, per lo più numerici, che sono stati ottenuti per le strutture quasiperiodiche bidimensionali.

Nell'ultima parte si introduce la tecnica di decimazione nello spazio reale e si mostra come tramite essa si possano ottenere la densità integrata degli stati e la funzione di Green del sistema. Tale approccio, a differenza della trace map, è del tutto generale ed in linea di principio può essere applicato a qualsiasi sistema.

Il terzo capitolo è interamente dedicato ai problemi di hopping con interazioni a primi vicini sulla catena di Fibonacci. Si illustra come tale problema viene risolto via trace map.

Si accenna anche ad un approccio di rinormalizzazione basato sulla teoria perturbativa dei livelli degeneri che mette in evidenza la struttura gerarchica dello spettro.

Applichiamo quindi il metodo di decimazione descritto nel secondo capitolo, tenendo

conto delle regole di inflazione della catena, e dimostriamo che esso è riconducibile alla trace map. Si mostra quindi come in tutta generalità possano essere introdotte le condizioni iniziali della stessa, che risultano essere lineari nell'energia, e come ad essa sia legata la densità integrata degli stati.

Nell'ultima parte studiamo in dettaglio, con le tecniche di decimazione, lo spettro fononico per basse frequenze su questo stesso sistema.

Nel quarto capitolo affrontiamo il problema di hopping su di una catena di Fibonacci con interazioni a secondi vicini ed i risultati presentati sono del tutto originali. In questo contesto, ove si ponga anche la condizione di avere un numero di coordinazione variabile, si ottiene una rinormalizzazione esatta dei parametri che mantiene le interazioni limitate ai primi e secondi vicini ad ogni passo.

Due casi vengono studiati in dettaglio e si mostra come ci si possa ricondurre, dopo una o due decimazioni, ad un problema a primi vicini. Il problema è quindi trattabile via trace map, ma va sottolineato che le condizioni iniziali della stessa non sono più lineari nell'energia. Per alcune scelte dei valori dei parametri possiamo inoltre avere degli stati localizzati e degli stati estesi ordinari.

Ci è parso infine opportuno ricordare nell'appendice I alcune proprietà delle frazioni continue (che sono di particolare utilità nello studio delle catene quasiperiodiche unidimensionali), della sezione aurea e dei numeri Fibonacci (che servono nello studio dell'omonima catena). Per tutte gli altri argomenti di teoria dei numeri incontrati nel lavoro si è fatto riferimento e si rimanda alle Ref.[Has] e [HW].

Nell'appendice II mostriamo come la decomposizione in frazioni continue dell'irrazionale associato ad una catena unidimensionale quasiperiodica ottenuta col metodo della proiezione permetta di ottenere uno schema di decimazione particolarmente efficiente. Un generico problema di questo di tipo (con interazioni a primi vicini) può quindi essere affrontato per mezzo di due sole leggi di rinormalizzazione opportunamente combinate.

In sintesi nel primo capitolo si discutono alcune proprietà generali delle strutture quasiperiodiche. Nel secondo si pongono le basi per lo studio dei problemi di hopping su

tali strutture. Nel terzo si mostra come le tecniche presentate si applichino alla catena di Fibonacci con interazioni a primi vicini. Infine nel quarto portiamo un contributo allo studio della stessa risolvendo il problema a secondi vicini con numero di coordinazione variabile; i risultati ottenuti consentono di ottenere una stima, per difetto, del bacino d'attrazione della trace map nello spazio degli Hamiltoniani di hopping definibili su tale catena.

CAPITOLO I

§I.1—STRUTTURE QUASIPERIODICHE

Funzioni periodiche e quasiperiodiche

Per prima cosa ci pare opportuno richiamare alcune semplici nozioni matematiche sulla periodicità e la quasiperiodicità. Una funzione è detta periodica quando è sviluppabile in serie di Fourier armonica:

$$f(x) = \sum_j c_j e^{2i\pi n_j x}, \quad n_j \in \mathbf{Z}; \quad (I.1.1)$$

è detta invece pressoché-periodica (*almost periodic*), se è sviluppabile in serie di Fourier generale:

$$f(x) = \sum_j c_j e^{2i\pi \lambda_j x}, \quad \lambda_j \in \mathbf{R} \quad (I.1.2)$$

(si noti che l'insieme dei λ_j è comunque numerabile poiché $j \in \mathbf{Z}$). Un caso particolare si ha quando i λ_j appartengono ad uno \mathbf{Z} -modulo, ovvero quando esiste un insieme finito di numeri reali α_k aritmeticamente indipendenti (ovvero tali che $\sum n_k \alpha_k = 0$ se e solo se $\alpha_k = 0 \forall k$, dove gli n_k sono numeri interi) ed i λ_j sono esprimibili come combinazione lineare a coefficienti interi degli α_k :

$$\lambda_j = \sum_{k=1}^N n_k \alpha_k. \quad (I.1.3)$$

La serie di Fourier si scrive allora:

$$f(x) = \sum_{n_1, \dots, n_N} c_{n_1, \dots, n_N} e^{2i\pi(n_1 \alpha_1 + \dots + n_N \alpha_N)x}, \quad (I.1.4)$$

dove N è il rango dello \mathbf{Z} -modulo. Funzioni di questo tipo sono dette quasiperiodiche (*quasiperiodic*). Una funzione quasiperiodica può essere vista come la restrizione ad una particolare retta di una funzione periodica avente come dominio uno spazio di dimensionalità piú alta; facendo riferimento alla funzione in (I.1.4) dobbiamo restringere la funzione periodica a N variabili

$$f(x_1, \dots, x_N) = \sum_{n_1, \dots, n_N} c_{n_1, \dots, n_N} e^{2i\pi(n_1 x_1 + \dots + n_N x_N)} \quad (I.1.5)$$

alla retta definita da $x_1 = \alpha_1 x, \dots, x_N = \alpha_N x$.

La generalizzazione al caso di funzioni quasiperiodiche a piú variabili è immediata.

Cristalli incommensurabili

Sono le strutture quasiperiodiche piú vicine ai cristalli veri e propri, in quanto hanno una simmetria cristallografica. Evidentemente sono cristalli incommensurabili tutti i quasireticolari unidimensionali. Ci pare utile trattare in dettaglio una di queste strutture, perché la natura unidimensionale permette di visualizzare meglio quanto, in tutta generalità, descriveremo poi in piú dimensioni.

Il cosiddetto *quasireticolato di Fibonacci*, di cui intendiamo parlare, è dato dalla successione di punti x_n sulla retta reale definita come segue:

$$\begin{aligned} x_n &= n + \frac{1}{\sigma} \left[\frac{n}{\sigma} + c \right], \\ \sigma &= \frac{1 + \sqrt{5}}{2}, \end{aligned} \tag{I.1.6}$$

dove $[x]$ indica la parte intera di x , σ è la sezione aurea e c è una costante reale arbitraria. È immediato verificare che la distanza tra due punti successivi può assumere solo i valori 1 e σ . L'irrazionalità di σ fa sí che i segmenti lunghi e quelli corti si succedano in maniera quasiperiodica. Passiamo ora a mostrare che la trasformata di Fourier della densità ha un supporto costituito da uno \mathbf{Z} -modulo^[BT]. Consideriamo infatti la misura di densità del nostro oggetto definita come:

$$m(x) = \sum_n \delta(x - x_n). \tag{I.1.7}$$

Poiché possiamo riscrivere la (I.1.6) come

$$x_n = pn - \frac{1}{\sigma} \left\{ \frac{n}{\sigma} + c \right\} + \frac{c}{\sigma}, \tag{I.1.6'}$$

dove $p = 1 + \frac{1}{\sigma^2}$ e $\{x\}$ indica la parte frazionaria di x , si trova immediatamente che la trasformata di Fourier della (I.1.7) diventa:

$$m^*(k) = \sum_n e^{2\pi i p k n} e^{\frac{2\pi i k c}{\sigma}} e^{-\frac{2\pi i}{\sigma} k \left\{ \frac{n}{\sigma} + c \right\}}. \tag{I.1.8}$$

Il terzo fattore può essere visto come una funzione periodica di $\frac{n}{\sigma} + c$, parametrizzata da k . Possiamo quindi esprimerla come serie di Fourier con i coefficienti dello sviluppo dipendenti da k stesso. Otteniamo così:

$$m^*(k) = e^{\frac{2\pi i k c}{\sigma}} \sum_n e^{2\pi i p k n} \sum_m c_m(k) e^{2\pi i m(\frac{n}{\sigma} + c)};$$

quindi applicando la formula di Poisson alla somma su n , otteniamo:

$$\begin{aligned} m^*(k) &= e^{\frac{2\pi i k c}{\sigma}} \sum_m \sum_n e^{2\pi i m c} c_m(k) \delta(pk + \frac{m}{\sigma} - n) = \\ &= \frac{1}{p} e^{\frac{2\pi i k c}{\sigma}} \sum_m \sum_n e^{2\pi i m c} c_m(\frac{n}{p} - \frac{m}{p\sigma}) \delta(k + \frac{m}{p\sigma} - \frac{n}{p}), \end{aligned} \quad (I.1.9)$$

dimostrando così che il supporto di m^* è dato dallo \mathbf{Z} -modulo con base $\alpha_1 = \frac{1}{p\sigma}$ e $\alpha_2 = \frac{1}{p}$. Si noti inoltre che al variare di c non cambia né la posizione dei picchi né la loro intensità (modulo quadrato); il valore di c non influenza dunque la figura di diffrazione. Si noti che se la successione fosse stata definita come

$$x_n = n + \gamma \left[\frac{n}{\sigma} \right], \quad (I.1.10)$$

dove γ è un qualsiasi numero reale avremmo comunque ottenuto una successione quasiperiodica con le stesse proprietà della precedente (si tratta semplicemente di sostituire a p il valore appropriato).

È interessante notare che il quasireticolato di Fibonacci può essere ottenuto per proiezione da un reticolo quadrato bidimensionale. Precisamente si consideri (fig. 1) una striscia definita dalle due rette parallele:

$$y = \frac{1}{\sigma} x + c, \quad (I.1.11 - a)$$

$$y = \frac{1}{\sigma} x + 1 + \frac{1}{\sigma} + c, \quad (I.1.11 - b)$$

ove c è una costante arbitraria scelta in maniera tale però che le rette non incontrino mai punti con coordinate entrambe intere. Si proiettino quindi ortogonalmente i punti del reticolo quadrato bidimensionale \mathbf{Z}^2 che appartengono alla striscia sulla retta (I.11.-a). La successione di punti così ottenuta è proprio quella data da (I.1.6), a meno di una costante moltiplicativa.

Se invece chiediamo che i punti vengano sí selezionati con questo meccanismo, ma vengano poi proiettati su di una terza retta arbitraria otteniamo la successione dell'equazione (I.1.10).

Notiamo che se le rette che definiscono la striscia avessero coefficiente angolare razionale, allora avremmo una successione di punti che si ripete periodicamente. Possiamo quindi pensare di approssimare il nostro irrazionale con una successione di razionali, producendo cosí una successione di cristalli periodici con cella sempre piú grande che nel limite ci dà il nostro quasireticolato. Una successione ottimale è quella che si ottiene dallo sviluppo in frazioni continue (v.App.I). Nel caso della sezione aurea essa è data da $\frac{F_{n+1}}{F_n}$, dove gli F_n sono i numeri di Fibonacci definiti per ricorrenza da:

$$\begin{aligned} F_n &= F_{n-1} + F_{n-2}, \\ F_1 &= 1, \\ F_0 &= 1, \end{aligned} \tag{I.1.12}$$

ovvero esplicitamente da:

$$F_n = \frac{1}{\sqrt{5}} \sigma^{n+1} - \frac{1}{\sqrt{5}} \left(-\frac{1}{\sigma}\right)^{n+1}. \tag{I.1.12'}$$

Esiste un'ulteriore interessante proprietà del quasireticolato di Fibonacci, cioè la presenza di *regole di inflazione*. Indichiamo con A i segmenti piú lunghi e con B quelli piú corti; se agiamo su tutti i segmenti come segue

$$A \longrightarrow AB, \quad B \longrightarrow A, \tag{I.1.13}$$

otteniamo un nuovo quasireticolato di Fibonacci (che differisce dal primo solo per un diverso valore di c). Tale sequenza è dunque un punto fisso della trasformazione (I.1.13). Possiamo giungere a questo punto fisso partendo dalla semplicissima struttura costituita dal solo segmento B ; consideriamo cioè la successione di reticoli:

$$\begin{aligned} T_0 &= B, \\ T_n &= w(T_{n-1}) = w^n(T_0), \end{aligned} \tag{I.1.14}$$

dove w indica l'applicazione dell'inflazione (I.1.13). È facile verificare per induzione che $T_n = T_{n-1} * T_{n-2}$ ($*$ indica concatenazione) e che quindi il reticolo T_n è costituito da

F_n segmenti; il quasireticolato di Fibonacci si ottiene nel limite per $n \rightarrow \infty$. Se invece di considerare i reticoli "finiti" T_n consideriamo la loro ripetizione periodica $P_n = \dots * T_n * T_n * T_n * \dots$, i reticoli approssimanti così ottenuti sono quelli che avremmo approssimando la striscia di proiezione con una striscia di coefficiente angolare $\frac{F_{n-2}}{F_{n-1}}$.

Il formalismo della proiezione ci permette di capire come si generino le regole di inflazione. Consideriamo infatti la matrice:

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (I.1.15)$$

Essa ha come autovalori σ e $-\frac{1}{\sigma}$, mentre gli autovettori sono diretti rispettivamente come la retta di proiezione e la perpendicolare ad essa. Un'applicazione di \mathbf{W} , come si vede, provoca semplicemente un riscaldamento all'interno della retta di proiezione ed uno spostamento parallelo della striscia, portando ad una struttura dello stesso tipo della precedente. Notando che i segmenti A si ottengono dalla proiezione di segmenti paralleli a $(1 \ 0)$ mentre i segmenti B derivano dalla proiezione di segmenti paralleli a $(0 \ 1)$, ricaviamo le regole di sostituzione per A e B ; infatti si ha che:

$$\mathbf{W} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (I.1.16 - a)$$

$$\mathbf{W} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (I.1.17 - b)$$

Un altro importante quasireticolato unidimensionale è il cosiddetto *ottonacci*, il cui nome deriva dalla sua relazione col quasicristallo bidimensionale a simmetria ottagonale. L'irrazionalità di questa struttura è data da $1 + \sqrt{2}$, mentre le regole d'inflazione sono:

$$A \rightarrow ABA, \quad B \rightarrow A. \quad (I.1.18)$$

Non tutti i quasireticolati unidimensionali sono generabili con regole di inflazione, ovvero con leggi del tipo $A \rightarrow M(A, B)$, $B \rightarrow N(A, B)$, dove M e N sono monomi ordinati nelle variabili A e B ; inoltre va detto che se intendiamo per quasireticolati solo quelle strutture la cui densità ha una trasformata di Fourier costituita da delta di Dirac centrate su di uno \mathbf{Z} -modulo allora non tutte le catene unidimensionali generate per inflazione lo sono.

Un esempio è fornito dalla catena di Thue–Morse con legge di inflazione $A \rightarrow AB, B \rightarrow BA$, in cui i picchi della trasformata di Fourier sono dati da una legge di potenza^[CSM], una situazione che risulta più vicina a quella random nonostante la legge di formazione strettamente deterministica.

Si dimostra^[BT2] che se l'equazione caratteristica associata alla regola d'inflazione ha la proprietà di Pisot–Vijayaraghavan (PV), cioè ha una e una sola radice fuori dal cerchio unitario e tutte le altre strettamente al suo interno, allora la catena così generata è un quasireticolo. L'equazione caratteristica nel caso di leggi date da $M = A^m B^n, N = A^p B^q$ risulta:

$$\lambda^2 = (m + q)\lambda + np - mq. \quad (I.1.19)$$

Questa condizione è comunque solo necessaria, come mostra il caso della catena di Thue–Morse.

Come semplici esempi di cristalli incommensurabili bidimensionali possiamo citare i superreticoli ed i quasireticoli ottenuti da strutture unidimensionali. Precisamente il superreticolo è dato da una struttura analoga a quelle di cui sopra per l'asse x mentre è periodico lungo l'asse y ; il quasireticolo ha invece natura quasiperiodica su entrambi gli assi; evidentemente la simmetria delle figure di diffrazione sarà quella quadrata, che appartiene a quelle cristallografiche.

Una struttura bidimensionale particolarmente interessante è il *labirinto*^[SMS], che è ottenuto da un quasireticolo bidimensionale di ottonacci selezionando solo quei siti che possono essere collegati ai vicini da link obliqui, iniziando il processo nell'origine (fig. 2). Un'interessante proprietà del labirinto, che è un sottoreticolo del quasicristallo ottagonale di cui parleremo più avanti, è l'aver una figura di diffrazione con simmetria quasi ottagonale, nel senso che la posizione dei picchi è invariante per rotazioni di $\frac{\pi}{4}$, e la loro intensità concorda, in seguito a tale rotazione, con un errore inferiore al 5% .

Quasicristalli

Si dicono quasicristalli quei quasireticoli che presentano una figura di diffrazione con simmetria non cristallografica.

In due dimensioni le simmetrie cristallografiche sono quella quadratica e quella esagonale; una simmetria come quella pentagonale ad esempio non può sussistere, perché, come mostra la figura 3, viene violato il requisito, necessario per un oggetto fisico, che ci sia una distanza minima tra i punti.

Un oggetto quasiperiodico che gode invece di questa simmetria è il *Penrose tiling* (fig. 4-a). Esso è costituito da due differenti tipi di celle a forma di rombo (fig. 4-b) che vengono "assemblate" accostando sempre due frecce dello stesso tipo e nello stesso verso (si parla di *matching rules*). Il reticolo che si ottiene può avere i tipi di vertice mostrati in fig. 4-c. Sono presenti anche in questo caso delle regole di inflazione.

Altri esempi di quasicristalli bidimensionale sono quello a simmetria ottagonale (fig. 5) e quello a simmetria dodecagonale (fig. 6).

In tre dimensioni le simmetrie possibili sono rappresentate dai 14 reticoli di *Bravais*. Un esempio molto semplice di quasicristallo tridimensionale è la cosiddetta *fase T*. Essa è ottenuta sovrapponendo dei piani paralleli equidistanziati ciascuno dei quali ricoperto da un Penrose. Tale oggetto ovviamente ha una direzione in cui si manifesta periodicità, ma ha comunque una simmetria non cristallografica nel piano ortogonale a questa direzione.

Un altro caso interessante è il quasicristallo a simmetria icosaedrica. Esso può essere costruito a partire da celle a forma di romboedro con delle opportune *matching rules*, analogamente a quanto accade nel Penrose in due dimensioni; tuttavia si preferisce usare un'altra costruzione, equivalente a questa, come spiegato ad esempio in Ref. [Cal].

Reticoli di riferimento e cristalli modulati (I)

Una domanda che sorge spontanea occupandosi di strutture quasicristalline è come esse nascano o come possano derivare da un cristallo periodico attraverso una transizione di fase.

È stato messo in luce^[DO] che alcune strutture quasiperiodiche possono essere definite a partire da un reticolo periodico tramite un campo vettoriale limitato. Ovvero per alcuni quasireticolari $X \in \mathbf{R}^d$ (d = dimensione fisica) esiste una funzione $f: X \rightarrow \mathbf{R}^d$ iniettiva (cioè tale che $x \neq x' \Rightarrow f(x) \neq f(x')$), uniformemente limitata (cioè tale che $\exists c \in \mathbf{R}^+ : \|f(x) -$

$x \parallel \leq c, \forall x \in X$), che manda X in un reticolo periodico. Il reticolo $Y = f(X)$ è detto *reticolo di riferimento*. Se inoltre $f(x)$ è una funzione periodica o quasiperiodica si dice che X è un *crystallo modulato*. Come esempi di crystallo modulato abbiamo ad esempio il Fibonacci, l'ottonacci e il labirinto. Il quasicristallo a simmetria ottagonale invece è un esempio di struttura periodica che può essere ottenuta in questo modo. Per ulteriori approfondimenti rimandiamo al § I.2 ed all'articolo originale.

Strutture di questo tipo potrebbero originare da un crystallo periodico attraverso spostamenti localmente limitati di atomi conservando di conseguenza densità e concentrazioni. Le strutture di altro tipo possono derivare da un crystallo periodico solo attraverso moti diffusivi che implicano migrazioni atomiche su una scala macroscopica.

§I.2- IL METODO DELLA PROIEZIONE

Descrizione del metodo

In questo e nel prossimo paragrafo descriveremo due importanti metodi per la costruzione e la caratterizzazione dei quasicristalli: il *metodo della proiezione* e il *metodo duale generalizzato*. Benché essi possano essere ricondotti l'uno all'altro, è opportuno averli entrambi presenti, poiché per certe applicazioni (ad esempio lo studio delle figure di diffrazione) il primo risulta più utile, per altre (ad esempio considerazioni sulla stabilità del sistema) è più appropriato il secondo.

Il metodo della proiezione (*cut and project method*), permette di ottenere strutture quasiperiodiche con la simmetria desiderata semplicemente considerando un'opportuna sezione di un reticolo periodico di dimensionalità superiore. Più precisamente, si prenda un reticolo periodico n -dimensionale (p.es. \mathbf{Z}^n immerso in \mathbf{R}^n) e si consideri un iperpiano di dimensione d pari alla dimensione fisica della struttura che si vuole ottenere; si consideri quindi una striscia generata da questo iperpiano e si proiettino ortogonalmente tutti i punti del reticolo n -dimensionale che appartengono alla striscia sull'iperpiano.

Figure di diffrazione

Vediamo ora come sia possibile calcolare come si presenta la figura di diffrazione di

un oggetto ottenuto col metodo della proiezione. (Seguiamo da vicino la dimostrazione in Ref. [KD]).

Indichiamo, per comodità, con R il reticolo da cui si proietta, con E l'iperpiano su cui si proietta e con E' il sottospazio di \mathbf{R}^n ortogonale a E ($E \oplus E' = \mathbf{R}^n$). Sia quindi K il sottoinsieme limitato di E' che genera la nostra striscia, che sarà indicata con S ($S = E \times K$).

La misura di densità del nostro oggetto è definita come una somma di delta di Dirac centrate sui vertici dell'oggetto stesso, ossia $m = \sum_{\xi \in S \cap R} \delta_{\pi(\xi)}$, ove con π indichiamo il proiettore su E . La trasformata di Fourier di m sarà:

$$m^*(k) = \sum_{\xi \in S \cap R} e^{2i\pi k \cdot \pi(\xi)}. \quad (I.2.1)$$

È comodo prendere in considerazione la misura definita da $\mu = \sum_{\xi \in S \cap R} \delta_{\xi}$ e la sua trasformata di Fourier

$$\mu^*(\kappa) = \sum_{\xi \in S \cap R} e^{2\pi i \kappa \cdot \xi}. \quad (I.2.2)$$

Se ora scriviamo ξ come (x, x') (cioè le componenti su E ed E') e κ come (k, k') (le componenti negli spazi duali di E ed E'), scopriamo immediatamente che

$$m^*(k) = \mu^*(k, 0). \quad (I.2.3)$$

Ma evidentemente $\mu = \chi_S \cdot \sum_{\xi \in R} \delta_{\xi}$, dove con χ_S si è indicata la funzione caratteristica della striscia S . La trasformata di Fourier di μ sarà scritta come una convoluzione $\mu^* = \chi_S^* * \sum_{\lambda \in Q} \delta_{\lambda}$ e quindi

$$\mu^*(\kappa) = \sum_{\lambda \in Q} \chi_S^*(\kappa - \lambda), \quad (I.2.4)$$

ove Q è il reticolo reciproco di R .

Poiché $S = E + K$, si ha $\chi_S(x, x') = \chi_K(x')$, ove χ_K è la funzione caratteristica di K . Quindi si trova

$$\chi_S^*(k, k') = \delta(k) \cdot \chi_K^*(k') \quad (I.2.5)$$

e

$$\mu^*(k, k') = \sum_{\lambda \in Q} \delta(k - l) \cdot \chi_K^*(k' - l'), \quad (I.2.6)$$

dove abbiamo decomposto λ in (l, l') .

Otteniamo infine, ponendo $k' = 0$:

$$m^*(k) = \sum_{\lambda \in Q} \delta(k - \lambda) \cdot \chi_K^*(-l'). \quad (I.2.7)$$

Come si vede, m^* è una somma di delta di Dirac centrate sui valori $\pi(\lambda)$ con λ in Q , ciascuna con un peso dato da $\sum_{l'} \chi_K^*(-l')$ dove l' deve essere tale che $(l, l') \in Q$. In generale, fissato l , ci possono essere più valori di l' accettabili o può non esservene alcuno. Se restringiamo la nostra attenzione al caso di un reticolo cubico n -dimensionale, si avrà $R = Q = \mathbf{Z}^n$. Se le tangenti degli angoli che individuano il piano "fisico" E sono tutte irrazionali, allora si ha che i valori di l appartengono ad uno \mathbf{Z} -modulo di dimensione d e rango n e che per ogni valore di l c'è uno e un solo valore di l' accettabile e la somma che esprime il peso di un punto nello spazio reciproco del nostro sistema si riduce ad un solo termine. Questo è il caso che ci interessa; è immediato inoltre verificare che se il reticolo di partenza è invariante rispetto ad una certa simmetria e se i sottospazi E ed E' sono sottospazi invarianti, allora m^* godrà di questa stessa simmetria; abbiamo dunque un metodo che ci permette di generare quasireticolari di simmetria arbitraria. Analizzeremo in seguito che cosa succede se alcune direzioni sono razionali.

Consideriamo ora che cosa accade se trasliamo la nostra striscia S di un vettore $\alpha \in E'$ (evidentemente la striscia è invariante per traslazioni parallele a E). Come è noto, l'operatore di traslazione ($e^{\alpha \cdot \partial'}$) si traduce sotto trasformata di Fourier in un semplice fattore di fase. Più precisamente si ha che:

$$\chi_K^*(-l') \longrightarrow \chi_K^*(-l') \cdot e^{2i\pi\alpha \cdot l'}. \quad (I.2.8)$$

Se, come si è discusso sopra, il peso di un certo punto l è dato da un solo addendo, questo fattore di fase non sarà rilevabile con esperienze di diffrazione, che, come è noto, misurano solo il modulo al quadrato dei pesi dei singoli punti l . Abbiamo quindi un'intera classe di oggetti che condividono la stessa figura di diffrazione e sono quindi, almeno sotto quest'aspetto, equivalenti; questi oggetti sono detti *localmente isomorfi*, poiché si può dimostrare che, presa una porzione comunque grande ma finita di uno di essi, è possibile

ritrovare la stessa configurazione in ogni altro oggetto della stessa classe. Se sono presenti delle direzioni razionali, che permettono alla somma che definisce i pesi delle delta di avere piú addendi (addirittura infiniti), allora una traslazione in una di queste direzioni, che provoca una variazione di fase diversa per ogni addendo, produrrà una variazione del peso osservabile con un'esperienza di diffrazione e ci farà quindi cambiare classe di isomorfismo locale. Bisogna notare, tuttavia, che non vi sarà alcun cambiamento se

$$\alpha \cdot l' \in \mathbf{Z} \quad \forall l' \in \pi'(Q), \quad (I.2.9)$$

poiché in questo caso tutti i fattori di fase saranno uguali a 1.

Ricerca della dimensione minimale

Abbiamo dianzi osservato che siamo in grado, col metodo della proiezione, di ottenere un oggetto con una figura di diffrazione con la simmetria desiderata proiettando da un reticolo di dimensione superiore che gode di questa simmetria. Ci poniamo ora il problema di trovarne la dimensione minima^[Gra].

Sia G il gruppo di simmetria in questione; affinché esso sia compatibile con un reticolo periodico, dobbiamo trovarne una rappresentazione intera Γ (cioè tale che tutti gli elementi di G si possano esprimere come matrici a coefficienti interi) che contenga la rappresentazione fisica Φ cercata. Perché Γ abbia la minima dimensione possibile, è sufficiente che non contenga altre rappresentazioni intere che quella eventualmente contenuta in Φ . La dimensione di quest'ultima dà la dimensione dell'eventuale parte periodica del nostro oggetto (si pensi ad esempio alla fase T, cui abbiamo accennato nel §1, che ha una direzione in cui vi è periodicità).

Un caso particolarmente semplice, che può essere studiato in tutta generalità, è quello del gruppo delle rotazioni di multipli interi di $\frac{2\pi}{n}$ in uno spazio fisico bidimensionale, che viene usualmente indicato con C_n . Esso ha una rappresentazione intera banale in \mathbf{R}^n , quella corrispondente alla permutazione ciclica degli n vettori di base (che corrisponde a rotazioni di angoli multipli di $\frac{2\pi}{n}$ attorno alla diagonale principale). Per ottenere una rappresentazione di dimensione minimale, dobbiamo eliminare tutte le rappresentazioni intere tranne quella che contiene la rotazione di $\frac{2\pi}{n}$ in uno spazio bidimensionale.

Consideriamo l'elemento generatore X del gruppo; esso dovrà obbedire all'equazione

$$X^n - 1 = 0. \quad (I.2.10)$$

Se lavorassimo nel piano complesso, l'equazione precedente potrebbe essere riscritta nella forma:

$$\prod_{k=0}^{n-1} (X - e^{\frac{2\pi i}{n}k}) = 0. \quad (I.2.11)$$

Consideriamo ora quelle frazioni $\frac{k}{n}$ che non sono ridotte ai minimi termini e riscriviamole come $\frac{k'}{n'}$ dove ora k' e n' sono coprimi. Se raggruppiamo i fattori con lo stesso n' , otteniamo una rappresentazione che non contiene le rotazioni di $\frac{2\pi}{n}$ e che quindi va eliminata (si tratta di una rappresentazione del sottogruppo $C_{n'}$).

Ci restano infine solo quei fattori con k coprimo con n ; il loro prodotto

$$f_n(X) = \prod_{\substack{0 \leq k < n \\ (k, n) = 1}} (X - e^{\frac{2\pi i}{n}k}) \quad (I.2.12)$$

(dove (\cdot) indica il massimo comun divisore) è un polinomio di grado $\phi(n)$ (la funzione toziente di Eulero, che dà la cardinalità dell'insieme degli interi coprimi con n inferiori a n); come provato da Kronecker e Eisestein tale polinomio oltre ad avere i coefficienti interi è anche irriducibile. Ne segue che la dimensione minimale dello spazio in cui C_n ha una rappresentazione intera è $\phi(n)$ e la sua equazione caratteristica è $f_n(X) = 0$. In tale spazio possiamo rappresentare X con una matrice $\phi(n) \times \phi(n)$, il cui polinomio caratteristico sia proprio f_n ; se riscriviamo f_n come:

$$f_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_{s-1}x^{s-1} + x^s, \quad (I.2.13)$$

dove $s = \phi(n)$, allora tale matrice si scrive:

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \\ -a_0 & -a_1 & -a_2 & \dots & -a_{s-1} \end{pmatrix}. \quad (I.2.14)$$

Inoltre ogni piano generato da due vettori con autovalori complessi coniugati, sarà un sottospazio invariante di X ; si sceglierà quindi uno di questi $\frac{\phi(n)}{2}$ piani come piano fisico.

Passiamo ora a considerare un paio di esempi.

Esempio 1: Simmetria pentagonale

L'equazione caratteristica si scrive:

$$X^5 - 1 = 0, \quad (I.2.15)$$

ovvero:

$$(X - 1)(X^4 + X^3 + X^2 + X + 1) = 0 \quad (I.2.15')$$

(si noti che $\phi(5) = 4$).

La dimensione minimale è dunque 4; in uno spazio quadridimensionale l'operatore X in questione può essere rappresentato dalla matrice:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (I.2.16)$$

Tuttavia, poiché in questo semplice caso c'è da escludere solo la banale rappresentazione identica, in genere si preferisce lavorare in uno spazio a 5 dimensioni (dove X è rappresentato semplicemente, come detto sopra, dalla permutazione ciclica dei 5 vettori di base) e imporre l'annullarsi della componente sulla diagonale principale (ove si ha la rappresentazione identica) del vettore che definisce la striscia (v. Ref. [Jar]).

Più precisamente, in 5 dimensioni l'operatore X può essere rappresentato dalla semplice matrice:

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (I.2.17)$$

e ammette tre sottospazi invarianti: uno monodimensionale (la diagonale principale) e due bidimensionali (uno dei quali viene scelto come spazio fisico). Seguendo la notazione di

Jarić, abbiamo i seguenti due vettori come base del piano fisico:

$$\hat{\mathbf{a}}_1^{\parallel} = \sqrt{\frac{2}{5}} \Re(1, z, z^2, z^3, z^4), \quad (I.2.18 - a)$$

$$\hat{\mathbf{a}}_2^{\parallel} = \sqrt{\frac{2}{5}} \Im(1, z, z^2, z^3, z^4), \quad (I.2.18 - b)$$

come base del piano ortogonale:

$$\hat{\mathbf{a}}_1^{\perp\perp} = \sqrt{\frac{2}{5}} \Re(1, z^2, z^4, z, z^3), \quad (I.2.18 - c)$$

$$\hat{\mathbf{a}}_2^{\perp\perp} = \sqrt{\frac{2}{5}} \Im(1, z^2, z^4, z, z^3), \quad (I.2.18 - d)$$

e infine per la diagonale principale:

$$\hat{\mathbf{a}}_0^{\perp} = \sqrt{\frac{1}{5}} (1, 1, 1, 1, 1), \quad (I.2.18 - e)$$

ove abbiamo posto:

$$z = e^{\frac{2\pi i}{5}}. \quad (I.2.19)$$

La posizione del piano su cui si proietta è data da un vettore $\mathbf{y} \in \mathbf{R}^5$ che indica un punto qualsiasi del piano stesso; tale piano dev'essere inoltre parallelo a quello definito da $\hat{\mathbf{a}}_1^{\parallel}$ e da $\hat{\mathbf{a}}_2^{\parallel}$; evidentemente il valore della componente y^{\parallel} è del tutto irrilevante. È invece necessario porre $y_0^{\perp} = 0$ per avere il cosiddetto *Penrose tiling*^{[Pen],[dB],[Jar]}, la più semplice struttura a simmetria pentagonale; ciò equivale alla condizione:

$$y_1 + y_2 + y_3 + y_4 + y_5 = 0, \quad (I.2.20)$$

dove y_1, \dots, y_5 indicano le componenti cartesiane di \mathbf{y} . Assolvere a questa condizione equivale a lavorare nello spazio a 4 dimensioni di cui sopra.

Applicando i risultati generali, discussi precedentemente, sulle figure di diffrazione, è immediato osservare che queste sono indipendenti sia da \mathbf{y}^{\parallel} sia da $\mathbf{y}^{\perp\perp}$, ma non da $\{y_0^{\perp} \sqrt{5}\}$, ove $\{x\}$ indica la parte frazionaria di x (cfr. eq. (I.2.9)).

Esempio 2: Simmetria ottagonale

In questo caso l'equazione caratteristica $X^8 - 1 = 0$ può essere riscritta come:

$$(X - 1)(X + 1)(X^2 + 1)(X^4 + 1) = 0 \quad (I.2.21)$$

(si ha $\phi(8) = 4$).

Anche in questo caso la dimensione minimale è 4; in uno spazio quadridimensionale si può rappresentare il nostro operatore X con la matrice:

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (I.2.22)$$

che soddisfa l'equazione $M^4 + 1 = 0$.

Anche in questo caso possiamo distinguere due piani invarianti, quello fisico:

$$\hat{a}_1^{\parallel} = \frac{1}{\sqrt{2}} \Re(1, z, z^2, z^3), \quad (I.2.23 - a)$$

$$\hat{a}_2^{\parallel} = \frac{1}{\sqrt{2}} \Im(1, z, z^2, z^3), \quad (I.2.23 - b)$$

e quello ortogonale:

$$\hat{a}_1^{\perp} = \frac{1}{\sqrt{2}} \Re(1, z^3, z^6, z), \quad (I.2.23 - c)$$

$$\hat{a}_2^{\perp} = \frac{1}{\sqrt{2}} \Im(1, z^3, z^6, z), \quad (I.2.23 - d)$$

avendo posto:

$$z = e^{\frac{i\pi}{4}}. \quad (I.2.24)$$

Approssimazioni col metodo della proiezione

Il metodo della proiezione ci fornisce anche una semplice maniera per approssimare il quasireticolato con una successione di cristalli periodici di cella elementare via via più complessa. Abbiamo visto, infatti, che la situazione quasiperiodica è determinata da irrazionalità nell'inclinazione della striscia di proiezione; la successione di cristalli approssimanti è ottenuta considerando per ogni irrazionale una successione di razionali che lo approssimano; è evidente, si faccia riferimento per semplicità alla proiezione $2 \rightarrow 1$, che quanto più

grande è il denominatore del numero razionale in questione tanto maggiore sarà la cella elementare.

Evidentemente le piastrelle elementari del quasicristallo saranno sostituite da altre configurazioni che solo nel limite riprodurranno le piastrelle stesse. Con questo metodo l'oggetto che costruiamo sarà, anche localmente, diverso dal quasireticolo che vogliamo ottenere.

È tuttavia possibile limitarsi ad approssimare la quasiperiodicità conservando le piastrelle del quasireticolo e quindi le configurazioni locali. Per fare questo dobbiamo prima generalizzare il metodo della proiezione distinguendo la striscia che seleziona i punti (e che determina quindi la periodicità o meno dell'oggetto) dall'iperpiano su cui questi punti vengono proiettati; il caso finora considerato si ottiene imponendo che quest'ultimo sia parallelo all'iperpiano che genera la striscia.

Possiamo quindi considerare degli approssimanti razionali dell'iperpiano generante la striscia e lasciare invariato l'iperpiano di proiezione giungendo così alla favorevole situazione descritta sopra.

Va da sé che volendo possiamo approssimare anche l'iperpiano di proiezione e per giunta possiamo farlo in maniera diversa da come approssimiamo l'iperpiano generante la striscia (anzi possiamo mantenere l'irrazionalità di quest'ultimo ottenendo così un reticolo decorato in maniera quasiperiodica).

Reticoli di riferimento e cristalli modulati (II)

Nel §I.1 abbiamo già affrontato questo tema dando le definizioni occorrenti. Vogliamo qui accennare ad alcuni teoremi al proposito che si possono ottenere ricorrendo al metodo della proiezione^[DO].

Si può dimostrare che se K , il sottoinsieme limitato di E' che genera la striscia di proiezione, è la cella elementare di un reticolo $(n - d)$ -dimensionale contenuto nell'insieme che si ottiene proiettando tutti i punti del reticolo n -dimensionale Z^n su E' , allora il quasireticolo d -dimensionale ottenuto col metodo della proiezione è un cristallo modulato. Si dimostra quindi che questo avviene sempre se $d = 1$ o se $d = n - 1$.

Più in generale si dimostra che se K è un'unione disgiunta di celle K_1, \dots, K_k , ciascuna

delle quali è la cella elementare di un reticolo $(n - d)$ -dimensionale con le proprietà di cui sopra, allora il quasireticolato che otteniamo col metodo della proiezione ammette un reticolo di riferimento. È stato mostrato che il quasicristallo ottagonale gode di questa proprietà ed il suo reticolo di riferimento è il labirinto.

§1.3- IL METODO DUALE GENERALIZZATO

Descrizione del metodo

Descriviamo ora il metodo duale generalizzato, limitandoci in un primo momento alla situazione bidimensionale, considerando un ricoprimento del piano attuato mediante un certo numero di celle elementari a forma di parallelogramma (una situazione un po' più generale di quella quasicristallina pura). Ogni parallelogramma è definito da due vettori che appartengono ad una classe di n vettori a due a due non paralleli e_i ($i = 1, \dots, n$); abbiamo quindi $\frac{n(n-1)}{2}$ differenti tipi di parallelogrammi.

In teoria dei grafi si definisce il *grafico duale* come l'insieme di n fasci di curve ottenuto come in fig. 7; esso ha le seguenti importanti proprietà:

- a) due curve dello stesso fascio non hanno punti in comune
- b) due curve di fasci diversi hanno sempre uno e un solo punto in comune
- c) non esistono punti d'intersezione di tre curve contemporaneamente
- d) ad ogni punto d'intersezione del grafico duale corrisponde un parallelogramma nello spazio diretto; precisamente si ha che all'intersezione di due curve appartenenti rispettivamente ai fasci i -esimo e j -esimo corrisponde il parallelogramma definito dai vettori e_i e e_j .

Il punto *d* chiarisce la denominazione di grafico duale; si noti inoltre che ad ogni maglia del grafico duale corrisponde un vertice nello spazio diretto che ha numero di coordinazione pari al numero dei lati del poligono che costituisce la maglia.

È importante notare che ciò che conta in un grafico duale sono le sue proprietà topologiche; grafici duali connessi da un omeomorfismo sono quindi detti equivalenti e danno origine allo stesso ricoprimento nello spazio diretto. Con una trasformazione di questo tipo è sempre possibile far sí che due dei fasci di curve divengano fasci di rette parallele

equidistanziate.

Il grafico duale di un quasireticolato è tale che si possono ridurre contemporaneamente tutti i fasci in questa forma. Se c'è una simmetria C'_n , le n rette generatrici dei fasci saranno disposte secondo n direzioni che differiscono l'una dall'altra per $\frac{2\pi}{n}$ e le spaziatore saranno uguali per tutti i fasci; nel reticolo duale è quindi evidente la simmetria; manca invece il requisito della minima distanza tra i vertici se la simmetria non è cristallografica.

La terminologia corrente chiama *griglie* i fasci di rette parallele equidistanziate e *n-griglia* l'insieme degli n fasci. Ogni griglia è data dalle (infinite) equazioni:

$$f(x) = k + c, \quad k \in \mathbf{Z}, \quad (I.3.1)$$

ove f è una funzione lineare da \mathbf{R}^2 in \mathbf{R} e c è una costante reale. La n -griglia è data dalle equazioni:

$$f_i(x) = k_i + c_i, \quad k_i \in \mathbf{Z}, \quad i = 1, \dots, n. \quad (I.3.2)$$

Le f_i sono n differenti funzioni lineari da \mathbf{R}^2 in \mathbf{R} e le c_i sono n costanti reali.

Se lavoriamo in tre dimensioni, anziché avere dei parallelogrammi come unità fondamentali nello spazio diretto, avremo delle celle di forma romboedrica. Come nel caso bidimensionale si passa allo spazio duale, dove vi saranno fasci di superficie anziché fasci di curve. Le proprietà del grafico duale sono analoghe a quelle del caso bidimensionale:

- a) due superficie dello stesso fascio non hanno punti in comune
- b) tre superficie di fasci diversi hanno sempre uno e un solo punto in comune
- c) non esistono punti d'intersezione di quattro superficie contemporaneamente
- d) ad ogni punto d'intersezione nello spazio duale corrisponde nello spazio diretto il romboedro definito dai tre vettori associati ai fasci delle tre superficie intersecantesi.

Anche in questo caso un omeomorfismo non cambia le proprietà del grafico ed è sempre possibile far sí che tre dei fasci di superficie divengano fasci di piani paralleli equidistanziate.

In un quasireticolato tutti i fasci potranno essere ridotti a questa forma. Si parlerà ancora di griglie e di n -griglie ($n > 3$); queste ultime saranno ancora rappresentate senza modifiche dalle equazioni (I.6.2), dove però le f_i saranno intese come funzioni lineari da \mathbf{R}^3 in \mathbf{R} .

§I.4— SULLA STABILITÀ DEI QUASICRISTALLI

Fononi e fasoni

In un normale solido cristallino lo stato fondamentale è soggetto a perturbazioni di tipo *fononico*, che corrispondono a variazioni delle lunghezze dei lati e delle ampiezze degli angoli delle celle. La perturbazione fononica altro non è che un campo di traslazioni o rotazioni non uniformi; poiché evidentemente l'energia del cristallo è invariante per traslazioni o rotazioni uniformi, l'energia del campo fononico s'annulla quando la sua lunghezza d'onda diventa infinita, ovvero quando il vettore d'onda tende a zero. In simboli:

$$\omega \xrightarrow{k \rightarrow 0} 0 \quad (I.4.1)$$

(in generale nel caso fononico si ha $\omega \propto k$ per $k \rightarrow 0$).

Nei quasireticolari esiste tuttavia un altro campo di eccitazioni che gode di questa proprietà; nel formalismo del metodo della proiezione, si tratta delle traslazioni non uniformi della striscia nelle direzioni ortogonali al piano fisico. Formalmente se indichiamo con x_{\parallel} le coordinate del piano fisico E e con x_{\perp} le coordinate nella direzione perpendicolare, il campo fasonico si può scrivere come:

$$x_{\perp} = x_{\perp}(x_{\parallel}). \quad (I.4.2)$$

Una traslazione uniforme ($x_{\perp} = \text{cost.}$), come abbiamo visto precedentemente, fa cambiare la fase dell'ampiezza dell'intensità di ogni picco nella figura di diffrazione e per questo è nota col nome di *fasone*; tuttavia questa variazione non comporta cambiamenti né alla figura di diffrazione stessa, come già abbiamo osservato, né all'energia del sistema, come vedremo più avanti. Per questa ragione anche il campo fasonico ha un'energia che si annulla per $k \rightarrow 0$.

La formulazione del fasone come campo potrebbe indurre erroneamente a pensare che esso provochi una trasformazione continua dell'oggetto in esame, così come accade per i fononi. In realtà, poiché nel metodo della proiezione contano solo i punti all'interno della striscia ed uno spostamento anche infinitesimo della striscia stessa può far entrare o uscire

un punto, un'eccitazione fasonica è sempre rappresentata da una deformazione discontinua della struttura in esame.

In effetti nello spazio diretto un fasone si presenta come un riarrangiamento delle celle elementari. Un fasone uniforme comporta un riarrangiamento globale da cui scaturisce una nuova struttura che appartiene alla stessa classe d'isomorfismo locale della precedente. Un fasone non uniforme è un riarrangiamento locale delle celle e fa quindi violare le regole di costruzione del quasireticolato. Se, come è naturale, associamo ad ogni violazione una variazione d'energia, allora è chiaro che oggetti nella stessa classe di isomorfismo locale sono isoenergetici. Dire che il quasireticolato è stabile significa inoltre che un qualsiasi campo fasonico accresce l'energia del sistema (vi possono essere naturalmente delle strutture quasiperiodiche instabili rispetto a perturbazioni di questo tipo). Dal punto di vista fisico è chiaro che questo riarrangiamento comporta un moto diffusivo degli atomi ed ha quindi un tempo di rilassamento estremamente lento ed infatti può in taluni casi essere osservato.

A mo' d'esempio mostriamo come si presenta un'eccitazione fasonica in un quasicristallo di Penrose^[SL5]. Come è chiaro dalla fig. 8, ribaltando un esagono costituito da tre losanghe si ha una violazione solo coi due esagoni confinanti. Poiché nel Penrose sono presenti veri e propri *vermi* costituiti da esagoni di questo tipo che attraversano tutta la struttura da un estremo all'altro, quando ribaltiamo contemporaneamente tutti gli esagoni in uno stesso *verme*, non abbiamo più alcuna violazione pur avendo un oggetto diverso (in realtà un vero fasone comporta il ribaltamento contemporaneo di infiniti *vermi* e non di uno solo). In questo caso è chiaro come un fasone locale porti ad un aumento di energia mentre un fasone uniforme porti ad una struttura localmente isomorfa alla prima e di pari energia.

Nel formalismo delle n -griglie un fasone uniforme corrisponde alla variazione di almeno una delle costanti reali c_i nelle equazioni (I.3.2). La nuova costante, chiamiamola c'_i , sarà legata alla vecchia dalla relazione:

$$c'_i = c_i + \delta c_i. \quad (I.4.3)$$

L'effetto di tale variazione è mostrato in fig. 9 per un oggetto bidimensionale. Come si vede finché non c'è attraversamento di un vertice non accade nulla nello spazio diretto; dopo tale attraversamento si ha, nello spazio diretto, un ribaltamento di un esagono costituito da tre losanghe. Anche con questo formalismo, la deformazione discontinua, che rappresenta il fasone, è associata ad una variazione continua dei c_i . Indicheremo d'ora innanzi ognuno di questi esagoni che si possono ribaltare come ERS (*elementary rearrangement system*), secondo che propone il Levitov^[Lev1].

Il fasone non uniforme sarà invece rappresentato da un campo $\delta c_i(\mathbf{x})$.

La condizione di seconda intersezione

Un semplice ragionamento di tipo euristico dovuto a Levitov^[Lev1] mostra come la condizione che il sistema in esame sia stabile per eccitazioni fasoniche unita all'ipotesi che siano presenti solo interazioni a corto raggio implichi una restrizione sul tipo d'irrazionalità associata al quasireticolato.

In 2D si dimostra che l'irrazionalità dev'essere di tipo quadratico (cioè soluzione di un'equazione di secondo grado a coefficienti interi); se si chiede che il sistema abbia una simmetria rotazionale, si conclude che questa non può che essere del tipo C_3 o C_4 (rispettivamente il reticolo triangolare e quello quadrato), o del tipo C_5 , C_8 o C_{12} (i primi due sono il Penrose, il reticolo a simmetria ottagonale e quello a simmetria dodecagonale).

Il ragionamento esteso al caso tridimensionale mostra che l'irrazionalità può essere al più di tipo cubico (cioè soluzione di un'equazione di terzo grado a coefficienti interi).

Il ragionamento euristico in 2D procede a grandi linee come segue. Si consideri una trasformazione fasonica uniforme con δc_i molto piccolo. Per quanto visto nel paragrafo precedente saranno toccati da questa trasformazione solo gli ERS associati, nello spazio duale, a triangoli di dimensioni inferiori ad un certo valore che dipende da $|\delta c_i|$. È necessario a questo punto studiare la distribuzione dei piccoli triangoli nello spazio duale (ciò è descritto in dettaglio in Ref. [Lev2]).

In particolare si dimostra che la densità dei triangoli di diametro inferiore ad un certo valore d (con diametro qui s'intende la massima distanza tra i vertici del triangolo) tende a zero all'annullarsi di d . Consideriamo ora una terna qualsiasi di griglie che costituiscono

la n -griglia ($n \geq 3$). Se questa terna soddisfa una certa condizione detta di seconda intersezione (la cui definizione preferiamo posporre per non interrompere il ragionamento), allora i piccoli triangoli si disporranno su righe la cui distanza diverge all'annullarsi di d , mentre la distanza dei triangoli all'interno di una stessa riga si mantiene finita (queste righe nel caso del Penrose altro non sono che il corrispondente nello spazio duale dei vermi). Se invece la terna non soddisfa la condizione di seconda intersezione, i triangoli si troveranno isolati, ovvero la distanza tra due triangoli comunque presi divergerà all'annullarsi di d . Si dimostra anche che è sufficiente che una sola terna delle $\frac{n(n-1)(n-2)}{6}$ possibili non soddisfi la condizione menzionata perché i triangoli che non appartengono alle righe risultino isolati, siano cioè tali che la loro distanza da un qualsiasi altro triangolo diverga al tendere a zero di d .

Orbene, sia ora R il raggio d'azione (finito!) dell'interazione; se la trasformazione fasonica è sufficientemente piccola, allora tutti i triangoli isolati da essa coinvolti disteranno da ogni altro più di R . Ciò significa che i corrispondenti ERS non potranno interagire e che quindi la variazione di energia ΔE associata al riarrangiamento di ciascuno di essi sarà dovuta solo ad interazioni con la regione circostante. Il fasone uniforme non cambia l'energia globale del sistema, poiché per ogni ERS che passa da uno stato s_1 ad uno stato s_2 con variazione di energia ΔE ve n'è un altro che passa dallo stato s_2 allo stato s_1 provocando una variazione di energia $-\Delta E$ che compensa la prima.

Consideriamo ora un fasone non uniforme che abbia la stessa azione del precedente sugli ERS del secondo tipo (supponendo $\Delta E > 0$), ma che lasci invariati quelli del primo. Avendo così eliminato il contributo positivo delle variazioni locali di energia, il sistema che otteniamo risulta avere un'energia più bassa del sistema imperturbato, che quindi non può essere stabile.

È la presenza dei triangoli isolati che ci porta a questa conclusione; pertanto possiamo avere un quasireticolo stabile solo se questi sono del tutto assenti, ovvero solo se tutte le terne di griglie soddisfano alla condizione di seconda intersezione.

È dunque venuto il momento di chiarire che cosa significhi questa condizione. Scegliamo una terna di griglie, ovvero tre delle funzione lineari che specificano l' n -griglia

(queste funzioni saranno indicate come f_1, f_2, f_3). Scegliamo quindi dei valori opportuni delle costanti reali c_1, c_2 e c_3 , tali che ci sia un'intersezione multipla, ovvero esistano un punto $\mathbf{x}_1 \in \mathbf{R}^2$ ed una terna d'interi z_1^1, z_2^1 e z_3^1 tali che sia soddisfatto il sistema:

$$f_i(\mathbf{x}_1) = z_i^1 + c_i \quad i = 1, 2, 3, \quad (I.4.4)$$

il che è sempre possibile. Una seconda intersezione multipla, ovvero un secondo punto \mathbf{x}_2 ed una seconda terna d'interi z_1^2, z_2^2 e z_3^2 che soddisfano il sistema (I.4.4), si presenta invece solo per determinate scelte delle f_i . Questa è condizione di seconda intersezione.

È immediato verificare, ricordando che le f_i sono funzioni lineari, che la condizione di seconda intersezione implica che le intersezioni multiple sono addirittura infinite. Esplicitamente sono soluzioni di (I.4.4) tutti i punti della forma:

$$\mathbf{x}_\kappa = (1 - \kappa)\mathbf{x}_1 + \kappa\mathbf{x}_2, \quad (I.4.5)$$

con una corrispondente terna di interi:

$$z_i^\kappa = (1 - \kappa)z_i^1 + \kappa z_i^2, \quad (I.4.6)$$

dove κ è della forma:

$$\kappa = \frac{k}{M}, \quad k \in \mathbf{Z}, \quad (I.4.7)$$

$$M = \text{M.C.D.}\{|z_1^2 - z_1^1|, |z_2^2 - z_2^1|, |z_3^2 - z_3^1|\}$$

(M.C.D. indica il massimo comun divisore).

È la presenza di tutte queste intersezioni multiple – la situazione è illustrata in fig. 10 – a far sí che i piccoli triangoli si dispongano su righe.

Vediamo ora come la condizione di seconda intersezione equivalga alla condizione che l'irrazionalità del problema sia di tipo quadratico. Se indichiamo con \mathbf{x} la differenza tra \mathbf{x}_2 e \mathbf{x}_1 e con m_i la differenza tra z_i^2 e z_i^1 , la condizione di seconda intersezione si legge anche come:

$$f_i(\mathbf{x}) = m_i, \quad m_i \in \mathbf{Z}, \quad i = 1, 2, 3. \quad (I.4.8)$$

Ricordando che le f_i sono funzioni lineari possiamo quindi scrivere:

$$f_i(x) := a_i x + b_i y, \quad (I.4.9)$$

definendo così le costanti reali a_i e b_i (abbiamo scritto x in componenti come (x, y)).

L'equazione (I.4.8) può essere riscritta in forma matriciale come:

$$\begin{pmatrix} a_1 & b_1 & m_1 \\ a_2 & b_2 & m_2 \\ a_3 & b_3 & m_3 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ -1 \end{pmatrix} = 0. \quad (I.4.10)$$

Perché l'equazione (I.4.10) possa avere soluzione ci deve essere una terna di interi m_1 , m_2 e m_3 che annulli il determinante della matrice:

$$\begin{vmatrix} a_1 & b_1 & m_1 \\ a_2 & b_2 & m_2 \\ a_3 & b_3 & m_3 \end{vmatrix} = 0. \quad (I.4.11)$$

Come mostreremo fra poco (eq. (I.4.14) e (I.4.17)), questa condizione equivale a chiedere che l'irrazionalità del quasireticolo in questione sia al più quadratica.

Una dimostrazione più rigorosa, sempre dovuta a Levitov^[Lev2], mostra come la condizione di seconda intersezione, e quindi l'annullamento del determinante di cui sopra, sia condizione necessaria perché il quasireticolo, visto ora come un puro oggetto matematico, sia ricostruibile a partire da *regole locali*, ovvero quando sono date tutte le possibili configurazioni all'interno di una regione di raggio r finito. Rimandiamo all'articolo originale per una definizione più precisa delle regole locali; in esso si distingue tra l'altro fra regole locali forti e regole locali deboli, ed il teorema vale, sempre come condizione necessaria, per le regole forti. Trattare questa distinzione ci porterebbe troppo lontano; citiamo solo il fatto che la presenza delle sole regole deboli non determina esattamente la superficie di proiezione, ma lascia la possibilità di fluttuazioni della stessa (è interessante notare che per il quasicristallo ottagonale non si conoscono regole forti).

Applichiamo ora i risultati ottenuti al caso di un quasireticolo bidimensionale con simmetria rotazionale C_n . Le n funzioni f_i che rappresentano la n -griglia saranno scritte

come:

$$\begin{aligned} f_i(x, y) &= \cos(\alpha i) x + \sin(\alpha i) y, \\ \alpha &= \frac{2\pi}{n}. \end{aligned} \tag{I.4.12}$$

Consideriamo ora la terna f_n, f_1, f_3 e verifichiamo se essa soddisfa alla condizione di seconda intersezione, ovvero se si ha:

$$\begin{vmatrix} 1 & 0 & m_1 \\ \cos \alpha & \sin \alpha & m_2 \\ \cos 3\alpha & \sin 3\alpha & m_3 \end{vmatrix} = 0. \tag{I.4.13}$$

Sviluppando il determinante e facendo uso di una semplice identità trigonometrica, si ottiene:

$$m_1 \sin 2\alpha - m_2 \sin 3\alpha + m_3 \sin \alpha = 0,$$

che, con qualche semplice riarrangiamento, diviene:

$$4m_2(\cos \alpha)^2 - 2m_1 \cos \alpha - (m_2 + m_3) = 0. \tag{I.4.14}$$

Evidentemente l'equazione precedente può essere soddisfatta se e solo se $\cos \frac{2\pi}{n}$ appartiene al campo degli irrazionali quadratici. Dalla teoria di Galois è noto che questo avviene solo per $n \in \{3, 4, 5, 6, 8, 10, 12\}$.

Per $n = 3$ o per $n = 4$, $\cos \alpha$ è un numero razionale e le strutture ottenute sono quindi periodiche.

Per $n = 5$ abbiamo un quasicristallo che ha un'irrazionalità che dipende da $\sqrt{5}$, per $n = 8$ abbiamo un quasicristallo con irrazionalità che dipende da $\sqrt{2}$, mentre per $n = 12$ abbiamo un quasicristallo con irrazionalità dipendente da $\sqrt{3}$.

I casi $n = 6$ e $n = 10$ devono essere scartati poiché generano una situazione con griglie diverse che sono tuttavia parallele tra loro, il che viola il punto *b* del § 3; le simmetrie C_6 e C_{10} possono essere ottenute rispettivamente da $n = 3$ e da $n = 5$ con un'opportuna scelta dei c_i .

Tra i quasireticolari abbiamo incluso, forse un po' impropriamente, anche il caso particolare dei reticoli periodici. Il reticolo quadrato (con simmetria C_4) è rappresentato nello spazio duale da un altro reticolo quadrato. I parallelogrammi sono in questo caso dei semplici quadrati.

Il caso del reticolo triangolare sembra essere di altro tipo poiché le celle fondamentali non sono parallelogrammi ma triangoli ovvero esagoni. In realtà se consideriamo il reticolo duale con simmetria C_3 senza intersezioni multiple abbiamo effettivamente delle celle a forma di parallelogramma ma queste invariabilmente si uniscono in gruppi di tre a formare le usuali celle esagonali; l'“atomo” all'interno di ciascun esagono si trova nella stessa posizione in cui si troverebbe se usassimo celle triangolari per costituire l'esagono. Ciò che cambia è la posizione dei link, che nel caso di celle a parallelogramma fa sì che, nonostante la costruzione del reticolo via esagoni, la simmetria sia solo C_3 . Se scegliamo una configurazione fasonica che ci dà un'intersezione multipla, la periodicità del sistema fa sì che tutte le intersezioni siano multiple; siamo in una situazione davvero singolare (si viola dappertutto il punto c del § 3), che, come si vede, dà origine a celle esagonali e alla simmetria C_6 .

Anche nel caso di simmetria pentagonale possiamo considerare il caso particolare di un'intersezione multipla^[dB]. Se questa è solo tripla abbiamo oltre ai parallelogrammi anche delle celle esagonali che si dispongono lungo una linea. Se invece abbiamo un'intersezione di cinque rette contemporaneamente, avremo cinque rette di esagoni che vanno ad incontrarsi su di un decagono regolare. Si guadagna, rispetto al centro del decagono, la simmetria decagonale.

Vogliamo ora mostrare come anche un quasireticolato bidimensionale che non obbedisca ad alcuna simmetria rotazionale debba avere un'irrazionalità quadratica. Supponiamo dapprima che esso sia descritto da una 4-griglia. Abbiamo quindi quattro possibili terne e di conseguenza quattro equazioni cui i parametri, che definiscono le griglie, debbono soddisfare. Questi parametri sono in tutto quattro, poiché è possibile con un omeomorfismo, che quindi non cambia la topologia della 4-griglia, ridurre due delle funzioni lineari f_i alla semplice forma:

$$f_1(x, y) = x \quad (I.4.15 - a)$$

$$f_2(x, y) = y. \quad (I.4.15 - b)$$

Rimangono dunque solo i parametri che definiscono le altre due funzioni lineari:

$$f_3(x, y) = ax + by \quad (I.4.15 - c)$$

$$f_4(x, y) = cx + dy. \quad (I.4.15 - d)$$

Abbiamo quindi da soddisfare le quattro seguenti equazioni, in cui sono presenti come parametri liberi gli interi m_i, n_i, p_i, q_i ($i = 1, 2, 3$):

$$\begin{vmatrix} 1 & 0 & m_1 \\ 0 & 1 & m_2 \\ a & b & m_3 \end{vmatrix} = 0, \quad (I.4.16 - a)$$

$$\begin{vmatrix} 1 & 0 & n_1 \\ 0 & 1 & n_2 \\ c & d & n_3 \end{vmatrix} = 0, \quad (I.4.16 - b)$$

$$\begin{vmatrix} 1 & 0 & p_1 \\ a & b & p_2 \\ c & d & p_3 \end{vmatrix} = 0, \quad (I.4.16 - c)$$

$$\begin{vmatrix} 0 & 1 & q_1 \\ a & b & q_2 \\ c & d & q_3 \end{vmatrix} = 0. \quad (I.4.16 - d)$$

Esplicitando i determinanti otteniamo:

$$m_3 - m_1a - m_2b = 0, \quad (I.4.17 - a)$$

$$n_3 - n_1c - n_2d = 0, \quad (I.4.17 - b)$$

$$p_3b - p_2d + p_1(ad - bc) = 0, \quad (I.4.17 - c)$$

$$q_2c - q_3a + q_1(ad - bc) = 0. \quad (I.4.17 - d)$$

Questo sistema è solo apparentemente di quarto grado; in realtà, come è facile verificare, esso è solo di secondo grado e porta quindi alla conclusione preannunciata che i parametri a, b, c e d sono al più quadratici.

Il caso $n > 4$ si tratta in maniera molto semplice osservando che presa una qualsiasi quaterna di griglie, perché il quasireticolato sia stabile, ogni terna delle stesse deve soddisfare alla condizione di seconda intersezione. Per ogni quaterna ci troviamo dunque nelle condizioni del caso $n = 4$ e giungiamo pertanto alle medesime conclusioni.

Il caso $n = 3$ viene trattato sulla base di un teorema generale (vedi per esempio Ref. [Lev2]), secondo cui un quasireticolato d -dimensionale ottenuto proiettando da $d + 1$ dimensioni può soddisfare a regole locali solo se è periodico.

Nel caso tridimensionale le griglie di rette sono sostituite da griglie di piani; tre piani appartenenti a griglie diverse s'intersecheranno sempre in un punto; si potranno sempre aggiustare le costanti fasoniche affinché sia possibile un'intersezione multipla di quattro piani. La richiesta che ci siano regole locali implicherà anche in questo caso la condizione di seconda intersezione per ogni quaterna di griglie e quindi l'equazione

$$\begin{vmatrix} a_1 & b_1 & c_1 & k_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 & k_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 & k_3 \\ a_4 & b_4 & c_4 & k_4 \end{vmatrix} = 0, \quad k_i \in \mathbf{Z}, \quad i = 1, \dots, 4, \quad (I.4.18)$$

dovrà essere soddisfatta per almeno una quaterna d'interi k_i .

L'applicazione di questa condizione mostra che l'irrazionalità può essere al più cubica.

CAPITOLO II

§II.1-PROBLEMI SU RETICOLO

L'approssimazione di tight-binding

Nell'approssimazione di tight-binding, si assume che la funzione d'onda dell'elettrone possa essere sviluppata in termini di funzioni concentrate attorno ad ogni sito atomico r_j :

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_j \psi_j \phi_j(\mathbf{x} - \mathbf{r}_j). \quad (II.1.1)$$

La funzione ϕ_j è detta *funzione di Wannier* e nei casi più semplici non dipende dal sito j che attraverso il suo argomento; essa rappresenta la distribuzione elettronica attorno all'atomo j -esimo.

Da un altro punto di vista tale approssimazione non è che un'ipotesi aggiuntiva sullo spazio di Hilbert dove è ambientato il nostro problema; tale spazio (\mathcal{H}), la cui dimensione è ora pari al numero di siti del reticolo, è rappresentato dai vettori:

$$|\Psi\rangle = \sum_j \psi_j |j\rangle, \quad (II.1.2)$$

con la condizione di quadrato-sommabilità $\sum_j |\psi_j|^2 < \infty$, dove con ψ_j indichiamo il prodotto scalare $\langle j|\Psi\rangle$ e la base $|j\rangle$ è rappresentata, secondo la (II.1.1), dalle funzioni:

$$\langle \mathbf{x}|j\rangle = \phi_j(\mathbf{x} - \mathbf{r}_j). \quad (II.1.3)$$

Si tratta ora di riscrivere l'equazione di Schrödinger $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ in questo spazio. Sviluppiamo sulla base $|j\rangle$ l'Hamiltoniano H :

$$H = \sum_{ij} H_{ij} |i\rangle \langle j|, \quad (II.1.4)$$

dove abbiamo inteso con H_{ij} l'elemento di matrice $\langle i|H|j\rangle$, da cui segue $H_{ji} = H_{ij}^*$ (salvo avviso contrario tuttavia considereremo sempre H_{ij} reali). Dalle (II.1.2) e (II.1.4), otteniamo:

$$H|\Psi\rangle = \sum_{jl} H_{lj} |l\rangle \langle j|\Psi\rangle = \sum_{ij} H_{ij} \psi_j |i\rangle$$

e quindi possiamo riscrivere l'equazione di Schrödinger come:

$$\sum_j H_{ij} \psi_j = E \psi_i \quad (II.1.5)$$

(ricordiamo che $|j\rangle$ è una base ortonormale completa di \mathcal{H}).

Poiché il termine H_{ii} agisce nell'equazione (II.1.5) come un'energia potenziale è d'uso indicarlo come V_i ; i termini H_{ij} con $i \neq j$ vengono generalmente indicati come t_{ij} . La (II.1.5) viene quindi riscritta come

$$\sum_{j:j \neq i} t_{ij} \psi_j + V_i \psi_i = E \psi_i \quad (II.1.5')$$

Un Hamiltoniano della forma (II.1.4) è detto *Hamiltoniano di hopping* poiché la sua applicazione consiste nel far saltare l'elettrone da un sito j ad un sito i con ampiezza di probabilità data dagli elementi di matrice t_{ij} , che sono detti *integrali di hopping*; essi possono essere scritti anche come:

$$\begin{aligned} t_{ij} &= \langle i | H | j \rangle = \int \int dx dy \langle i | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | H | \mathbf{y} \rangle \langle \mathbf{y} | j \rangle = \\ &= \int \int dx dy \phi_i^*(\mathbf{x} - \mathbf{r}_i) \langle \mathbf{x} | H | \mathbf{y} \rangle \phi_j(\mathbf{y} - \mathbf{r}_j). \end{aligned} \quad (II.1.6)$$

È chiaro che al crescere della distanza tra i siti i e j le funzioni $\phi_i(\mathbf{x} - \mathbf{r}_i)$ e $\phi_j(\mathbf{x} - \mathbf{r}_j)$ si sovrapporranno sempre meno rendendo sempre più piccolo il valore di t_{ij} . Generalmente si suppone inoltre che tali funzioni siano fortemente piccate attorno all'origine; in tal caso gli unici elementi di matrice sensibilmente diversi da zero sono quelli in cui i e j sono primi vicini (per indicare siti i j primi vicini useremo la notazione $\langle ij \rangle$). L'equazione di Schrödinger si legge ora come:

$$\sum_j t_{\langle ij \rangle} \psi_j + V_i \psi_i = E \psi_i. \quad (II.1.7)$$

Nel caso si voglia descrivere la propagazione fononica, l'equazione che dev'essere discretizzata è:

$$-c_s^2 \nabla^2 \psi = \omega^2 \psi, \quad (II.1.8)$$

dove c_s indica la velocità del suono.

Su reticolo si introducono le variabili ψ_i che danno lo spostamento dell'atomo i -esimo dalla posizione di equilibrio. Lavorando su queste variabili l'equazione lineare piú generale è ancora la (II.1.5) a patto di sostituire E con ω^2 e di scegliere gli H_{ij} in maniera appropriata. A questo proposito è opportuno notare che nella (II.1.8) a $\psi = \text{cost.}$ corrisponde ω^2 uguale a zero; ciò impone agli H_{ij} il seguente vincolo:

$$\sum_j H_{ij} = 0. \quad (II.1.9)$$

Inoltre, dovendo l'operatore H rappresentare una derivata seconda, si considerano generalmente diversi da zero i soli termini a primi vicini $t_{\langle ij \rangle}$ ed i potenziali V_i in modo da garantire la (II.1.9), che con queste notazioni si riscrive:

$$V_i + \sum_j t_{\langle ij \rangle} = 0. \quad (II.1.9')$$

Le funzioni che soddisfano all'equazione $\sum_j H_{ij}\psi_j = 0$ sono l'analogo discreto delle *funzioni armoniche*. L'equazione (II.1.9') ci permette di scrivere per tali funzioni:

$$\psi_i = \frac{\sum_j t_{\langle ij \rangle} \psi_j}{\sum_j t_{\langle ij \rangle}},$$

che rappresenta l'analogo nel discreto del *teorema della media*.

Con questo formalismo, unitamente all'ultima condizione, è possibile descrivere un generico modo di Goldstone descritto da un campo ψ_i di natura appropriata.

Il caso periodico unidimensionale

In una catena periodica tutti i siti sono equivalenti; ne segue che né i potenziali V_i né gli integrali di hopping $t_{\langle ij \rangle}$ possono dipendere dal sito e saranno di conseguenza indicati rispettivamente come V e $-t$ (il segno meno è convenzionale!). L'Hamiltoniano diventa:

$$H = -t \sum_j (|j-1\rangle + |j+1\rangle)\langle j| + V, \quad (II.1.10)$$

mentre l'equazione di Schrödinger si legge:

$$-t(\psi_{i-1} + \psi_{i+1}) = (E - V)\psi_i. \quad (II.1.11)$$

Possiamo approssimare la catena periodica infinita con una successione di catene costituite da N siti con $N \rightarrow \infty$. È conveniente considerare condizioni al contorno periodiche. Possiamo quindi espandere la funzione d'onda come:

$$\psi_j = \langle j | \Psi \rangle = \sum_k \phi_k \langle j | k \rangle, \quad (II.1.12)$$

con

$$\begin{aligned} \langle j | k \rangle &= \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ikj}, \\ \phi_k &= \langle k | \Psi \rangle, \\ k &= \frac{2\pi}{N} n - \pi, \quad n = 0, \dots, N-1, \end{aligned} \quad (II.1.13)$$

dove k è il numero d'onda che per convenzione vien fatto variare tra $-\pi$ e π (prima zona di Brillouin).

Sostituendo la (II.1.12) nella (II.1.10), si trova:

$$(E - V + 2t \cos k) |k\rangle = 0, \quad (II.1.14)$$

da cui segue che tali stati sono autovettori con autovalori:

$$E_k = V - 2t \cos k. \quad (II.1.15)$$

Per risolvere questo problema si può usare anche un altro approccio che fa ricorso alla *matrice di trasferimento*. Introduciamo le seguenti notazioni:

$$\underline{\psi}_i := \begin{pmatrix} \psi_i \\ \psi_{i-1} \end{pmatrix}, \quad (II.1.16 - a)$$

$$X(E) := \begin{pmatrix} \frac{V-E}{t} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (II.1.16 - b)$$

L'equazione (II.1.10) può ora essere riscritta come:

$$\underline{\psi}_{i+1} = X(E) \cdot \underline{\psi}_i, \quad (II.1.17)$$

da cui segue per iterazione:

$$\underline{\psi}_{i+n} = X^n(E) \cdot \underline{\psi}_i. \quad (II.1.17')$$

Poiché il determinante della matrice di trasferimento è uguale a uno i due autovalori complessi hanno argomenti opposti e si possono presentare i seguenti due casi:

i) entrambi gli autovalori giacciono sul cerchio unitario e sono complessi coniugati; la traccia risulta in modulo minore o uguale a due;

ii) un autovalore sta fuori dal cerchio unitario mentre l'altro sta al suo interno e sono entrambi reali; la traccia risulta in modulo maggiore di due.

Nel secondo caso la funzione d'onda non si mantiene limitata, ma diverge esponenzialmente violando il requisito di quadrato-sommabilità; lo spettro è quindi dato da quei valori dell'energia che producono il caso i); cioè quelli che danno $|\frac{V-E}{t}| \leq 2$. In tal caso possiamo scrivere gli autovalori come $e^{\pm ik}$ con $k \in [-\pi, \pi)$ con la condizione:

$$2 \cos k = \frac{V - E}{t},$$

che corrisponde alla (II.1.15).

Una funzione particolarmente importante è la *densità degli stati* che sovente chiameremo DOS (= *density of states*):

$$\rho(E) := \frac{1}{N} \sum_{\alpha} \delta(E - E_{\alpha}), \quad (II.1.18)$$

dove α labella tutti gli autovalori.

Chiaramente nel nostro caso $\rho(E)$ è uguale a zero per $|\frac{V-E}{2t}| > 1$. Calcoliamo ora la forma esplicita per gli altri valori nel limite $N \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned} \rho(E) &= \frac{1}{N} \sum_k \delta(E - E_k) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk \delta(E - E_k) = \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} dk \delta(E - V + 2t \cos k) = \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} dk \frac{\delta(k - \arccos \frac{V-E}{2t})}{2|t \sin k|} = \\ &= \frac{1}{2\pi|t|} \frac{1}{\sqrt{1 - (\frac{V-E}{2t})^2}}, \end{aligned} \quad (II.1.19)$$

dove abbiamo fatto uso delle proprietà di simmetria di E_k e delle proprietà della delta di Dirac.

La DOS può essere riscritta, contemplando tutti i valori di E , come:

$$\rho(E) = \frac{1}{\pi} \Re \frac{1}{\sqrt{(2t)^2 - (V - E)^2}}. \quad (II.1.19')$$

Le singolarità per $E = V \pm 2t$ sono dette di Van Hove.

Un'altra importante funzione per lo studio dello spettro è la *densità integrata degli stati* (IDOS), definita come:

$$\mathcal{N}(E) := \frac{1}{N} \sum_{\alpha} \Theta(E - E_{\alpha}) = \int_{-\infty}^E dE' \rho(E'). \quad (II.1.20)$$

La IDOS è quindi una funzione non decrescente che è uguale a zero per $E < E_{\min}$ e uguale a uno per $E > E_{\max}$ (dove E_{\min} e E_{\max} sono rispettivamente l'estremo inferiore e superiore dello spettro).

Nel caso in questione si ha, integrando la (II.1.19):

$$\mathcal{N}(E) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arcsin \frac{E - V}{2|t|}$$

per $V - 2|t| < E < V + 2|t|$; possiamo estendere l'equazione precedente a tutto \mathbf{R} scrivendo:

$$\mathcal{N}(E) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \Re \arcsin \frac{E - V}{2|t|}, \quad (II.1.21)$$

dove $\Re \arcsin x$ è uguale a zero per $x < -1$, è uguale a uno per $x > 1$, ed è uguale a $\arcsin x$ per $|x| \leq 1$.

Nel caso fononico si procede esattamente alla stessa maniera ponendo tuttavia $V = 2t$ (cfr.eq.(II.1.9)) con $t > 0$ ed effettuando la sostituzione $E \rightarrow \omega^2$. L'equazione di dispersione risulta quindi:

$$\omega_k^2 = 2t(1 - \cos k) \quad (II.1.22)$$

che nel limite di piccoli k dà:

$$\omega_k^2 = tk^2 + O(k^4), \quad (II.1.22')$$

da cui segue che dobbiamo identificare t con c_s^2 .

I casi periodici bidimensionali

In due dimensioni l'equazione di Schrödinger viene scritta come:

$$-t \sum_j (\psi_{\mathbf{i}+\mathbf{e}_j} + \psi_{\mathbf{i}-\mathbf{e}_j}) = (E - V)\psi_{\mathbf{i}}, \quad (II.1.23 - a)$$

$$\mathbf{i} = m\mathbf{e}_1 + n\mathbf{e}_2 \quad (II.1.23 - b)$$

dove m e n sono interi, $j = 1, 2$ nel reticolo quadrato e $j = 1, 2, 3$ nel reticolo triangolare, mentre i vettori \mathbf{e}_j sono definiti come:

$$\mathbf{e}_1 = (1, 0), \quad \mathbf{e}_2 = (0, 1), \quad (II.1.24 - a)$$

per il reticolo quadrato, e:

$$\mathbf{e}_1 = (1, 0), \quad \mathbf{e}_2 = \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right), \quad \mathbf{e}_3 = \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right) = \mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_1, \quad (II.1.24 - b)$$

per il reticolo triangolare.

Studiamo in particolare il reticolo quadrato limitandoci dapprima al caso finito di $N \times N$ siti. Ponendo condizioni periodiche al contorno, si può sviluppare la funzione d'onda come:

$$\psi_{\mathbf{i}} = \langle \mathbf{i} | \Psi \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{i} | \mathbf{k} \rangle, \quad (II.1.25)$$

con

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{i} | \mathbf{k} \rangle &= \frac{1}{N} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{i}}, \\ \phi_{\mathbf{k}} &= \langle \mathbf{k} | \Psi \rangle, \\ k_j &= \frac{2\pi}{N} n_j - \pi, \quad n_j = 0, \dots, N-1. \end{aligned} \quad (II.1.26)$$

Inserendo la (II.1.25) nella (II.1.23), si trova che gli stati $|\mathbf{k}\rangle$ sono autovettori con autovalori

$$E_{\mathbf{k}} = V - 2t \sum_{j=1}^2 \cos k_j. \quad (II.1.27)$$

Lo spettro è quindi compreso tra $V - 4|t|$ e $V + 4|t|$. La densità degli stati per valori di

E all'interno dello spettro, quando $N \rightarrow \infty$, è data da:

$$\begin{aligned}
 \rho(E) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int d^2\mathbf{k} \delta(E - E_{\mathbf{k}}) = \\
 &= \frac{4}{(2\pi)^2} \int_0^\pi dk_x \int_0^\pi dk_y \delta(E - V + 2t(\cos k_x + \cos k_y)) = \\
 &= \frac{1}{\pi} \int_0^\pi dk_x \rho_1(E + 2t \cos k_x) = \\
 &= \frac{1}{2\pi^2 |t|} \int_0^\pi dk_x \Re \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{V-E}{2t} - \cos k_x\right)^2}} = \tag{II.1.28} \\
 &= \frac{1}{2\pi^2 |t|} \int_{-1}^1 dx \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \Re \frac{1}{\sqrt{1 - \left(x + \frac{E-V}{2t}\right)^2}} = \\
 &= \frac{1}{2\pi^2 |t|} \int_{-1}^{1 - \frac{E-V}{2t}} dx \frac{1}{\sqrt{1-x^2} \sqrt{1 - \left(x + \frac{E-V}{2t}\right)^2}},
 \end{aligned}$$

ove abbiamo sfruttato il risultato (II.1.19') - ρ_1 è la DOS unidimensionale - ed abbiamo effettuato il cambiamento di variabile $x = \cos k_x$. Purtroppo non è possibile risolvere l'ultimo integrale; è interessante notare che esso è ben definito tranne che per $E = V$, cioè nel centro banda, dove si ha una divergenza logaritmica (singolarità di Van Hove):

$$\rho(E) \stackrel{E \rightarrow V}{\sim} -\frac{1}{2\pi^2 |t|} \ln \left| \frac{E - V}{8t} \right|. \tag{II.1.29}$$

Nel caso fononico si fa la solita sostituzione $E \rightarrow \omega^2$ e si pone $V = 4t$ ottenendo l'equazione di dispersione:

$$\omega_{\mathbf{k}}^2 = 2t(2 - \cos k_x - \cos k_y),$$

che nel limite di piccoli momenti dà:

$$\omega_{\mathbf{k}}^2 \stackrel{|\mathbf{k}| \rightarrow 0}{\sim} t |\mathbf{k}|^2,$$

che c'impone $t = c_s^2$.

Nel caso del reticolo triangolare lo spettro è dato, in funzione dei vettori d'onda lungo x e y da:

$$E_{\mathbf{k}} = V - 2t \left(\cos k_x + \cos \frac{k_x + \sqrt{3}k_y}{2} + \cos \frac{k_x - \sqrt{3}k_y}{2} \right).$$

Nel caso fononico si pone $V = 6t$ e si ottiene:

$$\omega_{\mathbf{k}}^2 = 2t \left(3 - \cos k_x - \cos \frac{k_x + \sqrt{3}k_y}{2} - \cos \frac{k_x - \sqrt{3}k_y}{2} \right),$$

che nel limite di piccoli momenti dà:

$$\omega_{\mathbf{k}}^2 \stackrel{|\mathbf{k}| \rightarrow 0}{\sim} \frac{3}{2} t |\mathbf{k}|^2,$$

da cui segue $t = \frac{2}{3} c_s^2$.

§II.2-PROBLEMI SU RETICOLI BIDIMENSIONALI CON CAMPO MAGNETICO

L'equazione (II.1.5') è invariante per un cambiamento di fase globale della funzione d'onda $\psi_i \rightarrow e^{\frac{i}{\hbar} \frac{e}{c} \Lambda} \psi_i$, dove le costanti \hbar (costante di Planck), e (carica dell'elettrone) e c (velocità della luce) sono introdotte per pura convenienza. Tuttavia l'equazione non è più invariante se facciamo un cambiamento di fase locale (con un Λ_i dipendente dalla posizione).

Si può verificare che, introdotto il "potenziale vettore" \mathbf{A}_j , ed effettuata la sostituzione di Peierls-Onsager^[Pei]:

$$t_{ij} \longrightarrow e^{\frac{i}{\hbar} \frac{e}{c} \mathbf{A}_i \cdot \delta \mathbf{r}_{ij}} t_{ij} \quad (II.2.1)$$

(dove $\delta \mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ è il vettore che congiunge il sito j al sito i), l'equazione (II.1.5') diviene invariante sotto la trasformazione di gauge:

$$\psi_j \longrightarrow e^{\frac{i}{\hbar} \frac{e}{c} \Lambda_j} \psi_j \quad (II.2.2 - a),$$

$$\mathbf{A}_j \longrightarrow \mathbf{A}_j + (\nabla \Lambda)_j \quad (II.2.2 - b)$$

(dove l'operatore di derivazione ∇ è da intendersi discretizzato con la proprietà $\delta \mathbf{r}_{ij} \cdot (\nabla \Lambda)_j = \Lambda_i - \Lambda_j$). Si noti che la sostituzione (II.2.1) non viola la regola $t_{ji} = t_{ij}^*$. e, come è immediato verificare, la somma delle fasi di t_{ij} attorno ad una cella elementare fornisce il flusso del campo magnetico attraverso la stessa ed è quindi una quantità gauge invariante.

Consideriamo ora il caso di un reticolo bidimensionale quadrato con interazioni a primi vicini immerso in un campo magnetico H costante ed uniforme perpendicolare al piano

stesso^{[Hof],[Koh]}. Nel gauge di Landau si ha:

$$A_j = H(0, x_j, 0) \quad (II.2.3)$$

(dove (x_j, y_j) è il vettore posizione del sito j).

Ricorrendo alla notazione vettoriale già impiegata, indichiamo ogni sito con un $i = (m, n) \in \mathbb{Z}^2$ e la sua posizione con $\mathbf{r}_i = a \cdot (m, n) = (x_m, y_n)$, dove a è il passo del reticolo.

Scrivendo t^x e t^y per gli integrali di hopping relativi, rispettivamente, a salti lungo l'asse positivo delle ascisse e delle ordinate, si ha dopo la sostituzione di Peierls-Onsager:

$$t^x = -t \quad (II.2.4 - a),$$

$$t_m^y = -e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{e}{c} H a x_m} t = -e^{-2\pi i \varphi m} t, \quad (II.2.4 - b)$$

dove φ è il flusso del campo magnetico H attraverso la cella elementare misurato in unità di $\frac{hc}{e}$ (il "quanto di flusso"). L'equazione che descrive il nostro sistema è quindi:

$$-t(\psi_{i+\mathbf{e}_1} + \psi_{i-\mathbf{e}_1} + e^{-2\pi i \varphi m} \psi_{i+\mathbf{e}_2} + e^{2\pi i \varphi m} \psi_{i-\mathbf{e}_2}) = E\psi_i, \quad (II.2.5)$$

dove \mathbf{e}_1 e \mathbf{e}_2 rappresentano ancora i versori $(1, 0)$ e $(0, 1)$.

L'invarianza per traslazione lungo l'asse y , ci suggerisce di espandere la funzione d'onda come segue:

$$\psi_i = \langle \mathbf{i} | \Psi \rangle = \sum_{k_y} \phi_{m k_y} |k_y\rangle, \quad (II.2.6)$$

con

$$\begin{aligned} \langle n | k_y \rangle &= \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i n k_y}, \\ \phi_{m k_y} &= \langle m k_y | \Psi \rangle \end{aligned} \quad (II.2.7)$$

(con k_y nella prima zona di Brillouin), ottenendo per ϕ l'equazione:

$$\phi_{m+1, k_y} + \phi_{m-1, k_y} + 2 \cos(2\pi \varphi m - k_y) \phi_{m, k_y} = -\frac{E}{t} \phi_{m, k_y}, \quad (II.2.8)$$

che è nota come *equazione di Harper*^[Har]. Le sue proprietà sono completamente diverse a seconda che φ sia razionale (della forma $\frac{p}{q}$ con p e q interi) o irrazionale.

Nel primo caso possiamo scegliere come nuova cella elementare quella ottenuta da q celle elementari originali consecutive. Ogni sito i sarà ora scritto come $(sq + l, n)$, dove

s indica la cella elementare e l ($l \in \{1, \dots, q-1\}$) la posizione del sito all'interno di tale cella. Possiamo fare una trasformata di Fourier anche lungo l'asse x :

$$\phi_{mk_y} = \sum_{k_x} c_{k_x k_y} e^{imk_x},$$

con k_x nella prima zona di Brillouin. È conveniente tuttavia esprimere k_x come $k_x^0 + 2\pi\varphi j$ con k_x^0 nella zona di Brillouin ridotta $[-\frac{\pi}{q}, \frac{\pi}{q}]$ e $j \in \{1, \dots, q-1\}$. Lo sviluppo precedente si riscrive come:

$$\phi_{mk_y} = \sum_{k_x^0} \sum_{j=0}^{q-1} c_{jk_x^0 k_y} e^{imk_x^0} e^{2\pi i \varphi j l}, \quad (II.2.9)$$

essendo il fattore $e^{2\pi i \varphi j s q}$ identicamente uguale a uno.

Poiché il terzo addendo dell'equazione (II.2.8) può essere riscritto come

$$2 \cos(2\pi\varphi m - k_y) \phi_{m, k_y} = e^{2\pi i \varphi l} e^{-ik_y} \phi_{mk_y} + e^{-2\pi i \varphi l} e^{ik_y} \phi_{mk_y},$$

e poiché un termine del tipo $e^{\pm 2\pi i \varphi l} \phi_{mk_y}$ sotto la trasformazione inversa della (II.2.9) produce un termine $c_{j \mp 1, k_x^0 k_y}$, l'equazione per c_j (sopprimiamo per comodità gl'indici k_x^0 e k_y) risulta^[Koh]:

$$-t[2 \cos(k_x^0 + 2\pi\varphi j) c_j + e^{-ik_y} c_{j-1} + e^{ik_y} c_{j+1}] = E c_j, \quad (II.2.10)$$

che, fissati k_x^0 e k_y , è un'equazione agli autovalori in uno spazio di Hilbert q -dimensionale. Essa avrà al più q autovalori $E(k_x^0, k_y)$ distinti, ciascuno dei quali al variare di k_x^0 e k_y originerà una banda.

Se avessimo scelto il gauge $\mathbf{A} = H(-y, 0, 0)$, avremmo operato in maniera identica scegliendo k_x nella prima zona di Brillouin e scrivendo k_y come $k_y^0 + 2\pi\varphi j$ con $k_y^0 \in [-\frac{\pi}{q}, \frac{\pi}{q}]$; avremmo quindi ottenuto un'equazione identica alla (II.2.10) coi ruoli di k_x e k_y invertiti. Ne segue che ogni valore di E nello spettro è q volte degenere, poiché non varia se aggiungiamo $2\pi\varphi j$ ($j = 1, \dots, q-1$) al vettore d'onda che lasciamo libero di variare in tutta la zona di Brillouin.

Si capisce che un φ irrazionale può essere visto come il limite di un'opportuna successione di razionali $\frac{p_n}{q_n}$, con $p_n, q_n \rightarrow \infty$ quando $n \rightarrow \infty$. Allora il problema risulta avere

uno spettro costituito da q_n bande e, nel limite $n \rightarrow \infty$, avremo uno spettro decisamente singolare.

Un altro modo per risolvere l'equazione (II.2.8) si basa sull'uso del formalismo della matrice di trasferimento. Con un'ovvia estensione delle (II.1.16) e (II.1.17), otteniamo l'equazione:

$$\underline{\phi}_{m+1, k_y} = X_{mk_y}(E) \cdot \underline{\phi}_{mk_y}, \quad (II.2.11)$$

con:

$$X_{mk_y}(E) = \begin{pmatrix} -\frac{E}{t} - 2 \cos(2\pi\varphi m - k_y) & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (II.2.12)$$

Se φ è un razionale $\frac{p}{q}$, allora dopo q passi le matrici X cominciano a ripetersi. Se consideriamo dunque il prodotto di q successive matrici, denotato con $Q_{k_y}(E)$ possiamo scrivere la generalizzazione di (II.1.17') come:

$$\underline{\phi}_{m+q, k_y} = Q_{k_y}(E) \cdot \underline{\phi}_{mk_y}, \quad (II.2.13)$$

e ancora, per evitare divergenze esponenziali della funzione d'onda, dobbiamo chiedere che gli autovalori di Q stiano sul cerchio unitario e che quindi si abbia

$$|\text{Tr}Q_{k_y}(E)| \leq 2.$$

Tuttavia si può dimostrare^[BB] che k_y influisce solo in maniera additiva su $\text{Tr}Q$ e che si può quindi scrivere $\text{Tr}Q_{k_y}(E)$ come $\text{Tr}Q(E) + 2f(k_y)$, dove $f(k_y)$ è una funzione periodica di ampiezza unitaria e $Q(E) = Q_{\frac{1}{2q}}(E)$. La condizione sulla traccia diventa quindi:

$$|\text{Tr}Q(E)| \leq 4. \quad (II.2.14)$$

Lo studio delle proprietà della (II.2.8), appare particolarmente interessante nel caso che φ sia irrazionale. Poiché l'equazione così com'è presenta notevoli difficoltà già per razionali con denominatori grandi, si preferisce sostituire il potenziale cosinusoidale con un'onda quadra di pari periodo; è stato mostrato che le proprietà di *scaling* dello spettro restano sostanzialmente le stesse^[KKT].

L'equazione - per comodità di scrittura sopprimiamo la dipendenza da k_y - diviene dunque:

$$-t(\phi_{m+1} + \phi_{m-1}) + V_m \phi_m = E \phi_m,$$

che può anche essere interpretata come l'equazione per un elettrone su di un quasireticolo unidimensionale, dove però la quasiperiodicità si manifesta solo nei potenziali. Tratteremo in dettaglio questo problema nei paragrafi seguenti.

È interessante notare come l'equazione (II.1.5') e la conseguente equazione di Harper non servano solo a descrivere la presenza di un campo magnetico, ma siano anche le equazioni risultanti della teoria di campo medio per il modello a legame di valenza risonante (RVB), importante per le teorie di superconduttività calda [AM].

§II.3- PROBLEMI SU QUASIRETICOLI

Quasireticoli unidimensionali

Abbiamo visto che, in generale, quando si ha a che fare con un reticolo unidimensionale si può riformulare il problema facendo uso della matrice di trasferimento. Nel caso in cui siano presenti le sole interazioni a primi vicini, questa risulta essere una matrice 2×2 unimodulare (cioè con determinante uguale a uno), o per lo meno è possibile ricondursi a questa situazione (v. più avanti).

Queste matrici godono di particolari proprietà che, nel caso di catene generate per inflazione (cfr. §I.1), portano a delle leggi di ricorsione per le tracce delle matrici di trasferimento^{[AP],[Ben],[KB],[KKT],[KO]}.

Poiché, come è stato mostrato nel § II.1, ciò che interessa, al fine di sapere se un certo valore dell'energia appartiene allo spettro, è proprio la traccia della matrice di trasferimento, si capisce come questo metodo riconduca il problema agli autovalori allo studio di una mappa dinamica.

Dallo studio di questa mappa si possono ottenere notevoli informazioni sulle proprietà dello spettro. In generale si mostra che in presenza di quasiperiodicità (persino nel caso di una perturbazione quasiperiodica infinitesima) su di un reticolo unidimensionale con

interazioni a primi vicini, lo spettro risulta singolare; si mostra per esempio che esso ha un numero infinito di gap ed una misura di Lebesgue nulla. Più precisamente si mostra che si ha a che fare con un insieme di Cantor a più scale (un insieme di Cantor è un insieme chiuso senza punti isolati il cui insieme complementare è denso).

Vediamo ora in dettaglio come si opera nel caso di una catena unidimensionale generata con regole d'inflazione del tipo $A' = M(A, B)$, $B' = N(A, B)$, dove M ed N sono monomi ordinati di A e B (cfr. §I.1).

Per quanto riguarda le matrici di trasferimento ne avremo di due diversi tipi, che indicheremo pure con A e B , disposte nella stessa sequenza con cui sono disposti gli elementi costituenti il quasireticolo. Se consideriamo la catena P_n , ripetizione periodica di $T_n = w^{(n-1)}(A)$, dove w indica la trasformazione d'inflazione, allora si avrà che:

$$\underline{\psi}_{i+N_n} = A^{(n)} \cdot \underline{\psi}_i, \quad (II.3.1)$$

dove N_n è il numero di siti in T_n , mentre la matrice $A^{(n)}$ è formalmente ottenuta come $w^{n-1}(A)$ (ora w è inteso come operazione sulle matrici A e B).

A questo punto dobbiamo imporre, come sempre, che $\text{Tr}A^{(n)} \leq 2$. Si può dimostrare, tuttavia, che, date due matrici 2×2 unimodulari, una trasformazione come quella in esame produce una formula di ricorsione sulle tracce^[AP]:

$$\begin{aligned} \alpha' &= F^{(1)}(\alpha, \beta, \gamma) \\ \beta' &= F^{(2)}(\alpha, \beta, \gamma), \\ \gamma' &= F^{(3)}(\alpha, \beta, \gamma) \end{aligned} \quad (II.3.2)$$

dove $\alpha = \text{Tr}A$, $\beta = \text{Tr}B$ e $\gamma = \text{Tr}AB$. Quando avremo $\alpha^{(n)} \leq 2$, allora saremo in presenza di un valore accettabile dell'energia (ricordiamo che A e B dipendono dall'energia!).

In pratica si tratta di studiare la mappa (II.3.2) in \mathbf{R}^3 e di vedere per quali condizioni iniziali $(\alpha(E), \beta(E), \gamma(E))$ l'evoluto n -esimo avrà la prima coordinata contenuta nell'intervallo $[-2, 2]$.

Un aiuto per la ricerca di leggi di conservazione per la (II.3.2) è dato da un'importante proprietà delle matrici 2×2 unimodulari. Sia $X * Y$ il commutatore grupale $XYX^{-1}Y^{-1}$;

si ha che:

$$\text{Tr}X * Y = (\text{Tr}X)^2 + (\text{Tr}Y)^2 + (\text{Tr}XY)^2 - \text{Tr}X\text{Tr}Y\text{Tr}XY - 2. \quad (II.3.3)$$

Quindi, ogni volta che le regole d'inflazione producono una formula di ricorsione che conserva la traccia del commutatore, la (II.3.2) ha una "costante del moto" data dalla (II.3.3).

Vediamo ora esplicitamente come si presentano le matrici A e B nel caso di quasiperiodicità dei potenziali o degli integrali di hopping.

Nel primo caso dalla generalizzazione immediata della (II.1.16-b) otteniamo:

$$X_i(E) = \begin{pmatrix} \frac{V_i - E}{t_i} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (II.3.4)$$

e a ciascuno dei due valori possibili di V_i corrisponde una matrice 2×2 unimodulare che sarà identificata con A o con B .

Il caso in cui variano gli integrali di hopping richiede un po' più d'attenzione; infatti in questo caso le matrici

$$X_i(E) = \begin{pmatrix} \frac{V - E}{t_i} & -\frac{t_{i-1}}{t_i} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (II.3.5)$$

non sono unimodulari.

Per riportarsi alla situazione precedente bisogna ricorrere ad un artificio. Prima di tutto si esprime X_i come prodotto $T_i S_{i-1}$, dove:

$$T_i = \begin{pmatrix} \frac{V - E}{t_i} & -\frac{1}{t_i} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (II.3.6 - a)$$

$$S_i = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & t_i \end{pmatrix}; \quad (II.3.6 - b)$$

quindi si nota che:

$$\underline{\psi}_{1+k} = T_k S_{k-1} T_{k-1} S_{k-2} \cdots T_1 S_0 \underline{\psi}_1 = T_k Z_{k-1} Z_{k-2} \cdots Z_1 S_0 \underline{\psi}_1, \quad (II.3.7)$$

dove abbiamo introdotto:

$$Z_i = S_i T_i = \begin{pmatrix} \frac{V - E}{t_i} & -\frac{1}{t_i} \\ t_i & 0 \end{pmatrix}. \quad (II.3.8)$$

A questo punto possiamo ragionare sulle matrici Z che sono unimodulari.

Dobbiamo infine sottolineare che questo metodo estremamente potente ha la grande limitazione di valere solo per matrici 2×2 unimodulari e quindi si applica solo al caso di quasireticoli unidimensionali con interazioni a primi vicini.

Quasireticolari bidimensionali

Un caso semplice da studiare^{[ALS],[Sir]}, ma non per questo meno interessante, è costituito dai quasireticolari bidimensionali ottenuti tensorializzando due quasireticolari unidimensionali.

Piú precisamente, se H_A e H_B sono due Hamiltoniani di hopping unidimensionali, si considera il problema definito sullo spazio di Hilbert $\mathcal{H} = \mathcal{H}_x \oplus \mathcal{H}_y$ (dove \mathcal{H}_x e \mathcal{H}_y sono relativi ad uno spazio unidimensionale), dall'Hamiltoniano:

$$H = H_{A,x} \otimes I_y + I_x \otimes H_{B,y},$$

dove I indica l'identità e gli indici x e y indicano il sottospazio su cui si fa agire l'operatore.

Se indichiamo gli autovalori di H_A e H_B rispettivamente come E_α e E_β , e gli autovettori come $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$, allora gli autovalori e gli autovettori di H saranno dati rispettivamente da:

$$E_{\alpha\beta} = E_\alpha + E_\beta, \quad (II.3.9 - a)$$

$$|\alpha\beta\rangle = |\alpha\rangle|\beta\rangle. \quad (II.3.9 - b)$$

Possiamo ora calcolare la densità degli stati di tale sistema, secondo la definizione (II.1.18), indicando con N_A e N_B il numero di siti su ciascun reticolo e con ρ_A e ρ_B le DOS su ciascuno di essi:

$$\begin{aligned} \rho(E) &= \frac{1}{N_A N_B} \sum_{\alpha\beta} \delta(E - E_{\alpha\beta}) = \frac{1}{N_A N_B} \sum_{\alpha\beta} \delta(E - E_\alpha - E_\beta) = \\ &= \frac{1}{N_A} \sum_{\alpha} \rho_B(E - E_\alpha) = \frac{1}{N_A} \sum_{\alpha} \int dE' \delta(E' - E_\alpha) \rho_B(E - E') = \quad (II.3.10) \\ &= \int dE' \rho_A(E') \rho_B(E - E'). \end{aligned}$$

Come si vede la densità degli stati per un siffatto sistema è data dalla convoluzione delle densità degli stati dei due sottosistemi che lo costituiscono.

Il caso dei superreticolari, ovvero quando il problema è periodico per uno dei due sottosistemi, è banale; infatti lo spettro del sottosistema periodico è dato da un numero finito di bande, ciascuna delle quali ha una misura finita. Se indichiamo con m la misura della

banda piú sottile, allora è evidente che nella somma (II.3.9-a) verranno riempiti tutti i gap del sottosistema quasiperiodico con misura inferiore a m . Lo spettro risultante sarà quindi un normalissimo spettro a bande.

Piú interessante è il caso dei quasireticolì, che possono presentare fenomeni di transizione dimensionale. Lo studio di un sistema Fibonacci per Fibonacci^[ALS] (facendo uso della (II.3.9-a)), con la quasiperiodicità riversata sui potenziali, ha mostrato che finché la differenza tra i due valori possibili di questi potenziali è inferiore ad un certo valore V_1 lo spettro è un normalissimo spettro a bande; quando questa differenza eccede V_1 , il numero delle bande diventa infinito, ma, finché non si eccede un altro valore critico V_2 , la misura di Lebesgue dello spettro rimane finita, riducendosi invece a zero quando V_2 viene superato.

Un altro quasireticolò bidimensionale che è stato studiato in dettaglio è il labirinto^[Siv] (cfr. §I.1), il cui spettro risulta dato da:

$$E_{\alpha\beta} = E_\alpha E_\beta, \quad (II.3.11)$$

dove E_α e E_β appartengono allo spettro del quasireticolò unidimensionale di ottonacci.

Anche in questo caso si verificano delle transizioni. Sembra esserci una prima regione in cui lo spettro non presenta gap; una seconda in cui i gap sono presenti ma in numero finito; una terza in cui il numero dei gap diviene infinito e la misura di Lebesgue complessiva dello spettro si annulla.

Piú complesso è il caso dei quasicristalli veri e propri, che per ora sono studiati unicamente per via numerica^{[KS],[ON]}, anche se vi sono già alcuni tentativi, nel caso ottagonale^[SB], di applicare le tecniche del gruppo di rinormalizzazione.

La prima cosa da stabilire è dove considerare i siti atomici nel quasicristallo. Le due possibilità investigate sono:

i) considerare gli atomi al centro dei rombi. In questo caso ogni sito avrà numero di coordinazione (il numero di siti primi vicini) pari a quattro, come nel reticolò quadrato, tuttavia gli integrali di hopping saranno di vario tipo e disposti in maniera quasiperiodica.

ii) considerare gli atomi sui vertici. Poiché i rombi hanno tutti i lati uguali, uguali saranno considerati anche gli integrali di hopping; diverso invece sarà, da sito a sito, il

numero di coordinazione (cioè il numero di link che connettono ogni sito ai suoi primi vicini).

Il quasicristallo piú studiato, sotto questo punto di vista, è il Penrose. Un aspetto interessante è che, sia nel primo sia nel secondo caso di cui sopra, esso presenta nello spettro un punto isolato^{[FATK],[KS]}. Nel primo caso – atomi al centro dei rombi – se gli integrali di hopping sono presi tutti uguali a -1 ciò si verifica per $E = 2$, nel secondo caso – atomi sui vertici – per $E = 0$.

È stato mostrato che tale punto è relativo a stati localizzati costituiti da funzioni d'onda con supporto ad anello attorno ad alcuni particolari siti. Per il resto lo spettro è costituito da bande, ma è tuttora aperta la questione se il numero di gap sia finito oppure infinito e se la misura di Lebesgue dello spettro sia finita o nulla.

Sono stati condotti studi numerici anche nel caso di un Penrose immerso in un campo magnetico uniforme^[HK], adottando la sostituzione di Peierls–Onsager (II.2.1).

Un'altra questione ancora aperta è quale sia la natura precisa delle funzioni d'onda relative ad uno spettro continuo singolare. Esse hanno un andamento intermedio tra le usuali funzioni localizzate, che sono relative ad uno spettro puntuale, e quelle estese, relative ad uno spettro continuo non singolare.

§II.4–L'APPROCCIO FUNZIONALE E IL GRUPPO DI RINORMALIZZAZIONE

L'approccio funzionale

Mostriamo ora, seguendo la Ref.[ALS], come sia possibile derivare la densità e la densità integrata degli stati a partire dall'integrale funzionale:

$$\Xi_N(E) := \int \mathcal{D}\mathbf{u} e^{\frac{i}{2}\mathcal{A}([\mathbf{u}], E)}, \quad (II.4.1)$$

dove \mathbf{u} è un vettore N -dimensionale (N è la dimensione dello spazio di Hilbert, nel nostro caso il numero di siti), $\mathcal{D}\mathbf{u}$ è la misura $\prod_{j=1}^N du_j$ (u_j per $j = 1, \dots, N$ sono le componenti di \mathbf{u} in una generica base), e \mathcal{A} è definita come segue:

$$\mathcal{A}([\mathbf{u}], E) := \mathbf{u}^T \cdot (E + i\eta - \mathbf{H}) \cdot \mathbf{u} = u_j [(E + i\eta)\delta_{jl} - H_{jl}]u_l, \quad (II.4.2)$$

essendo \mathbf{H} l'Hamiltoniano del sistema e $\eta > 0$ introdotto per ragioni di convergenza dell'integrale (II.4.1). Supponiamo per comodità che l'Hamiltoniano sia rappresentato da una matrice reale simmetrica (che è il caso di un'Hamiltoniano di hopping senza campo magnetico); ciò ci permette di considerare \mathbf{u} come un vettore reale.

Se diagonalizziamo \mathbf{H} e indichiamo con u_α le componenti di \mathbf{u} sulla base di autovettori e con E_α i corrispondenti autovalori, l'integrale (II.4.1) diviene:

$$\Xi_N(E) = \prod_{\alpha=1}^N \int du_\alpha e^{\frac{i}{2}(E+i\eta-E_\alpha)u_\alpha^2} = \frac{(2\pi)^{\frac{N}{2}}}{\prod_{\alpha=1}^N [\eta - i(E - E_\alpha)]^{\frac{1}{2}}}. \quad (II.4.3)$$

Introduciamo ora l'"energia libera":

$$\mathcal{F}_N(E) := \ln \Xi_N(E), \quad (II.4.4)$$

che per la (II.4.3) risulta valere:

$$\mathcal{F}_N(E) = \frac{N}{2} \ln(2\pi) - \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N \ln[\eta - i(E - E_\alpha)]. \quad (II.4.4')$$

Dall'identità:

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \Im \ln(\eta - ix) = -\pi\theta(x) + \frac{\pi}{2}, \quad x \in \mathbf{R} \setminus \{0\} \quad (II.4.5)$$

(dove $\theta(x)$ è la funzione di Heaviside), segue che possiamo esprimere la densità integrata degli stati nella forma:

$$\mathcal{N}_N(E) = \frac{1}{2} + \frac{2}{N\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \Im \mathcal{F}_N(E), \quad (II.4.6)$$

e, di conseguenza, la densità degli stati come:

$$\rho_N(E) = \frac{2}{N\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \Im \frac{\partial \mathcal{F}_N(E)}{\partial E}. \quad (II.4.7)$$

Si noti che queste due quantità sono ben definite anche quando $N \rightarrow \infty$.

La decimazione

Il vantaggio di quest'approccio funzionale sta nel fatto che esso si presta in modo assai semplice alle procedure del gruppo di rinormalizzazione per decimazione.

Si consideri infatti una partizione dello spazio di Hilbert \mathcal{H} in $\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$; si indichi con \mathbf{u}_1 e \mathbf{u}_2 le componenti di \mathbf{u} appartenenti all'uno e all'altro sottospazio, e con \mathbf{H}_{11} , \mathbf{H}_{22} ,

\mathbf{H}_{12} e \mathbf{H}_{21} l'Hamiltoniano relativo rispettivamente a due elementi di \mathcal{H}_1 , a due elementi di \mathcal{H}_2 , ad un elemento di \mathcal{H}_1 e ad un elemento di \mathcal{H}_2 e, infine ad un elemento di \mathcal{H}_2 e ad un elemento di \mathcal{H}_1 .

Possiamo quindi scrivere:

$$\mathcal{A}([\mathbf{u}], E) = \mathbf{u}_1^T \cdot (E + i\eta - \mathbf{H}_{11}) \cdot \mathbf{u}_1 + \mathbf{u}_2^T \cdot (E + i\eta - \mathbf{H}_{22}) \cdot \mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_1^T \cdot \mathbf{H}_{12} \cdot \mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_2^T \cdot \mathbf{H}_{21} \cdot \mathbf{u}_1.$$

Se ora integriamo solo sulle N_2 variabili \mathbf{u}_2 e ribattezziamo le \mathbf{u}_1 come \mathbf{u} , otteniamo, risolvendo l'integrale gaussiano, che:

$$\Xi_N(E) = \frac{(2\pi)^{\frac{N_2}{2}}}{\prod_{\alpha=1}^{N_2} [\eta - i(E - \lambda_\alpha)]^{\frac{1}{2}}} \Xi'_{N_1}(E), \quad (II.4.8)$$

dove i λ_α sono gli autovalori di \mathbf{H}^{22} , e Ξ' è data da:

$$\Xi'_{N_1}(E) := \int \mathcal{D}\mathbf{u} e^{\frac{i}{2} \mathcal{A}'([\mathbf{u}], E)}, \quad (II.4.1')$$

con:

$$\mathcal{A}'([\mathbf{u}], E) := u_j [(E + i\eta)\delta_{jl} - H'_{jl}] u_l, \quad (II.4.2')$$

e l'Hamiltoniano rinormalizzato \mathbf{H}' si scrive in termini del vecchio come:

$$\mathbf{H}' = \mathbf{H}_{11} - \mathbf{H}_{12} \cdot (\mathbf{H}_{22} - E - i\eta)^{-1} \cdot \mathbf{H}_{21}. \quad (II.4.9).$$

Si noterà immediatamente che la rinormalizzazione dipende dal valore di E .

Proprietà per $E = 0$

Mostriamo ora un'importante proprietà della (II.4.9), valida quando $E + i\eta = 0$. Si supponga che l'Hamiltoniano \mathbf{H} soddisfi alla (II.1.9). Ne segue che anche l'Hamiltoniano \mathbf{H}' le soddisfa.

Per dimostrarlo ci conviene introdurre le seguenti notazioni:

- i, j, k, \dots indicheranno un generico indice;
- a, b, c, \dots indicheranno un indice di tipo 1;
- $\alpha, \beta, \gamma, \dots$ indicheranno un indice di tipo 2.

Inoltre indichiamo con \mathbf{G} la matrice inversa di \mathbf{H} ($G_{ij}H_{jk} = \delta_{ik}$) e con $\tilde{\mathbf{G}}$ la matrice inversa di \mathbf{H}_{22} ($\tilde{G}_{\alpha\beta}H_{\beta\gamma} = \delta_{\alpha\gamma}$).

Con queste notazioni la rinormalizzazione (II.4.9) per $E + i\eta = 0$ si scrive:

$$H'_{ab} = H_{ab} - H_{a\alpha} \tilde{G}_{\alpha\beta} H_{\beta b}. \quad (II.4.9')$$

La condizione (II.1.9) implica che

$$\sum_j H_{a\alpha} \tilde{G}_{\alpha\beta} H_{\beta j} = 0,$$

e quindi che

$$\sum_b H_{a\alpha} \tilde{G}_{\alpha\beta} H_{\beta b} = - \sum_\gamma H_{a\alpha} \tilde{G}_{\alpha\beta} H_{\beta\gamma} = - \sum_\gamma H_{a\alpha} \delta_{\alpha\gamma} = - \sum_\gamma H_{a\gamma}.$$

Applicando quest'ultimo risultato si ha che

$$\sum_b H'_{ab} = \sum_b H_{ab} + \sum_\gamma H_{a\gamma} = \sum_j H_{aj} = 0.$$

Consideriamo ora un caso un po' piú generale. Supponiamo che per $E \cong 0$ si abbia

$$\sum_j H_{ij}(E) = (1 - \epsilon_j)E + O(E^2). \quad (II.4.10)$$

Si mostra con una dimostrazione simile alla precedente che l'Hamiltoniano rinormalizzato gode ancora della proprietà (II.4.10) con

$$\epsilon'_a = \epsilon_a - H_{a\alpha} \tilde{G}_{\alpha\beta} \epsilon_\beta \quad (II.4.11)$$

(dove tutte le grandezze sono valutate per $E = 0$).

La densità integrata degli stati

Per quanto riguarda l'energia libera, abbiamo, in base alla (II.4.4) e alla (II.4.8):

$$\mathcal{F}_N(E) = \frac{N_2}{2} \ln(2\pi) - \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^{N_2} \ln[\eta - i(E - \lambda_\alpha)] + \mathcal{F}'_{N_1}(E), \quad (II.4.12)$$

dove $\mathcal{F}'_{N_1}(E) = \ln \Xi'_{N_1}(E)$.

Quindi, in base alla (II.4.6) e alla (II.4.12), otteniamo per la IDOS:

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_N(E) &= \frac{1}{2} - \frac{N_2}{2N} + \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^{N_2} \theta(E - \lambda_\alpha) + \frac{2}{N\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \Im \mathcal{F}'_{N_1}(E) = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^{N_2} \theta(E - \lambda_\alpha) + \frac{N_1}{N} \mathcal{N}'_{N_1}(E). \end{aligned} \quad (II.4.13)$$

avendo posto

$$\mathcal{N}'_{N_1}(E) = \frac{1}{2} + \frac{2}{N_1\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \Im \mathcal{F}'_{N_1}(E). \quad (II.4.6')$$

A questo punto si può effettuare una nuova partizione tra le variabili su cui si integra per ottenere Ξ' ed operare una nuova decimazione esattamente come sopra. Questa procedura può essere ripetuta fino ad esaurire tutto lo spazio. Per quanto riguarda la IDOS ogni decimazione fornisce un nuovo contributo alla somma di theta.

È opportuno naturalmente scegliere i siti su cui si integra in maniera tale che \mathbf{H}_{22} sia facilmente diagonalizzabile. Un caso particolarmente semplice è quando i siti di tipo 2 sono addirittura isolati, poichè in questo caso \mathbf{H}_{22} è già diagonale e l'unico autovalore (N_2 volte degenere) è V_2 (il potenziale in tali siti). La somma di theta dovuta alla decimazione diventa semplicemente $\frac{N_2}{N} \theta(E - V_2)$.

Le proprietà spettrali

La procedura di decimazione risulta particolarmente utile quando abbiamo a che fare con un reticolo periodico di cella complessa; si decima come descritto sopra fino a ridurre ogni cella ad un solo atomo; il passo successivo consiste nel risolvere l'integrale funzionale residuo, che ora è banale, ottenendo la IDOS di un reticolo periodico (che è una funzione con valori tra 0 e 1) divisa per il numero di atomi contenuti nella cella originale.

Se ad esempio il reticolo è unidimensionale e, anche dopo la decimazione, le interazioni sono a primi vicini, allora lo spettro sarà ancora dato dalla (II.1.15), considerando però t e V come funzioni di E , e potremo scrivere la IDOS come:

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_N(E) &= \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{\bar{n}-1} \sum_{\alpha=1}^{N_2^{(n)}} \theta(E - \lambda_\alpha^{(n)}(E)) + \frac{N_1^{(\bar{n})}}{N} \mathcal{N}_{per}(E), \\ \mathcal{N}_{per}(E) &= \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \Re \arcsin \frac{E - V_{per}(E)}{2|t_{per}(E)|} \end{aligned} \quad (II.4.13')$$

Poiché, secondo quanto appena detto, i valori di E accettabili saranno quelli che soddisfano l'equazione

$$\left| \frac{V_{per}(E) - E}{2|t_{per}(E)|} \right| \leq 1 \quad (II.4.14)$$

(dove $V_{per}(E)$ e $t_{per}(E)$ rappresentano appunto il potenziale e integrale di hopping del sistema periodico che risulta dopo aver decimato su tutta la cella elementare originale), possiamo risolvere graficamente il problema come segue.

Si consideri su di un piano, con l'energia in ascissa, la striscia definita dalle equazioni:

$$y = V_{per}(E) + 2|t_{per}(E)| \quad (II.4.15 - a)$$

$$y = V_{per}(E) - 2|t_{per}(E)| \quad (II.4.15 - b)$$

le intersezioni della striscia con la retta $y = E$ proiettate sull'asse delle ascisse daranno lo spettro del sistema.

Per quanto riguarda la banda piú bassa dello spettro fononico ($\omega^2 \rightarrow 0$), la proprietà (II.1.9) ci dice che la curva (II.4.15-b) parte da $\omega^2 = 0$ e mentre la curva (II.4.15-a) parte da $\omega^2 = 4|t_{per}(E)|$.

Inizialmente, per garantire la (II.1.9), i potenziali dovranno avere segno opposto rispetto agli integrali di hopping (supposti inizialmente tutti con lo stesso segno). Se la decimazione avviene su siti isolati, la (II.4.9) ci dice che per $\omega^2 \rightarrow 0$ il segno degli integrali di hopping resta invariato e quindi anche quello dei potenziali.

La (II.4.11) ci mostra quindi che se $\epsilon > 0$ allora $\epsilon' \geq \epsilon > 0$ e, poiché inizialmente si ha $\epsilon = 1$, si avrà ad ogni passo $\epsilon > 1$.

Ciò implica che la prima banda è determinata dall'intersezione della retta $y = E$ con la (II.4.15-a). Tale banda avrà quindi sempre lo zero come estremo inferiore ed esso non sarà mai un punto isolato.

La formula (II.4.13'), come si è visto, fornisce la IDOS di un sistema periodico unidimensionale con cella complessa. Tale sistema può essere l'approssimante periodico di un quasireticolo.

Al crescere dell'ordine dell'approssimante, il rapporto $\frac{N_1^{(n)}}{N}$ diverrà sempre piú piccolo e, poiché $\mathcal{N}_{per}(E)$ è una funzione limitata, si potrebbe pensare di scrivere la IDOS del

quasireticolò nella forma:

$$\mathcal{N}_N(E) = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\alpha=1}^{N_2^{(n)}} \theta(E - \lambda_{\alpha}^{(n)}(E)).$$

Tale formula è tuttavia sbagliata, come mostra un'analisi della stessa applicata alla catena di Fibonacci. La ragione sta nel fatto che $\mathcal{N}_{per}(E)$ è sí una funzione limitata, ma, poiché in generale ha delle discontinuità a salto, la sua derivata non lo è affatto (contiene dei picchi deltiformi).

Usando l'approccio funzionale possiamo anche ottenere la funzione di Green $G_{ij}(E)$ ($(H_{ij} - E - i\eta)G_{jl}(E) = \delta_{il}$, dove naturalmente si prende $\eta \rightarrow 0^+$) aggiungendo ad \mathcal{A} un termine $2\mathbf{b}^T \cdot \mathbf{u}$ e derivando due volte rispetto al vettore \mathbf{b} posto infine uguale a zero (seguiamo qui la Ref.[AS]). Si ha dunque che:

$$G_{ij}(E) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} i \frac{\partial^2}{\partial b_i \partial b_j} \Big|_{\mathbf{b}=0} \mathcal{F}(\{\mathbf{b}\}, E). \quad (II.4.17)$$

Si verifica che, decimando come sopra, le leggi di ricorsione per H restano invariate, mentre quelle per \mathbf{b} sono:

$$\mathbf{b}' = \mathbf{b}_1 - \mathbf{H}_{12} \cdot (\mathbf{H}_{22} - E - i\eta)^{-1} \cdot \mathbf{b}_2. \quad (II.4.18)$$

Si può ancora verificare che ogni rinormalizzazione porta a G un contributo, che indicheremo con $I^{(n)}$, sicché possiamo scrivere:

$$G_{ij}(E) = \sum_{n=1}^{\infty} I_{ij}^{(n)}(E), \quad (II.4.19 - a)$$

con

$$I_{ij}^{(n)}(E) = - \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial b_i \partial b_j} \Big|_{\mathbf{b}=0} (\mathbf{b}_2^{(n-1)})^T \cdot (\mathbf{H}_{22}^{(n-1)} - E - i\eta)^{-1} \cdot \mathbf{b}_2^{(n-1)}. \quad (II.4.19 - b)$$

Si noti che $\mathbf{b}_2^{(n-1)}$ e $\mathbf{H}_{22}^{(n-1)}$ dipendono sia da E sia da \mathbf{b} ed è rispetto a queste ultime variabili che va fatta la derivazione. Tuttavia la linearità della (II.4.18), ci dice che esisterà un operatore $\mathbf{X}^{(n)}$ tale che:

$$\mathbf{b}_2^{(n)}(E) = \mathbf{X}^{(n)}(E) \cdot \mathbf{b}, \quad (II.4.18')$$

e quindi la (II.4.19-b) si riduce a:

$$I^{(n)}(E) = -(\mathbf{X}^{(n-1)}(E))^T \cdot (\mathbf{H}_{22}^{(n-1)}(E) - E)^{-1} \cdot \mathbf{X}^{(n-1)}(E). \quad (II.4.19')$$

L'approccio proiettivo

La rinormalizzazione dell'Hamiltoniano (II.4.9) può essere ottenuta più semplicemente considerando la proiezione dell'equazione di Schrödinger

$$E\Psi = H\Psi \quad (II.4.20)$$

sui due sottospazi ortogonali \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 .

Siano P_1 e P_2 i proiettori relativi a tali sottospazi (si noti che quindi $P_1 + P_2 = 1$) e si indichi con Ψ_1 la funzione d'onda ristretta ad \mathcal{H}_1 ($\Psi_1 = P_1\Psi$) e con Ψ_2 la funzione d'onda ristretta ad \mathcal{H}_2 ($\Psi_2 = P_2\Psi$).

La (II.4.20) viene quindi riscritta come:

$$E\Psi_1 = P_1HP_1\Psi_1 + P_1HP_2\Psi_2, \quad (II.4.21 - a)$$

$$E\Psi_2 = P_2HP_1\Psi_1 + P_2HP_2\Psi_2. \quad (II.4.21 - b)$$

La (II.4.21-b) può essere risolta rispetto a Ψ_2 dando

$$\Psi_2 = -(P_2HP_2 - E)^{-1}P_2HP_1\Psi_1, \quad (II.4.22)$$

che sostituita nella (II.4.21-a) fornisce

$$E\Psi_1 = [P_1HP_1 - P_1HP_2(P_2HP_2 - E)^{-1}P_2HP_1]\Psi_1. \quad (II.4.23)$$

Il termine tra parentesi quadra costituisce un Hamiltoniano efficace per il sistema decimato e corrisponde esattamente a quello fornito dalla (II.4.9).

Questo approccio non fornisce direttamente la rinormalizzazione dell'IDOS, ma in compenso, con la (II.4.22), ci dice come riscala la funzione d'onda.

CAPITOLO III

§III.1-IL QUASIRETICOLO DI FIBONACCI E LA TRACE MAP

La matrice di trasferimento

Il quasireticolo di Fibonacci, come abbiamo visto nel Cap. I, è generato dalle regole d'inflazione

$$\begin{aligned} A &\longrightarrow AB \\ B &\longrightarrow A, \end{aligned} \tag{III.1.1}$$

che indicheremo con w . La catena finita $T_n = w(T_{n-1}) = w^n(B)$ (cfr. (I.1.14)) gode, in questo caso, della proprietà

$$T_{n+1} = T_n * T_{n-1}, \tag{III.1.2}$$

come è immediato verificare per induzione. Per comodità riportiamo qui di seguito i primi termini della successione $\{T_n\}$:

$$\begin{aligned} T_0 &= B, \\ T_1 &= A, \\ T_2 &= AB, \\ T_3 &= ABA, \\ T_4 &= ABAAB, \\ T_5 &= ABAABABA, \\ T_6 &= ABAABABAABAAB, \\ &\dots \end{aligned}$$

Per studiare lo spettro della catena P_n (ripetizione periodica di T_n) col metodo della matrice di trasferimento si procede come nel §II.3. Notando che T_n consta di F_n siti, come segue dalla (III.1.2), possiamo riscrivere la (II.3.1) come:

$$\underline{\psi}_{i+F_n} = A^{(n)} \cdot \underline{\psi}_i, \tag{III.1.3}$$

e, sempre per la (III.1.2), le matrici $A^{(l)}$ soddisfano alla ricorsione:

$$A^{(l+1)} = A^{(l)} \cdot A^{(l-1)}. \tag{III.1.4}$$

La trace map^{[Cas],[KB],[KKT],[KO]}

Dall'equazione (III.1.4), che ci dà un regola di ricorsione per le matrici di trasferimento, si può ricavare una relazione di ricorsione per le tracce (*trace map*). Per farlo dobbiamo prima ricavare dalla (III.1.4) la relazione:

$$(A^{(l-2)})^{-1} = (A^{(l)})^{-1} \cdot A^{(l-1)},$$

che sommata alla (III.1.4) stessa dà:

$$A^{(l+1)} + (A^{(l-2)})^{-1} = [A^{(l)} + (A^{(l)})^{-1}] \cdot A^{(l-1)}. \quad (III.1.4')$$

È opportuno a questo punto ricordare che abbiamo a che fare con matrici due per due unimodulari. Queste godono delle seguenti proprietà. Siano X e Y due generiche matrici due per due unimodulari; allora:

$$\text{Tr}X^{-1} = \text{Tr}X,$$

$$\text{Tr}(X + X^{-1}) \cdot Y = \text{Tr}X + \text{Tr}Y.$$

Prendendo la traccia della (III.1.4') ed usufruendo di queste proprietà, otteniamo, indicando con x_l la traccia di $A^{(l)}$ divisa per due, l'equazione di ricorsione:

$$x_{l+1} = 2x_l x_{l-1} - x_{l-2}, \quad (III.1.5)$$

che corrisponde alla (II.3.2), mentre la condizione di appartenenza di E allo spettro di P_n si scrive:

$$|x_n| \leq 1. \quad (III.1.6)$$

Come si può facilmente verificare, l'equazione (III.1.5) ammette la quantità invariante

$$\gamma^2 := x_l^2 + x_{l-1}^2 + x_{l-2}^2 - 2x_l x_{l-1} x_{l-2} - 1, \quad (III.1.7)$$

che corrisponde alla (II.3.3).

La (III.1.5) può essere vista come una mappa dinamica in \mathbf{R}^3 . Infatti, se introduciamo la funzione

$$f(x, y, z) = (2xy - z, x, y), \quad (III.1.5' - a)$$

e poniamo $\mathbf{x} = (x'', x', x)$, allora la (III.1.5) equivale alla mappa:

$$\mathbf{x}' = \mathbf{f}(\mathbf{x}). \quad (\text{III.1.5}' - b)$$

La (III.1.7) ci dice che il moto si svolge anziché in tutto \mathbf{R}^3 limitatamente alla superficie:

$$\gamma^2 = x^2 + y^2 + z^2 - 2xyz - 1. \quad (\text{III.1.7}')$$

Tale superficie è costituita, per $\gamma^2 > 0$, da un corpo centrale limitato da cui si dipartono quattro braccia che vanno all'infinito (v.fig.11). Se γ^2 è uguale a zero, ogni braccio resta attaccato al corpo centrale per un solo punto. Se γ^2 diventa negativo, le braccia si distaccano completamente e la superficie diviene sconnessa.

Lo studio dello spettro del sistema equivale alla ricerca di quei valori dell'energia che corrispondono a condizioni iniziali della (III.1.5) tali che l'iterata n -esima della mappa si trovi sul corpo centrale. Se $\gamma^2 \leq 0$ ciò accade se e solo se le condizioni iniziali si trovano già su di esso, mentre se $\gamma^2 > 0$ è necessario seguire l'evoluzione del punto rappresentativo.

In particolare si può mostrare che, per quasi ogni condizione iniziale della mappa (III.1.5), il punto rappresentativo va all'infinito per $n \rightarrow \infty$. Ciò significa che la misura di Lebesgue dello spettro del quasireticolato è uguale a zero.

La mappa (III.1.5) ammette anche dei cicli di tipo iperbolico (ovvero dei punti fissi della funzione \mathbf{f} iterata un certo numero di volte che sono attrattivi in una certa direzione e repulsivi in un'altra)^{[Cas],[KO]}.

Se le condizioni iniziali appartengono ad un ciclo limitato di ordine p , siamo sicuri che x_n non va all'infinito al crescere di n ed anzi per certi valori di n (definiti mod p) si avrà $|x_n| \leq 1$ che implica che l'energia associata a tali condizioni iniziali appartiene allo spettro di P_n .

Se variamo di poco l'energia e quindi le condizioni iniziali, per n sufficientemente piccolo resteremo vicini al ciclo tanto da garantire l'appartenenza di tale energia allo spettro. Questa è la genesi delle bande. Al crescere di n ci allontaneremo dal ciclo con una "velocità" che dipende dall'autovalore maggiore di uno della linearizzazione di \mathbf{f}^p . La banda si "restringerà" con la stessa velocità.

È possibile definire un esponente critico per ogni banda che ci dice come essa decresce; esso dipenderà dal ciclo associato a tale banda. Si noti che i cicli e quindi il modo di riscalarare delle bande dipendono dal parametro marginale γ^2 ; quindi per sistemi diversi avremo proprietà spettrali diverse. La conservazione di γ^2 significa assenza di universalità.

Problemi sul quasireticolato di Fibonacci

È opportuno ora considerare che faccia abbiano le condizioni iniziali a seconda che si consideri la quasiperiodicità sui potenziali o sugli integrali di hopping.

Nel primo caso^[KKT] (detti i potenziali V_1 e V_0 e presi gli integrali di hopping uguali a uno), dall'equazione (II.3.4), si vede che come condizioni iniziali della (III.1.5) si ha:

$$\begin{aligned}x_1 &= \frac{1}{2}(E - V_1), \\x_0 &= \frac{1}{2}(E - V_0), \\x_{-1} &= 1,\end{aligned}\tag{III.1.8}$$

da cui segue $\gamma^2 = \frac{1}{4}(V_1 - V_0)^2$

Nel secondo caso^[KB] (indicando gli integrali di hopping come $-J_A$ e $-J_B$ e prendendo i potenziali uguali a zero), per la (II.3.8) si ha:

$$\begin{aligned}x_1 &= -\frac{E}{2J_A}, \\x_0 &= -\frac{E}{2J_B}, \\x_{-1} &= \frac{J_A^2 + J_B^2}{2J_A J_B},\end{aligned}\tag{III.1.9}$$

da cui segue $\gamma^2 = \frac{1}{4}\left(\frac{J_A}{J_B} - \frac{J_B}{J_A}\right)^2$.

Si noti che in ambo i casi si ha $\gamma^2 = 0$ solo quando viene meno la quasiperiodicità ($V_1 = V_0$ nel primo caso, $J_A = J_B$ nel secondo). In tale situazione si ha una sola banda in corrispondenza di quelle energie che rendono $|x_1| \leq 1$, cioè $|E| \leq |2J_A|$.

Se c'è quasiperiodicità, anche minima, si ha $\gamma^2 > 0$. Per quanto detto sopra le bande tenderanno a svanire nel limite $n \rightarrow \infty$. La misura m globale dello spettro andrà zero al crescere di n come:

$$m \sim F_n^{-\delta(\gamma^2)},\tag{III.1.10}$$

dove l'esponente critico δ dipende dal parametro marginale γ^2 come è mostrato in fig.12. Si può dimostrare^[KT] che asintoticamente

$$\delta \underset{\gamma \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{2} \ln 2\gamma. \quad (III.1.11)$$

Nel caso fononico^[KB] bisogna sostituire E con ω^2 e scegliere i potenziali in modo che la (II.1.9) sia soddisfatta. Indicando gli integrali di hopping con $-J_A$ e $-J_B$, si può mostrare che le condizioni iniziali appropriate per la trace map sono:

$$\begin{aligned} x_1 &= 1 - \frac{\omega^2}{2J_A}, \\ x_0 &= 1 - \frac{\omega^2}{2J_B}, \\ x_{-1} &= 1, \end{aligned} \quad (III.1.12)$$

da cui segue $\gamma^2 = \frac{\omega^4}{4} \left(\frac{1}{J_A} - \frac{1}{J_B} \right)^2$.

Anche in questo caso γ^2 si annulla in assenza di quasiperiodicità e $|x_1| \leq 1$ implica che ω^2 dev'essere minore o uguale a $4J_A$.

Se c'è quasiperiodicità, allora γ^2 è maggiore di zero e dipende da ω . Ciò significa che lo scaling dello spettro è più accentuato nella parte alta (dove γ^2 è più grande), e più ridotto nella parte bassa (v.fig.13). Per $\omega^2 \rightarrow 0$, γ^2 tende addirittura ad annullarsi, il che significa che ivi lo scaling è quello relativo ad un sistema periodico; ovvero, detta m_0 la misura della prima banda dello spettro fononico, asintoticamente si ha

$$m_0 \sim F_n^{-1}. \quad (III.1.13)$$

Come si vede per condizioni iniziali di interesse fisico non si ha $\gamma^2 < 0$ che implicherebbe, avendo anche $|x_1| \leq 1$, l'esistenza di una banda che non riscalda e quindi la possibilità di uno spettro con misura di Lebesgue finita (si noti che per sistemi quasiperiodici bidimensionali ciò può accadere).

Si mostra inoltre che non esistono, nei sistemi considerati, dei punti isolati dello spettro.

§III.2-IL QUASIRETICOLO DI FIBONACCI E LA TEORIA PERTURBATIVA

Vogliamo accennare in questo paragrafo come l'applicazione della teoria perturbativa dei livelli degeneri ai problemi di hopping sulla catena di Fibonacci porti ad una rinormalizzazione dei parametri e permetta di evidenziare la struttura gerarchica dello spettro^[NN].

Supponiamo di avere a che fare con un problema elettronico di hopping (cioè senza potenziali) con $J_A \ll J_B$. In prima approssimazione possiamo porre $J_A = 0$. Il sistema consiste allora in atomi isolati ($E = 0$) o molecole biatomiche ($E = \pm J_B$). Ciascuno di questi tre livelli è altamente degenere e la presenza di J_A rimuove tale degenerazione.

Consideriamo dapprima il caso $E = 0$. Gli stati imperturbati - atomi isolati, come abbiamo visto - per la presenza di J_A risulteranno interagire tra loro. Si può mostrare che due atomi separati da una molecola sono connessi da un integrale di hopping efficace dato da $-\frac{J_A^2}{J_B}$, quelli separati da due molecole sono invece connessi da un integrale di hopping efficace dato da $\frac{J_A^3}{J_B^2}$.

Nel caso $E = J_B$, gli stati imperturbati, che abbiamo visto essere molecole biatomiche, interagiranno tra loro con un integrale di hopping efficace uguale a $\frac{J_A}{2}$, se sono vicini, uguale a $\frac{J_A^2}{2J_B}$ se sono separati da un sito atomico.

Analogamente nel caso $E = -J_B$ si trovano degli integrali di hopping efficaci pari a $-\frac{J_A}{2}$ e $\frac{J_A^2}{2J_B}$.

L'autosimilarità del quasireticolo di Fibonacci fa sì che questi parametri efficaci risultino ordinati con la stessa sequenza quasiperiodica degli originali. Si può quindi procedere come sopra, trascurando quell'integrale di hopping che risulta molto minore dell'altro ed avendo così a che fare con unità isolate (superatomi) o connesse a coppie (supermolecole). Ciascuno dei tre livelli ottenuti precedentemente si divide così in tre sottolivelli.

Per ciascuno di questi sottolivelli si ripete la procedura descritta e così via per ciascuno dei sottolivelli che si generano. Lo spettro è quindi costituito da tre cluster principali, ognuno dei quali si divide in tre sottocluster e così via.

Il caso $J_B \ll J_A$ si tratta ponendo in primo luogo $J_B = 0$ ottenendo così cinque livelli altamente degeneri. La presenza di J_B dà quindi luogo a delle interazioni efficaci tra gli

stati imperturbati, che in questo caso sono molecole bi- e triatomiche. Si mostra tuttavia che queste interazioni sono arrangiate nell'ordine del caso precedente cosicché lo spettro è costituito da cinque cluster principali ognuno dei quali si divide in tre sottocluster e ad ogni passo si ha una triforcazione degli stessi.

Il caso in cui gli integrali di salto sono tutti uguali a J e i potenziali (V_1 e V_0) sono arrangiati in maniera quasiperiodica può essere trattato allo stesso modo se vale la condizione $\left| \frac{J}{V_1 - V_0} \right| \ll 1$.

Ponendo $J = 0$ il sistema consta di soli atomi isolati e lo spettro ha due soli livelli. Il calcolo dei parametri efficaci mostra come anche in questo caso ci si riconduca al primo caso considerato. Lo spettro è quindi costituito da due cluster principali, ciascuno dei quali si divide in tre sottocluster e così via.

Il metodo qui descritto permette anche di ottenere informazioni sulla struttura delle funzioni d'onda. Inoltre è stato generalizzato^[Lev3] ad un generico quasireticolo unidimensionale ricorrendo alla rappresentazione in frazioni continue dell'irrazionale associato. In generale si mostra che lo spettro ha una struttura gerarchica analoga a quella qui presentata.

§III.3— IL QUASIRETICOLO DI FIBONACCI E LA DECIMAZIONE

Proprietà della catena di Fibonacci

Vogliamo ora applicare^{[ALS],[AS]} il procedimento descritto nel §II.4 alla catena di Fibonacci. È opportuno scegliere i siti su cui decimare in conformità alla regola d'inflazione (III.), che ci indica a questo scopo i siti preceduti da un link di tipo A e seguiti da uno di tipo B . Dopo la decimazione l'intero gruppo AB , privato del sito intermedio, sarà considerato come un unico link di tipo A ; un link di tipo A non seguito da link di tipo B avrà invece agli estremi dei siti su cui non si decima e resterà dunque invariato dopo la decimazione anche se dovrà, in seguito ad essa, essere considerato come un link di tipo B (v.fig.14).

Per comodità è opportuno dare dei nomi non solo ai link ma anche ai siti. Prima di

fare questo ci sembra tuttavia opportuno dare alcune proprietà della catena di Fibonacci che si ricavano in maniera immediata dalla (III.1.1).

- I) per $n > 0$ non è possibile che in P_n vi siano due link B consecutivi
- II) per $n > 1$ non è possibile che in P_n vi siano tre link A consecutivi
- III) per $n > 2$ non è possibile che in P_n vi siano tre gruppi AB consecutivi
- IV) per $n > 2$ non è possibile che in P_n vi siano tre gruppi BA consecutivi.

Dimostrazione

I) La regola d'inflazione (III.1.1) produce sempre link di tipo B preceduti da link di tipo A e quindi un gruppo BB non è possibile, salvo che in P_0 che, per definizione, è dato da $\dots BBB \dots$

II) Secondo la (III.1.1) i primi due link A di un gruppo AAA devono necessariamente derivare ciascuno da un link di tipo B . Quindi se in P_n abbiamo un gruppo AAA ne segue che in P_{n-1} abbiamo un gruppo di tipo BB che per $n > 1$ non è possibile secondo la I).

III) Ogni gruppo AB deriva per la (III.1.1) da un link A . Avere un gruppo $ABABAB$ in P_n significa quindi avere un gruppo AAA in P_{n-1} il che, secondo la II), non è possibile per $n > 2$.

IV) Prima di un link di tipo B dobbiamo avere un link di tipo A . Quindi un gruppo $BABABA$ è in realtà un gruppo $ABABABA$ che per la III) non può esistere.

Il modo piú semplice per denominare i siti consiste nel far riferimento ai soli link che li precedono e li seguono. Poiché, secondo la I), non esistono gruppi BB , dovremo dare un nome solo ai siti corrispondenti ai gruppi AA , AB , BA . Chiameremo i primi siti α , i secondi siti β ed i terzi siti γ .

$$A^\alpha A, \quad A^\beta B, \quad B^\gamma A.$$

Secondo quanto detto in precedenza i siti su cui bisogna decimare, rispettando la (III.1.1), sono quelli di tipo β .

Vi è anche una classificazione piú precisa dei siti che ci farà comodo in seguito. Conviene cioè distinguere i siti β a seconda che essi appartengano a gruppi AB isolati (parleremo allora di siti β_1) o a gruppi $ABAB$ (il primo sito β sarà detto β_2 ed il secondo β_3).

Per la III) non esistono altre possibilità.

In maniera analoga distingueremo tra siti $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$. Avremo dunque:

$$A^\alpha A, AA^{\beta_1} BAA, A^{\beta_2} BA^{\beta_3} B, AAB^{\gamma_1} AA, B^{\gamma_2} AB^{\gamma_3} A.$$

Conteggio dei link e dei siti

Sappiamo che T_n contiene F_n link e F_n siti (d'ora in avanti intenderemo sempre T_n con condizioni di periodicità; per esempio $T_3 = ABA$ ha 3 link, di cui due A ed un B , e 3 siti, un β , un γ ed un α). Vogliamo ora calcolare quanti link e quanti siti di ogni tipo esso contiene.

Cominciamo con i link. Poiché ogni link di tipo B , secondo la (III.1.1), è originato da un link di tipo A , la cardinalità dei link B in T_{n+1} sarà uguale alla cardinalità dei link A in T_n ; in simboli:

$$(\#B)_{n+1} = (\#A)_n. \quad (III.3.1 - a)$$

I link di tipo A sono invece originati, sempre secondo la (III.), sia dai link A che dai link B e quindi si ha:

$$(\#A)_{n+1} = (\#A)_n + (\#B)_n. \quad (III.3.1 - b)$$

Dalle due equazioni (III.3.1) possiamo ottenere un'unica equazione per $(\#A)$:

$$(\#A)_{n+1} = (\#A)_n + (\#A)_{n-1}, \quad (III.3.2)$$

che è l'equazione che definisce i numeri di Fibonacci. Poiché le condizioni iniziali sono $(\#A)_2 = (\#A)_1 = 1$, per la (I.1.12) avremo:

$$(\#A)_n = F_{n-1}, \quad (III.3.3 - a)$$

da cui per la (III.3.1-a) segue:

$$(\#B)_n = F_{n-2} \quad (III.3.3 - b)$$

(si noti che $(\#A)_n + (\#B)_n = F_n$, come abbiamo già detto).

Veniamo ora al conteggio dei siti. Si noti che un gruppo $ABAB$ deriva sempre da un gruppo AA ; ne segue che:

$$(\#\beta_2)_{n+1} = (\#\beta_3)_{n+1} = (\#\gamma_2)_{n+1} = (\#\gamma_3)_{n+1} = (\#\alpha)_n. \quad (III.3.4 - a)$$

I gruppi AB isolati derivano necessariamente da link A isolati, ovvero appartenenti ad un gruppo BAB ; ne segue che:

$$(\#\beta_1)_{n+1} = (\#\gamma_1)_{n+1} = (\#\beta_2)_n. \quad (III.3.4 - b)$$

Infine notiamo che i gruppi AA derivano da gruppi BA e quindi:

$$(\#\alpha)_{n+1} = (\#\gamma_1)_n + (\#\gamma_2)_n + (\#\gamma_3)_n. \quad (III.3.4 - c)$$

Dalle equazioni (III.3.4) possiamo dedurre un'equazione chiusa per $(\#\alpha)$:

$$(\#\alpha)_{n+1} = 2(\#\alpha)_{n-1} + (\#\alpha)_{n-2}, \quad (III.3.5)$$

che è soddisfatta, come è immediato verificare, dai numeri di Fibonacci. Poiché le condizioni iniziali sono $(\#\alpha)_3 = (\#\alpha)_4 = 1$ e $(\#\alpha)_5 = 2$, ne segue che gli $(\#\alpha)_n$ sono dati proprio da numeri di Fibonacci; precisamente:

$$(\#\alpha)_n = F_{n-3}. \quad (III.3.6 - a)$$

Dalla (III.3.6-a) e dalle (III.3.4-a) e (III.3.4-b), si ricava:

$$(\#\beta_2)_n = (\#\beta_3)_n = (\#\gamma_2)_n = (\#\gamma_3)_n = F_{n-4} \quad (III.3.6 - b)$$

$$(\#\beta_1)_n = (\#\gamma_1)_n = F_{n-5} \quad (III.3.6 - c)$$

Complessivamente per i siti β e γ abbiamo:

$$(\#\beta)_n = (\#\gamma)_n = F_{n-2} \quad (III.3.7)$$

(si noti che dalla (III.3.6-a) e dalla (III.3.7) si ricava che il numero complessivo di siti in T_n è proprio dato da F_n).

Il problema di hopping sul quasireticolo di Fibonacci

Possiamo ora passare alla risoluzione di un problema definito da un Hamiltoniano di hopping su P_n usando il formalismo del §II.4.

Indicheremo gli integrali di hopping relativi a link di tipo A (B) con J_A (J_B), e supporremo per ora di avere solo interazioni a primi vicini.

Indicheremo i potenziali sui siti α (β, γ) come L_α (L_β, L_γ) e supporremo di non dover distinguere tra i vari tipi di siti β e γ .

Vediamo ora come, con queste notazioni, sia possibile descrivere i problemi che abbiamo già trattato col metodo della trace map.

Il problema elettronico con la quasiperiodicità sui potenziali si ottiene prendendo:

$$\begin{aligned} L_\alpha &= L_\gamma = V_1, \\ L_\beta &= V_0, \\ J_A &= J_B = 1 \end{aligned} \tag{III.3.8 - a}$$

(una scelta equivalente sarebbe $L_\alpha = L_\beta = V_1$ e $L_\gamma = V_0$).

Il caso elettronico con la quasiperiodicità sugli hopping si ottiene prendendo gli L tutti uguali a zero e J_A e J_B diversi l'uno dall'altro.

Infine il caso fononico si tratta, fissati J_A e J_B , imponendo il vincolo (II.1.9), ovvero prendendo:

$$\begin{aligned} L_\alpha &= 2J_A, \\ L_\beta &= L_\gamma = J_A + J_B. \end{aligned} \tag{III.3.8 - b}$$

Naturalmente anche altre scelte dei parametri iniziali sono ammissibili.

La decimazione

Applichiamo finalmente il formalismo del §II.4 ad un sistema con interazioni a primi vicini definito su P_N .

Prima di tutto notiamo che, se le interazioni sono solo a primi vicini, i siti β , su cui decimiamo, sono isolati gli uni dagli altri; ne segue che la matrice \mathbf{H}_{22} è uguale a $L_\beta \mathbf{1}_{22}$ (dove $\mathbf{1}_{22}$ è la matrice identità ristretta ad \mathcal{H}_2).

La matrice $(\mathbf{H}_{22} - E - i\eta)^{-1}$ è quindi data da $\frac{1}{L_\beta - E - i\eta} \mathbf{1}_{22}$ e possiamo quindi esplicitare la rinormalizzazione (II.4.9) come:

$$L'_\alpha = L_\gamma - \frac{J_A^2 + J_B^2}{L_\beta - E}, \tag{III.3.9 - a}$$

$$L'_\beta = L_\gamma - \frac{J_B^2}{L_\beta - E}, \tag{III.3.9 - b}$$

$$L'_\gamma = L_\alpha - \frac{J_A^2}{L_\beta - E}, \quad (III.3.9 - c)$$

$$J'_A = \frac{J_A J_B}{L_\beta - E}, \quad (III.3.9 - d)$$

$$J'_B = J_A \quad (III.3.9 - e)$$

dove per comodità abbiamo trascurato il termine η (si può anche pensare a E come un numero complesso con parte immaginaria positiva infinitesima).

Ricordando che $\mathbf{H}_{22}^{(n)}(E)$ ha come autovalore $L_\beta^{(n)}(E)$ con degenerazione pari a F_{N-n-2} (cfr. III.3.7) e che dopo $N-1$ decimazioni il nostro reticolo si riduce a $P_1 (\dots AAA \dots)$, possiamo riscrivere la (II.4.11') come:

$$\mathcal{N}_{F_N}(E) = \frac{1}{2F_N} + \sum_{n=0}^{N-2} \frac{F_{N-n-2}}{F_N} \theta(E - L_\beta^{(n)}(E)) + \frac{1}{\pi F_N} \Re \arcsin \frac{E - L_\alpha^{(N-1)}(E)}{2 |J_A^{(N-1)}(E)|}. \quad (III.3.10)$$

Per ottenere i valori di E appartenenti allo spettro di P_N , dobbiamo invece risolvere, come spiegato nel §II.4, la disequazione:

$$\left| \frac{E - L_\alpha^{(N-1)}(E)}{2 |J_A^{(N-1)}(E)|} \right| \leq 1, \quad (III.3.11)$$

ottenendo così lo spettro a bande del sistema.

Relazione con la trace map

Vogliamo ora mostrare come questo formalismo, quando ci si limiti a chiedere l'appartenenza o meno di un valore di E allo spettro, conduca esattamente alla trace map.

Si consideri infatti un problema su P_{l+1} . Abbiamo visto che decimando l volte ci si riconduce ad un problema su di una catena periodica con un potenziale $L_\alpha^{(l)}(E)$ ed un integrale di hopping pari a $J_A^{(l)}(E)$. La matrice di trasferimento di tale problema si scrive dunque:

$$X(E) = \begin{pmatrix} \frac{L_\alpha^{(l)}(E) - E}{J_A^{(l)}(E)} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (III.3.12)$$

Anche se questa matrice non corrisponde alla $A^{(l+1)}$ introdotta nel §III.1, tuttavia esse dovranno essere legate da una trasformazione unitaria e quindi le loro tracce dovranno coincidere. Si ha dunque che

$$x_{l+1} = \frac{L_\alpha^{(l)} - E}{2J_A^{(l)}}. \quad (III.3.13)$$

È anche possibile verificare direttamente che tale grandezza soddisfa l'equazione (III.1.5).

Infatti applicando le relazioni (III.3.9), è immediato ottenere le seguenti:

$$\begin{aligned} x_{l+2} &= \frac{(L_\beta^{(l)} - E)(L_\gamma^{(l)} - E) - (J_A^{(l)})^2 - (J_B^{(l)})^2}{2J_A^{(l)}J_B^{(l)}}, \\ x_{l+3} &= \{(L_\beta^{(l)} - E)[(L_\gamma^{(l)} - E)(L_\alpha^{(l)} - E) - (J_A^{(l)})^2] + \\ &\quad - [(J_A^{(l)})^2(L_\gamma^{(l)} - E) + (J_B^{(l)})^2(L_\alpha^{(l)} - E)]\}/2(J_A^{(l)})^2J_B^{(l)}, \\ x_{l+4} &= \{(L_\beta^{(l)} - E)^2[(L_\alpha^{(l)} - E)(L_\gamma^{(l)} - E)^2 - (J_A^{(l)})^2(L_\gamma^{(l)} - E)] + \\ &\quad + (L_\beta^{(l)} - E)[(J_A^{(l)})^4 + (J_A^{(l)}J_B^{(l)})^2 - ((J_A^{(l)})^2 + 2(J_B^{(l)})^2)(L_\alpha^{(l)} - E)(L_\gamma^{(l)} - E) + \\ &\quad - (J_A^{(l)}(L_\gamma^{(l)} - E))^2] + (J_A^{(l)})^4(L_\gamma^{(l)} - E) + (J_B^{(l)})^4(L_\alpha^{(l)} - E) + \\ &\quad + (J_A^{(l)}J_B^{(l)})^2(L_\gamma^{(l)} - E)\}/2(J_A^{(l)})^3(J_B^{(l)})^2, \end{aligned}$$

dalle quali è possibile ricavare che:

$$x_{l+4} = 2x_{l+3}x_{l+2} - x_{l+1},$$

che corrisponde esattamente alla (III.1.5).

Inoltre la condizione (III.3.11) di appartenenza di E allo spettro di P_n si può riscrivere come:

$$|x_n| \leq 1,$$

che è la (III.1.6)

Passiamo ora a determinare le condizioni iniziali di questa mappa, in funzione dei parametri L e J e dell'energia E . Secondo (III.3.13), abbiamo che

$$x_1 = \frac{L_\alpha - E}{2J_A}. \quad (III.3.14 - a)$$

Possiamo quindi calcolarci x_2 e x_3 e, ricorrendo alla (III.1.5), ottenere da x_3 , x_2 e x_1 il valore di x_0 :

$$x_0 = \frac{L_\beta + L_\gamma - L_\alpha - E}{2J_B}. \quad (III.3.14 - b)$$

Quindi da x_2 , x_1 e x_0 otteniamo, sempre grazie alla (III.1.5), che

$$x_{-1} = \frac{(L_\alpha - L_\gamma)(L_\beta - L_\alpha) + J_A^2 + J_B^2}{2J_A J_B}. \quad (III.3.14 - c)$$

Scegliendo gli appropriati valori dei parametri L e J , le (III.3.14) conducono esattamente alle stesse condizioni iniziali trattate nel §III.1.

§III.4—IL PROBLEMA FONONICO PER $\omega^2 \rightarrow 0$

La rinormalizzazione in $\omega^2 = 0$

Vogliamo far vedere come la proprietà (III.1.13) dello spettro fononico possa essere dimostrata in dettaglio usando la procedura di decimazione.

In primo luogo notiamo che, per quanto mostrato nel §II.4, in $\omega^2 = 0$ si ha:

$$L_\alpha^{(n)} = 2J_A^{(n)}, \quad (III.4.1 - a)$$

$$L_\beta^{(n)} = L_\gamma^{(n)} = J_A^{(n)} + J_B^{(n)}, \quad (III.4.1 - b)$$

per ogni n .

Ne segue, per le (III.3.9-d), (III.3.9-e) e (III.3.9-b), che la rinormalizzazione di J_A , è data da:

$$J_A'' = \frac{J_A' J_A}{J_A' + J_A}; \quad (III.4.2)$$

e poiché le condizioni iniziali per J_A sono

$$J_A^{(0)} = J_A, \quad (III.4.3 - a)$$

$$J_A^{(-1)} = J_B, \quad (III.4.3 - b)$$

si trova che:

$$J_A^{(n)} = \frac{J_A J_B}{F_{n-1} J_A + F_n J_B}, \quad (III.4.4)$$

come si può facilmente dimostrare per induzione.

Asintoticamente la (III.4.4) si riduce a

$$J_A^{(n)} \underset{n \rightarrow \infty}{\sim} \frac{C}{F_n}, \quad (III.4.4')$$

con

$$C = \frac{\sigma J_A J_B}{J_A + \sigma J_B}. \quad (III.4.5)$$

È conveniente introdurre anche la grandezza

$$R_n := \frac{J_A^{(n)}}{J_A^{(n-1)}}, \quad (III.4.6)$$

che per la (III.4.2) soddisfa alla legge di ricorsione

$$R_{n+1} = \frac{1}{1 + R_n}, \quad (III.4.7)$$

ed ha come condizione iniziale

$$R_0 = \frac{J_A}{J_B}. \quad (III.4.8)$$

Usando la (III.4.7) e la definizione (III.4.6), si può dare la forma esplicita di R_n ; tuttavia ciò che ci servirà nel seguito è solo il valor limite:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} R_n = \sigma^{-1}, \quad (III.4.9)$$

che si ricava immediatamente dalla (III.4.4').

La rinormalizzazione per $\omega^2 \rightarrow 0$

Secondo la notazione introdotta nel paragrafo §II.4, scriviamo i potenziali per $\omega^2 \rightarrow 0$ nella forma:

$$L_\alpha^{(n)}(\omega^2) = 2J_A^{(n)}(\omega^2) + (1 - \epsilon_\alpha^{(n)})\omega^2 + O(\omega^4), \quad (III.4.10 - a)$$

$$L_\beta^{(n)}(\omega^2) = J_A^{(n)}(\omega^2) + J_B^{(n)}(\omega^2) + (1 - \epsilon_\beta^{(n)})\omega^2 + O(\omega^4), \quad (III.4.10 - b)$$

$$L_\gamma^{(n)}(\omega^2) = J_A^{(n)}(\omega^2) + J_B^{(n)}(\omega^2) + (1 - \epsilon_\gamma^{(n)})\omega^2 + O(\omega^4), \quad (III.4.10 - c)$$

e, secondo la (II.4.11), i parametri ϵ seguono la legge di ricorsione:

$$\epsilon_{\alpha}^{(n+1)} = \epsilon_{\gamma}^{(n)} + \epsilon_{\beta}^{(n)}, \quad (III.4.11 - a)$$

$$\epsilon_{\beta}^{(n+1)} = \epsilon_{\gamma}^{(n)} + R_{n+1} \epsilon_{\beta}^{(n)}, \quad (III.4.11 - b)$$

$$\epsilon_{\gamma}^{(n+1)} = \epsilon_{\alpha}^{(n)} + (1 - R_{n+1}) \epsilon_{\beta}^{(n)} \quad (III.4.11 - c)$$

(dove abbiamo anche sfruttato la formula (III.4.2) e la definizione (III.4.6)).

Le condizioni iniziali sono date semplicemente da:

$$\epsilon_{\alpha}^{(0)} = \epsilon_{\beta}^{(0)} = \epsilon_{\gamma}^{(0)} = 1. \quad (III.4.12)$$

Dalle (III.4.11) si può ricavare per il parametro ϵ_{α} la legge di ricorsione

$$\epsilon_{\alpha}^{(n+2)} = \epsilon_{\alpha}^{(n+1)} + \epsilon_{\alpha}^{(n)}, \quad (III.4.13)$$

che, unitamente alle condizioni iniziali

$$\epsilon_{\alpha}^{(0)} = 1, \quad (III.4.14 - a)$$

$$\epsilon_{\alpha}^{(1)} = 2, \quad (III.4.14 - b)$$

fornisce il risultato:

$$\epsilon_{\alpha}^{(n)} = F_{n+1}. \quad (III.4.15)$$

Facendo uso di questo risultato e delle (III.4.11), possiamo ottenere la seguente equazione per il parametro ϵ_{β} :

$$\epsilon_{\beta}^{(n+1)} = F_{n+2} + (R_{n+1} - 1) \epsilon_{\beta}^{(n)}, \quad (III.4.16)$$

che asintoticamente si riduce a:

$$\epsilon_{\beta}^{(n+1)} \underset{n \rightarrow \infty}{\sim} F_{n+2} + (\sigma - 2) \epsilon_{\beta}^{(n)}, \quad (III.4.16')$$

da cui si ricava:

$$\epsilon_{\beta}^{(n)} \underset{n \rightarrow \infty}{\sim} \frac{F_{n+2}}{2}. \quad (III.4.17)$$

Per le considerazioni che seguono non serve né la forma esatta di $\epsilon_{\beta}^{(n)}$ né quella di $\epsilon_{\gamma}^{(n)}$.

Dobbiamo invece studiare la rinormalizzazione di $J_A^{(n)}(\omega^2)$ per $\omega^2 \rightarrow 0$. In base alle (III.3.9-d) e (III.3.9-e) ed alla (III.4.10-b), si può scrivere:

$$J_A^{(n+2)}(\omega^2) = \frac{J_A^{(n+1)}(\omega^2)J_A^{(n)}(\omega^2)}{J_A^{(n+1)}(\omega^2) + J_A^{(n)}(\omega^2) - \epsilon_\beta^{(n)}\omega^2 + O(\omega^4)}. \quad (III.4.18)$$

Se poniamo

$$J_A^{(n)}(\omega^2) = J_A^{(n)} + y_n\omega^2 + O(\omega^4), \quad (III.4.19)$$

dalla (III.4.18) ricaviamo

$$y_{n+2} = \frac{(J_A^{(n)} - J_A^{(n+2)})y_{n+1} + (J_A^{(n+1)} - J_A^{(n+2)})y_n + J_A^{(n+2)}\epsilon_\beta^{(n+1)}}{J_A^{(n+1)} + J_A^{(n)}}, \quad (III.4.20)$$

che asintoticamente diventa

$$y_{n+2} \stackrel{n \rightarrow \infty}{\sim} \frac{y_{n+1}}{\sigma^2} + \frac{y_n}{\sigma^4} + \frac{F_n}{2}. \quad (III.4.20')$$

La (III.4.20') può essere risolta dando

$$y_n \stackrel{n \rightarrow \infty}{\sim} \frac{F_{n+1}}{6}. \quad (III.4.21)$$

La prima banda fononica

Secondo il procedimento descritto nel §II.4, possiamo ottenere le bande dello spettro di P_n intersecando la retta $y = \omega^2$ con le curve

$$y = L_\alpha^{(n-1)}(\omega^2) - 2J_A^{(n-1)}(\omega^2) \quad (III.4.22 - a)$$

$$y = L_\alpha^{(n-1)}(\omega^2) + 2J_A^{(n-1)}(\omega^2) \quad (III.4.22 - b)$$

Grazie alla (III.4.10-a) ed alla (III.4.19), possiamo riscrivere la curva (III.4.22-b) come:

$$y = 4J_A^{(n-1)} + (1 - \epsilon_\alpha^{(n-1)} + 4y_{n-1})\omega^2 + O(\omega^4), \quad (III.4.22 - b')$$

da cui segue, sfruttando i risultati (III.4.15) e (III.4.21), che il valore massimo della prima banda è dato da:

$$\omega_{\text{Max}}^2 = \frac{4J_A^{(n-1)}}{\epsilon_\alpha^{(n-1)} - 4y_{n-1}} \stackrel{n \rightarrow \infty}{\sim} \frac{12C\sigma}{F_n^2}.$$

Si ha quindi che la misura della prima banda dello spettro fononico va a zero secondo la seguente formula:

$$m_0 = \sqrt{\frac{12\sigma^2 J_A J_B}{J_A + \sigma J_B}} F_n^{-1}, \quad (III.4.23)$$

che corrisponde alla (III.1.13).

Possiamo infine calcolare la relazione che intercorre tra i parametri dell'Hamiltoniano e la velocità del suono per $\omega^2 \ll \frac{12C\sigma}{F_n^2}$. Scrivendo

$$\frac{L_\alpha^{(n-1)}(\omega^2) - \omega^2}{2J_A^{(n-1)}(\omega^2)} = \cos F_n k, \quad (III.4.24)$$

dove k varia nella prima zona di Brillouin ridotta $\left[-\frac{\pi}{F_n}, \frac{\pi}{F_n}\right)$, si ottiene per $\omega^2 \rightarrow 0$:

$$\omega^2 \sim C\sigma k^2, \quad (III.4.25)$$

da cui segue che ivi la velocità del suono è data da:

$$c_s = \sqrt{\frac{\sigma^2 J_A J_B}{J_A + \sigma J_B}}. \quad (III.4.26)$$

CAPITOLO IV

§IV.1- IL QUASIRETICOLO DI FIBONACCI CON NUMERO DI COORDINAZIONE VARIABILE

I quasicristalli bidimensionali hanno la proprietà caratteristica di avere un numero di coordinazione variabile. Risulta pertanto interessante considerare anche in una dimensione oggetti con questa proprietà. Possiamo pensare ad esempio ad un quasireticolo di Fibonacci in cui, oltre alle interazioni a primi vicini, siano presenti anche alcune interazioni a secondi vicini.

Un tale sistema non può essere trattato col formalismo della trace map, che richiede l'uso di matrici due per due unimodulari ed è quindi applicabile solo al caso di interazioni a primi vicini.

Risulta invece utile la procedura di decimazione esposta nel §II.4. In generale essa non conserva la struttura dell'Hamiltoniano, ovvero, partendo dalle sole interazioni a primi e a secondi vicini, si ottengono, applicando ripetutamente la (II.4.9), altre interazioni che interessano siti via via più lontani. Per trattare il problema è quindi necessario troncare l'Hamiltoniano rinormalizzato conservando solo i termini fino ad un certo ordine di interazione.

Mostreremo tuttavia nei prossimi paragrafi che è possibile avere una rinormalizzazione esatta che produca solo interazioni a primi e secondi vicini quando alcune di queste ultime sono del tutto assenti, ovvero proprio nel caso del problema con numero di coordinazione variabile che vogliamo trattare.

§IV.2-IL CASO $J_{AB} \neq 0$

La prima rinormalizzazione

Cominciamo da un caso semplice che può essere trattato in dettaglio: un problema elettronico (tutti gli L uguali a zero) con un'interazione a secondi vicini che interessa solo i siti connessi da un gruppo AB che chiameremo J_{AB} (saranno invece uguali a zero J_{AA} e J_{BA}).

Data l'assenza del link J_{BA} , i siti β saranno ancora isolati e quindi la matrice H_{22}

sarà ancora della forma $L_{\beta}1_{22}$.

Applicando la (II.4.9) una volta si ottiene:

$$L'_{\alpha} = \frac{J_A^2 + J_B^2}{E}, \quad (IV.2.1 - a)$$

$$L'_{\beta} = \frac{J_B^2}{E}, \quad (IV.2.1 - b)$$

$$L'_{\gamma} = \frac{J_A^2}{E}, \quad (IV.2.1 - c)$$

$$J'_A = J_{AB} - \frac{J_A J_B}{E}, \quad (IV.2.1 - d)$$

$$J'_B = J_A, \quad (IV.2.1 - e)$$

mentre tutte le interazioni a secondi vicini, compreso J'_{AB} , risultano uguali a zero.

Lo stato localizzato

Un'interessante proprietà del sistema rinormalizzato è che J'_A risulta uguale a zero per

$$E = \frac{J_A J_B}{J_{AB}}, \quad (IV.2.2)$$

il che corrisponde ad avere delle molecole unite dai link J'_B o degli atomi isolati sui siti α .

Studiamo dapprima quest'ultimo caso. Sia ψ'_{α} il valore della funzione d'onda in un generico sito α della catena rinormalizzata. L'equazione agli autovalori, per E dato dalla (IV.2.2), sarà:

$$E\psi'_{\alpha} = L'_{\alpha}\psi'_{\alpha}, \quad (IV.2.3)$$

dove L'_{α} è dato dalla (IV.2.1-a).

La soluzione $\psi'_{\alpha} = 0$ sarà evitata se e solo se $E = L'_{\alpha}$ ovvero, esprimendo tutto in funzione di J_A , J_B e J_{AB} :

$$J_{AB} = \pm \frac{J_A J_B}{\sqrt{J_A^2 + J_B^2}}. \quad (IV.2.4)$$

È interessante studiare il problema della localizzazione direttamente sul quasireticolo originale. Poiché nel sistema rinormalizzato lo stato localizzato ha come supporto un sito

α ed è quindi associato alla configurazione AA , nel sistema originale ci aspettiamo di dover considerare la configurazione $w(AA)$, cioè:

$$\cdots_1 A_2 B_3 A_4 B_5 \cdots,$$

dove 1, 2, 3, 4 e 5 indicano i siti che dobbiamo considerare.

Se poniamo $\psi_1 = \psi_5 = 0$, allora possiamo porre uguali a zero anche tutti i siti al di fuori della configurazione $ABAB$. L'equazione cui deve soddisfare la funzione d'onda del sistema localizzato si scrive allora in componenti come:

$$0 = E\psi_1 = -J_A\psi_2 - J_{AB}\psi_3, \quad (IV.2.5 - a)$$

$$E\psi_2 = -J_B\psi_3, \quad (IV.2.5 - b)$$

$$E\psi_3 = -J_B\psi_2 - J_A\psi_4, \quad (IV.2.5 - c)$$

$$E\psi_4 = -J_A\psi_3, \quad (IV.2.5 - d)$$

$$0 = E\psi_5 = -J_{AB}\psi_3 - J_B\psi_4. \quad (IV.2.5 - e)$$

Dalle equazioni (IV.2.5-a) e (IV.2.5-b) si ricava che se non è soddisfatta la (IV.2.2) si ha $\psi_2 = \psi_3 = 0$, il che implica, per le altre equazioni (IV.2.5), che $\psi_i = 0 \forall i$.

Se ne deduce che tale condizione è necessaria per avere lo stato localizzato, ovvero che se tale stato esiste esso ha un'energia data dalla (IV.2.2).

Se l'energia è data dalla (IV.2.2), è immediato verificare che la (IV.2.5-a) è equivalente alla (IV.2.5-b) e la (IV.2.5-e) è equivalente alla (IV.2.5-d). Ci restano quindi solo tre equazioni indipendenti: la (IV.2.5-b), la (IV.2.5-c) e la (IV.2.5-d).

Se il determinante di tale sistema è diverso da zero, allora la soluzione è ancora data da $\psi_i = 0 \forall i$. L'annullamento del determinante, che corrisponde all'equazione (IV.2.4), permette invece di avere una soluzione non banale con ψ_2, ψ_3 e ψ_4 diverse da zero e quindi uno stato localizzato.

Possiamo quindi esprimere i valori di ψ_2, ψ_3 e ψ_4 , a meno di un fattore di fase, risolvendo il sistema (IV.2.5) ed imponendo la condizione di normalizzazione $|\psi_2|^2 + |\psi_3|^2 +$

$|\psi_4|^2 = 1$. Si trova:

$$\begin{aligned}\psi_2 &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{J_{AB}}{J_A}, \\ \psi_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}}, \\ \psi_4 &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{J_{AB}}{J_B},\end{aligned}\tag{IV.2.6}$$

dove s'intende che J_A , J_B e J_{AB} soddisfano la (IV.2.4).

Consideriamo ora il caso delle molecole unite da J'_B . Se chiamiamo ψ'_1 il valore della funzione d'onda sul sito a sinistra del link B (che è un sito β) e ψ'_2 quello sul sito a destra (che è un sito γ), allora il problema agli autovalori per questo stato localizzato può essere scritto come:

$$E\psi'_1 = L'_\beta\psi'_1 - J'_B\psi'_2,\tag{IV.2.7 - a}$$

$$E\psi'_2 = L'_\gamma\psi'_2 - J'_B\psi'_1,\tag{IV.2.7 - b}$$

dove L'_β , L'_γ , J'_B ed E sono dati rispettivamente dalle (IV.2.1-b), (IV.2.1-c), (IV.2.1-e) e (IV.2.2).

In generale la soluzione del sistema (IV.2.7) sarà data da $\psi'_1 = \psi'_2 = 0$ e lo stato non sarà accettabile, il che significa che l'energia data dalla (IV.2.2) non appartiene allo spettro.

Tuttavia se i coefficienti J_A , J_B e J_{AB} soddisfano l'equazione

$$J_{AB}^4 - (2J_A^2 + J_B^2)J_{AB}^2 + J_A^2J_B^2 = 0,\tag{IV.2.8}$$

il determinante del sistema (IV.2.7) si annulla ed abbiamo una soluzione non banale. Risolvendo rispetto a J_{AB}^2 la condizione (IV.2.8), otteniamo:

$$J_{AB}^2 = \frac{2J_A^2 + J_B^2 \pm \sqrt{4J_A^4 + J_B^4}}{2}.\tag{IV.2.8'}$$

Quando J_{AB} è uno dei quattro valori dati dalla (IV.2.8') allora l'energia data dalla (IV.2.2) corrisponde ad uno stato localizzato ed è quindi un punto isolato dello spettro.

In particolare se scegliamo $J_A = J_B = 1$, i valori di J_{AB} che permettono lo stato isolato, sono:

$$J_{AB} = \pm\sigma\tag{IV.2.9 - a}$$

e

$$J_{AB} = \pm \frac{1}{\sigma} \quad (IV.2.9 - b)$$

(dove σ è la sezione aurea data dalla (I.1.6)).

Analogamente a quanto fatto precedentemente, possiamo studiare anche in questo caso la localizzazione direttamente sul quasireticolato originale. Poiché nel sistema rinormalizzato lo stato localizzato ha come supporto i siti adiacenti ad un link di tipo B ed è quindi associato alla configurazione ABA , nel sistema originale ci aspettiamo di dover considerare la configurazione $w(ABA)$, cioè:

$$\cdots_1 A_2 B_3 A_4 A_5 B_6 \cdots,$$

dove 1, 2, 3, 4, 5 e 6 indicano i siti che dobbiamo considerare.

Se poniamo $\psi_1 = \psi_6 = 0$, allora possiamo porre uguali a zero anche tutti i siti fuori dalla configurazione $ABAAB$. L'equazione cui deve soddisfare la Ψ del sistema localizzato si scrive allora in componenti come:

$$0 = E\psi_1 = -J_A\psi_2 - J_{AB}\psi_3, \quad (IV.2.10 - a)$$

$$E\psi_2 = -J_B\psi_3, \quad (IV.2.10 - b)$$

$$E\psi_3 = -J_B\psi_2 - J_A\psi_4, \quad (IV.2.10 - c)$$

$$E\psi_4 = -J_A\psi_3 - J_A\psi_5, \quad (IV.2.10 - d)$$

$$E\psi_5 = -J_A\psi_4, \quad (IV.2.10 - e)$$

$$0 = E\psi_6 = -J_{AB}\psi_4 - J_B\psi_5. \quad (IV.2.10 - f)$$

Dalle equazioni (IV.2.10-a) e (IV.2.10-b) si ricava che se non è soddisfatta la (IV.2.2) si ha $\psi_2 = \psi_3 = 0$, il che implica, per le altre equazioni (IV.2.10), che $\psi_i = 0 \forall i$.

Se ne deduce che tale condizione è necessaria per avere lo stato localizzato, ovvero che se tale stato esiste esso ha un'energia data dalla (IV.2.2).

Se l'energia è data dalla (IV.2.2), è immediato verificare che la (IV.2.10-a) è equivalente alla (IV.2.10-b) e la (IV.2.10-f) è equivalente alla (IV.2.10-e). Ci restano quindi solo quattro equazioni indipendenti: la (IV.2.10-b), la (IV.2.10-c), la (IV.2.10-d) e la (IV.2.10-e).

Se il determinante di tale sistema è diverso da zero, allora la soluzione è ancora data da $\psi_i = 0 \forall i$. L'annullamento del determinante, che corrisponde all'equazione (IV.2.8), permette invece di avere una soluzione non banale con ψ_2, ψ_3, ψ_4 e ψ_5 diverse da zero e quindi uno stato localizzato.

Possiamo quindi esprimere i valori di ψ_3, ψ_4 e ψ_5 in funzione di ψ_2 risolvendo il sistema (IV.2.10). Si trova:

$$\begin{aligned}\psi_3 &= -\frac{J_A}{J_{AB}}\psi_2, \\ \psi_4 &= \left(\frac{J_A J_B}{J_{AB}^2} - \frac{J_B}{J_A}\right)\psi_2, \\ \psi_5 &= \left(\frac{J_{AB}}{J_A} - \frac{J_A}{J_{AB}}\right)\psi_2,\end{aligned}\tag{IV.2.11}$$

dove si intende che J_A, J_B e J_{AB} soddisfano la (IV.2.8).

Imponendo la condizione di normalizzazione $|\psi_2|^2 + |\psi_3|^2 + |\psi_4|^2 + |\psi_5|^2 = 1$ è possibile determinare esattamente la funzione d'onda a meno di un fattore di fase.

Nel caso in cui $J_A = J_B = 1$ lo stato localizzato risulta particolarmente simmetrico. Se $J_{AB} = s\sigma$ (con $s = \pm 1$) si ottiene:

$$\begin{aligned}\psi_3 &= -\frac{s}{\sigma}\psi_2, \\ \psi_4 &= -\frac{1}{\sigma}\psi_2, \\ \psi_5 &= s\psi_2.\end{aligned}\tag{IV.2.12 - a}$$

Se invece si ha $J_{AB} = \frac{s}{\sigma}$, si trova:

$$\begin{aligned}\psi_3 &= -s\sigma\psi_2, \\ \psi_4 &= \sigma\psi_2, \\ \psi_5 &= -s\psi_2.\end{aligned}\tag{IV.2.12 - b}$$

Ci resta infine da considerare la degenerazione dello stato localizzato con energia data dalla (IV.2.2).

Nel primo caso, come abbiamo visto, esso ha supporto, nel sistema rinormalizzato, dato dai siti α ; per la (III.3.6-a), in T_{N-1} abbiamo F_{N-4} siti α e quindi la degenerazione

relativa (cioè divisa per il numero totale di stati) è data da $\frac{F_{N-4}}{F_N}$ che tende, per $N \rightarrow \infty$, a σ^{-4} .

Nel secondo caso lo stato localizzato ha, nel sistema rinormalizzato, supporto esteso alla configurazione ABA e quindi avremo tante autofunzioni localizzate in P_n quanti sono i link B in P_{n-1} . Poiché in T_{n-1} abbiamo F_{n-3} link B (per la (III.3.3-b)), la degenerazione relativa di tale stato è data da $\frac{F_{n-3}}{F_n}$ che tende, per $n \rightarrow \infty$, a σ^{-3} .

Si noti infine che le due condizioni (IV.2.4) e (IV.2.8) sono incompatibili (a meno che sia $J_A = 0$, cosa che escludiamo per ipotesi), e quindi non è possibile avere contemporaneamente stati localizzati di ambo i tipi.

Relazioni con la trace map

Come si è visto, il sistema considerato dopo una rinormalizzazione mantiene le sole interazioni a primi vicini e può quindi essere trattato col formalismo della trace map.

Si noti tuttavia che i nuovi parametri L e J dipendono dall'energia e pertanto le condizioni iniziali della trace map saranno molto particolari. Precisamente, facendo uso delle (III.3.14), si trova:

$$x_2 = \frac{J_A^2 + J_B^2 - E^2}{2(J_{AB}E - J_A J_B)}, \quad (IV.2.13 - a)$$

$$x_1 = -\frac{E}{2J_A}, \quad (IV.2.13 - b)$$

$$x_0 = \frac{(J_A^2 + J_{AB}^2)E - 2J_A J_B J_{AB}}{2J_A(J_{AB}E - J_A J_B)}, \quad (IV.2.13 - c)$$

che, sostituite nella (III.1.7), danno:

$$\begin{aligned} \gamma^2 = \{ & J_{AB}^2(J_{AB}^2 + J_B^2 - J_A^2)E^2 + 2J_A J_B J_{AB}(J_A^2 - J_B^2 - 2J_{AB}^2)E + \\ & + 4J_A^2 J_B^2 J_{AB}^2 + J_A^2(J_A^2 - J_B^2)^2 \} / [4J_A^2(J_{AB}E - J_A J_B)^2]. \end{aligned} \quad (IV.2.14)$$

Si nota immediatamente che γ^2 dipende dall'energia e che quindi, come nel caso fononico a primi vicini, lo spettro avrà uno scaling non uniforme. In particolare si noti che per E dato dalla (IV.2.2) γ^2 va all'infinito, il che rende conto del possibile stato localizzato a tale energia.

Inoltre si può verificare che γ^2 può diventare negativo. Se a ciò si accompagnasse la condizione $|x_1| \leq 1$, avremmo una banda che non riscalerebbe e che quindi manterrebbe finita la misura di Lebesgue dello spettro. Ora mostriamo che ciò non può verificarsi.

Conviene introdurre i seguenti parametri adimensionali:

$$z = \frac{J_{AB}E}{J_A J_B}, \quad (IV.2.15 - a)$$

$$j = \frac{J_{AB}}{J_B}, \quad (IV.2.15 - b)$$

$$j_A = \frac{J_A}{J_B}, \quad (IV.2.15 - c)$$

$$\Delta = \frac{J_B^2 - J_A^2}{J_B^2} = 1 - j_A^2 \quad (IV.2.15 - d)$$

(si noti che si ha sempre $\Delta \leq 1$). Con queste notazioni possiamo riscrivere γ^2 nella forma:

$$\gamma^2 = \frac{y}{4j_A^2(z-1)^2}, \quad (IV.2.14')$$

con

$$y = (z-2)^2 j^2 + \Delta(z^2 - 2z + \Delta). \quad (IV.2.16)$$

È opportuno riscrivere con queste variabili la condizione $|x_1| \leq 1$ nella forma:

$$|z| \leq 2|j|, \quad (IV.2.17)$$

come si ottiene dalla (IV.2.13-b) e dalle (IV.2.15).

Consideriamo dapprima il caso $z = 2$ (che corrisponde a $E = \frac{2J_A J_B}{J_{AB}}$). Esso implica $y = \Delta^2$ e quindi $\gamma^2 = (\frac{\Delta}{2j_A})^2$. Ne segue che $\gamma^2 > 0$ a meno che si abbia $\Delta = 0$ (che corrisponde a $J_A = J_B$). In questo caso si ha una banda che riscalda come lo spettro continuo a patto che sia soddisfatta la (IV.2.17), cioè si abbia $|J_{AB}| \geq |J_B|$.

Consideriamo ora il caso $z \neq 2$. Possiamo avere $y \leq 0$ se e solo se

$$j^2 \leq \frac{\Delta(2z - z^2 - \Delta)}{(z-2)^2},$$

che, unitamente alla condizione (IV.2.17) riscritta come $z^2 \leq 4j^2$, fornisce la disequazione:

$$z^2(z-2)^2 \leq 4\Delta(2z - z^2 - \Delta),$$

che può essere riscritta come:

$$[z(2-z) - 2\Delta]^2 \leq 0,$$

che ha soluzione solo per $z(2-z) = 2\Delta$.

Anche in questo caso non si riesce a rendere γ^2 negativo (contemporaneamente a $|x_1| \leq 1$), ma si può solo annullarlo. Ciò può avvenire se e solo se si ha $|z| = 2|j|$, $\Delta < \frac{1}{2}$ e $z = 1 \pm \sqrt{1 - 2\Delta}$. Possiamo riscrivere queste condizioni in termini di J_A , J_B , J_{AB} ed E come:

$$\begin{aligned} E &= \pm 2J_A, \\ |J_B| &< \sqrt{2}|J_A|, \\ J_{AB} &= \frac{J_B \pm \sqrt{2J_A^2 - J_B^2}}{2}. \end{aligned} \tag{IV.2.18}$$

Il caso $\Delta = \frac{1}{2}$ dev'essere trattato a parte; infatti esso implica che si può avere $y = 0$ solo per $z = 1$, ma quest'ultima condizione fa annullare anche il denominatore della (IV.2.14').

Studiando in dettaglio questo caso ($\Delta = \frac{1}{2}$, $j_A = \frac{1}{\sqrt{2}}$, $j = \frac{1}{2}$), si trova:

$$\gamma^2 = \frac{3}{8} + \frac{1}{4(1-z)},$$

che mostra come $\gamma^2 > 0$ finché $z \leq 1$.

È da sottolineare che anche il caso $J_{BA} \neq 0$, con tutti gli altri integrali di salto a secondi vicini uguali a zero, è trattabile esattamente allo stesso modo, a patto che come prima cosa si effettui una trasformazione d'inversione. Essa opera sugli integrali di salto come segue:

$$J_A \rightarrow J_A, \quad J_B \rightarrow J_B, \quad J_{BA} \rightarrow J_{AB}, \tag{IV.2.19 - a}$$

e sugli eventuali potenziali come:

$$L_\alpha \rightarrow L_\alpha, \quad L_\beta \rightarrow L_\gamma, \quad L_\gamma \rightarrow L_\beta. \tag{IV.2.19 - b}$$

A questo punto siamo tornati alla situazione $J_{AB} \neq 0$, con tutti gli altri integrali di salto a secondi vicini uguali a zero, che sappiamo trattare.

§IV.3-IL CASO $J_{AA} \neq 0$

La prima rinormalizzazione

Un caso piú significativo di quello trattato nel paragrafo precedente consiste nel considerare come unica interazione a secondi vicini diversa da zero quella che interessa siti connessi da un gruppo AA (si prendono inoltre tutti i potenziali uguali a zero).

Anche in questo caso l'assenza di J_{BA} fa sí che i siti β risultino isolati e si abbia quindi la semplice rinormalizzazione dei parametri:

$$L'_\alpha = \frac{J_A^2 + J_B^2}{E}, \quad (IV.3.1 - a)$$

$$L'_\beta = \frac{J_B^2 + J_{AA}^2}{E}, \quad (IV.3.1 - b)$$

$$L'_\gamma = \frac{J_A^2}{E}, \quad (IV.3.1 - c)$$

$$J'_A = -\frac{J_A J_B}{E}, \quad (IV.3.1 - d)$$

$$J'_B = J_A - \frac{J_A J_{AA}}{E}, \quad (IV.3.1 - e)$$

$$J'_{BA} = -\frac{J_B J_{AA}}{E}, \quad (IV.3.1 - f)$$

mentre tutte le altre interazioni a secondi vicini risultano nulle.

La presenza di J'_{BA} , ci impedisce di avere tutti i siti β isolati. È quindi conveniente decimare anziché su questi sui siti γ che risultano isolati data l'assenza di J'_{BA} .

Una procedura del tutto equivalente consiste nell'operare dapprima l'inversione data dalle (IV.2.17) ottenendo cosí i parametri:

$$\bar{L}'_\alpha = \frac{J_A^2 + J_B^2}{E}, \quad (IV.3.2 - a)$$

$$\bar{L}'_\beta = \frac{J_A^2}{E}, \quad (IV.3.2 - b)$$

$$\bar{L}'_\gamma = \frac{J_B^2 + J_{AA}^2}{E}, \quad (IV.3.2 - c)$$

$$\bar{J}'_A = -\frac{J_A J_B}{E}, \quad (IV.3.2 - d)$$

$$\bar{J}'_B = J_A - \frac{J_A J_{AA}}{E}, \quad (IV.3.2 - e)$$

$$\bar{J}'_{AB} = -\frac{J_B J_{AA}}{E}. \quad (IV.3.2 - f)$$

Conviene a questo punto, analogamente a quanto fatto nel paragrafo precedente, riesprimere tutto in funzione dei seguenti parametri a adimensionali:

$$\begin{aligned} j_B &:= \frac{J_B}{J_A}, \\ j &:= \frac{J_{AA}}{J_A}, \\ z &:= \frac{EJ_{AA}}{J_A^2} \end{aligned} \quad (IV.3.3)$$

(risulterà chiara piú avanti la scelta del parametro z , che è il corrispondente diretto dello z introdotto nel paragrafo precedente).

Con questi parametri possiamo riscrivere i parametri del sistema rinormalizzato nella forma:

$$\bar{L}'_{\alpha} = \frac{(1 + j_B^2)j}{z} J_A, \quad (IV.3.4 - a)$$

$$\bar{L}'_{\beta} - E = \frac{j^2 - z^2}{jz} J_A, \quad (IV.3.4 - b)$$

$$\bar{L}'_{\gamma} = \frac{(j_B + j^2)j}{z} J_A, \quad (IV.3.4 - c)$$

$$\bar{J}'_A = -\frac{j_B j}{z} J_A, \quad (IV.3.4 - d)$$

$$\bar{J}'_B = \left(1 - \frac{j^2}{z}\right) J_A, \quad (IV.3.4 - e)$$

$$\bar{J}'_{AB} = -\frac{j_B j^2}{z} J_A. \quad (IV.3.4 - f)$$

La seconda rinormalizzazione

Essendo $\bar{J}'_{BA} = 0$, ed essendo quindi i siti β isolati, la successiva rinormalizzazione risulta data semplicemente da:

$$L''_{\alpha} = \frac{j}{z} \frac{z(z-2)j^2 - (1 + j_B^2)z^2}{j^2 - z^2} J_A, \quad (IV.3.5 - a)$$

$$L''_{\beta} = \frac{j}{z} \frac{(2z - z^2 + j_B^2)j^2 - (1 + j_B^2)z^2}{j^2 - z^2} J_A, \quad (IV.3.5 - b)$$

$$L''_{\gamma} = \frac{j}{z} \frac{j^2 - (1 + j_B^2)z^2}{j^2 - z^2} J_A, \quad (IV.3.5 - c)$$

$$J_A'' = \frac{j}{z} j_B z j \frac{z-1}{j^2 - z^2} J_A, \quad (IV.3.5 - d)$$

$$J_B'' = -\frac{j}{z} j_B J_A, \quad (IV.3.5 - e)$$

mentre tutte le interazioni a secondi vicini risultano assenti.

Lo stato localizzato

Come si vede dalla (IV.3.5-d), se z è uguale a uno si ha J_A'' uguale a zero. Si possono quindi avere degli stati localizzati ad un'energia

$$E = \frac{J_A^2}{J_{AA}} \quad (IV.3.6)$$

concentrati, nel sistema rinormalizzato, su di un sito α o sui siti adiacenti ad un link B .

Nel primo caso oltre alla (IV.3.6) dovrà essere soddisfatta la seguente condizione:

$$L_\alpha'' = E, \quad (IV.3.7)$$

che può essere riscritta, in termini dei parametri iniziali, come:

$$j^4 - (2 + jB^2)j^2 + 1 = 0. \quad (IV.3.7')$$

Benché sia possibile risolvere la (IV.7') rispetto a j , tuttavia risulta più semplice risolverla rispetto a j_B , ottenendo:

$$|j_B| = \frac{|j^2 - 1|}{|j|}. \quad (IV.3.8)$$

Tale stato corrisponde, nel sistema originale, ad uno stato localizzato con supporto limitato ad una configurazione $AABAA$, mentre la sua degenerazione relativa, legata alla cardinalità dei siti α in T_{N-2} , è data da $\frac{F_{N-5}}{F_N}$, che tende nel limite $N \rightarrow \infty$ a σ^{-5} .

Nel caso di siti adiacenti ad un link B , la condizione aggiuntiva cui debbono soddisfare i parametri è data da:

$$(L_\beta'' - E)(L_\gamma'' - E) = (J_B'')^2, \quad (IV.IV.3.9)$$

che può essere riscritta nella forma:

$$j^4 j_B^4 - 2(j^2 - j^4)j_B^2 - j^6 + 3j^4 - 3j^2 + 1 = 0, \quad (IV..3.9')$$

che risolta rispetto a j_B dà:

$$|j_B| = \frac{|1 \pm j|}{|j|} \sqrt{1 \mp j} \quad (IV.3.10 - a)$$

per $|j| \leq 1$, e:

$$|j_B| = \frac{|j| - 1}{|j|} \sqrt{1 + |j|} \quad (IV.3.10 - b)$$

per $|j| \geq 1$.

Tale stato, che nel sistema originale è confinato ad una configurazione $AABABAA$, ha una degenerazione relativa legata alla cardinalità dei link B in T_{N-2} ed è quindi data da $\frac{F_{N-4}}{F_N}$, che tende nel limite $N \rightarrow \infty$ a σ^{-4} .

Si può infine facilmente verificare che possono coesistere stati localizzati dei due tipi solo se $j_B = 0$ e $|j| = 1$ o se $j_B = \infty$ e $j = 0$.

Relazioni con la trace map

Come nel caso trattato nel paragrafo precedente, anche qui ci siamo ridotti ad un problema con interazioni solo a primi vicini e dunque trattabile col formalismo della trace map. L'applicazione della (III.3.14), fornisce come condizioni iniziali:

$$x_3 = \frac{(2-z)j^4 - (2+j_B^2)zj^2 + z^3}{2j_B j^3(z-1)}, \quad (IV.3.11a)$$

$$x_2 = \frac{z^2 - (1+j_B^2)j^2}{2j_B j^2}, \quad (IV.3.11 - b)$$

$$x_1 = \frac{(z-2)j^2 + z}{2j(z-1)}, \quad (IV.3.11 - c)$$

che sostituite nella (III.1.7) danno:

$$\gamma^2 = \left[\frac{z(z-2) + 1 - j_B^2}{2j_B(z-1)} \right]^2. \quad (IV.3.12)$$

Come si vede, in questo caso non è mai possibile avere $\gamma^2 \leq 0$, ma è comunque possibile annullarlo per

$$z = 1 \pm |j_B|. \quad (IV.3.13)$$

Perché uno stato con energia corrispondente alla (IV.3.13) possa appartenere allo spettro, è necessario che accanto a tale condizione si aggiunga anche la seguente:

$$|x_1| \leq 1.$$

Si dimostra con un calcolo diretto che l'energia data da $z = 1 + |j_B|$ appartiene allo spettro se e solo se

$$1 \leq |j| \leq \left| \frac{1 + |j_B|}{1 - |j_B|} \right|, \quad (IV.3.14 - a)$$

mentre l'energia data da $z = 1 - |j_B|$ appartiene allo spettro se e solo se

$$\left| \frac{1 - |j_B|}{1 + |j_B|} \right| \leq |j| \leq 1. \quad (IV.3.14 - b)$$

Si noti che per $|j| = 1$ sono presenti ambo gli stati.

§IV.4-IL CASO GENERALE

Lo spazio dei parametri

Consideriamo ora un sistema in cui siano presenti tutte le interazioni a secondi vicini (vedremo in seguito che vincolo si debba mettere per avere una rinormalizzazione esatta).

La presenza di J_{BA} fa sí che i siti β_2 e β_3 non siano piú isolati, mentre tali rimangono i siti β_1 ; ne segue che la matrice \mathbf{H}_{22} non è piú diagonale.

Data l'evidente diversità del ruolo dei diversi siti β_i , è opportuno denominare i potenziali in maniera diversa a seconda del tipo specifico di sito cui sono associati. Avremo cosí i sette potenziali $L_\alpha, L_{\beta_1}, L_{\beta_2}, L_{\beta_3}, L_{\gamma_1}, L_{\gamma_2}$ e L_{γ_3} .

Come vedremo in seguito, la rinormalizzazione distingue in generale anche tra i vari tipi di integrali di hopping in maniera piú precisa che non semplicemente tra i J_A, J_B, J_{AB}, J_{AA} e J_{BA} . Sarà opportuno indicare ogni integrale di hopping scrivendo tutti i siti che esso interessa.

Per esempio, per quanto riguarda J_A , dovremo distinguere tra $J_{\alpha\beta}, J_{\gamma\alpha}$ e $J_{\gamma\beta}$, relativi ai link A appartenenti rispettivamente ai gruppi $\underline{AAB}, \underline{BAA}$ e \underline{BAB} (tralasciamo di indicare gl'indici 1, 2 e 3 per i siti β e γ ove questo non generi confusione).

Le rinormalizzazione

Con queste notazioni l'integrale di salto J_{BA} che connette i siti β_2 e β_3 sarà indicato come $J_{\beta_2\beta_3}$, e la matrice \mathbf{H}_{22} potrà essere scritta come:

$$\mathbf{H}_{22} = L_{\beta_1} \mathbf{P}_i + \mathbf{P}_c \cdot \begin{pmatrix} L_{\beta_2} & -J_{\beta_2\beta_3} \\ -J_{\beta_2\beta_3} & L_{\beta_3} \end{pmatrix} \cdot \mathbf{P}_c, \quad (IV.4.1)$$

dove \mathbf{P}_i e \mathbf{P}_c sono i proiettori sui siti β rispettivamente isolati e connessi (si noti che $\mathbf{P}_i + \mathbf{P}_c = \mathbf{1}_{22}$).

Indicando con $D = (L_{\beta_2} - E)(L_{\beta_3} - E) - J_{\beta\gamma\beta}^2$ il determinante della matrice $\mathbf{P}_c \cdot (\mathbf{H}_{22} - E) \cdot \mathbf{P}_c$, otteniamo:

$$(\mathbf{H}_{22} - E)^{-1} = \frac{1}{L_{\beta_1} - E} \mathbf{P}_i + \frac{1}{D} \mathbf{P}_c \cdot \begin{pmatrix} L_{\beta_3} - E & J_{\beta\gamma\beta} \\ J_{\beta\gamma\beta} & L_{\beta_2} - E \end{pmatrix} \cdot \mathbf{P}_c. \quad (IV.4.2)$$

A questo punto siamo in grado di applicare la (II.4.9) per ottenere i parametri rinormalizzati. Cominciamo col calcolare che cosa valga dopo un passo l'integrale di salto $J_{\beta\gamma\alpha\beta}$ associato al gruppo BAA ; si trova:

$$J'_{\beta\gamma\alpha\beta} = \frac{J_{\gamma\alpha\beta} J_{\beta\gamma\beta} J_{\beta\gamma_3}}{D}. \quad (IV.4.3)$$

Questo integrale di hopping connette i siti β_1 con i siti β_2 o due siti β_1 tra loro. Se, dopo una rinormalizzazione, esso risultasse diverso da zero, ciò implicherebbe che al passo successivo non saremmo piú in grado di spezzare la matrice \mathbf{H}_{22} come nella (IV.4.1). L'applicazione della (II.4.9) produrrebbe quindi interazioni che interessano siti sempre piú lontani ed il problema potrebbe essere affrontato solo in maniera approssimata trascurando le interazioni oltre una certa distanza.

Se tuttavia $J'_{\beta\gamma\alpha\beta}$ risulta uguale a zero si evita questo problema. La condizione perché ciò avvenga, se riteniamo che le interazioni a primi vicini siano tutte presenti e che quindi $J_{\beta\gamma_3} \neq 0$, è espressa da:

$$J_{\gamma\alpha\beta} J_{\beta\gamma\beta} = 0. \quad (IV.4.4)$$

Si vedrà in seguito che, se questa condizione è verificata all'inizio, allora sarà verificata ad ogni passo e saremo sempre nella condizione di avere solo siti β isolati e a coppie.

I parametri che sono interessati dalla rinormalizzazione sono i seguenti:

- a) I potenziali: $L_\alpha, L_{\beta_1}, L_{\beta_2}, L_{\beta_3}, L_{\gamma_1}, L_{\gamma_2}$ e L_{γ_3} .
- b) Gli integrali di salto di tipo J_A : $J_{\alpha\beta}, J_{\gamma\alpha}$ e $J_{\gamma\beta}$.
- c) Gli integrali di salto di tipo J_B : $J_{\beta\gamma_1}, J_{\beta\gamma_2}$ e $J_{\beta\gamma_3}$.
- d) L'integrale di salto di tipo J_{AA} : $J_{\gamma\alpha\beta}$.

e) Gli integrali di salto di tipo J_{AB} : $J_{\alpha\beta\gamma}$ e $J_{\gamma\beta\gamma}$.

f) Gli integrali di salto di tipo J_{BA} : $J_{\beta\gamma\beta}$ e $J_{\beta\gamma\alpha}$.

g) L'integrali di salto di tipo J_{AAB} : $J_{\gamma\alpha\beta\gamma}$.

Quest'ultimo compare come effetto della rinormalizzazione ma non dà alcun problema.

Seguono le relazioni di rinormalizzazione:

$$L'_\alpha = L_{\gamma_2} - \frac{J_{\gamma\beta}^2(L_{\beta_2} - E) + J_{\beta\gamma_2}^2(L_{\beta_3} - E) + 2J_{\gamma\beta}J_{\beta\gamma\beta}J_{\beta\gamma_2}}{D}, \quad (IV.4.5 - a)$$

$$L'_{\beta_1} = L_{\gamma_3} - \frac{J_{\beta\gamma_3}^2(L_{\beta_2} - E) + J_{\gamma\alpha\beta}^2(L_{\beta_3} - E)}{D}, \quad (IV.4.5 - b)$$

$$L'_{\beta_2} = L_{\gamma_3} - \frac{J_{\beta\gamma_3}^2(L_{\beta_2} - E)}{D} - \frac{J_{\gamma\alpha\beta}^2}{L_{\beta_1} - E}, \quad (IV.4.5 - c)$$

$$L'_{\beta_3} = L_{\gamma_1} - \frac{J_{\beta\gamma_1}^2}{L_{\beta_1} - E} - \frac{J_{\gamma\alpha\beta}^2(L_{\beta_3} - E)}{D}, \quad (IV.4.5 - d)$$

$$L'_{\gamma_1} = L_\alpha - \frac{J_{\beta\gamma\alpha}^2(L_{\beta_2} - E) + J_{\alpha\beta}^2(L_{\beta_3} - E)}{D}, \quad (IV.4.5 - e)$$

$$L'_{\gamma_2} = L_\alpha - \frac{J_{\beta\gamma\alpha}^2(L_{\beta_2} - E)}{D} - \frac{J_{\alpha\beta}^2}{L_{\beta_1} - E}, \quad (IV.4.5 - f)$$

$$L'_{\gamma_3} = L_\alpha - \frac{J_{\beta\gamma\alpha}^2}{L_{\beta_1} - E} - \frac{J_{\alpha\beta}^2(L_{\beta_3} - E)}{D}, \quad (IV.4.5 - g)$$

$$J'_{\alpha\beta} = J_{\gamma\beta\gamma} + \frac{J_{\gamma\beta}J_{\beta\gamma_3}(L_{\beta_2} - E) + J_{\beta\gamma_2}J_{\beta\gamma\beta}J_{\beta\gamma_3}}{D}, \quad (IV.4.5 - h)$$

$$J'_{\gamma\alpha} = J_{\alpha\beta\gamma} + \frac{J_{\alpha\beta}J_{\beta\gamma_2}(L_{\beta_3} - E) + J_{\alpha\beta}J_{\beta\gamma\beta}J_{\gamma\beta}}{D}, \quad (IV.4.5 - i)$$

$$J'_{\gamma\beta} = J_{\alpha\beta\gamma} + \frac{J_{\alpha\beta}J_{\beta\gamma_1}}{L_{\beta_1} - E}, \quad (IV.4.5 - l)$$

$$J'_{\beta\gamma_1} = J_{\gamma\alpha} + \frac{J_{\beta\gamma_3}J_{\beta\gamma\alpha}(L_{\beta_2} - E) + J_{\gamma\alpha\beta}J_{\alpha\beta}(L_{\beta_3} - E)}{D}, \quad (IV.4.5 - m)$$

$$J'_{\beta\gamma_2} = J_{\gamma\alpha} + \frac{J_{\beta\gamma_3}J_{\beta\gamma\alpha}(L_{\beta_2} - E)}{D} + \frac{J_{\gamma\alpha\beta}J_{\alpha\beta}}{L_{\beta_1} - E}, \quad (IV.4.5 - n)$$

$$J'_{\beta\gamma_3} = J_{\gamma\alpha} + \frac{J_{\beta\gamma_3}J_{\beta\gamma\alpha}}{L_{\beta_1} - E} + \frac{J_{\gamma\alpha\beta}J_{\alpha\beta}(L_{\beta_3} - E)}{D}, \quad (IV.4.5 - o)$$

$$J'_{\gamma\alpha\beta} = \frac{J_{\alpha\beta}J_{\beta\gamma\beta}J_{\beta\gamma\alpha}}{D}, \quad (IV.4.5 - p)$$

$$J'_{\alpha\beta\gamma} = \frac{J_{\gamma\beta}J_{\beta\gamma\alpha}(L_{\beta_2} - E) + J_{\beta\gamma_2}J_{\beta\gamma\beta}J_{\beta\gamma\alpha}}{D}, \quad (IV.4.5 - q)$$

$$J'_{\gamma\beta\gamma} = \frac{J_{\alpha\beta}J_{\beta\gamma\alpha}}{L_{\beta_1} - E}, \quad (IV.4.5 - r)$$

$$J'_{\beta\gamma\beta} = J_{\gamma\alpha\beta\gamma} + \frac{J_{\gamma\alpha\beta}J_{\beta\gamma_1}}{L_{\beta_1} - E}, \quad (IV.4.5 - s)$$

$$J'_{\beta\gamma\alpha} = J_{\gamma\alpha\beta\gamma} + \frac{J_{\gamma\alpha\beta}J_{\beta\gamma_2}(L_{\beta_3} - E)}{D}, \quad (IV.4.5 - t)$$

$$J'_{\gamma\alpha\beta\gamma} = \frac{J_{\alpha\beta}J_{\beta\gamma\beta}J_{\beta\gamma\alpha}}{D}. \quad (IV.4.5 - u)$$

Dalle equazioni di rinormalizzazione (IV.4.5), si può verificare che è alternativamente uguale a zero $J_{\beta\gamma\beta}$ o la coppia $J_{\gamma\alpha\beta}$ e $J_{\gamma\alpha\beta\gamma}$.

Quindi, se la condizione (IV.4.4) è rispettata dai parametri iniziali e si ha, sempre all'inizio, $J_{\gamma\alpha\beta\gamma} = 0$, allora essa sarà rispettata ad ogni passo.

La rinormalizzazione (IV.4.5) può essere applicata fino ad arrivare alla catena P_3 (si ricordi che $T_3 = ABA$), dove i soli parametri residui sono:

$$L_\alpha; L_{\beta_1}; L_{\gamma_1}; J_{\alpha\beta}; J_{\gamma\alpha}; J_{\beta\gamma_1}; J_{\gamma\alpha\beta}; J_{\alpha\beta\gamma}; J_{\beta\gamma\alpha}; J_{\gamma\alpha\beta\gamma}$$

(si noti l'assenza di $J_{\beta\gamma\beta}$).

Il passaggio a P_2 (si ricordi che $T_2 = AB$) richiede nuove relazioni di rinormalizzazione che fanno passare ai nuovi parametri, presenti in P_2 :

$$L_\beta; L_\gamma; J_A; J_B; J_{AB}; J_{BA}; J_{BAB}.$$

Le regole di rinormalizzazione sono le seguenti:

$$L_\beta = L_{\gamma_1} - \frac{J_{\beta\gamma_1}^2 + J_{\gamma\alpha\beta}^2}{L_{\beta_1} - E}, \quad (IV.4.6 - a)$$

$$L_\gamma = L_\alpha - \frac{J_{\alpha\beta}^2 + J_{\beta\gamma\alpha}^2}{L_{\beta_1} - E}, \quad (IV.4.6 - b)$$

$$J_A = J_{\alpha\beta\gamma} + \frac{J_{\alpha\beta}J_{\beta\gamma_1}}{L_{\beta_1} - E}, \quad (IV.4.6 - c)$$

$$J_B = J_{\gamma\alpha} + \frac{J_{\beta\gamma_1}J_{\beta\gamma\alpha} + J_{\gamma\alpha\beta}J_{\alpha\beta}}{L_{\beta_1} - E}, \quad (IV.4.6 - d)$$

$$J_{AB} = \frac{J_{\alpha\beta}J_{\beta\gamma\alpha}}{L_{\beta_1} - E}, \quad (IV.4.6 - e)$$

$$J_{BA} = J_{\gamma\alpha\beta\gamma} + \frac{J_{\gamma\alpha\beta}J_{\beta\gamma_1}}{L_{\beta_1} - E}, \quad (IV.4.6 - f)$$

$$J_{BAB} = \frac{J_{\gamma\alpha\beta}J_{\beta\gamma\alpha}}{L_{\beta_1} - E}. \quad (IV.4.6 - g)$$

La presenza in P_2 di J_{BA} fa sí che i siti β risultino tutti collegati e complica la rinormalizzazione per passare a P_1 . Se tuttavia facciamo l'ipotesi che in P_3 si abbia $J_{\gamma\alpha\beta} = J_{\gamma\alpha\beta\gamma} = 0$ evitiamo questo problema.

Tale ipotesi equivale a partire da P_N con N dispari se inizialmente si ha $J_{\gamma\alpha\beta} = 0$ e con N pari se inizialmente si ha $J_{\beta\gamma\beta} = 0$.

Sotto quest'ipotesi la rinormalizzazione che ci fa passare da P_2 a P_1 , dove sono presenti i soli parametri ${}^1L_\alpha$ e 1J_A (l'apice 1 serve a distinguere questi parametri da quelli presenti in P_2) è data semplicemente da:

$${}^1L_\alpha = L_\gamma - \frac{J_B^2 + J_A^2}{L_\beta - E}, \quad (IV.4.7 - a)$$

$${}^1J_A = J_{AB} + \frac{J_A J_B}{L_\beta - E}. \quad (IV.4.7 - b)$$

Siamo ora in grado di scrivere la IDOS di P_N , tenendo conto della (II.4.11'') e delle (III.), come:

$$\begin{aligned} \mathcal{N}(E) = & \frac{1}{2F_N} + \\ & + \sum_{n=0}^{N-4} \left\{ \frac{F_{N-n-5}}{F_N} \theta(E - L_{\beta_1}^{(n)}(E)) + \frac{F_{N-n-4}}{F_N} [\theta(E - L_{\beta_2}^{(n)}(E)) + \theta(E - L_{\beta_3}^{(n)}(E))] \right\} + \\ & + \frac{1}{F_N} [\theta(E - L_{\beta_1}^{(N-3)}(E)) + \theta(E - L_{\beta}^{(N-2)}(E))] + \frac{1}{\pi F_N} \Re \arcsin \frac{E - {}^1L_\alpha^{(N-1)}(E)}{2 |{}^1J_A^{(N-1)}(E)|}, \end{aligned} \quad (IV.4.8)$$

tramite la quale è possibile ottenere il grafico IDOS vs E .

L'appartenenza di E allo spettro è data (cfr. III.3.11) da:

$$\left| \frac{E - {}^1L_\alpha^{(N-1)}(E)}{2 {}^1J_A^{(N-1)}(E)} \right| \leq 1, \quad (IV.4.9)$$

che, sfruttando le (IV.4.7) e le (IV.4.6), può essere riscritta in termini dei parametri valutati in P_3 (ovvero dopo $N - 3$ rinormalizzazioni) come:

$$\begin{aligned} & |(L_{\beta_1} - E)[J_{\alpha\beta\gamma}^2 + J_{\gamma\alpha}^2 - (L_\alpha - E)(L_{\gamma_1} - E)] + \\ & + 2J_{\beta\gamma_1}(J_{\alpha\beta}J_{\alpha\beta\gamma} + J_{\gamma\alpha}J_{\beta\gamma\alpha}) + \\ & + (L_{\gamma_1} - E)(J_{\alpha\beta}^2 + J_{\beta\gamma\alpha}^2) + (L_\alpha - E)J_{\beta\gamma_1}^2| \leq \quad (IV.4.10) \\ & \leq 2|(L_{\beta_1} - E)J_{\alpha\beta\gamma}J_{\gamma\alpha} + (L_{\gamma_1} - E)J_{\alpha\beta\gamma}J_{\beta\gamma\alpha} + \\ & + J_{\beta\gamma_1}(J_{\alpha\beta\gamma}J_{\beta\gamma\alpha} + J_{\gamma\alpha}J_{\alpha\beta})|. \end{aligned}$$

§IV.5—CONCLUSIONI

In questo lavoro di tesi abbiamo studiato un problema di hopping con interazioni a secondi vicini e numero di coordinazione variabile su di una catena di Fibonacci.

In due casi (§IV.2 e §IV.3) siamo riusciti a dimostrare che il sistema, dopo una o due rinormalizzazioni, corrisponde ad uno con interazioni a primi vicini e quindi trattabile con la trace map.

Si mostra che esiste uno stato localizzato se i parametri soddisfano ad una certa relazione (eqq. IV.2.4, IV.2.8, IV.3.8 e IV.3.10). Lo studio dell'invariante della trace map permette di mostrare che, se tali relazioni non sono esattamente soddisfatte, si trova, al posto del punto isolato nello spettro che corrisponde allo stato localizzato, una banda che riscalda molto più rapidamente di tutte le altre. Inoltre si mostra che è possibile per un'ampia scelta dei parametri (eqq. IV.2.18 e IV.3.14) avere uno stato con invariante uguale a zero (come nel caso periodico); esso corrisponde ad uno stato esteso ordinario.

Il caso rimanente rientra nel caso generale trattato nel §IV.4. Ne segue che si ha una rinormalizzazione esatta in uno spazio dei parametri finito-dimensionale.

APPENDICE I

Le frazioni continue

Le frazioni continue giocano un ruolo molto importante nella teoria dei numeri e, come si è visto, anche nella modellizzazione dei quasireticolari. Per questo ci sembra opportuno ricordarne alcune proprietà.

Una frazione continua è un'espressione della forma:

$$b_0 + \frac{1}{b_1 + \frac{1}{b_2 + \frac{1}{b_3 + \dots}}}, \quad (AI.1)$$

e viene solitamente indicata con $[b_0; b_1, b_2, b_3, \dots, b_n]$, dove i b_i sono interi positivi.

Se la successione dei b_i è finita (infinita) si dice che la frazione continua è finita (infinita). Una frazione continua finita rappresenta un numero razionale, una infinita un numero irrazionale.

Perché tale rappresentazione sia unica, si proibisce il numero 1 come ultimo elemento tra parentesi quadre; ad esempio il razionale $\frac{1}{2}$ andrà scritto come $[0; 2]$ e non come $[0; 1, 1]$.

Se una frazione continua, finita o infinita, viene troncata al termine k ($k < n$), allora $[b_0; b_1, \dots, b_k] = \frac{A_k}{B_k}$ viene detta frazione approssimante (o convergente) di ordine k . I numeri A_k e B_k sono interi coprimi che soddisfano alla ricorsione:

$$A_k = b_k A_{k-1} + A_{k-2}, \quad (AI.2 - a)$$

$$B_k = b_k B_{k-1} + B_{k-2}, \quad (AI.2 - b)$$

con le condizioni iniziali

$$A_0 = b_0, \quad A_{-1} = 1, \quad (AI.3 - a)$$

$$B_0 = 1, \quad B_{-1} = 0. \quad (AI.3 - b)$$

Si può notare che il vero valore della frazione continua viene approssimato alternativamente da sopra e da sotto.

Le frazioni continue approssimano piuttosto bene gli irrazionali. Per esempio l'approssimazione del second'ordine di π , cioè $[3; 7, 16]$, ha un errore inferiore a 10^{-7} .

Inoltre molti irrazionali presentano una notevole regolarità nello sviluppo in frazioni continue, a differenza dell'usuale rappresentazione decimale. Ad esempio il numero e si scrive:

$$e = [2; 1, 2, 1, 1, 4, 1, 1, 6, 1, 1, 8, \dots].$$

Inoltre gl'irrazionali che possono essere espressi per mezzo di sole radici quadrate hanno uno sviluppo in frazioni continue periodico. Ad esempio la sezione aurea si scrive:

$$\sigma = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} = [1; \bar{1}] \quad (AI.4)$$

(dove $[1; \bar{1}]$ significa $[1; 1, 1, 1, 1, \dots]$).

Il numero $1 + \sqrt{2}$, associato alla catena di ottonacci, si scrive invece:

$$1 + \sqrt{2} = [2; \bar{2}]. \quad (AI.5)$$

La sezione aurea ed i numeri di Fibonacci

Se vogliamo dividere un segmento in due parti in modo che il rapporto tra la misura dell'intero segmento e quella della parte piú lunga sia uguale al rapporto tra la misura di quest'ultima e quella della parte piú corta, tale rapporto dev'essere uguale alla sezione aurea. Infatti detto y l'inverso della stessa, la richiesta precedente si traduce nella porzione:

$$1:y = y:(1-y),$$

da cui ricaviamo

$$y^2 = 1 - y,$$

che, posto $x = y^{-1}$, porta all'equazione

$$x^2 - x - 1 = 0, \quad (AI.6)$$

che definisce la sezione aurea (l'altra radice è negativa e pari a $-\sigma^{-1}$).

Grazie alla (AI.6) è possibile esprimere tutte la potenze intere di σ in termini di combinazione lineare di σ^1 e σ^0 . Si ha infatti dalla (AI.6):

$$\sigma^2 = \sigma + 1; \quad (AI.6')$$

moltiplicando ambo i membri per σ ed applicando nuovamente la (AI.6), si ottiene

$$\sigma^3 = 2\sigma + 1.$$

Si può dimostrare facilmente per induzione che in generale

$$\sigma^n = F_{n-1}\sigma + F_{n-2}, \quad (AI.7)$$

dove $n \geq 0$ e gli F_n sono i numeri di Fibonacci definiti dalla (I.1.12).

Un risultato identico si ottiene per l'altra radice della (AI.6):

$$(-\sigma^{-1})^n = F_{n-1}(-\sigma^{-1}) + F_{n-2}. \quad (AI.8)$$

Sottraendo la (AI.8) alla (AI.6), otteniamo

$$(\sigma + \sigma^{-1})F_{n-1} = \sigma^n - (-\sigma^{-1})^n,$$

e, notando che $\sigma + \sigma^{-1} = \sqrt{5}$, otteniamo la (I.1.12').

Possiamo riscrivere la (AI.8) nella forma:

$$\sigma^{-n} = (-1)^n(F_n - F_{n-1}\sigma), \quad (AI.9)$$

Se definiamo i numeri di Fibonacci con indice negativo facendo uso della legge di ricorsione retrograda

$$F_{n-1} = F_{n+1} - F_n,$$

notando che si ha

$$F_{-n} = (-1)^n F_{n-2} \quad (AI.10)$$

(come si mostra facilmente per induzione), si vede che la (AI.7) può essere intesa per ogni $n \in \mathbf{Z}$.

La rappresentazione in frazioni continue (AI.4) si ottiene immediatamente osservando che la (AI.6') può essere riscritta come:

$$\sigma = 1 + \frac{1}{\sigma}.$$

Poiché in questo sviluppo i b_i sono tutti uguali a 1, la ricorsione cui debbono soddisfare A_k e B_k è quella dei numeri di Fibonacci, e tenendo conto delle condizioni iniziali si ha:

$$A_k = F_{k+1} \quad B_k = F_k,$$

e quindi la frazione approssimante di ordine k della sezione aurea è data da $\frac{F_{k+1}}{F_k}$.

Vi sono molte altre interessanti proprietà dei numeri di Fibonacci, tra cui quella di poter esprimere ogni intero mediante una somma di essi (tale rappresentazione è unica se imponiamo che nella somma ciascun numero di Fibonacci compaia al più una volta e che non si faccia mai uso di due F_n adiacenti). Ricorderemo ancora solamente quelle legate alla matrice \mathbf{W} definita in (I.1.15). Si dimostra per induzione che:

$$\mathbf{W}^n = \begin{pmatrix} F_n & F_{n-1} \\ F_{n-1} & F_{n-2} \end{pmatrix}, \quad (\text{AI.11})$$

da cui segue, prendendo il determinante da ambo i membri, che:

$$F_n F_{n-2} - F_{n-1}^2 = (-1)^n. \quad (\text{AI.12})$$

Un'immediata applicazione della (AI.11) permette di calcolare la cardinalità dei link A e B nell'approssimante finito T_n .

APPENDICE II

La decimazione in una generica catena unidimensionale

Consideriamo un generico razionale minore di 1

$$\frac{p}{q} = [0; n_1, n_2, n_3, \dots] \quad (AII.1)$$

e riscriviamolo come

$$\frac{p}{q} = \frac{1}{n_1 + \frac{p'}{q'}}, \quad (AII.2 - a)$$

con

$$\frac{p'}{q'} = [0; n_2, n_3, \dots]. \quad (AII.2 - b)$$

Possiamo riscrivere la (AII.2-a) come:

$$\frac{p}{q} = \frac{1}{n_1 - 1 + \frac{1}{0 + \frac{1}{1 + \frac{p'}{q'}}}}, \quad (AII.2')$$

che piú succintamente riscriviamo

$$\frac{p}{q} = \frac{1}{n_1 - 1 + w_0 w_1 \frac{p'}{q}}, \quad (AII.4)$$

dove le funzioni w_0 e w_1 sono definite come segue:

$$w_0(x) = \frac{1}{1+x}, \quad (AII.5 - a)$$

$$w_1(x) = \frac{1}{0+x}. \quad (AII.5 - b)$$

Per induzione si ha:

$$\frac{p}{q} = \frac{1}{1 + \underbrace{w_0 w_1 \dots w_0 w_1}_{n_1 - 1 \text{ volte}} \frac{p'}{q}},$$

e quindi

$$[0; n_1, n_2, n_3, \dots] = w_1 \underbrace{w_0 w_1 \dots w_0 w_1}_{n_1 - 1 \text{ volte}} [0; n_2, n_3, \dots]. \quad (AII.6)$$

Consideriamo come si possa applicare la procedura precedente ai numeri della forma $\frac{1}{n}$ con $n > 1$. Essi hanno una rappresentazione in frazioni continue data da $[0; n]$, che,

con abuso di notazione, si può scrivere anche come $[0; n - 1, 1]$. Secondo quanto appena mostrato si ha:

$$[0; n] = [0; n - 1, 1] = w_1 \underbrace{w_0 w_1 \cdots w_0 w_1}_{n-2 \text{ volte}} [0; 1], \quad (AII.7)$$

e notando che

$$[0; 1] = w_1(0), \quad (AII.8)$$

possiamo riscrivere la (AII.7) come:

$$[0; n] = w_1 \underbrace{w_0 w_1 \cdots w_0 w_1}_{n-2 \text{ volte}} w_1(0). \quad (AII.9)$$

Siamo ora in grado di associare ad ogni razionale un'opportuna stringa di elementi w_0 e w_1 . Infatti sia

$$\alpha_n = [0; a_1, a_2, \dots, a_n], \quad (AII.10)$$

allora, applicando ripetutamente la (AII.6) e quindi la (AII.9), si ha

$$\alpha_n = W_n(0), \quad (AII.11)$$

dove

$$W_n = w_1 \underbrace{w_0 w_1 \cdots w_0 w_1}_{a_1-1 \text{ volte}} w_1 \underbrace{w_0 w_1 \cdots w_0 w_1}_{a_2-1 \text{ volte}} \cdots w_1 \underbrace{w_0 w_1 \cdots w_0 w_1}_{a_n-2 \text{ volte}} w_1. \quad (AII.12)$$

Se vogliamo rappresentare un irrazionale α in questo modo, dobbiamo semplicemente considerare la successione $\{\alpha_n\}$ delle frazioni approssimanti e la associata successione di stringhe $\{W_n\}$. Si avrà

$$\alpha = W(0), \quad (AII.13)$$

con

$$W = \lim_{n \rightarrow \infty} W_n. \quad (AII.14)$$

Passando al problema delle catene quasiperiodiche unidimensionali, notiamo che l'azione di w_0 e w_1 su di un razionale, cui corrisponde una certa catena periodica, produce

un altro razionale, cui corrisponderà un'altra catena periodica. Data la forma di w_0 e w_1 è facile vedere che la nuova catena è legata alla prima dalle leggi

$$\begin{aligned} A &\longrightarrow B, \\ B &\longrightarrow A, \end{aligned} \tag{AII.15}$$

nel caso si applichi w_0 , e

$$\begin{aligned} A &\longrightarrow AB, \\ B &\longrightarrow A, \end{aligned} \tag{AII.16}$$

nel caso si applichi w_1 (si noti che quest'ultima legge di sostituzione corrisponde alla (I.1.13) del Fibonacci). Non essendoci ambiguità, indicheremo le leggi (AII.15) e (AII.16) ancora con w_0 e w_1 .

Se chiamiamo P_n la catena periodica associata al razionale α_n , introdotto precedentemente, e T_n la sua cella elementare, cioè $P_n = \dots * T_n * T_n * T_n * \dots$, allora potremo scrivere

$$T_n = W_n(A), \tag{AII.17}$$

dove W_n è definito in (AII.12) (si noti che la catena $\dots * A * A * A * \dots$ corrisponde ad una retta con inclinazione 0).

Notando che la stringa che definisce W_n in (AII.12) contiene s_n elementi, dove

$$s_n = 2(a_1 + a_2 + \dots + a_n) - n - 1, \tag{AII.28}$$

possiamo scrivere

$$W_n = v_1 v_2 \dots v_{s_n}, \tag{AII.19}$$

dove la successione $\{v_i\}$ ha le seguenti proprietà:

- I) $v_i \in \{w_0, w_1\}$
- II) $v_1 = v_{s_n-1} = v_{s_n} = w_1$
- III) $v_i = w_0 \Rightarrow v_{i\pm 1} = w_1$

Se invertiamo la relazione (AII.17), possiamo scrivere

$$A = (v_{s_n})^{-1} (v_{s_n-1})^{-1} \dots (v_2)^{-1} (v_1)^{-1} T_n. \tag{AII.20}$$

Quest'equazione sostanzialmente ci dice come si deve decimare la catena P_n per ottenere in s_n passi una catena periodica.

La rinormalizzazione

Consideriamo ora un problema di hopping definito su di una catena unidimensionale quasiperiodica, ottenuta col metodo della proiezione, con interazioni a primi vicini.

Sia α l'irrazionale ad essa associato. Consideriamo quindi la successione di catene periodiche P_n associate agli approssimanti razionali α_n , ottenuti troncando la rappresentazione in frazioni continue di α .

Come abbiamo visto, al razionale α_n possiamo associare la stringa W_n e, tramite la (AII.20), sappiamo come decimare P_n per arrivare ad un sistema periodico.

Per quanto riguarda i parametri che descrivono il sistema, dobbiamo notare che, essendo possibile la configurazione BB , il cui sito corrispondente chiameremo δ , dovremo introdurre anche il potenziale L_δ . Si noti tuttavia che la presenza di gruppi BB corrisponde a rette con inclinazione maggiore di 1, mentre la presenza di gruppi AA corrisponde a rette con inclinazione minore di 1. Quindi non potremo mai avere contemporaneamente siti α e δ .

Per quanto riguarda la rinormalizzazione dei parametri, è immediato verificare che a $(w_0)^{-1}$ corrisponde la seguente:

$$L'_\alpha = L_\delta, \quad (\text{AII.21} - a)$$

$$L'_\beta = L_\gamma, \quad (\text{AII.21} - b)$$

$$L'_\gamma = L_\beta, \quad (\text{AII.21} - c)$$

$$J'_A = J_B, \quad (\text{AII.21} - d)$$

$$J'_B = J_A, \quad (\text{AII.21} - e)$$

mentre alla decimazione $(w_1)^{-1}$ corrisponde, per la (II.4.9):

$$L'_\alpha = L_\gamma - \frac{J_A^2 + J_B^2}{L_\beta - E}, \quad (\text{AII.22} - a)$$

$$L'_\beta = L_\gamma - \frac{J_B^2}{L_\beta - E}, \quad (\text{AII.22} - b)$$

$$L'_\gamma = L_\alpha - \frac{J_A^2}{L_\beta - E}, \quad (\text{AII.22} - c)$$

$$L'_\delta = L_\alpha \quad (\text{AII.22} - d)$$

$$J'_A = \frac{J_A J_B}{L_\beta - E}, \quad (\text{AII.22} - e)$$

$$J'_B = J_A \quad (\text{AII.22} - f)$$

Applicando ripetutamente le (AII.21) e le (AII.22), secondo che prescrive la (AII.20), giungiamo infine alla catena periodica ... AAA... con un certo potenziale efficace $L_\alpha^{per}(E)$ ed un integrale di hopping efficace $J_A^{per}(E)$. Per la (II.4.14), lo spettro del sistema sar  dato dai valori di E che soddisfano la disequazione:

$$\left| \frac{E - L_\alpha^{per}(E)}{2J_A^{per}(E)} \right| \leq 1. \quad (\text{AII.23})$$

Da un punto di vista computazionale, il metodo presente permette di calcolare lo spettro di P_n per un generico razionale α_n .

BIBLIOGRAFIA

- [ALS] - Ashraff J.A., Luck J-M., Stinchcombe R.B., *Phys. Rev. B* **41** 4314 (1990).
- [AM] - Affleck I., Marston J.B., *Phys. Rev. B* **37** 3774 (1988).
- [AP] - Allouche J-P., Peyrière J., *C.R. Acad. Sci. (Paris)* **302** 1135 (1986).
- [AS] - Ashraff J.A., Stinchcombe R.B., *Phys. Rev. B* **39** 2670 (1989).
- [BB] - Butler F.A., Brown E., *Phys. Rev.* **166** 630 (1968).
- [Ben] - Benza V.G., *Quantum Ising Model Over Aperiodic Chains*, non pubblicato.
- [BT] - Bombieri E., Taylor J., *Contemp. Math.* **64** 241 (1987).
- [BT2] - Bombieri E., Taylor J.E., *J. Physique* **47** C3-19 (1986).
- [Cal] - Callegaro V., *Proprietà spettrali dei quasicristalli unidimensionali*, Cap. 2, tesi, Milano (1989).
- [Cas] - Casdagli M., *Commun. Math. Phys.* **107**, 295 (1986).
- [CSM] - Cheng Z., Savit R., Merlin R., *Phys. Rev. B* **37** 4375 (1988).
- [dB] - de Bruijn N.G., *Kon. Nederl. Akad. Wetensch. Proc. Ser. A (= Indagat. Math.)* **39** (1981).
- [DO] - Duneau M., Oguey C., *J. Phys. France* **51** 5 (1990).
- [FATK] - Fujiwara T., Arai M., Tokihiro T., Kohmoto M., *Phys. Rev. B* **37** 2797 (1988).
- [Gra] - Gratias D., *Introduction à la quasicristallographie in Du Cristal à l'Amorphe*, editeur: C. Godrèche, Les Editions de Physique, Les Ulis, France (1988).
- [Har] - Harper P.G., *Proc. Phys. Soc. Lond. A* **68** 874 (1955).
- [Has] - Hasse H., *Number Theory*, Springer-Verlag (1980).
- [HK] - Hatakeyama T., Kaminura H., *Solid State Communications* **62** 79 (1987).
- [Hof] - Hofstadter D.R., *Phys. Rev. B* **14** 2239 (1976).
- [HW] - Hardy G.H., Wright E.M., *An Introduction to the Theory of Numbers*, Oxford, Clarendon (1960).
- [Jar] - Jarić M.V., *Phys. Rev. B* **34** 4685 (1986).
- [KB] - Kohmoto M., Banavar J.R., *Phys. Rev. B* **34** 563 (1986).
- [KD] - Katz A., Duneau M., *J. Physique* **47** 181 (1986).
- [KKT] - Kohmoto M., Kadanoff L.P., Tang C., *Phys. Rev. Lett.* **50** 1870 (1983).
- [KO] - Kohmoto M., Oono Y., *Phys. Lett* **102** A 145 (1984).
- [Koh] - Kohmoto M., *Phys. Rev. B* **39** 11943 (1989).
- [KS] - Kohmoto M., Sutherland B., *Phys. Rev. B* **34** 3849 (1986).
- [KT] - Kadanoff L.P., Tang C., *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **81** 1276 (1984).
- [Lev1] - Levitov L.S., *Europhys. Lett.* **6** (6) 517 (1988).
- [Lev2] - Levitov L.S., *Commun. Math. Phys.* **119**, 627 (1988).
- [Lev3] - Levitov L.S., *J. Phys. France* **50** 707 (1989).
- [NN] - Niu Q., Nori F., *Phys. Rev. Lett.* **57** 2057 (1986).
- [ON] - Odagaki T., Nguyen D., *Phys. Rev. B* **33** 2184 (1986).
- [Pei] - Peierls R.E., *Z. Phys.* **80** 763 (1933).
- [Pen] - Penrose R., *Bull. Inst. Math. Appl.* **10** 266 (1974).
- [SB] - Sire C., Bellissard J., *Europhys. Lett.* **11** (5) 439 (1990).
- [SBGC] - Schechtman D., Blech I., Gratias D., Cahn J.W., *Phys. Rev. Lett.* **53** 1951 (1984).
- [Sir] - Sire C., *Europhys. Lett.* **10** (5) 483 (1989).

- [SLS] – Socolar J.E.S., Lubensky T.C., Steinhardt P.J., *Phys. Rev. B* **34** 3345 (1986).
[SMS] – Sire C., Mosseri R., Sadoc J.F., *J. Phys. France* **50** 3463 (1989).
[SO] – Steinhardt P.J., Ostlund S., *The Physics of Quasicrystals*, World Scientific (1980).

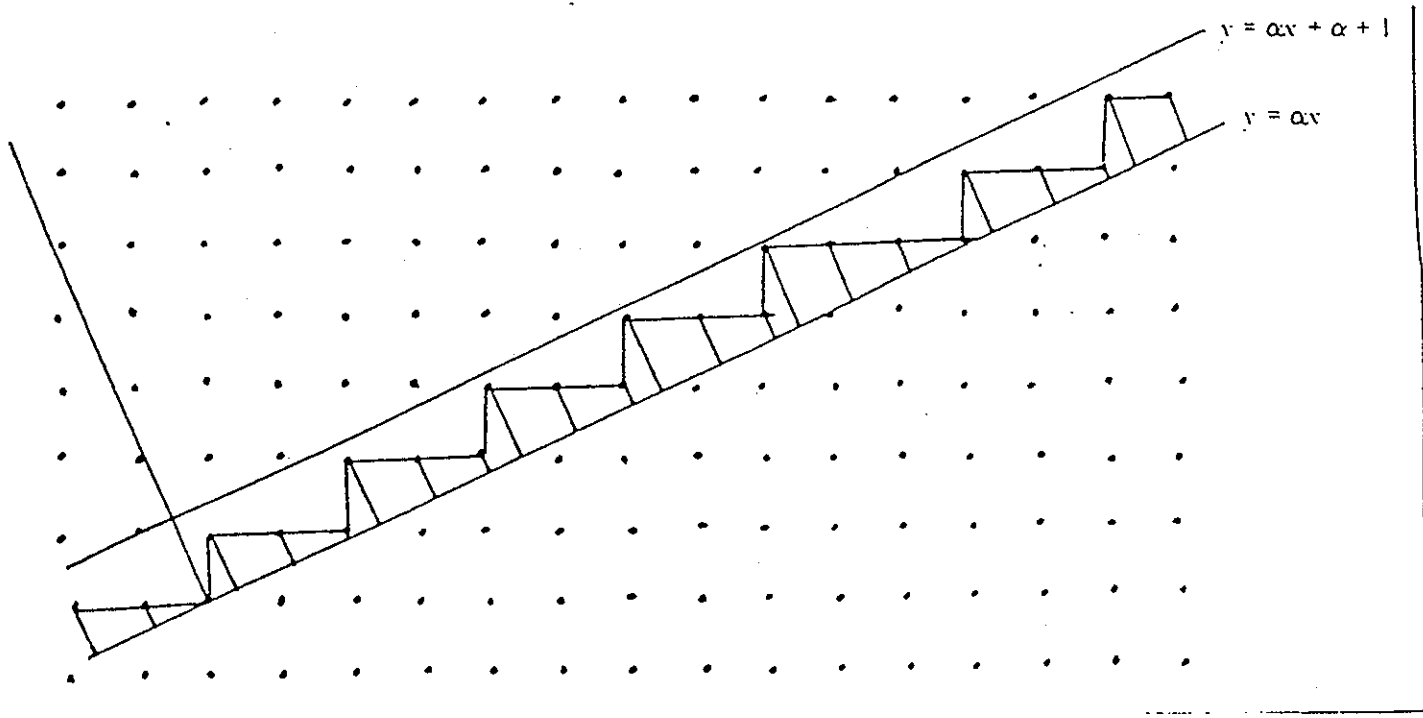


fig.1 - Una catena unidimensionale ottenuta per proiezione.
 Se $\alpha = \frac{1}{\phi}$ abbiamo la catena di Fibonacci.

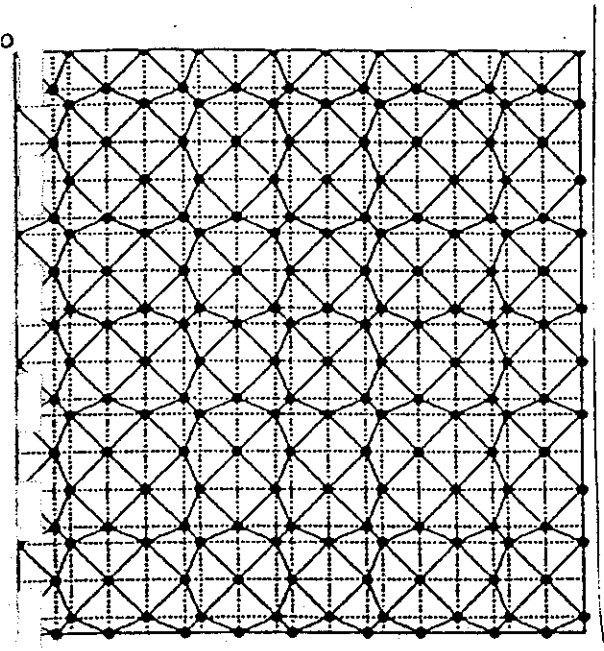
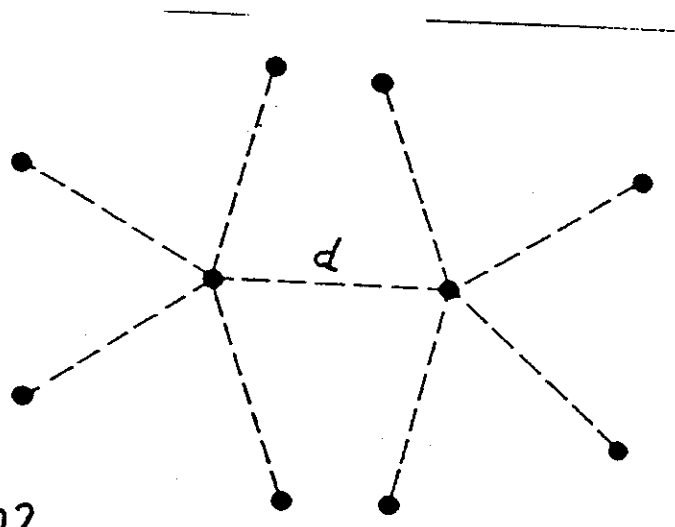


fig.2 - Il labirinto ottenuto dal quasireticolo bidimensionale di ottonacci.

fig.3 - Due centri di simmetria pentagonale ad una distanza d generano punti la cui distanza è inferiore a d.



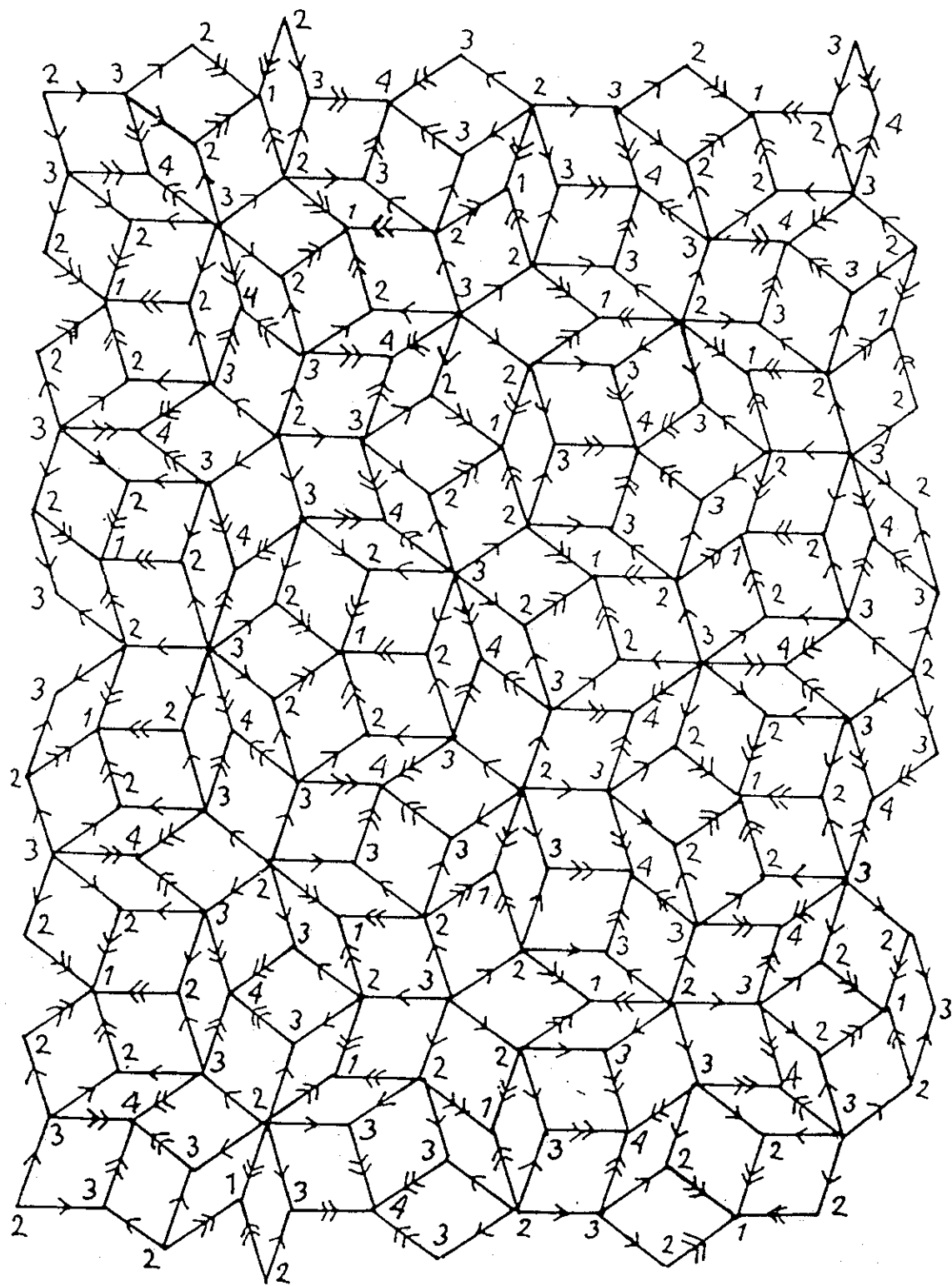


fig.4-a - La tassellatura di Penrose.

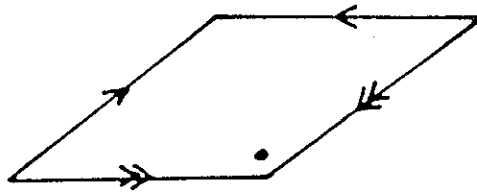
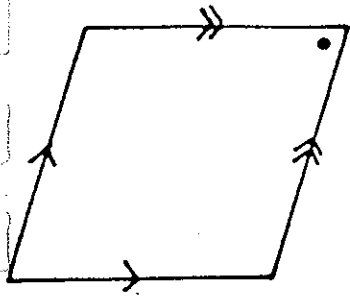
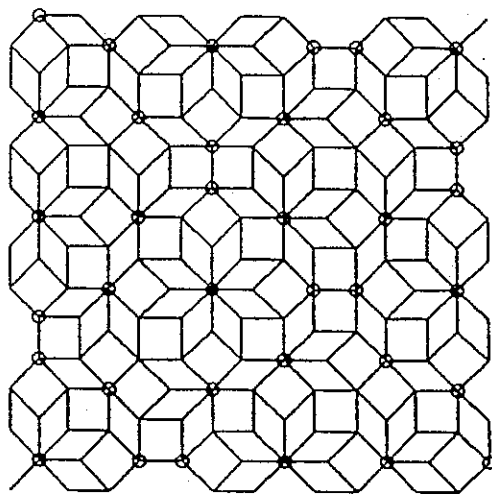
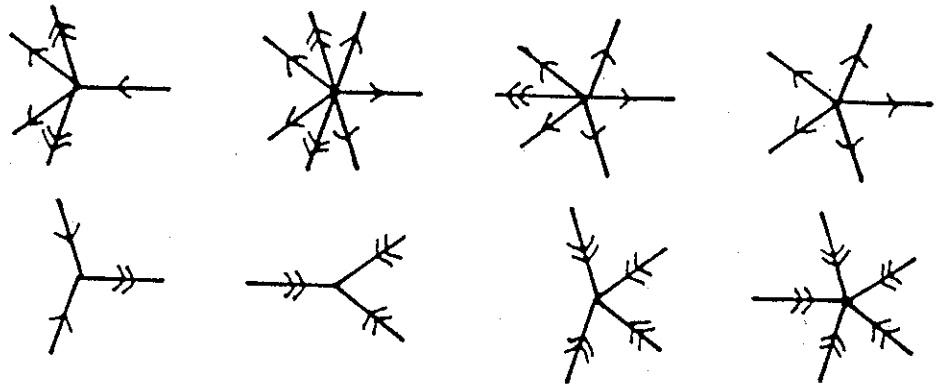


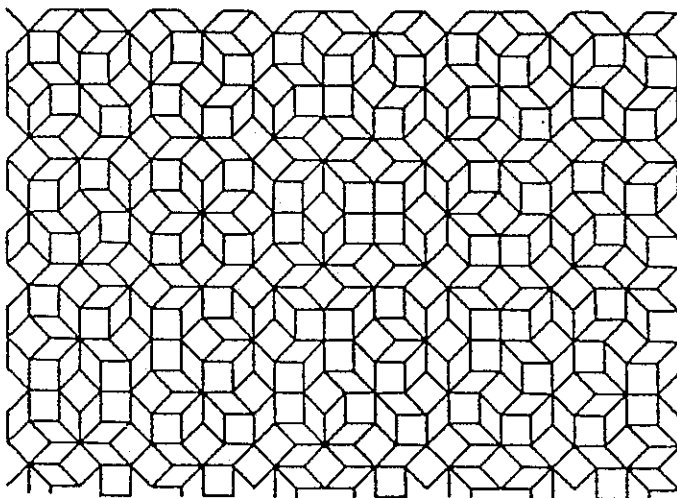
fig.4-b - I due rombi con cui si costruisce il Penrose.

fig.4-c - I possibili vertici nel Penrose.



a)

fig.5 - Il quasicristallo ottagonale (nella figura a è evidenziato il labirinto, che risulta essere un sotto-reticolo del quasicristallo ottagonale).



b)

fig.6 - Il quasicristallo dodecagonale.

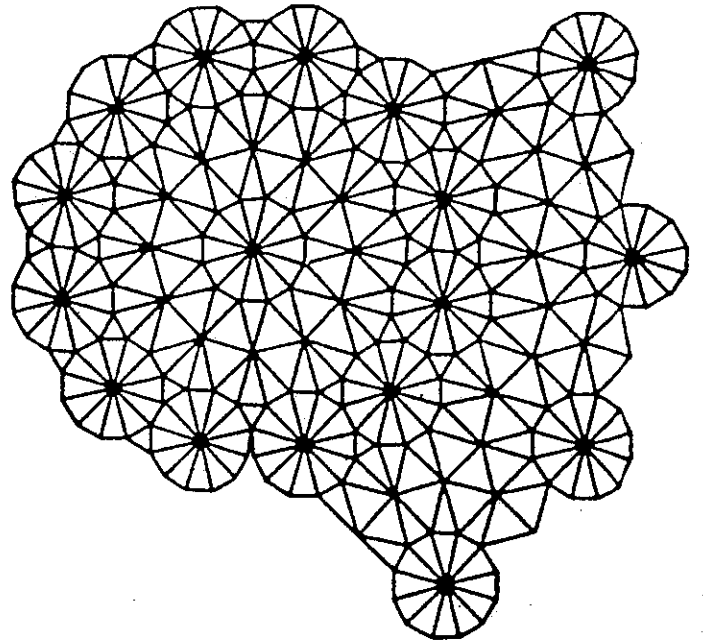


fig.7 - Il grafico duale (linee sottili) che deriva da una tassellatura di rombi (linee grosse).

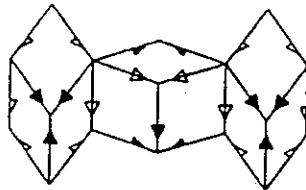
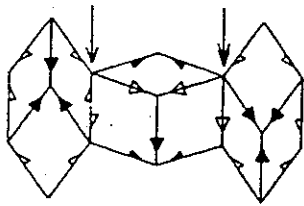
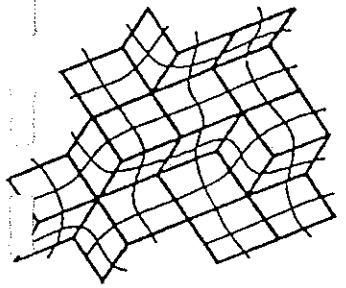


fig.8 - Il ribaltamento di un esagono nel Penrose produce una violazione solo coi due esagoni confinanti.

fig.9 - L'effetto di un fasone nello spazio duale e nello spazio reale.

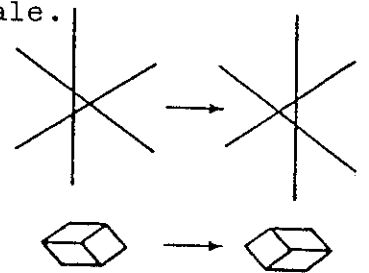


fig.10 - Quando tre griglie che soddisfano alla condizione di seconda intersezione si intersecano, i punti d'intersezione formano una riga.

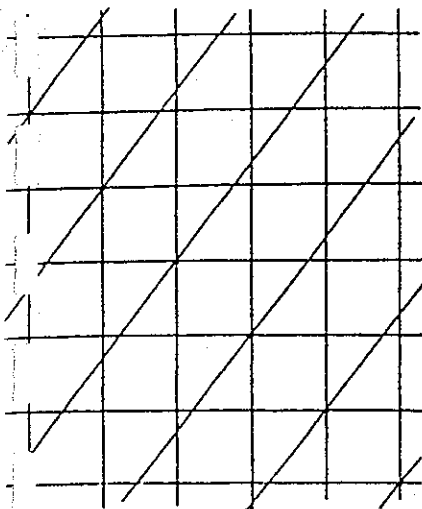


fig.11 - La superficie $\gamma^2 = x^2 + y^2 + z^2 - 2xyz - 1$.

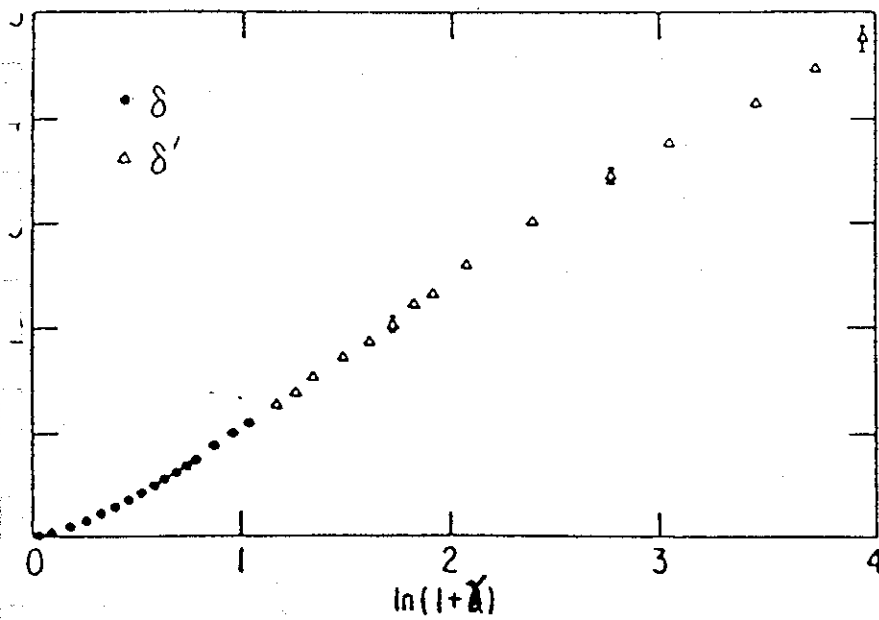
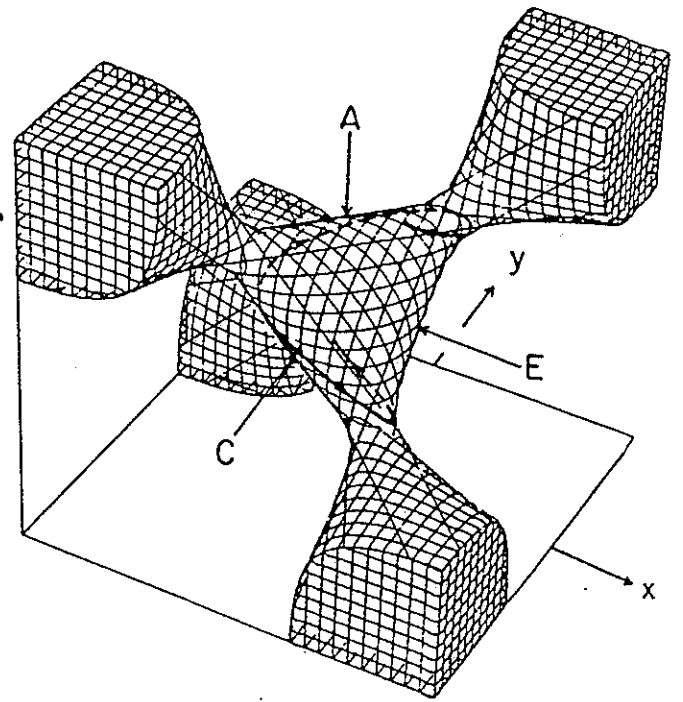


fig.12 - L'esponente di scaling globale δ in funzione di γ .

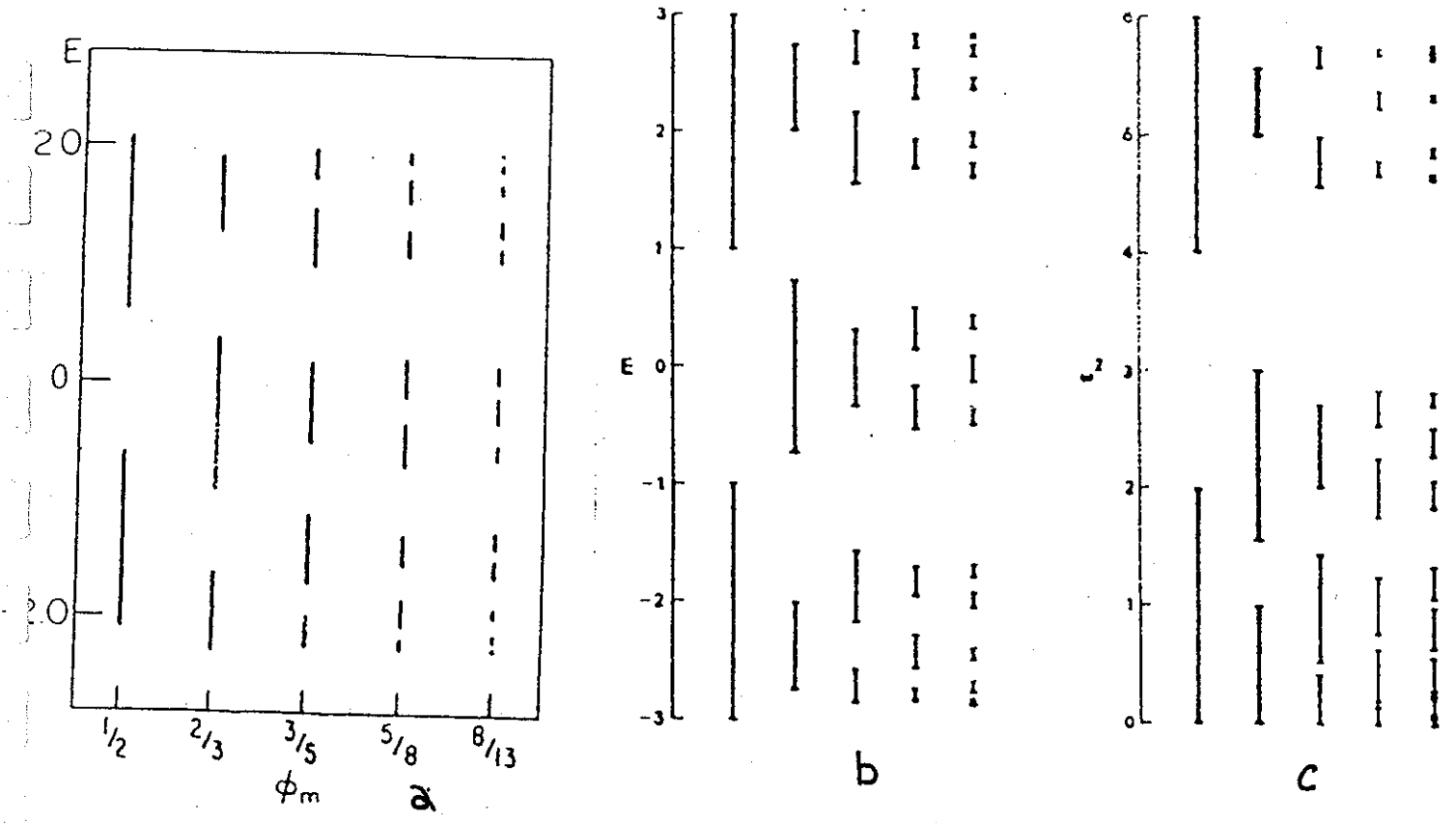
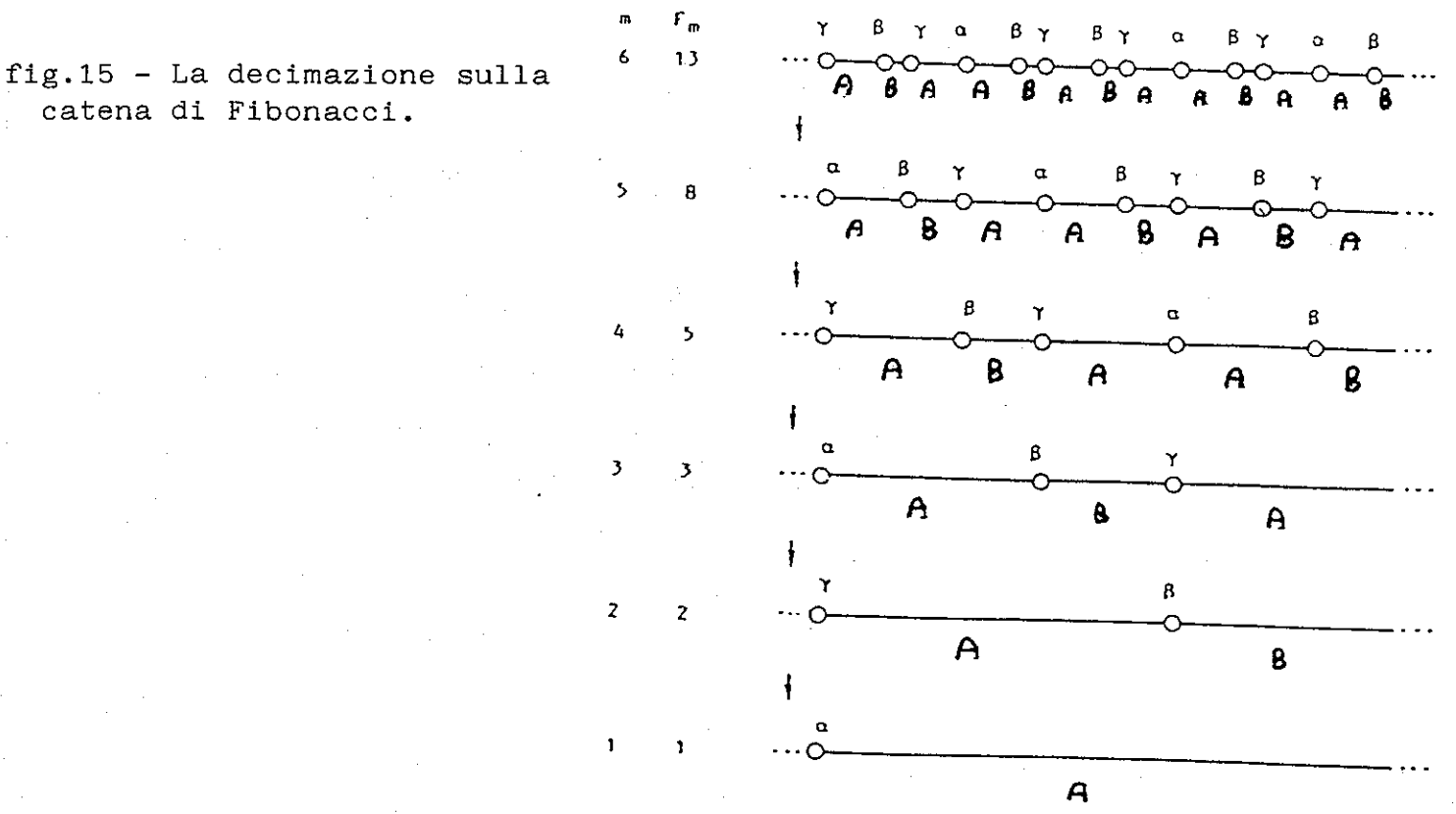


fig.13 - Lo spettro nei problemi di hopping su alcuni approssimanti della catena di Fibonacci.
 a) Problema elettronico con potenziali diversi
 b) Problema elettronico con integrali di hopping diversi
 c) Problema fononico



INDICE

Introduzione pag. I

CAPITOLO I

§I.1–Strutture quasiperiodiche pag. 1

Funzioni quasiperiodiche – Cristalli incommensurabili – Quasicristalli – Reticoli di riferimento e cristalli modulati (I)

§I.2–Il metodo della proiezione pag. 8

Descrizione del metodo – Figure di diffrazione – Ricerca della dimensione minimale – Approssimazioni col metodo della proiezione – Reticoli di riferimento e cristalli modulati (II)

§I.3–Il metodo duale generalizzato pag. 17

Descrizione del metodo

§I.4–Sulla stabilità dei quasicristalli pag. 19

Fononi e fasoni – La condizione di seconda intersezione

CAPITOLO II

§II.1–Problemi su reticoli pag. 29

L'approssimazione di tight-binding – Il caso periodico unidimensionale – I casi periodici bidimensionali

§II.2– Problemi su reticoli bidimensionali con campo magnetico pag. 37

§II.3–Problemi su quasireticoli pag. 41

Quasireticoli unidimensionali – Quasireticoli bidimensionali

§II.4–L'approccio funzionale e il gruppo di rinormalizzazione pag. 46

L'approccio funzionale – La decimazione – Proprietà per $E = 0$ – La densità integrata degli stati – Le proprietà spettrali – L'approccio proiettivo

CAPITOLO III

- §III.1–Il quasireticolato di Fibonacci e la trace map pag. 54
La matrice di trasferimento – La trace map – Problemi sul quasireticolato di Fibonacci
- §III.2–Il quasireticolato di Fibonacci e la teoria perturbativa pag. 59
- §III.3–Il quasireticolato di Fibonacci e la decimazione pag. 60
Proprietà della catena di Fibonacci – Conteggio dei link e dei siti – Il problema di hopping sul quasireticolato di Fibonacci – La decimazione – Relazione con la trace map
- §III.4–Il problema fononico per $\omega^2 \rightarrow 0$ pag. 67
La rinormalizzazione in $\omega^2 = 0$ – La rinormalizzazione per $\omega^2 \rightarrow 0$ – La prima banda fononica

CAPITOLO IV

- §IV.1–Il quasireticolato di Fibonacci con numero di coordinazione variabile pag. 72
- §IV.2–Il caso J_{AB} pag. 72
La prima rinormalizzazione – Lo stato localizzato – Relazioni con la trace map
- §IV.3–Il caso J_{AA} pag. 81
La prima rinormalizzazione – La seconda rinormalizzazione – Lo stato localizzato – Relazioni con la trace map
- §IV.4–Il caso generale pag. 85
Lo spazio dei parametri – La rinormalizzazione
- §IV.5–Conclusioni pag. 90
- Appendice I pag. 91
Le frazioni continue – La sezione aurea ed i numeri di Fibonacci
- Appendice II pag. 95
La decimazione in una generica catena unidimensionale – La rinormalizzazione

Bibliografia

pag. 100

Figure

pag. 102