

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA**  
**FACULTAD DE CIENCIAS**



**CRISTALES HIPERBÓLICOS Y TEORÍA DE LA ELASTICIDAD EN  
ESPACIOS NO EUCLIDIANOS**

TESIS

que para obtener el título de

FÍSICO

Presenta:

**ARIEL MORGAN SANCHEZ LOPEZ**

Ensenada, Baja California, México, Noviembre de 2024



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA  
Facultad de Ciencias,  
CAMPUS ENSENADA.



**“Cristales hiperbólicos y teoría de la elasticidad en espacios no euclidianos.”**

TESIS

PARA CUBRIR LOS REQUISITOS NECESARIOS PARA OBTENER EL TÍTULO DE

Física

PRESENTA

**Ariel Morgan Sánchez Lopez**  
**361512.**

A quien el Comité de Tesis autoriza el trabajo terminal y de acuerdo con el Art. 19 del R.G.E.P.E.P, emite los siguientes votos aprobatorios mediante rubrica:

Dr. Ramon Carrillo Bastos  
**DIRECTOR**

*SELENE SOLORZA*  
Dra. Selene Solorza Calderón  
**CODIRECTORA**

Dr. Jorge Alberto Villavicencio  
Aguilar  
**SINODAL**

Dr. Roberto Romo Martínez  
**SINODAL**

Dr. Carlos Yee Romero  
**SINODAL**

**“Por la Realización Plena del Ser”**

# Agradecimientos

A mis padres y a mis hermanos, por el gran apoyo para lograr este proyecto.

A mi tío Antonio, quien me guió al inicio de la carrera y quien me apoyó en todo momento con material bibliográfico.

A mis profesores de la Facultad de Ciencias, en particular quiero mencionar a la Dra. Brenda de la Rosa por su calida enseñanza (sobre todo su paciencia), al Dr. Villavicencio por su agradable compañía y apoyo al escribir esta tesis y al Dr. Ramón Carrillo Bastos por motivarme a salir de mi zona de confort y enseñarme a ser independiente en mi aprendizaje (y de nueva cuenta por su infinita paciencia).

Quiero agradecer a mi roomie Alfonso Paredes por acompañarme en mi trayecto por la Facultad de Ciencias y al próximo físico Saul Alfonso Macias por darme de su gran amistad.

Por último quiero mencionar a mi profesora de preparatoria Fís. Alejandra Ureña por acercame a este mundo tan horrible y tan bello que es la física.

**RESUMEN** de la tesis que como requisito parcial para la obtención de la Licenciatura en Física presenta **ARIEL MORGAN SANCHEZ LOPEZ**. Ensenada, Baja California, México, Noviembre de 2024.

## **CRISTALES HIPERBÓLICOS Y TEORÍA DE LA ELASTICIDAD EN ESPACIOS NO EUCLIDIANOS**

Resumen aprobado por:

---

Ramón Carrillo Bastos

Director de Tesis

Se desarrollaron herramientas para estudiar deformaciones elásticas en el espacio hiperbólico destacando el uso del tensor de deformaciones. En particular, se analizarán deformaciones sobre cristales en este espacio, identificando dos clases de esfuerzos compatibles con las restricciones impuestas por el espacio hiperbólico. Además se buscó interpretar físicamente los resultados obtenidos a lo largo de este trabajo. Para el estudio de estas deformaciones, se utilizó la ecuación de Schrödinger para una red periódica de pozos de potencial, empleando la aproximación de amarre fuerte; comúnmente utilizada en el estudio de cristales en espacios no hiperbólicos. Gracias a la implementación de herramientas computacionales proporcionadas por la librería LAPACK y el uso del lenguaje de programación Fortran 90 fue posible obtener una serie de resultados importantes para el desarrollo de esta tesis. Además, se propuso de manera teórica un tensor de deformaciones dentro del modelo de disco de Poincaré, esto respaldado por la definición del tensor de deformaciones y las generalizaciones que ofrece el uso de coordenadas curvilíneas. Uno de los resultados más importantes de la aplicación de estas deformaciones fue la caracterización de los espectros de eigenvalores antes y después de las deformaciones usando mapas de densidad de probabilidad como herramienta de visualización, al mismo tiempo encontramos una ruptura de simetría sobre los estados degenerados del cristal hiperbólico  $\{8, 3\}$  abriendo paso a posibles investigaciones futuras.

**Palabras Clave:** Cristal hiperbólico, esfuerzo, disco de Poincaré, densidad de probabilidad, simetría.

**ABSTRACT** of the thesis that as a partial fulfillment for obtaining the B.S. in Physics presents **ARIEL MORGAN SANCHEZ LOPEZ**. Ensenada, Baja California, México, November, 2024.

## HYPERBOLIC LATTICES AND ELASTICITY THEORY IN NON-EUCLIDEAN SPACES

Approved by:

---

Ramón Carrillo Bastos

Thesis Advisor

We introduce new theoretical tools for studying inelastic deformations in hyperbolic space, with a particular emphasis on the use of the deformation tensor. In particular, deformations on crystals in this space were analyzed, identifying two classes of stresses compatible with the constraints imposed by hyperbolic space. Additionally, an effort was made to physically interpret the results obtained throughout this work. For the study of these deformations, the Schrödinger equation was used for a periodic lattice of potential wells, employing the tight-binding approximation, which is commonly used in the study of crystals in non-hyperbolic spaces. Thanks to the implementation of computational tools provided by the LAPACK library and the use of the Fortran 90 programming language, it was possible to obtain several important results for the development of this thesis. Moreover, a deformation tensor was theoretically proposed within the Poincaré disk model, supported by the definition of the deformation tensor and the generalizations offered by the use of curvilinear coordinates. One of the most significant results of applying these deformations was the characterization of eigenvalue spectra before and after the deformations, using probability density maps as a visualization tool. At the same time, a symmetry breaking was observed in the degenerate states of the hyperbolic crystal  $\{8, 3\}$ , paving the way for potential future investigations.

**Keywords:** Hyperbolic lattice, strain, Poincaré disk model, probability density, symmetry.

# Contenido

	Página
<b>Resumen en español</b>	<b>I</b>
<b>Resumen en inglés</b>	<b>II</b>
<b>Dedicatoria</b>	<b>III</b>
<b>Agradecimientos</b>	<b>IV</b>
<b>Contenido</b>	<b>v</b>
<b>Lista de Figuras</b>	<b>vii</b>
<b>Lista de Tablas</b>	<b>x</b>
<b>I.. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>II.. MARCO TEÓRICO</b>	<b>4</b>
II.1. Definición de un cristal en un espacio euclideo . . . . .	4
II.2. La ecuación de Schrödinger y su solución para un cristal unidimensional . . . . .	5
II.3. Teorema de Bloch desde el punto de vista de la teoría de grupos . . . . .	9
II.4. Geometría hiperbólica . . . . .	12
II.4.1. Modelo de disco de Poincaré y sus propiedades . . . . .	13
II.5. Cristales hiperbólicos . . . . .	18
II.6. Teoría de la elasticidad en espacios euclideos . . . . .	21
II.6.1. Restricciones de la cristalografía hiperbólica . . . . .	24
<b>III.. RESULTADOS</b>	<b>25</b>
III.1. Distribución de puntos sobre los cristales hiperbólicos regulares . . . . .	25
III.2. Análisis del cristal hiperbólico $\{8, 3\}$ sin deformación . . . . .	30
III.3. Densidad de probabilidad . . . . .	32
III.4. Tensor de deformaciones hiperbólico . . . . .	36
III.5. Descripción de deformaciones . . . . .	39
III.6. Cambios en la densidad de probabilidad . . . . .	45
III.7. Trabajo futuro . . . . .	57
<b>IV.. CONCLUSIONES</b>	<b>58</b>
<b>REFERENCIAS</b>	<b>60</b>
<b>A.. Cálculo computacional</b>	<b>62</b>
A.1. Generación del cristal . . . . .	62
A.2. Aplicación de las deformaciones . . . . .	67

A.3. Densidad de probabilidad . . . . .	70
---	----

# Lista de Figuras

Figura	Página
1. Representación de un cristal Kagome en el disco de Poincaré. Los puntos amarillos representan interacciones a primeros vecinos y las líneas azules son a próximos vecinos (recuperado de Kollár <i>et al.</i> (2019)). . . . .	2
2. Representación del uso de los vectores base en una red arbitraria (extraído de Simon (2013)). . . . .	4
3. Modelo de cristal unidimensional. . . . .	5
4. Eigenvalores $\varepsilon(k)$ del cristal unidimensional representados por la curva roja como función de $k$ . Al valle delimitado por las líneas naranjas se le conoce como primer zona de Brillouin. . . . .	8
5. Red de pozos de potencial, donde $a \in G$ para un grupo cíclico $G$ . . . . .	11
6. Cadena cerrada de pozos de potencial. . . . .	11
7. Proyección estereográfica desde $\mathbb{H}^2$ a $\mathbb{D}$ . . . . .	18
8. Distintos cristales hiperbólicos (Boettcher <i>et al.</i> (2022)). . . . .	19
9. Polígono hiperbólico $\{7, 3\}$ . Aquí $z = x + iy \in \mathbb{C}$ . . . . .	20
10. Cristal hiperbólico de tres capas de forma $\{7, 3\}$ . . . . .	20
11. Cristal hiperbólico $\{7, 3\}$ . . . . .	25
12. Resultado de considerar 168 sitios en la cuarta capa en el cristal $\{7, 3\}$ . . . . .	27
13. Resultado de considerar 203 sitios en la cuarta capa en el cristal $\{7, 3\}$ . . . . .	27
14. Resultado de considerar 567 sitios en la quinta capa en el cristal $\{7, 3\}$ . . . . .	28
15. Resultado de considerar 532 sitios en la tercer capa en el cristal $\{7, 3\}$ . . . . .	29
16. Cristal hiperbólico $\{8, 3\}$ , donde se observa que cada vértice del cristal tiene tres vecinos cercanos. . . . .	30
17. Cristal hiperbólico de la forma $\{8, 3\}$ considerando 3 capas. . . . .	31
18. Espectro de eigenvalores del cristal $\{8, 3\}$ . . . . .	32
19. Mapas de densidad de probabilidad alrededor de distintos estados de sitio. . . . .	33
20. Mapas de densidad de probabilidad alrededor de distintos estados de sitio. . . . .	34
21. Mapas de densidad de probabilidad alrededor de distintos estados de sitio. . . . .	34

## Lista de Figuras (continuación)

Figura		Página
22.	Evolución de la densidad de probabilidad asociada a distintos eigenvectores.	35
23.	Expansión sobre el cristal $\{8, 3\}$ .	41
24.	Contracción sobre el cristal $\{8, 3\}$ .	42
25.	Rotación de $1^\circ$ sobre el cristal $\{8, 3\}$ .	43
26.	Rotación de $45^\circ$ sobre el cristal $\{8, 3\}$ .	44
27.	Comparación de la densidad de probabilidad del $7^\circ$ estado de sitio después de aplicar una expansión.	46
28.	Espectro de eigenvalores del cristal $\{8, 3\}$ después de la expansión, en donde la curva azul correspondiente al espectro de eigenvalores sin deformar y la curva roja al espectro de eigenvalores después de la expansión.	46
29.	Mapas de densidad de probabilidad después de la expansión.	47
30.	Densidad de probabilidad en el estado $100^\circ$ después de la expansión.	48
31.	Contracción sobre el cristal $\{8, 3\}$ .	49
32.	Espectro de eigenvalores después de la contracción.	49
33.	Mapas de densidad de probabilidad después de la contracción.	50
34.	Espectro de eigenvalores después de una rotación de un grado.	50
35.	Torsión de un grado sobre el séptimo estado.	51
36.	Espectro de eigenvalores después de una rotación de 45 grados.	51
37.	Densidad de probabilidad del $100^\circ$ eigenvector después de la rotación.	52
38.	Torsión sobre el cristal $\{8, 3\}$ .	53
39.	Espectro de eigenvalores después de la deformación propuesta en la ecuación (85).	53
40.	Comparación de espectros de eigenvalores sujetos a diferentes deformaciones.	54
41.	Comparación del mapa de densidad de probabilidad alrededor del $100^\circ$ sitio, siendo la figura (a) el mapa de densidad de probabilidad del cristal hiperbólico $\{8, 3\}$ sin deformar y las figuras (b) y (c) son los mapas de densidad de probabilidad del cristal deformado, siendo (b).	55

## Lista de Figuras (continuación)

Figura	Página
42. Mapas de densidad de probabilidad después de la torsión en distintos sitios del cristal $\{8, 3\}$ . . . . .	55
43. Torsión sobre el $100^\circ$ estado. . . . .	56

# Lista de Tablas

Tabla

Página

# Capítulo I

## Introducción

En la escala natural, el universo parece plano, y por ello las ecuaciones de la física se describen en espacios euclidianos, donde la forma de medir distancias está determinada por el teorema de Pitágoras (Carroll *et al.* (2004)). Sin embargo, con la llegada de la teoría de la relatividad especial en 1905 (Ramos-Sánchez y Vidal (2018)), se descubrió la necesidad de estudiar otros tipos de espacios geométricos para poder describir fenómenos en velocidades cercanas a la de la luz. Junto con los trabajos de Lorentz y Einstein, se concluyó que el espacio-tiempo sigue las reglas de la geometría hiperbólica (Carroll *et al.* (2004)), lo que demuestra que la naturaleza de la física no se limita a descripciones en espacios planos.

En un espacio (ya sea plano o curvo), las partículas libres siguen trayectorias rectas, conocidas como geodésicas, y conservan el momento (Landau (2013)). Esta conservación está asociada a la invariancia espacial, y al querer estudiar la física de los fenómenos cristalográficos, la conservación del momento nos permite analizar el comportamiento de una partícula cuántica sujeta a una red periódica de pozos de potencial. Esta es la primera conexión entre la geometría del espacio y los fenómenos de la mecánica cuántica (Huang *et al.* (2024)).

Kollár *et al.* (2019) publicaron un artículo en la revista Nature Physics, titulado "Hyperbolic lattices in circuit quantum electrodynamics". En él, el resultado fundamental (y la base para esta tesis) fue demostrar que se pueden crear, a través de guías de ondas

coplanares, cristales cinéticos que son aperiódicos en el modelo cristalográfico clásico, pero periódicos en un espacio hiperbólico con curvatura negativa constante. Dado que no podemos emplear el concepto de traslación de manera directa en este espacio, y por lo tanto no es posible usar el teorema de Bloch de forma trivial (Boettcher *et al.* (2022)), estos cristales se convierten en una herramienta de estudio muy atractiva. Además, existe una gran variedad de cristales que permite la geometría hiperbólica; en particular, en el trabajo de Kollár *et al.* (2019) se estudia el cristal Kagome representado en la figura 1.

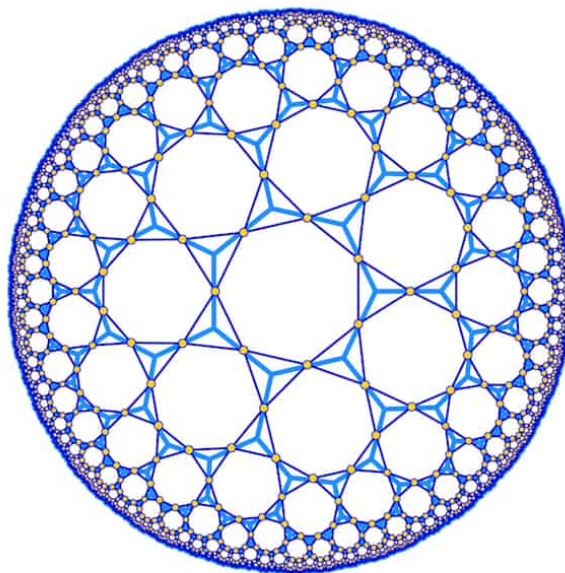


Figura 1: Representación de un cristal Kagome en el disco de Poincaré. Los puntos amarillos representan interacciones a primeros vecinos y las líneas azules son a próximos vecinos (recuperado de Kollár *et al.* (2019)).

Si bien, matemáticamente las redes cristalinas se definen por medio de una periodicidad perfecta, en la realidad los cristales presentan perturbaciones, siendo una de ellas las perturbaciones elásticas. Motivados por los resultados obtenidos en Oliva-Leyva y Wang (2017), surge la idea de desarrollar deformaciones mecánicas en este tipo de cristales,

las cuales se pueden estudiar mediante esfuerzos descritos por la teoría de la elasticidad. El propósito de este trabajo de tesis es estudiar cristales hiperbólicos formados por polígonos regulares, utilizando como representación el modelo del disco de Poincaré y sus implicaciones geométricas. Específicamente, se estudiarán las modificaciones en el espectro de valores propios de este sistema, utilizando una propuesta de deformaciones mecánicas sobre esta clase de cristales.

## Capítulo II

# MARCO TEÓRICO

### II.1. Definición de un cristal en un espacio euclideo

En esta sección tomaremos como base las definiciones de Simon (2013) acerca de conceptos básicos de cristalografía, empezando por la definición siguiente.

**Definición 2.1** Una **red** es un conjunto infinito de puntos definidos por la suma de un conjunto linealmente independiente de vectores base  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  y  $\mathbf{a}_3$ . En esta tesis serán conocidos como vectores base primitivos. En tres dimensiones se representa como

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3, \quad (1)$$

donde  $n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}$ . Hay que destacar que la elección de los vectores base no es única en  $\mathbb{R}^2$  y en  $\mathbb{R}^3$ , como se muestra en la figura 2.

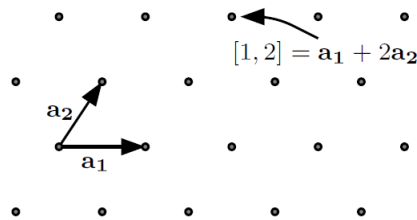


Figura 2: Representación del uso de los vectores base en una red arbitraria (extraído de Simon (2013)).

En la figura se tiene el caso en que  $a_1 = (1, 0)$  y  $a_2 = (1, 1)$ . Para  $\mathbb{R}$  se reduce a los puntos dados por  $\mathbf{R} = n\mathbf{a}$  con  $n \in \mathbb{Z}$  y es equivalente a traslaciones unidimensionales. Entonces podemos pensar que un cristal es un conjunto infinito de átomos acomodados de forma periódica y caracterizado por una base de vectores. Para el estudio de la descripción de un cristal hiperbólico primero es necesario conocer las características de un cristal euclideo, por ello estudiaremos el caso más simple, que es el modelo de un cristal unidimensional.

## II.2. La ecuación de Schrödinger y su solución para un cristal unidimensional

Considere un electrón en un conjunto de  $n$  pozos de potencial conectados entre sí, tal que se puede representar de manera gráfica como se muestra en la figura 3.



Figura 3: Modelo de cristal unidimensional.

Si consideremos que solo tenemos la posibilidad de tunelamiento entre vecinos cercanos (es equivalente a que se puede usar la aproximación de amarre fuerte), el hamiltoniano que describe al sistema es

$$\hat{H} = \sum_n \varepsilon |n\rangle \langle n| - t |n\rangle \langle n+1| - t |n+1\rangle \langle n|, \quad (2)$$

donde  $|n\rangle$  describe la eigenfunción asociada al  $n$ -ésimo pozo de potencial,  $\varepsilon$  es la energía asociada a cada estado y  $t$  es el parámetro de tuneleo o integral, la forma general de

este parámetro se representa de forma integral como

$$-t_{mn} = \int \psi_m^* V_m \psi_n dx, \quad (3)$$

donde  $V_m$  son los potenciales asignados a cada uno de los sitios de la red de pozos de potencial y  $\psi_m, \psi_n$  son las eigenfunciones de sitio. Con esto en mente construiremos la ecuación de Schrödinger  $\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$ , proponiendo una solución de forma  $|\psi\rangle = \sum_m C_m |m\rangle$ , para ello primeramente tenemos que

$$\left( \sum_n \varepsilon |n\rangle \langle n| - t |n\rangle \langle n+1| - t |n+1\rangle \langle n| \right) \sum_m C_m |m\rangle = E \sum_m C_m |m\rangle, \quad (4)$$

de la ecuación (4) obtenemos

$$\sum_n \sum_m \varepsilon |n\rangle \langle n|m\rangle C_m - t |n\rangle \langle n+1|m\rangle C_m - t |n+1\rangle \langle n|m\rangle C_m = E \sum_m C_m |m\rangle.$$

Si consideramos que los eigenvectores para este sistema forman una base ortonormal, entonces  $\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$ , por lo que

$$\sum_n \sum_m \varepsilon |n\rangle \delta_{n,m} C_m - t |n\rangle \delta_{n+1,m} C_m - t |n+1\rangle \delta_{n,m} C_m = \sum_m C_m |m\rangle.$$

Usando la definición de la delta de Kronecker llegamos a

$$\sum_n \varepsilon |n\rangle C_n - t |n\rangle C_{n+1} - t |n+1\rangle C_n = E \sum_m C_m |m\rangle. \quad (5)$$

El término del lado derecho de la igualdad se puede reescribir en la representación de los vectores  $|n\rangle$ , y la manera usual es aplicando el operador identidad de la forma siguiente

$$E \sum_m C_m |m\rangle = E \sum_m \sum_n C_m |n\rangle \langle n|m\rangle.$$

Como  $\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$ , entonces

$$\sum_n \varepsilon |n\rangle C_n - t |n\rangle C_{n+1} - t |n+1\rangle C_n = E \sum_n C_n |n\rangle. \quad (6)$$

Ahora, si proyectamos por izquierda  $\langle m|$ ,

$$\sum_n \varepsilon \langle m|n\rangle C_n - t \langle m|n\rangle C_{n+1} - t \langle m|n\rangle C_{n-1} = E \sum_n C_n \langle m|n\rangle.$$

De nueva cuenta usamos que  $\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$ , llegamos a

$$\varepsilon C_m - t C_{m+1} - t C_{m-1} = E C_m. \quad (7)$$

Para obtener los coeficientes  $C_m$  es necesario recurrir al teorema de Bloch, el cual se explica a continuación.

**Teorema de Bloch:** Los eigenestados de un electrón en un potencial periódico son de la forma

$$\psi_{\mathbf{k}}^{\alpha}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}^{\alpha}(\mathbf{r}), \quad (8)$$

donde  $\mathbf{k}$  es el momento cristalino y la función  $u_{\mathbf{k}}^{\alpha}(\mathbf{r})$  es periódica en la celda unitaria (en este caso particular de estudio cada n-ésima posición).

Este teorema se reduce a decir que  $C_m = e^{ikma}$  en la ecuación (7), al sustituirlo en esta ecuación se obtiene que

$$\varepsilon - te^{ika} - te^{-ika} = E(k).$$

Por lo tanto, los eigenvalores del sistema cuentan con la estructura

$$E(k) = \varepsilon - 2t \cos ka. \quad (9)$$

Los eigenvalores del sistema se pueden representar gráficamente en la figura 4.

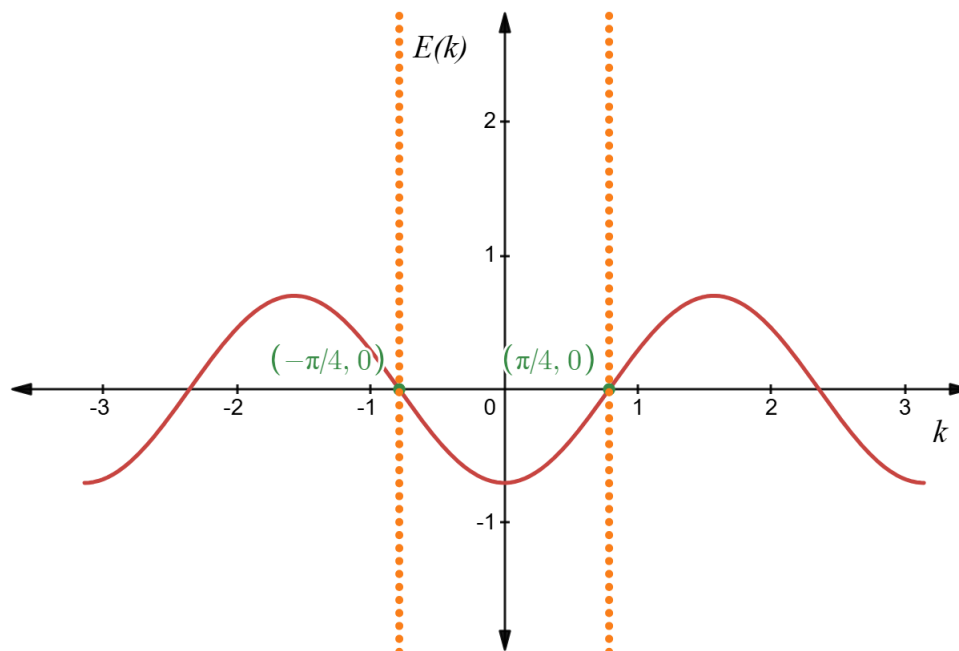


Figura 4: Eigenvalores  $\varepsilon(k)$  del cristal unidimensional representados por la curva roja como función de  $k$ . Al valle delimitado por las líneas naranjas se le conoce como primer zona de Brillouin.

De la ecuación (9) podemos observar que los eigenvalores de la partícula dependen de la evolución de  $\mathbf{k}$ , en la figura 4 podemos observar que se forma una especie de valle que encierra los estados de la partícula desde  $-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$  (puntos verdes).

Resulta bastante importante entender el origen del teorema de Bloch, ya que el propósito es comprender las limitaciones y los problemas a los que nos enfrentamos al no contar con un modelo hiperbólico cristalográfico.

## II.3. Teorema de Bloch desde el punto de vista de la teoría de grupos

Para poder entender por qué no es posible utilizar las herramientas del estado sólido sobre un cristal hiperbólico (que son una consecuencia de la geometría del sistema), es necesario analizar el teorema de Bloch desde el enfoque de la teoría de grupos. Para esto, se tomará como base la discusión el tratamiento dado por Tinkham (2012). Primeramente definiremos algunos conceptos básicos, como es un grupo, un grupo cíclico y la representación de un grupo.

**Definición 2.2 Grupo:** Sea  $G$  un conjunto no vacío, se dice que  $(G, *)$  forma un **grupo** si en  $G$  está definida una operación binaria asociativa, denotada por  $*$  tal que:

1. Sea  $a, b \in G$ , entonces  $a * b \in G$ .
2. Existe un elemento  $e \in G$ , tal que  $a * e = e * a = a$ , para todo  $a \in G$ .
3. Para todo  $a \in G$ , existe un elemento  $a^{-1} \in G$ , tal que  $a * a^{-1} = a^{-1} * a = e$ .

Notemos que la propiedad conmutativa,  $a * b = b * a$ , no es necesaria para formar la estructura de grupo. De hecho, si un grupo  $(G, *)$  cuenta con esta propiedad recibe el nombre de grupo abeliano. Con estas definiciones es posible definir un grupo cíclico.

**Definición 2.3 Grupo cíclico:** Sea  $(H, *)$  un grupo abeliano, tenemos que este grupo es **cíclico** si los elementos de  $a \in H$  cumplen que

$$a_1 = a, a_2 = a^2, a_3 = a^3, \dots, a^n = e, \quad (10)$$

donde  $e$  es el elemento identidad de  $H$ .

**Definición 2.4 Representación de grupo:** Una representación de grupo es una función  $D(g)$ , para  $g \in G$ , tal que  $D(g)$  es un conjunto de operadores lineales con las siguientes propiedades:

1.  $D(e) = 1$ , aquí 1 es el operador identidad en el espacio donde actúan los operadores lineales.
2.  $D(g_1)D(g_2) = D(g_1 * g_2)$ , lo cual se puede interpretar como que la operación  $*$  es transformada a la multiplicación natural sobre el espacio de operadores lineales.

Para demostrar el teorema de Bloch, primeramente hay que presentar el resultado siguiente: sea  $r$  un número que representa a un elemento  $a \in G$ , donde  $G$  es un grupo cíclico, entonces

$$D(a) = r,$$

$$D(a_n) = [D(a)]^n = r^n.$$

En particular, si queremos que  $D(e) = 1$ , lo cual refleja la propiedad cíclica de los elementos de  $G$ , entonces

$$[D(a)]^n = r^n = 1, \tag{11}$$

que es equivalente a

$$r = e^{\frac{i2\pi}{h}p} = 1,$$

para  $p = 1, 2, \dots, h$ , con  $p, h \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ . De este modo, las representaciones irreducibles son

$$D^{(p)}(a) = e^{\frac{i2\pi}{h}p}. \tag{12}$$

**Demostración del teorema de Bloch:** Consideremos una cadena de pozos de potencial de forma periódica como la mostrada en la figura 5.

Si aplicamos las condiciones de contorno de Born - von Kármán (Simon (2013)) tendremos una cadena cerrada y periódica como se muestra en la figura 6.



Figura 5: Red de pozos de potencial, donde  $a \in G$  para un grupo cíclico  $G$ .

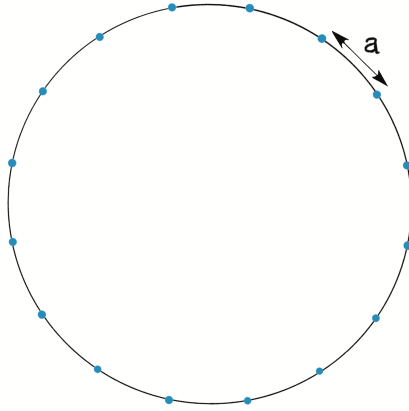


Figura 6: Cadena cerrada de pozos de potencial.

El conjunto de todas las traslaciones alrededor de esta cadena cerrada de pozos de potencial resulta ser un grupo cíclico de orden  $h$ , donde el orden es la cardinalidad del grupo  $G$ , lo que se asocia a una simetría traslacional dentro de un hamiltoniano periódico con  $h$  periodos. Estas traslaciones se expresan matemáticamente como

$$P(2a) = P(a) * P(a).$$

Sea  $a \in G$ , el desplazamiento en la coordenada  $x$  sobre una eigenfunción de sitio  $\psi(x)$  denotado por  $P_a$ , es tal que

$$P_a \psi(x) = \psi(x + a). \quad (13)$$

Todas las eigenfunciones de este hamiltoniano tienen esta simetría traslacional y deberán transformarse de acuerdo con alguna representación de grupo. De las ecuaciones

(12) y (13), tenemos que

$$\begin{aligned}\psi_p(x+a) &= P_a \psi_p(x) = D^{(p)} \psi_p(x), \\ \psi_p(x+a) &= e^{i \frac{2\pi}{h} p} \psi_p(x).\end{aligned}\tag{14}$$

Sea  $L = ah$ ,  $h = \frac{L}{a}$ , entonces

$$\psi_p(x+a) = e^{i \frac{2\pi a}{L} p} \psi_p(x).\tag{15}$$

Para  $k = \frac{2\pi p}{L}$ , la ecuación (15) se reescribe como

$$\psi_k(x+a) = e^{ika} \psi_k(x).\tag{16}$$

Esta es una propiedad impuesta por el grupo de simetría, por lo que cualquier función de la forma

$$\psi_k(x) = U_k(x) e^{ikx},\tag{17}$$

con  $U_k(x) = U_k(x+a)$ , satisface

$$\begin{aligned}\psi_k(x+a) &= U_k(x+a) e^{ik(x+a)}, \\ &= U_k(x) e^{ikx} e^{ika}.\end{aligned}\tag{18}$$

De esta forma

$$\psi_k(x+a) = \psi_k(x) e^{ika}.\tag{19}$$

Notemos una clara similitud entre la ecuación (19) y la ecuación (8) donde se muestra el origen geométrico del teorema de Bloch. Ahora es prudente introducir los conceptos de geometría hiperbólica.

## II.4. Geometría hiperbólica

Para presentar el espacio hiperbólico es necesario establecer distintas definiciones y teoremas que lo describen.

### II.4.1. Modelo de disco de Poincaré y sus propiedades

El modelo del espacio hiperbólico a utilizar es conocido como modelo de disco de Poincaré que está definido de la siguiente forma

$$\mathbb{D} = \{z \in \mathbb{C} \mid |z| < 1\}, \quad (20)$$

donde  $z$  es un número complejo de la forma  $z = x + iy$ . La forma diferencial para medir distancias sobre este espacio es

$$ds^2 = (2\kappa)^2 \frac{dx^2 + dy^2}{(1 - |z|^2)^2}, \quad (21)$$

con  $dx = x_2 - x_1$  y  $dy = y_2 - y_1$ , donde  $x_2$  es la posición final en la coordenada  $x$  y  $x_1$  es la posición inicial en la coordenada  $x$ , esto es del mismo modo para  $y_2$  y  $y_1$ , el término  $(1 - |z|^2)^2$  es el factor que delimita la frontera del disco de Poincaré (Boettcher *et al.* (2022)). Por otro lado, la distancia medida desde el origen a cualquier punto del disco de Poincaré está dada por la siguiente expresión

$$d(0, z) = \ln \left( \frac{1 + |z|}{1 - |z|} \right), \quad (22)$$

y la distancia hiperbólica entre dos puntos  $z$  y  $z'$  está dada por

$$d(z, z') = \kappa \cdot \operatorname{arccosh} \left( 1 + \frac{2(|z - z'|)^2}{(1 - |z|^2)(1 - |z'|^2)} \right). \quad (23)$$

Para extrapolar el concepto de traslación a este espacio geométrico es necesario entender cuáles son los grupos que caracterizan a las traslaciones en el disco de Poincaré. Para ello se retomarán los conceptos de teoría de grupos presentados en la sección II.2, tal que se define al grupo de simetrías del plano hiperbólico, siendo este el conjunto de transformaciones de Möbius que preservan el disco unitario  $\mathbb{D}$ . Estas transformaciones son de la forma (Lascurain Orive (2005))

$$S(z) = \frac{az^* + b}{b^*z + a^*}, \quad (24)$$

donde  $a, b, z \in \mathbb{C}$  y  $*$  denota la conjugación compleja de  $a, b, z$ , tal que  $a$  y  $b$  satisfacen la condición  $|a|^2 - |b|^2 = 1$ , esta condición es crucial para preservar la curvatura negativa y es fundamental para que siempre sea posible tener estas isometrías. En contraste, en la geometría euclídea las isometrías preservan  $|a|^2 + |b|^2 = 1$ . Con los elementos  $a, b$  de la ecuación (24) construimos la siguiente matriz

$$M = \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & a^* \end{pmatrix}. \quad (25)$$

Para determinar el grupo asociado a las traslaciones en el disco de Poincaré y contar con una definición más formal del grupo de isometrías del disco de Poincaré, será necesario presentar las siguientes definiciones tomadas de Herstein (1974) y Axler (1997).

**Definición 2.5 Grupo especial unitario:** El grupo especial unitario, denotado como  $SU(n)$  es conocido como el grupo de todas las matrices unitarias  $n \times n$  con determinante igual a 1, bajo la operación  $*$  que denota el producto usual de matrices cuadradas. Los elementos de estas matrices son números complejos (se puede escribir de forma compacta como  $SU(n, \mathbf{C})$ ). Este grupo puede ser representado como

$$SU(n) = \{M \in U(n) : \det(M) = 1\}, \quad (26)$$

donde  $M$  es una matriz de tamaño  $n \times n$  y  $U(n)$  representa al grupo de matrices unitarias. Este grupo está compuesto por matrices que satisfacen  $U * U^\dagger = 1$ , donde  $U^\dagger$  es la matriz traspuesta conjugada de  $U$ .

**Definición 2.6 Clase lateral izquierda.** Sea  $(H, *)$  un subgrupo del grupo  $(G, *)$ , entonces

$$a * H = \{a * h : h \in H\}. \quad (27)$$

A  $aH$  se le llama clase lateral izquierda de  $(H, *)$  en  $(G; *)$ , del mismo modo puede definirse a la *clase lateral derecha* como  $Ha = \{h * a : h \in H\}$ .

**Definición 2.7 Subgrupo normal.** Sea  $(N, *)$  un subgrupo del grupo  $(G, *)$ , se dice que  $N$  es un subgrupo normal si para todo  $g \in G$ , tenemos que

$$g * N * g^{-1} = N. \quad (28)$$

La operación  $g * N * g^{-1}$  recibe el nombre de conjugación, por lo que se dice que un subgrupo es normal si es invariante bajo la operación de conjugación o si su clase lateral izquierda es igual a su clase lateral derecha.

**Definición 2.8 Grupo cociente.** Sea  $(N, *)$  un subgrupo normal del grupo  $(G, *)$ , se define al grupo formado por las clases laterales de  $(N, *)$  en  $(G, *)$  como grupo cociente  $(G/N, *)$ , se tiene que

$$(gN) * (hN) = (g * h)N, \quad (29)$$

para todo  $g, h \in G$ .

**Definición 2.9 Grupo proyectivo unitario especial.** Las isometrías que preservan la métrica hiperbólica forman el grupo  $PSU(2, \mathbb{C}) = SU(2, \mathbb{C})/\{\pm 1\}$ , donde  $\{\pm 1\}$  es un subgrupo del grupo  $\mathbf{Z}$  definido como

$$\mathbf{Z} = \left\{ \text{diag}\{zI_n, zI_m\} : |z| = 1, z^{n+m} = 1 \right\}, \quad (30)$$

a  $\mathbf{Z}$  se le conoce como el grupo de matrices escalares, en este caso  $n = 1$  y  $m = -1$  (por que  $z^{1+(-1)} = z^0 = 1$ ), es por ello que se considera al subgrupo  $\{\pm 1\}$ .

**Definición 2.10 Grupo Fuchsiano:** Un grupo Fuchsiano es un subgrupo discreto

de  $PSU(1, 1)$  que preserva al disco  $\mathbb{D}$ , sus elementos pueden ser clasificados como parabólicos, elípticos o hiperbólicos.

Para los propósitos de esta discusión presentaremos solamente a los elementos parabólicos y los hiperbólicos, esto por su relación con el concepto de traslación. Los elementos parabólicos cuentan con la siguiente estructura

$$R(\phi) = \begin{pmatrix} e^{i\phi/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi/2} \end{pmatrix}. \quad (31)$$

Con  $\phi \neq 0$ , una respuesta natural de  $R(\phi)$  sobre algún  $z \in \mathbb{D}$  es  $z \longrightarrow e^{i\phi}z$  (básicamente una rotación) y está caracterizada por dejar un punto fijo, conocido como eje de rotación. Por otro lado los elementos hiperbólicos son de la forma

$$T(\tau) = \begin{pmatrix} \cosh(\tau/2\kappa) & \sinh(\tau/2\kappa) \\ \sinh(\tau/2\kappa) & \cosh(\tau/2\kappa) \end{pmatrix}. \quad (32)$$

Estos elementos son conocidos como boost y a  $\tau$  se le conoce como el parámetro de boost. En el caso de los boost no existe ningún punto fijo, por lo cual suelen ser reconocidos como una generalización de las traslaciones del caso euclidiano al hiperbólico. Por ejemplo, al aplicar  $T(\tau)$  al origen de  $\mathbb{D}$  y utilizando la ecuación (24), obtenemos

$$\begin{aligned} T(\tau)0 &= \frac{\cosh(\tau/2\kappa)0 + \sinh(\tau/2\kappa)}{\sinh(\tau/2\kappa)0 + \cosh(\tau/2\kappa)}, \\ &= \frac{\sinh(\tau/2\kappa)}{\cosh(\tau/2\kappa)}. \end{aligned}$$

Por lo tanto

$$T(\tau)0 = \tanh(\tau/2\kappa). \quad (33)$$

Notemos cómo se modifica la posición original del origen de  $\mathbb{D}$ , que se mapea a una coordenada en el eje real, que está a una distancia hiperbólica  $\tau$  del origen.

El último resultado hace ver que las traslaciones en el disco de Poincaré son diferentes a las del espacio euclidiano, por lo que el teorema de Bloch no puede ser definido de manera directa en el espacio hiperbólico, Aunque Boettcher *et al.* (2022) y Zhang *et al.* (2022) proponen una generalización del teorema de Bloch en el disco de Poincaré, en esta tesis se trabajará con otro enfoque. Se partirá del hamiltoniano de sitio, enfocándose en su construcción y su solución de forma numérica, por lo cual no se trabajará con un enfoque analítico.

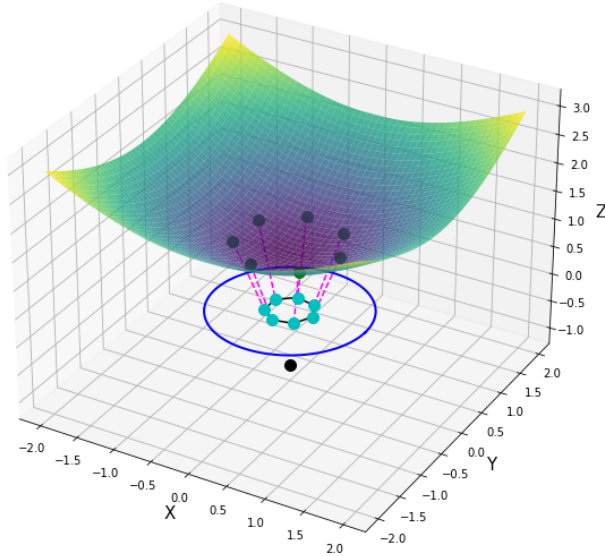
Por último se presentará como es que se genera el modelo de disco de Poincaré que se utilizará para representar el espacio hiperbólico. Este modelo del plano hiperbólico nace del uso de una herramienta matemática llamada *proyección estereográfica*, la cual nos proporciona la geometría proyectiva, definiéndose como una función que relaciona un plano en  $\mathbb{R}^2$  con una esfera  $\mathbb{S}^2 := \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 : x^2 + y^2 + z^2 = 1\}$  (Lascurain Orive (2005)). En mi caso de estudio; la proyección estereográfica será desde el hiperboloide  $\mathbb{H}^2 := \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 : z > 0, x^2 + y^2 - z^2 = -1\}$  a  $\mathbb{D}$ . Entonces, las ecuaciones que rigen la regla de correspondencia entre  $\mathbb{H}^2$  y  $\mathbb{D}$  son

$$\begin{aligned} t &= z + 1, \\ x_D &= \frac{x}{t}, \\ y_D &= \frac{y}{t}. \end{aligned} \tag{34}$$

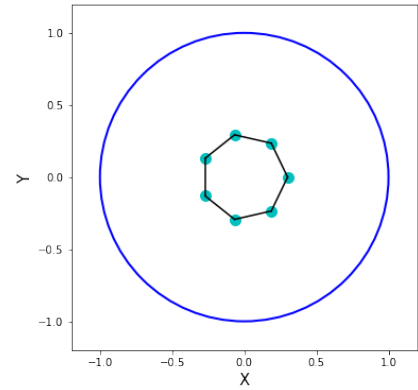
Análogamente, las ecuaciones de correspondencia entre  $\mathbb{D}$  y  $\mathbb{H}^2$  son

$$\begin{aligned} t_f &= \frac{2}{1 - (x^2 + y^2)} - 1, \\ x &= x_D * t_f, \\ y &= y_D * t_f. \\ z &= \sqrt{x_D^2 + y_D^2 + 1} \end{aligned} \tag{35}$$

La representación gráfica de las relaciones de las ecuaciones (34) y (35) se muestran en la figura 7.



(a) Proyección desde  $\mathbb{H}^2$  a  $\mathbb{D}$ .



(b) Polígono resultante de la proyección estereográfica.

Figura 7: Proyección estereográfica desde  $\mathbb{H}^2$  a  $\mathbb{D}$ .

En la figura 7(a) se muestra que la proyección estereográfica genera un polígono regular de siete vértices. Si realizamos una cantidad mayor de proyecciones de este tipo podemos formar desde  $\mathbb{H}^2$  lo que se conoce como *crystal hiperbólico*.

## II.5. Cristales hiperbólicos

Un cristal  $\{p, q\}$  (con  $p$  vértices y  $q$  conexiones) en un espacio plano cumple que  $(p - 2)(q - 2) = 4$ , mientras que por otro lado en el caso hiperbólico se cumple que (Boettcher *et al.* (2022))

$$(p - 2)(q - 2) > 4. \quad (36)$$

A diferencia del caso plano, aquí tendremos una mayor cantidad de cristales sobre este espacio. Hay que observar que no necesariamente se tendrán polígonos con estructura regular, como se representa en la figura 8. Por ejemplo, al comparar el cristal  $\{8, 3\}$  con el cristal  $\{8, 4\}$ , se observa cómo la cantidad de conexiones modifica los polígonos hiperbólicos, de tal forma que el cristal hiperbólico cambia totalmente.

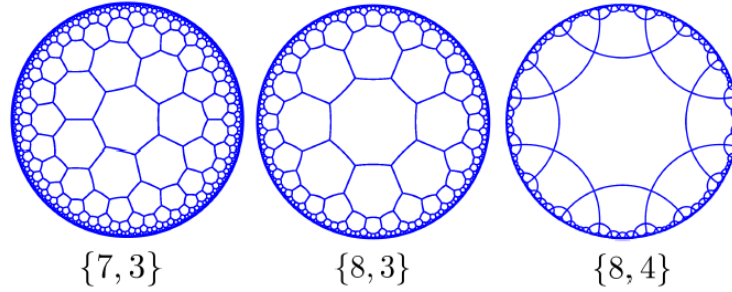


Figura 8: Distintos cristales hiperbólicos (Boettcher *et al.* (2022)).

En mi caso me enfocaré en el estudio de cristales hiperbólicos generados por polígonos regulares, llamados así por su similitud a la estructura de los cristales euclidianos. Para formar un cristal hiperbólico es necesario establecer los valores de los parámetros  $p$  y  $q$  en la ecuación

$$r_0 = \sqrt{\frac{\cos\left(\frac{\pi}{p} + \frac{\pi}{q}\right)}{\cos\left(\frac{\pi}{p} - \frac{\pi}{q}\right)}}, \quad (37)$$

donde  $r_0$  es el radio natural del cristal hiperbólico. Con este resultado es posible obtener las posiciones naturales de los primeros sitios del cristal al usarlo en la ecuación (Boettcher *et al.* (2022))

$$z_j = r_0 e^{i\left(\frac{2\pi j}{p+\delta}\right)}. \quad (38)$$

Notemos que esta ecuación está compuesta por el índice  $j$  que va desde el 1er sitio hasta el  $p$ -ésimo sitio. La fase  $\delta$  juega el papel de una fase que permite controlar la orientación del polígono. En la figura 9 se muestran en puntos azules las posiciones de los vértices del polígono hiperbólico  $\{7, 3\}$ , obtenidas de las ecuaciones (37) y (38).

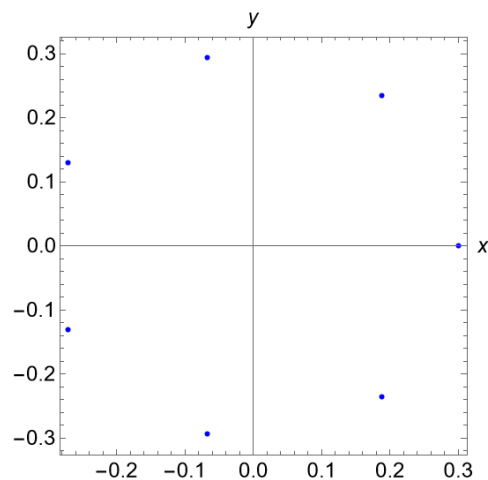


Figura 9: Polígono hiperbólico  $\{7, 3\}$ . Aquí  $z = x + iy \in \mathbb{C}$ .

Si realizamos traslaciones en el polígono hiperbólico  $\{7, 3\}$  sobre  $\mathbb{D}$ ; obtendremos un cristal hiperbólico, como se muestra en la figura 10 (estas traslaciones son conocidas como boosts (Boettcher *et al.* (2022))).

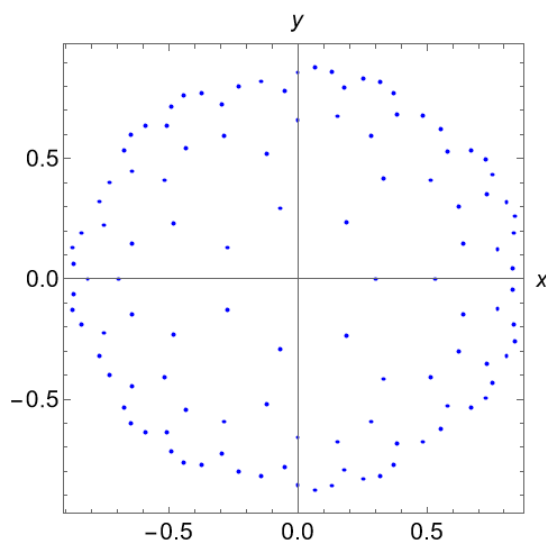


Figura 10: Cristal hiperbólico de tres capas de forma  $\{7, 3\}$ .

Uno de los propósitos del presente trabajo de tesis es realizar deformaciones mecánicas sobre esta clase de cristales, con el objetivo de estudiar el cambio del espectro de eigenvalores de cristales hiperbólicos regulares y por consiguiente analizar cómo sus

eigenvectores responden a estas deformaciones, por lo que resulta necesario presentar la siguiente sección.

## II.6. Teoría de la elasticidad en espacios euclidianos

En este trabajo se estudian los efectos de deformaciones mecánicas en un cristal hiperbólico; para ello, primero describimos las deformaciones en el espacio euclidiano y presentamos el *tensor de deformaciones* en este espacio.

En física, decimos que un objeto o partícula experimenta una deformación cuando, al aplicar una fuerza sobre él, su forma cambia, produciéndose una elongación o compresión. Para describir las deformaciones en espacio euclideo, seguimos a Landau *et al.* (1986) y consideramos un punto (en el cuerpo) con la posición inicial  $\mathbf{x} = x_i \hat{\mathbf{i}}$ , que después de la deformación, se traslada a la posición  $\mathbf{x}' = x'_i \hat{\mathbf{i}}$ . Definimos el vector de desplazamiento  $\mathbf{u}$ , dado por  $\mathbf{u} = \mathbf{x}' - \mathbf{x}$ , tal que sus coordenadas son  $u_i = x'_i - x_i$ ,  $i \in \{1, 2, 3\}$ .

Sea  $dl^2$  el cuadrado del diferencial de longitud euclidiano del vector  $\mathbf{x} = x_i \hat{\mathbf{i}}$ , dado por

$$dl^2 = dx_1^2 + dx_2^2 + dx_3^2. \quad (39)$$

Entonces, para el vector  $\mathbf{x}'$  con componentes  $x'_i = u_i + x_i$ , se tiene

$$dl'^2 = dx_i'^2 = (dx_i + du_i)^2. \quad (40)$$

Así,  $dl'^2$  representa el diferencial de longitud después de aplicar alguna deformación caracterizada por los desplazamientos  $u_i$ . Por regla de la cadena se tiene que  $du_i = \frac{\partial u_i}{\partial x_k} dx_k$ , sustituyendo este resultado y desarrollando el cuadrado en la ecuación (40)

llegamos a que

$$dl'^2 = dl^2 + 2\frac{\partial u_i}{\partial x_k} dx_i dx_k + \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} dx_k dx_j. \quad (41)$$

Invirtiendo los índices  $i$  y  $k$  en el segundo término de la ecuación (41), se puede reescribir como sigue

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_k} dx_i dx_k = \frac{\partial u_k}{\partial x_i} dx_i dx_k. \quad (42)$$

Del mismo modo, en el último término de la ecuación (41) se pueden invertir los índices  $i$  y  $j$ , obteniendo

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_k} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} dx_k dx_j = \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} dx_k dx_i. \quad (43)$$

Al sustituir la ecuación (42) y la ecuación (43) en la ecuación (41) llegamos a

$$dl'^2 = dl^2 + 2\frac{\partial u_i}{\partial x_k} dx_i dx_k + \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} dx_i dx_k \quad (44)$$

O bien,

$$dl'^2 = dl^2 + \frac{\partial u_i}{\partial x_k} dx_i dx_k + \frac{\partial u_i}{\partial x_k} dx_i dx_k + \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} dx_i dx_k. \quad (45)$$

Usando la ecuación (42) en el tercer término de la ecuación (45) llegamos a

$$dl'^2 = dl^2 + \frac{\partial u_i}{\partial x_k} dx_i dx_k + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} dx_i dx_k + \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} dx_i dx_k. \quad (46)$$

Agrupando términos, reescribimos de la siguiente manera,

$$dl'^2 = dl^2 + \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) dx_i dx_k. \quad (47)$$

Definimos el tensor de deformaciones  $u_{ik}$  como

$$u_{ik} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (48)$$

Al usar esta definición en la ecuación (47) obtenemos,

$$dl'^2 = dl^2 + 2u_{ik} dx_i dx_k. \quad (49)$$

El tensor  $u_{ik}$  nos dice cómo reacciona un sistema ante un cambio de longitud. En la ecuación (48) se observa cómo este tensor se relaciona con el vector de desplazamientos  $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ , el vector que describe cuánto cambia una posición inicial  $\mathbf{x}$  respecto a la posición final  $\mathbf{x}'$ .

Las deformaciones se pueden clasificar de acuerdo a las simetrías que preserva la distorsión, en esta tesis se consideran dos ejemplos. El primero es una expansión uniforme, una deformación que preserva ángulos y las relaciones entre las distancias de cada una de las posiciones. Dicha deformación modifica las posiciones de la siguiente manera

$$\mathbf{x}' = \alpha \mathbf{x}, \quad (50)$$

donde  $\mathbf{x}$  representa el vector de posición inicial,  $\alpha$  es el generador de la expansión uniforme y  $\mathbf{x}'$  representa el vector resultante de la deformación.

El segundo ejemplo son las deformaciones que se generan por los esfuerzos torsionales, los cuales definen un centro y respecto a este, un vector que caracteriza la dirección de torsión. Estas deformaciones modifican la posición angular respecto a este centro, sin modificar la distancia respecto a él, lo que se puede parametrizar definiendo un ángulo  $\theta = \arctan\left(\frac{y}{x}\right)$  (donde  $\theta \in (-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ ), por lo que en forma polar se tiene que

$$\theta' = \theta + f(r, \theta). \quad (51)$$

Con estas nociones sobre los esfuerzos se espera estudiar y comprender cómo se modifica la estructura de los cristales hiperbólicos ante las dos deformaciones mecánicas descritas por las ecuaciones (50) y (51).

### II.6.1. Restricciones de la cristalografía hiperbólica

Para el estudio de cristales unidimensionales se presentó el hamiltoniano en la ecuación (2). El propósito de este trabajo de tesis es trasladar ese hamiltoniano al caso de un electrón confinado sobre un cristal hiperbólico compuesto por polígonos regulares. Para ello es necesario ajustar la estructura del hamiltoniano, ya que cada sitio del cristal cuenta con  $q$  conexiones. Por consiguiente, el hamiltoniano de la ecuación (2) deja de ser válido para esta clase de cristales.

Ahora, para obtener una solución fiable del sistema, es necesario considerar los siguientes aspectos:

- No se conoce de forma analítica la distribución de sitios por cada una de las capas o regiones de un cristal hiperbólico regular.
- No es posible emplear herramientas tradicionales para resolver el caso de cadenas unidimensionales en cristales hiperbólicos, porque en el teorema de Bloch requiere periodicidad traslacional en un espacio euclideo. En el caso del espacio hiperbólico no se utilizan esta clase de traslaciones, en su lugar se utilizan boosts (Boettcher *et al.* (2022)).

Estas restricciones hacen ver que este problema es no trivial y al mismo tiempo genera interés por dar una solución. Para abordar de forma adecuada este problema es necesario el dar respuesta a cada uno de los puntos que se destacaron anteriormente, por lo cual en las siguientes secciones se dará una propuesta para la solución de cada uno de los puntos anteriores.

## Capítulo III

### RESULTADOS

#### III.1. Distribución de puntos sobre los cristales hiperbólicos regulares

En esta sección se busca determinar cómo se distribuyen los sitios en un cristal hiperbólico  $\{7, 3\}$  mostrado en la figura 11. Este resultado es crucial, ya que conocer cómo se distribuyen los sitios es esencial para resolver la ecuación de Schrödinger de este sistema.

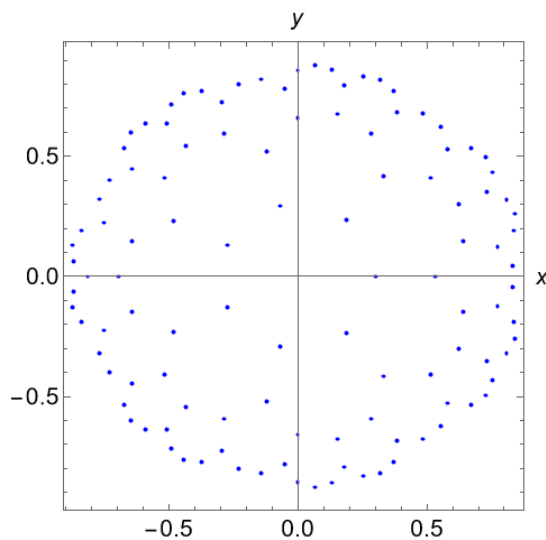


Figura 11: Cristal hiperbólico  $\{7, 3\}$ .

Para encontrar alguna clase de relación de recurrencia que nos permita obtener la cantidad de sitios en todo el cristal hiperbólico. Partimos del hecho de que la primer región del disco cuenta con  $p$  sitios, esto es  $p = 7$ . Se considerará que el cristal está distribuido en  $q$  capas.

Para encontrar esta relación de recurrencia tomamos en cuenta que la segunda capa tiene 28 sitios, lo cual se calcula como  $p(p - q)$ ; por lo que inicialmente se tiene que

$$\begin{aligned} n_1 &= p, \\ n_2 &= n_1(p - q), \end{aligned} \tag{52}$$

donde  $n_i$  denota la cantidad de sitios en la  $i$ -ésima capa.

En el caso de la tercer capa se tienen 77 sitios, lo que puede calcularse mediante el uso de las contribuciones de los sitios anteriores a la tercer capa del cristal hiperbólico de la siguiente manera

$$n_3 = (p - q)n_2 - (p - 2)n_1. \tag{53}$$

Si consideramos esta cantidad de sitios en la tercer capa se obtiene el cristal de la figura 11.

Para el caso de la cuarta capa, la cantidad de sitios puede calcularse directamente con en base a la tendencia anterior, por lo tanto

$$n_4 = (p - q)n_3 - (p - 2)n_2 = 168.$$

Sin embargo, resultado no concuerda con el número de sitios asociada a la cuarta capa, ya que al momento de utilizar esta cantidad de sitios en el cálculo computacional mostrado en el Apéndice A.1 se obtiene lo mostrado en la figura 12.

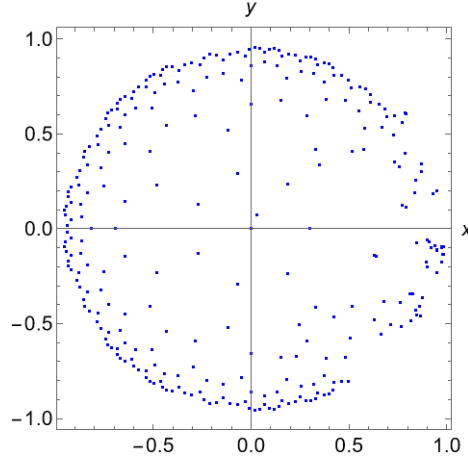


Figura 12: Resultado de considerar 168 sitios en la cuarta capa en el cristal  $\{7, 3\}$ .

Observemos que existen sitios desconectados y otros dispersos, lo que sugiere que esta propuesta de conteo de sitios no es la adecuada. Por otro lado, si agregamos  $(p - 2)n_1$  sitios a la cuarta capa obtenemos que

$$n_4 = (p - q)n_3 - (p - 2)n_2 + (p - 2)n_1 = 203. \quad (54)$$

Al momento de utilizar esta cantidad de sitios obtenemos lo mostrado en la figura 13.

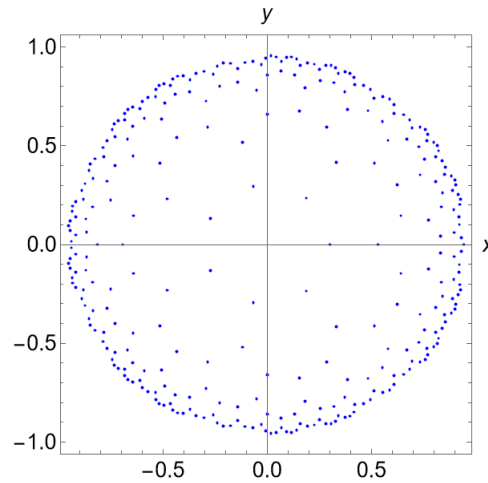


Figura 13: Resultado de considerar 203 sitios en la cuarta capa en el cristal  $\{7, 3\}$ .

En la figura 13 se observa que si se busca conocer la cantidad de sitios de la  $n_{i+1}$  capa se deben de considerar todos los sitios de las capas anteriores a ella en el cálculo de sitios.

Para la quinta capa se puede aplicar un procedimiento similar, obteniendo

$$n_5 = (p - q)n_4 - (p - 2)n_3 + (p - 2)n_2 = 567.$$

Sin embargo, se calcularon más sitios de los necesarios, como se observa en la figura 14.

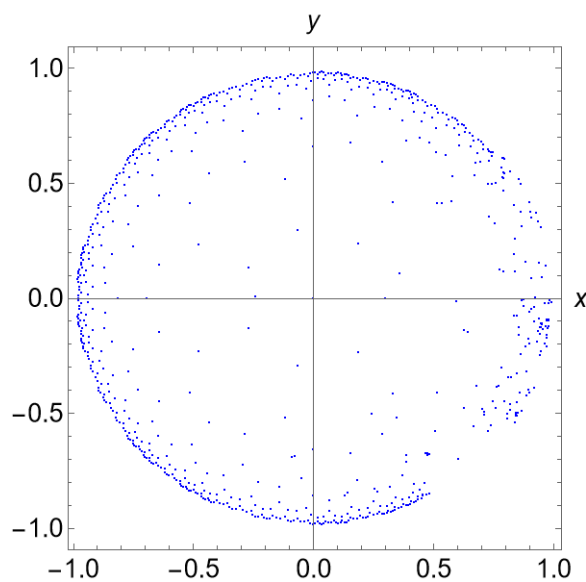


Figura 14: Resultado de considerar 567 sitios en la quinta capa en el cristal  $\{7, 3\}$ .

Se observa un comportamiento similar de la figura 12, lo que indica que la cantidad de sitios de red no es la adecuada, Por ello se restarán  $(p - 2)n_1$  sitios. Por lo tanto

$$n_5 = (p - q)n_4 - (p - 2)n_3 + (p - 2)n_2 - (p - 2)n_1 = 532. \quad (55)$$

El resultado de este ajuste se muestra en la figura 15.

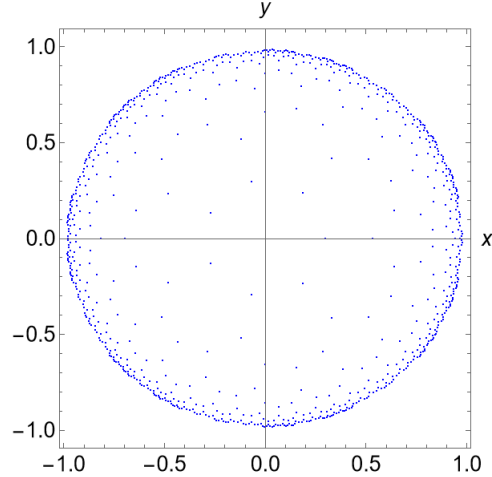


Figura 15: Resultado de considerar 532 sitios en la tercer capa en el cristal  $\{7, 3\}$ .

Este ajuste en el conteo de sitios permite recuperar la estructura del cristal hiperbólico  $\{7, 3\}$ . Analizando la tendencia del cálculo de sitios, se puede observar que

$$n_1 = p,$$

$$n_2 = (p - q)n_1,$$

$$n_3 = (p - q)n_2 - (p - 2)n_1,$$

$$n_4 = (p - q)n_3 + (p - 2)(-n_2 + n_1),$$

$$n_5 = (p - q)n_4 + (p - 2)(-n_3 + n_2 - n_1),$$

$$n_6 = (p - q)n_5 + (p - 2)(-n_4 + n_3 - n_2 + n_1).$$

Así se puede plantear que

$$n_k = (p - q)n_{k-1} + (p - 2)(-n_{k-2} + n_{k-3} - n_{k-4} + \dots + (-1)^k n_1). \quad (56)$$

Por lo tanto, uno de los resultados de esta tesis es la ecuación de recurrencia de la ecuación (56) para calcular sitios en la  $n_k$  capa. Además, este resultado no se limita al cristal  $\{7, 3\}$ , si no que es posible utilizarlo para poder describir la cantidad de sitios para cualquier cristal hiperbólico que cuente con una estructura formada por polígonos regulares. Este trabajo de tesis está enfocado en esta clase de cristales.

## III.2. Análisis del cristal hiperbólico $\{8, 3\}$ sin deformación

Los resultados obtenidos en la sección III.1 permiten resolver numéricamente el problema de eigenvalor que modela a un cristal hiperbólico regular  $\{p, q\}$ ,

$$\hat{H} |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle. \quad (57)$$

De la ecuación (2), el hamiltoniano de sitio asociado al cristal hiperbólico regular  $\{p, q\}$  es

$$\hat{H} = \sum_n \varepsilon |n\rangle \langle n| - t |n\rangle \langle n+1| - t |n+1\rangle \langle n| + O(q, t), \quad (58)$$

Siendo  $O(q)$  un término que se agrega al hamiltoniano con el propósito de referirse a las interacciones necesarias para tener las  $q$  conexiones del sistema. Esto se debe a la geometría de un cristal hiperbólico, que puede tener una mayor cantidad de vecinos cercanos. Por ejemplo, en una red unidimensional los vecinos cercanos del sitio  $n$  son el  $n - 1$  y el  $n + 1$ ; sin embargo en el caso hiperbólico esto no se cumple si  $q > 2$ , como se muestra en la figura 16.

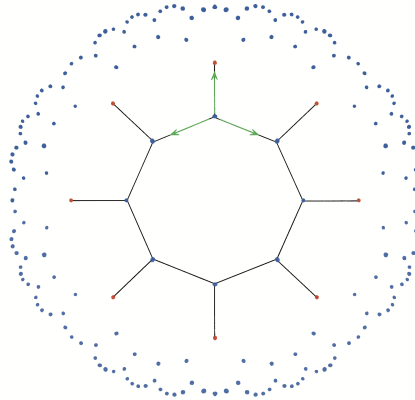


Figura 16: Cristal hiperbólico  $\{8, 3\}$ , donde se observa que cada vértice del cristal tiene tres vecinos cercanos.

Dada la geometría del cristal, no es posible tener un espectro de eigenvalores idéntico al presentado en el marco teórico, ya que el aumento de interacciones entre vecinos cercanos, esto repercute notablemente la estructura del hamiltoniano de sitio y de sus eigenvalores. Por lo tanto no se puede proporcionar una solución analítica del problema, ya que debemos conocer la estructura exacta del hamiltoniano para el cristal hiperbólico  $\{8, 3\}$  y contar con una adaptación hiperbólica del teorema de Bloch, lo que conduce a utilizar métodos numéricos. Una de las ventajas de usar métodos numéricos es que la solución del sistema se reduce en determinar los eigenvalores y los eigenvectores del operador hamiltoniano (Apéndice A.2), la cual es una matriz de  $n \times n$ , donde  $n$  es la cantidad de sitios en el sistema.

Por ejemplo, consideremos el cristal  $\{8, 3\}$  con tres capas que se muestra en la figura 17. Esto implica que contamos con 200 sitios y por lo tanto tendremos una matriz asociada al hamiltoniano de dimensiones  $200 \times 200$ .

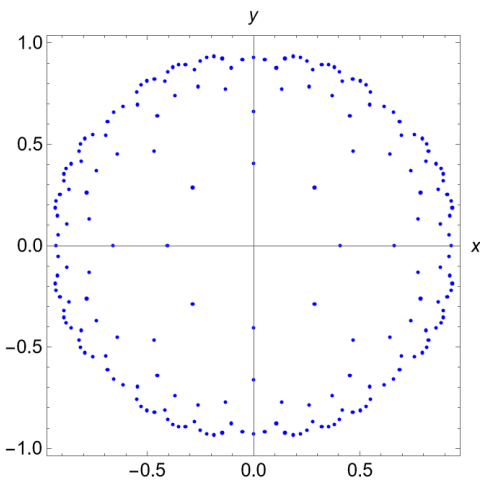


Figura 17: Cristal hiperbólico de la forma  $\{8, 3\}$  considerando 3 capas.

Mediante la diagonalización numérica del hamiltoniano, se obtiene el espectro de eigenvalores mostrado en la figura 18.

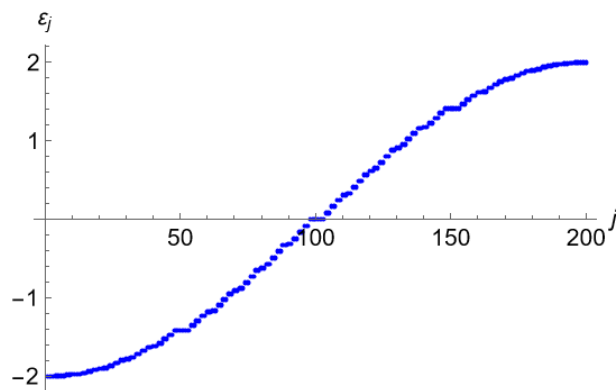


Figura 18: Espectro de eigenvalores del cristal  $\{8, 3\}$

La distribución de estados se obtiene utilizando 200 puntos de la red. Como se puede ver, el espectro de eigenvalores de la figura 18 difiere significativamente al de la figura 4. Mientras que en la figura 18 se esperaría obtener un espectro de eigenvalores con una tendencia sinusoidal, en este caso se identifican tres bandas planas de energía: alrededor de los eigenvalores 50, 100 y 150. Estas bandas de energía están asociadas a alguna simetría del cristal, ya que se están obteniendo diferentes eigenestados con mismos eigenvalores, de hecho en estos casos se dice que el sistema presenta estados **degenerados**.

Es posible realizar un estudio del espectro de eigenvalores con una cantidad mayor de sitios, pero no genera alguna diferencia notoria porque la distribución de estados no se altera; únicamente se hace más definida. Por ello resulta conveniente no utilizar una gran cantidad de puntos de la red para poder estudiar esta clase de sistemas, lo cual será especialmente ventajoso al abordar las deformaciones en cristales hiperbólicos.

### III.3. Densidad de probabilidad

Para tener una visión de cómo son los estados de sitio de un cristal hiperbólico (es decir su distribución espacial) se pueden emplear herramientas como los mapas de densidad.

Esta clase de mapas nos permitirán visualizar la distribución de probabilidad asociada para cada eigenvector de interés.

Para construir un mapa de densidad, le asociamos a cada punto de red una función gaussiana y utilizamos a la función de densidad de probabilidad como una amplitud asociada al  $j$ -ésimo estado, lo cual se expresa de la siguiente forma

$$P(x, y)_j = \sum_n |\psi(x, y)_n^j|^2 e^{-\frac{(x_i - x_o)^2 + (y_i - y_o)^2}{\sigma^2}}, \quad (59)$$

donde  $j$  es algún eigenestado con energía  $\varepsilon_j$  y su eigenfunción será un vector de dimensión  $n$ , siendo  $n$  el número de sitios y de esta forma  $\psi(x, y)_n^j$  es la eigenfunción de sitio, donde  $x$  y  $y$  son las posiciones de sitio en el disco de Poincaré alrededor de un punto  $(x_0, y_0)$ . Esto nos permite observar las contribuciones de probabilidad que dan sitios aledaños a un sitio en concreto del cristal hiperbólico. En el Apéndice A.3 se muestra el código desarrollado en el lenguaje de programación Python para construir los mapas de densidad de probabilidad. Debido a que con un solo mapa de densidad no es suficiente para analizar la densidad de estados del sistema, es necesario realizar un estudio por secciones del cristal hiperbólico tomando distintos eigenvectores, lo cual se ilustra en las figuras 19, 20 y 21.

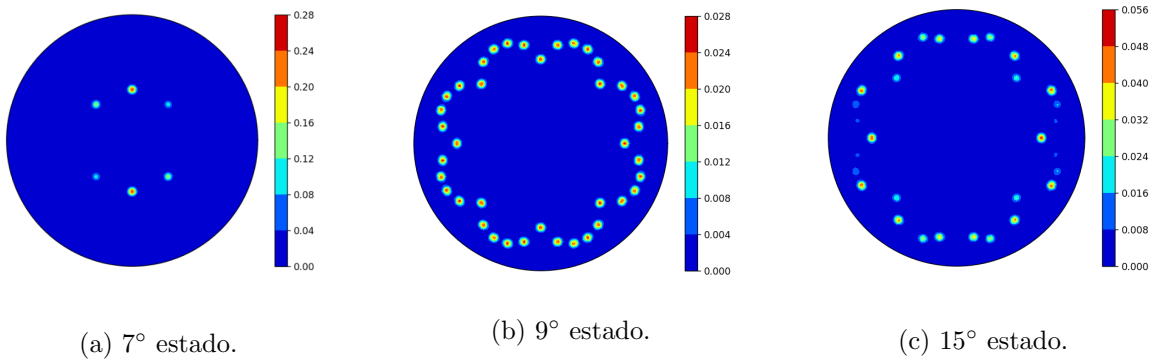


Figura 19: Mapas de densidad de probabilidad alrededor de distintos estados de sitio.

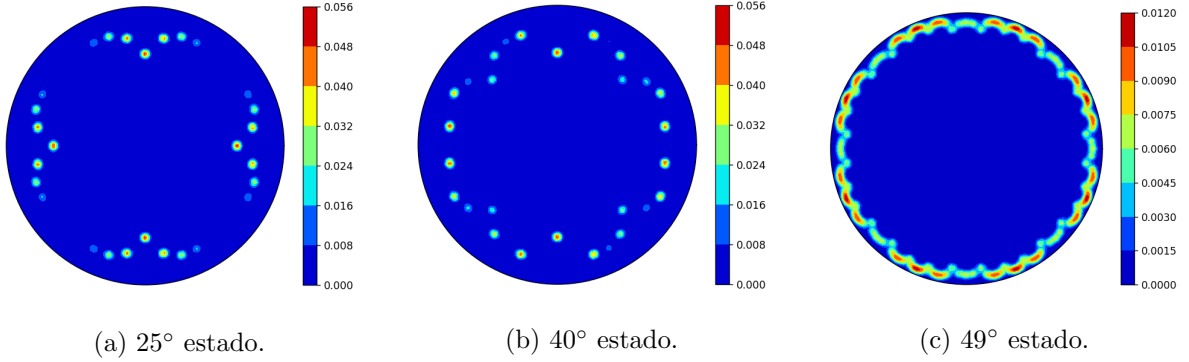


Figura 20: Mapas de densidad de probabilidad alrededor de distintos estados de sitio.

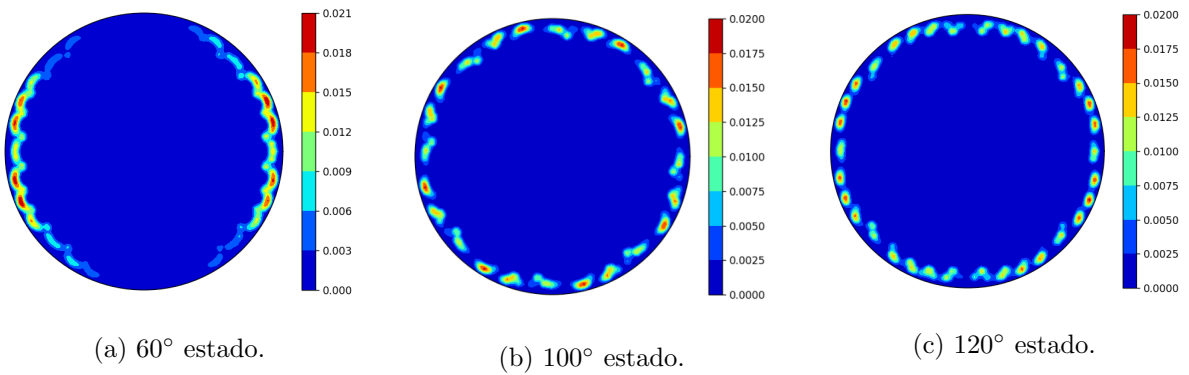


Figura 21: Mapas de densidad de probabilidad alrededor de distintos estados de sitio.

Notemos que en los sitios de la segunda capa tenemos un mayor panorama de la distribución de estados, como se observa en la figura 19 b) hasta la figura 20 b). Por otro lado en las figura 20 c) hasta la figura 21 c) se observa como se traslapan la densidad de probabilidad en sitios ubicados en la frontera del disco de Poincaré, mientras que en los estados de la primer y segunda capa del cristal tenemos que existe un espaciamento bien definido. A la primer capa del cristal la podemos asociar a todos los posibles  $p$  estados de sitio y a la segunda capa con todos los posibles  $p(p - q)$  estados de sitio. Esto se interpreta como que la geometría genera una especie de condensación de estados conforme nos acercamos a la frontera.

En la figura 22 se presenta un mapa resumido de como son las densidades de probabilidad y con respecto a ciertos eigenvalores del sistema. Con estos resultados podemos estudiar las deformaciones sobre cristales hiperbólicos, para lo cual es necesario desarrollar herramientas específicas, las cuales se presentarán en la siguiente sección.

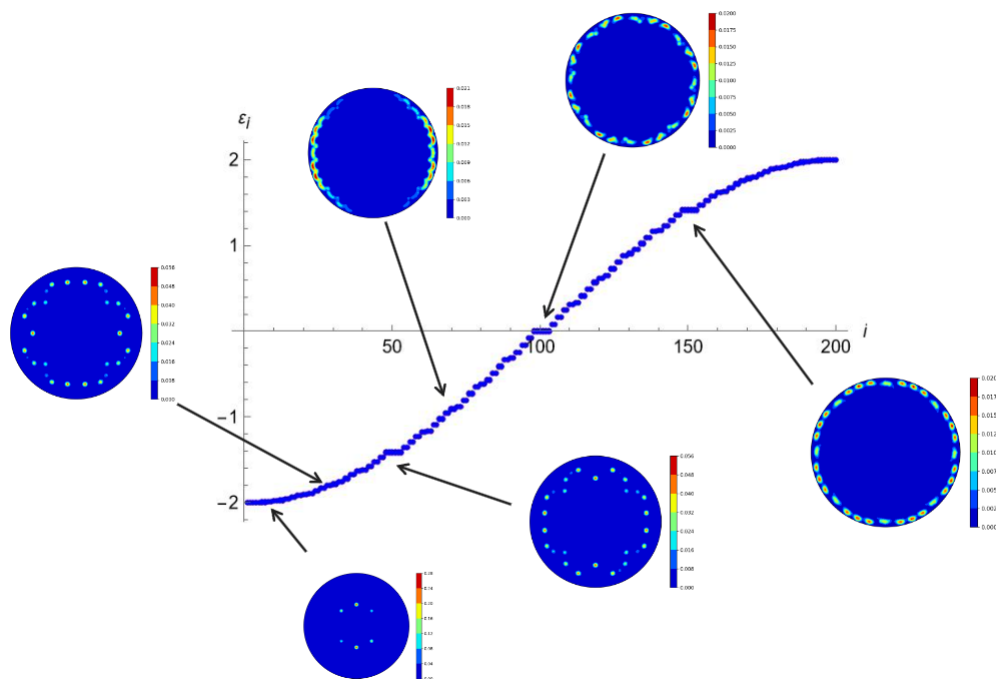


Figura 22: Evolución de la densidad de probabilidad asociada a distintos eigenvectores.

### III.4. Tensor de deformaciones hiperbólico

Para extrapolar el concepto de deformación del espacio euclideo al espacio hiperbólico, se presentará una propuesta partiendo del concepto de diferencial de longitud en coordenadas curvilíneas (Ramos-Sánchez y Vidal (2018))

$$dl^2 = (h_1 d\xi^1)^2 + (h_2 d\xi^2)^2 + (h_3 d\xi^3)^2, \quad (60)$$

siendo  $h_i$  los factores de escala, estos factores son los que determinan la curvatura del diferencial de longitud y  $d\xi^i$  son las posiciones infinitesimales sobre el sistema curvilíneo en cuestión. Por ejemplo, en coordenadas cartesianas son  $dx$ ,  $dy$  y  $dz$ . Se sabe que el tensor de deformaciones está íntimamente relacionado con el concepto de distancia, al definir  $u(\mathbf{x}) = \mathbf{x}' - \mathbf{x}$  como el vector de desplazamientos se puede determinar el tensor de deformaciones por medio de (Sadd (2010))

$$\varepsilon = \frac{1}{2} (\nabla \otimes u(\mathbf{x}) + (\nabla \otimes u(\mathbf{x}))^t), \quad (61)$$

siendo  $\varepsilon$  el tensor de deformaciones,  $\otimes$  representa el producto directo (también llamado producto tensorial) entre el operador  $\nabla$  y  $u(\mathbf{x})$ , el operador  $\nabla$  se tiene que representar en coordenadas curvilíneas, por lo que resulta conveniente utilizar (Ramos-Sánchez y Vidal (2018))

$$\nabla = \hat{\mathbf{e}}_1 \frac{1}{h_1} \frac{\partial}{\partial \xi^1} + \hat{\mathbf{e}}_2 \frac{1}{h_2} \frac{\partial}{\partial \xi^2} + \hat{\mathbf{e}}_3 \frac{1}{h_3} \frac{\partial}{\partial \xi^3}, \quad (62)$$

aquí los vectores  $\hat{\mathbf{e}}_i$  definen un sistema coordinado en el sistema curvilíneo, esto es

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{e}}_1 &= \frac{1}{h_1} \frac{\partial x^k}{\partial \xi^1} \mathbf{e}_k, \\ \hat{\mathbf{e}}_2 &= \frac{1}{h_2} \frac{\partial x^k}{\partial \xi^2} \mathbf{e}_k, \\ \hat{\mathbf{e}}_3 &= \frac{1}{h_3} \frac{\partial x^k}{\partial \xi^3} \mathbf{e}_k. \end{aligned}$$

Los vectores  $\mathbf{e}_k$  son los vectores base euclidianos, por lo tanto es posible determinar el tensor de deformaciones en el espacio hiperbólico. Para el modelo del disco de Poincaré

es muy fácil determinar que el factor de curvatura es  $(2k)^2/(1 - |z|^2)^2$  mediante el diferencial de longitud (Maciejko y Rayan (2022)).

$$dl^2 = (2k)^2 \frac{dx^2 + dy^2}{(1 - |z|^2)^2}, \quad (63)$$

donde  $|z|$  es el módulo del número complejo  $z = x + iy$ . Dado que el disco de Poincaré es un modelo bidimensional del espacio hiperbólico, se calcularán los vectores coordenados  $\hat{\mathbf{e}}_1$  y  $\hat{\mathbf{e}}_2$ , estos son

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{e}}_1 &= \frac{(1 - |z|^2)}{(2k)} \frac{dx}{dx} \mathbf{e}_1 = \frac{(1 - |z|^2)}{(2k)} \mathbf{e}_1, \\ \hat{\mathbf{e}}_2 &= \frac{(1 - |z|^2)}{(2k)} \frac{dy}{dy} \mathbf{e}_2 = \frac{(1 - |z|^2)}{(2k)} \mathbf{e}_2. \end{aligned}$$

Usando la ecuación (62) tendremos que

$$\nabla = \frac{(1 - |z|^2)^2}{(2k)^2} \left( \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{e}_1 + \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{e}_2 \right). \quad (64)$$

Finalmente, con este resultado y utilizando la ecuación (61), obtenemos que

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{(1 - |z|^2)^2}{(2k)^2} \begin{pmatrix} \frac{\partial u_x}{\partial x} & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_y}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) \\ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) & \frac{\partial u_y}{\partial y} \end{pmatrix}, \quad (65)$$

el cual resulta ser el tensor de deformaciones en el plano hiperbólico. De esta forma podemos describir cambios en la posición inicial de un vector como

$$\begin{aligned} \mathbf{x}' - \mathbf{x} &= u(\mathbf{x}), \\ \mathbf{x}' &= \mathbf{x} + u(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (66)$$

por lo que ahora  $u(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{x}$ .

Por otra parte, utilizando el método del diferencial de longitud partimos de la ecuación (63), de la misma forma que en la sección II.6, se considera un punto  $x_i \in \mathbb{D}$  y se propone un vector de desplazamiento  $u_i = x'_i - x_i$ , para  $i = 1, 2$ , de la ecuación (40) se tiene que  $dl'^2 = (dx_i + du_i)^2$ , haciendo uso de esta sustitución en la ecuación (63) se obtiene

$$dl'^2 = (2k)^2 \frac{(dx_i + du_i)^2}{(1 - (x_i + u_i)^2)^2}. \quad (67)$$

Por regla de la cadena se tiene que  $du_i = \frac{\partial u_i}{\partial x_k} dx_k$ , sustituyendo este resultado y desarrollando el termino cuadrático del numerador en la ecuación (67) llegamos a que

$$dl'^2 = \frac{(2k)^2}{(1 - (x_i + u_i)^2)^2} \left( dx_i^2 + 2 \frac{\partial u_i}{\partial x_k} dx_i dx_k + \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} dx_k dx_j \right). \quad (68)$$

Hay que observar la clara similitud entre este procedimiento y el mostrado en la sección II.6, de esta manera si seguimos los pasos mostrados en la ecuación (42) hasta la ecuación (49), llegamos a

$$dl'^2 = \frac{(2k)^2}{(1 - (x_i + u_i)^2)^2} \left( dx_i^2 + 2u_{ik} dx_i dx_k \right). \quad (69)$$

Hay que observar que el tensor  $u_{ik}$  conserva la misma estructura (al menos para esta métrica), lo que genera la diferencia es el factor de curvatura hiperbólica que multiplica a este tensor. Para obtener una ecuación que sea congruente con la definición de deformación debemos de reescribir el factor de curvatura como

$$dl'^2 = \frac{(2k)^2}{(1 - (x_i + u_i)^2)^2} dx_i^2 + \frac{(2k)^2}{(1 - (x_i + u_i)^2)^2} 2u_{ik} dx_i dx_k. \quad (70)$$

Para el último término de la ecuación (70), al sustituir la definición de  $x'_i$ , el factor de escala hiperbólica queda en términos de  $x'_i$ . En el caso del primer término es suficiente pedir que  $u = 0$ . Lo que tiene sentido por que  $dl'^2$  quedará en términos de  $dl^2$  y un factor extra que se interpreta como la deformación. Además, esto se puede interpretar como tomar el primer término de desarrollo en serie de Taylor de  $u(\mathbf{x})$  en una bola centrada en el origen. Por lo tanto

$$\begin{aligned} dl'^2 &= \frac{(2k)^2}{(1 - (x_i)^2)^2} dx_i^2 + \frac{(2k)^2}{(1 - (x'_i)^2)^2} 2u_{ik} dx_i dx_k, \\ dl'^2 &= dl^2 + \frac{(2k)^2}{(1 - (x'_i)^2)^2} 2u_{ik} dx_i dx_k. \end{aligned} \quad (71)$$

Por otro lado, tenemos que el tensor de deformación  $u_{ik}$  cuenta con la estructura siguiente

$$u_{ik} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_l}{\partial x_i} \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right), \quad (72)$$

y recordemos que este tensor en forma matricial

$$\mathbf{u}_{\mathbf{xy}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 \left( \frac{\partial u_x}{\partial x} \right) & \left( \frac{\partial u_y}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) \\ \left( \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) & 2 \left( \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) \end{pmatrix}. \quad (73)$$

Este resultado se diferencia con el mostrado en la ecuación (71) en el hecho de que este tensor está siendo multiplicado por el factor de escala hiperbólica, por lo tanto

$$\begin{aligned} \left( \frac{(2k)^2}{(1 - (x'_i)^2)^2} \right) u_{ik} &= \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \right), \\ u_{ik} &= \frac{(1 - (x'_i)^2)^2}{2(2k)^2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_l} + \frac{\partial u_l}{\partial x_i} \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right). \end{aligned} \quad (74)$$

Esto es consistente con el resultado propuesto en la ecuación (65), por lo tanto se ha deducido una forma de realizar deformaciones que respetan la geometría del disco de Poincaré. Es importante destacar la influencia del factor de curvatura hiperbólica al transformar el tensor de deformaciones euclidiano a uno hiperbólico. Además, se observa que este factor actúa de manera local en cada deformación, garantizando que los sitios permanezcan confinados dentro del disco de Poincaré.

### III.5. Descripción de deformaciones

Las ecuaciones (65) y (66) se pueden utilizar en los resultados obtenidos en la sección II.6 al caso hiperbólico. Para ello, es necesario comprender la estructura del disco de Poincaré.

El disco de Poincaré es un conjunto abierto formado por todos los números complejos cuyo módulo menor a uno, es decir:

$$\mathbb{D} = \{z \in \mathbb{C} \mid |z| < 1\}. \quad (75)$$

**Definición 3.1:** Sea  $U \subset \mathbb{R}^n$ . Llamamos a  $U$  **conjunto abierto** si para todo punto  $\mathbf{x}_0$  en  $U$  existe  $r > 0$ , tal que un disco de radio  $r$  centrado en  $\mathbf{x}_0$ . es decir,  $D_r(\mathbf{x}_0)$  está

contenido dentro de  $U$ .

Para el factor de escala que actúa sobre el elemento de línea

$$dl^2 = (2k)^2 \frac{dx^2 + dy^2}{(1 - |z|^2)^2}, \quad (76)$$

el término  $1/(1 - |z|^2)^2$  describe el comportamiento de los puntos cercanos a la frontera del disco. Esto proporciona un indicio de qué clase de deformaciones respetan la geometría del espacio hiperbólico.

De la ecuación (65), se observan dos tipos de deformaciones: expansión y contracción, descritas matemáticamente por

$$\mathbf{x}' = \mathbf{x} \mp \frac{(1 - |\mathbf{x}|^2)^2}{2k^2} \mathbf{x}, \quad (77)$$

siendo  $\mathbf{x} = (x, y)$ , con  $|\mathbf{x}| = \sqrt{x^2 + y^2}$ .

Al utilizar  $u(\mathbf{x}) = (x' - x, y' - y)$  en el tensor de deformación de la ecuación (65), obtenemos que

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon} &= \frac{(1 - |z|^2)^2}{(2k)^2} \begin{pmatrix} \frac{\partial u_x}{\partial x} & \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_y}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) \\ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) & \frac{\partial u_y}{\partial y} \end{pmatrix} \\ &= \frac{(1 - |z|^2)^2}{(2k)^2} \begin{pmatrix} \partial_x(x' - x) & \frac{1}{2} (\partial_x(y' - y) + \partial_y(x' - x)) \\ \frac{1}{2} (\partial_y(x' - x) + \partial_x(y' - y)) & \partial_y(y' - y) \end{pmatrix}, \\ &= \frac{(1 - |z|^2)^2}{(2k)^2} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Por lo tanto, cuando  $\boldsymbol{\varepsilon}$  actúa sobre el vector  $\mathbf{x}$  tendremos que  $\boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{x} = -\frac{(1-|\mathbf{x}|^2)^2}{2k^2}\mathbf{x}$ . Por lo tanto, la ecuación (77) es válida para describir expansiones o contracciones.

Se infiere que se aplica una expansión si el signo de la ecuación (77) es positivo o en caso contrario es una contracción. Es importante destacar de que para puntos cercanos a la frontera el factor  $(1 - |\mathbf{x}|)^2 \rightarrow 0$ , lo que implica que los efectos de la deformación serán despreciables o menores conforme nos acerquemos a la frontera del disco de Poincaré. Este análisis es análogo tanto para expansiones como para contracciones. De forma gráfica ,el resultado de una expansión en el cristal hiperbólico de la forma  $\{8, 3\}$  es representado en la figura 23. Los puntos azules son las posiciones originales en el disco de Poincaré y los puntos rojos son las posiciones después de la expansión /contracción. Esta convención de colores se usará a lo largo de la tesis, incluyendo los espectros de eigenvalores. En la figura 24 se muestran los efectos de la contracción sobre el cristal hiperbólico  $\{8, 3\}$ .

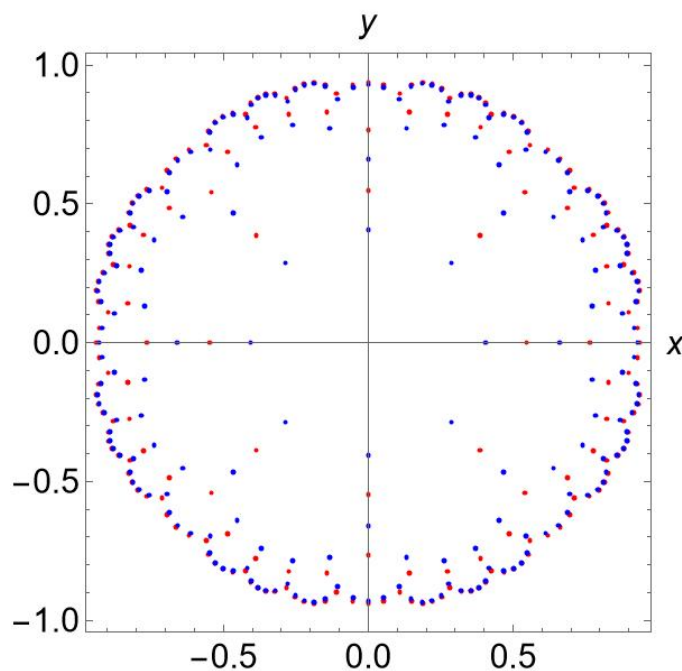


Figura 23: Expansión sobre el cristal  $\{8, 3\}$ .

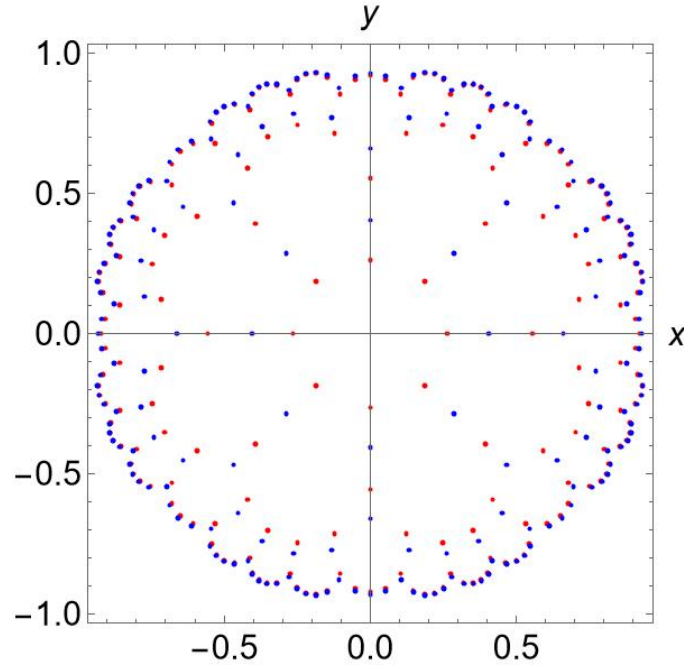


Figura 24: Contracción sobre el cristal  $\{8, 3\}$ .

Las figuras 23 y 24 ejemplifican que la metodología desarrollada en este trabajo de tesis es correcta para realizar deformaciones en el disco de Poincaré, ya que realizamos deformaciones sobre el cristal hiperbólico  $\{8, 3\}$  conservando su estructura geométrica dentro del disco de Poincaré.

Ahora se analizará el caso de las deformaciones torsionales. Como los puntos en el plano complejo se pueden rotar de manera análoga a lo que ocurre en  $\mathbb{R}^2$ , es posible utilizar la parametrización en coordenadas polares. En la ecuación (51) se propuso que la deformación torsional se representa como

$$\theta' = \theta + f(r, \theta).$$

Para el caso particular en que

$$\begin{aligned} x &= r \cos(\theta), \\ y &= r \sin(\theta), \end{aligned} \tag{78}$$

cuando se realice un cambio en el ángulo natural de la posición  $(x, y)$  se reflejará directamente en una nueva posición  $(x', y')$ . Entonces, se propone la siguiente transformación

$$\theta' = \theta + \alpha \quad (79)$$

siendo  $\alpha$  un parámetro a elegir. Esta clase de deformaciones conservan la norma, lo que las convierte en una propuesta para estudiar deformaciones en el espacio hiperbólico. Por ejemplo, se presenta el resultado de la rotación de  $1^\circ$  ( $\alpha = 1^\circ$ ).

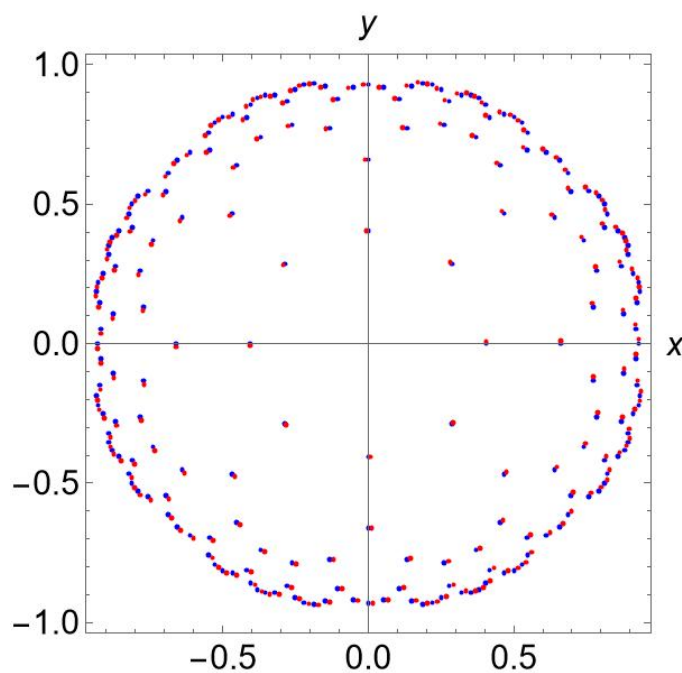


Figura 25: Rotación de  $1^\circ$  sobre el cristal  $\{8, 3\}$

Para analizar el espectro de eigenvalores después de la deformación, será necesario realizar ligeras modificaciones en la estructura de nuestro hamiltoniano, las cuales se detallarán en la siguiente sección. Un resultado a resaltar es que si el factor  $\alpha$  es  $45^\circ$ , se recupera el cristal hiperbólico original (sin deformar), como se muestra en la figura 26.

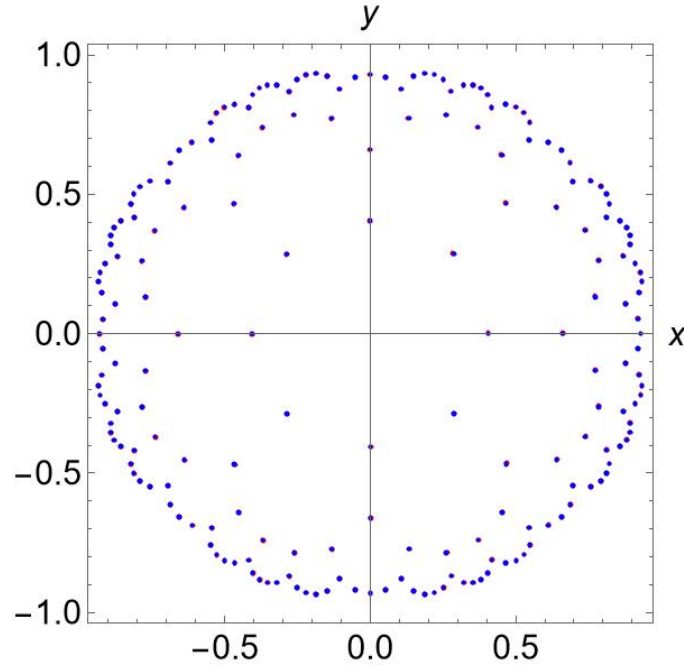


Figura 26: Rotación de  $45^\circ$  sobre el cristal  $\{8, 3\}$

Por lo tanto, esto nos permite pensar que en esta clase de cristales existe una simetría discreta de la forma

$$particiones = \frac{360}{p}, \quad (80)$$

donde  $p$  es el número de lados del cristal. Aún cuando falta interpretar esta clase de simetrías discretas, se puede inferir que los eigenestados de sitio tendrán acumulados una fase asociada a esta rotación (esta fase puede ser de la forma  $e^{i\frac{360}{p}}$ ). Sin embargo, esta fase es irrelevante al momento de obtener la densidad de estados al evaluar el módulo cuadrado del vector de estado.

### III.6. Cambios en la densidad de probabilidad

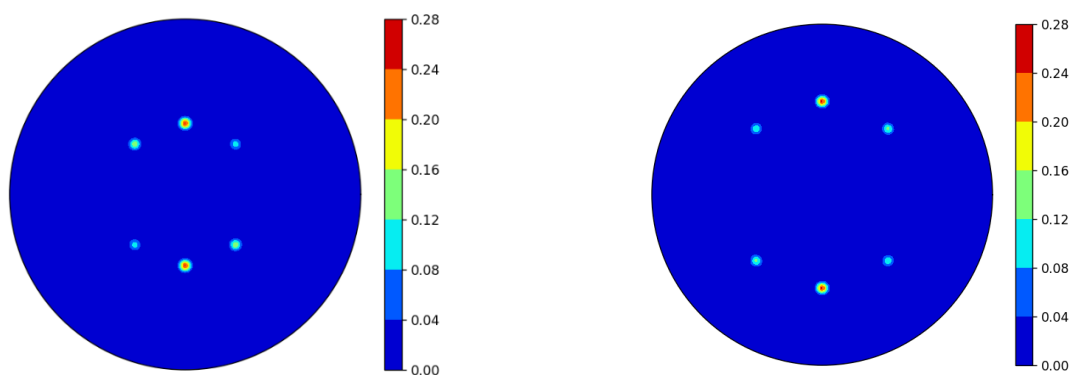
Para determinar cómo varía la densidad de probabilidad al aplicar alguna deformación es necesario analizar la estructura del hamiltoniano, específicamente cómo se afecta el parámetro de tuneo  $t$ . Una forma de describir esta variación es expresar al parámetro de tuneo en términos de una función exponencial que depende del cambio en la distancia de un sitio. Así, se define  $t'$  como

$$t' = t_o e^{\frac{l-l_o}{l_o}}, \quad (81)$$

donde  $l$  es la distancia hiperbólica después de la deformación y  $l_o$  es la distancia hiperbólica sin deformar. Si  $l = l_o$  entonces  $t' = t_o$ , lo que implica que el parámetro de tuneo  $t$  cambia si y solo si hay un cambio en la distancia del sitio original. Por lo que el hamiltoniano será

$$\hat{H}_{def} = \sum_n \varepsilon |n\rangle \langle n| - t' |n\rangle \langle n+1| - t' |n+1\rangle \langle n| + O'(q, t'). \quad (82)$$

La estructura del hamiltoniano se verá directamente modificada por la deformación. Resulta bastante simple emplear cálculos numéricos para analizar la densidad de estados después de la deformación, con el objetivo de determinar los eigenvalores del cristal hiperbólico deformado y por consiguiente obtener sus respectivos mapas densidad de probabilidad (hecho que se utiliza en la subrutina `deformed(N)` en el Apendice A.2). Ahora, de forma análoga al caso sin deformar, mostraremos la densidad de probabilidad de sitio.



(a) 7° estado sin deformación.

(b) Expansión sobre el 7° estado.

Figura 27: Comparación de la densidad de probabilidad del 7° estado de sitio después de aplicar una expansión.

Se puede observar que existe una clara diferencia entre los estados presentados en la figura 27 (a) y en la figura 27 (b), tal que se observa la expansión sobre los estados. Sin embargo, dicha expansión no afecta su densidad de probabilidad. Para tener una perspectiva más amplia, es necesario analizar cómo afecta la deformación al espectro de eigenvalores, lo cual se presenta en la figura 28.

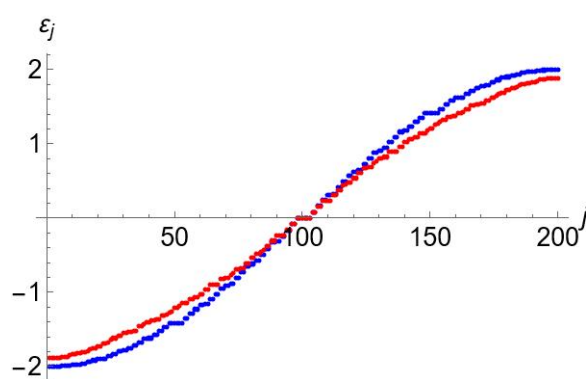


Figura 28: Espectro de eigenvalores del cristal  $\{8, 3\}$  después de la expansión, en donde la curva azul correspondiente al espectro de eigenvalores sin deformar y la curva roja al espectro de eigenvalores después de la expansión.

En la figura 28 se observa cómo los eigenvalores responden a la deformación. Los escalones que caracterizan al espectro del sistema desaparecen al momento de realizar la deformación, haciendo que el espectro sea más continuo y regular, esto se observa en la curva roja en la figura 28.

Independientemente de la deformación existen estados degenerados naturales sobre el espectro de eigenvalores del cristal, ya que a pesar de la deformación, los estados alrededor del  $100.^{\circ}$  eigenvalor no reaccionan ante la deformación. Ahora resulta interesante realizar un análisis de la densidad de probabilidad un poco más detallado, para ello presentaremos la figura 29 y la figura 30, con el propósito de ilustrar los cambios de la densidad de probabilidad en ciertas regiones del cristal hiperbólico  $\{8, 3\}$ .

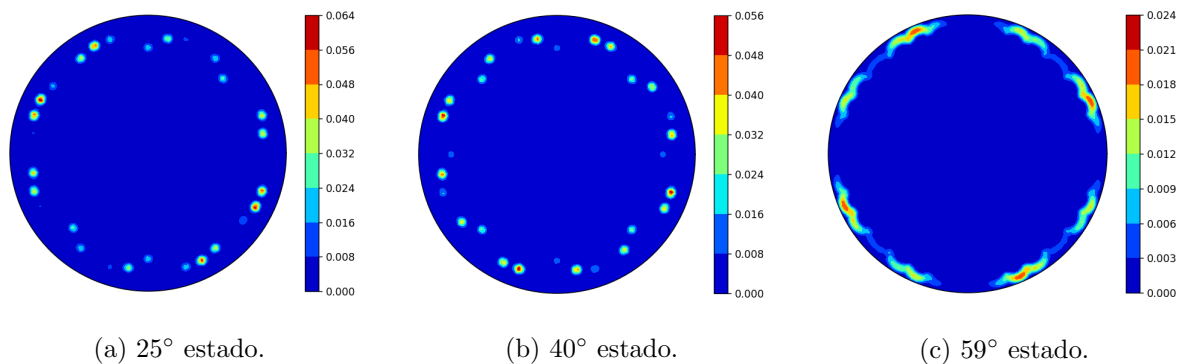


Figura 29: Mapas de densidad de probabilidad después de la expansión.

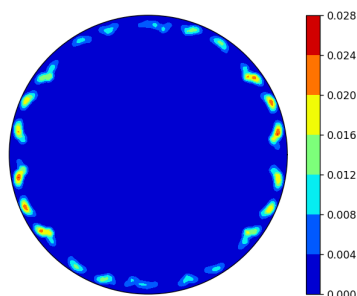


Figura 30: Densidad de probabilidad en el estado  $100^\circ$  después de la expansión.

Por medio del espectro de eigenvalores mostrado en la figura 28 y con los mapas de densidad de probabilidad, podemos inferir que esta clase de deformaciones aumenta la energía de los estados que se encuentran en la tercer capa.

Por otro lado, los estados de la primer capa se vuelven menos energéticos, ya que el cambio de la distancia tiende a ser más radical respecto a las posiciones originales, ya que el factor de curvatura hiperbólica tiende a ser medianamente grande a comparación de los estados que son cercanos a ella, en el caso de los eigenestados alrededor del eigenvalor  $100.^\circ$  tienden a ser muy similares a los estados sin deformar.

Ahora, si se realiza una contracción sobre el cristal hiperbólico  $\{8, 3\}$ , se muestra en la figura 31 como es que estos sitios se acercan mas al origen del disco de Poincaré (en el caso de la expansión los sitios se alejan del origen del disco de Poincaré), los efectos en el espectro de eigenvalores asociado a esta deformación se presentan en la figura 32.

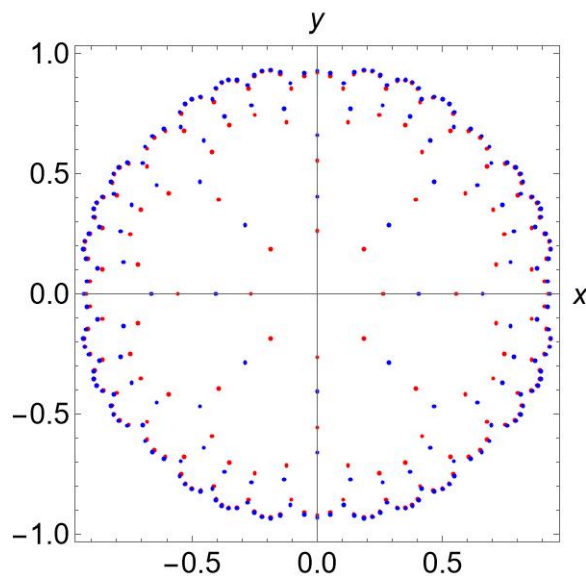


Figura 31: Contracción sobre el cristal  $\{8, 3\}$ .

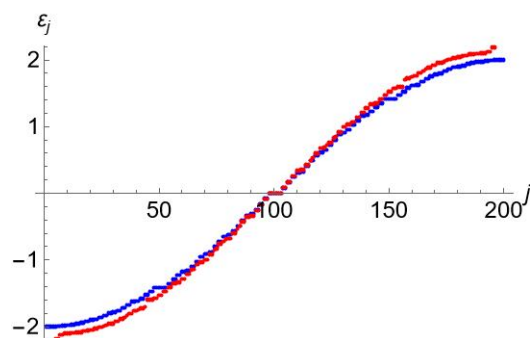


Figura 32: Espectro de eigenvalores después de la contracción.

En la figura 32 se observa que el espectro de eigenvalores es afectado de tal forma que generan brechas o saltos de energía, visibles aproximadamente en el eigenvalor  $45^\circ$  y alrededor del eigenvalor  $155^\circ$ . Es importante destacar que los eigenestados alrededor del  $100^\circ$  eigenvalor permanecen sin cambios y son idénticos a los del espectro de eigenvalores sin deformar ( $\varepsilon_j = 0$ ). Por este motivo, es relevante analizar la densidad de probabilidad en estas brechas de energía, como se muestra en la figura 33.

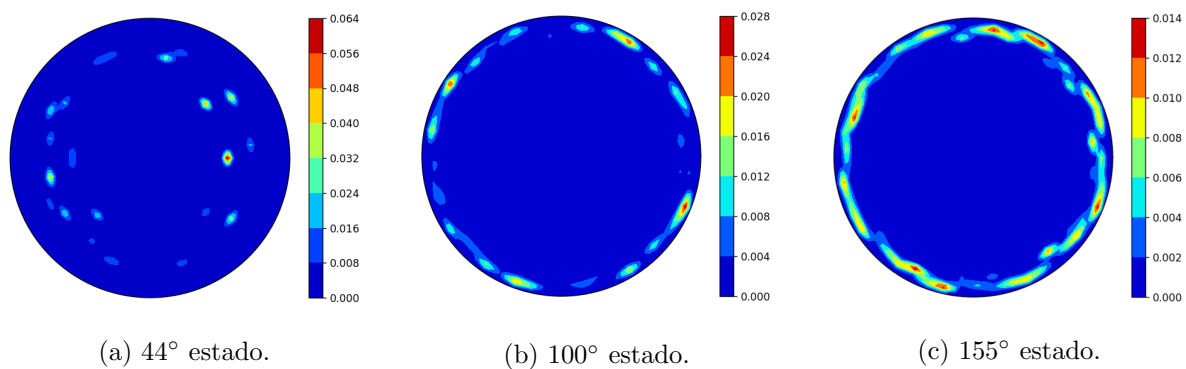


Figura 33: Mapas de densidad de probabilidad después de la contracción.

En el caso de la torsión se utiliza la ecuación (79). Al realizar una torsión de un grado, se puede observar que el espectro de eigenvalores queda aparentemente invariante. Sin embargo, si se analiza la densidad de probabilidad del 7° estado observaremos un leve corrimiento en la densidad de probabilidad, como se muestra en la figura 35.

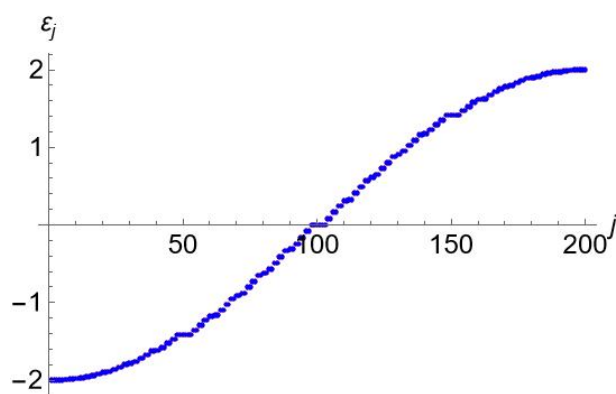


Figura 34: Espectro de eigenvalores después de una rotación de un grado.

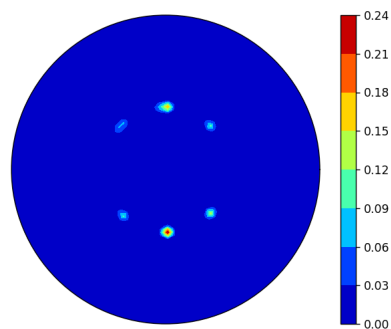


Figura 35: Torsión de un grado sobre el séptimo estado.

Al momento de realizar una torsión de 45 grados (enfocados en la simetría discutida en la sección III.5) obtendremos el espectro de eigenvalores de la figura 36.

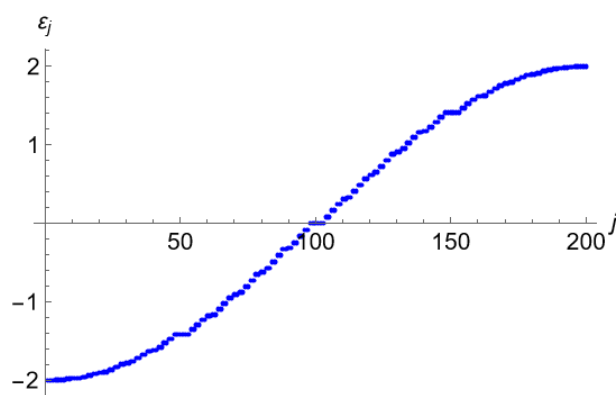


Figura 36: Espectro de eigenvalores después de una rotación de 45 grados.

Aunque el espectro de eigenvalores sea el mismo, se observa en la figura 37 que los eigenvalores. Esto sugiere que los eigenvectores están acumulando una fase, y al momento de realizar el cálculo numérico, esta fase se propaga sobre los eigenvectores, incluso si analíticamente las fases sean irrelevantes.

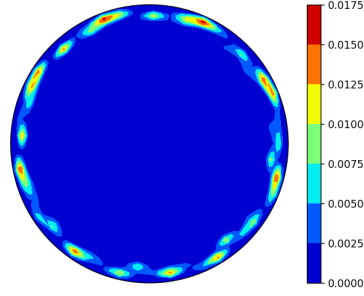


Figura 37: Densidad de probabilidad del 100.º eigenvector después de la rotación.

Una forma de describir esta fase es partiendo de

$$e^{i\alpha\theta'} = 1. \quad (83)$$

Para obtener una rotación de  $2\pi$ , se pide que  $\alpha\theta' = n\pi$ . Si se cumple para cualquier cristal hiperbólico podemos llegar a que

$$\begin{aligned} \frac{\alpha 2\pi}{p} &= n\pi, \\ \alpha &= \frac{np}{2}. \end{aligned}$$

Lo anterior ofrece una forma compacta para describir las simetrías rotacionales en un cristal hiperbólico dado por

$$\hat{\beta}(\theta) = e^{i\frac{np}{2}\theta}, \quad (84)$$

con  $n \in \mathbb{N}$  y tendremos que  $\hat{\beta}(\theta) = 1$ , si  $\theta = 2\pi/p$ . Debido a que esta simetría es discreta, el espectro de eigenvalores del sistema es invariante y recuperaremos el estado de las posiciones iniciales si y solo sí se emplean rotaciones de este tipo.

En el caso de realizar torsiones fuera de esta simetría se puede proponer que

$$\theta' = \theta + \phi * (1 - |\mathbf{x}|^2)^2, \quad (85)$$

donde  $\phi$  es una constante que permite que el factor de curvatura sea adimensional. Al aplicar esta clase de deformaciones sobre el cristal  $\{8, 3\}$  obtendremos lo mostrado en

la figura 38, mientras que el espectro de eigenvalores asociado a esta deformación es mostrado en la figura 39.

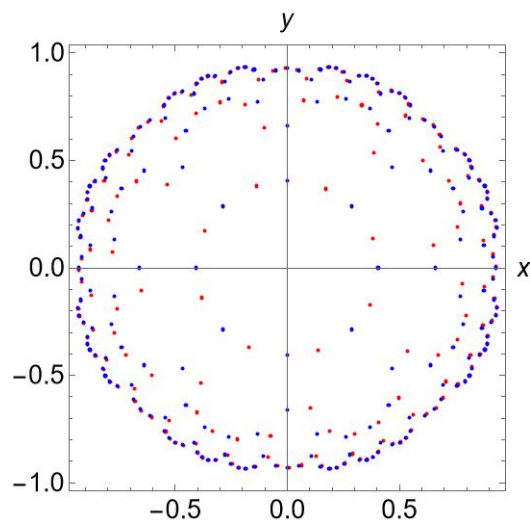


Figura 38: Torsión sobre el cristal  $\{8, 3\}$ .

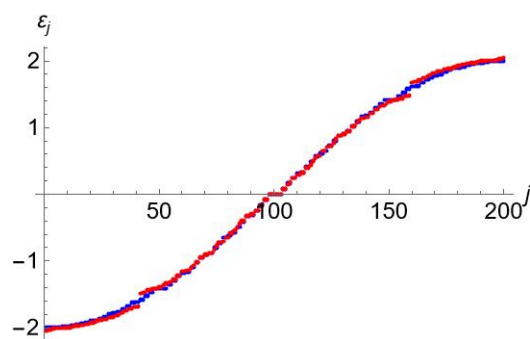
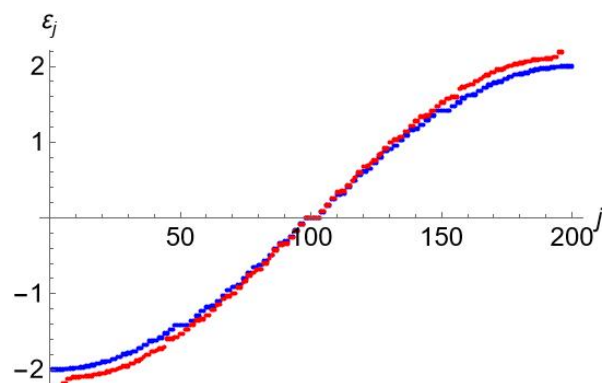
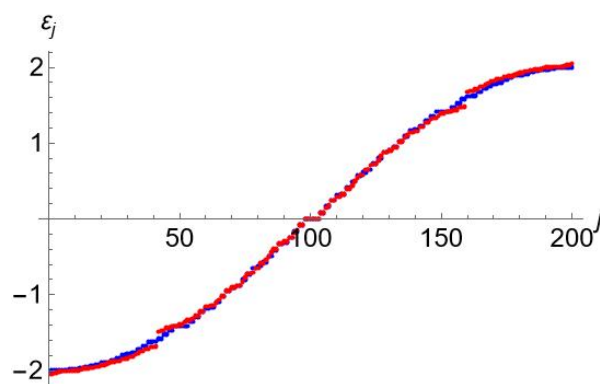


Figura 39: Espectro de eigenvalores después de la deformación propuesta en la ecuación (85).

Se puede observar en la figura 38 que este tipo de deformación no altera la estructura del cristal, aunque modifica las posiciones iniciales de los sitios, conservando la métrica hiperbólica original. Por otro lado al igual que en el caso de la compresión, se generan nueva mente brechas de energía en las mismas regiones del espectro de eigenvalores, como se muestra en la figura 40.



(a) Espectro de eigenvalores después de la contracción.



(b) Espectro de eigenvalores después de la torsión propuesta en la ecuación (85).

Figura 40: Comparación de espectros de eigenvalores sujetos a diferentes deformaciones.

Como se observa en la figura 40 (a) y 40 (b) los eigenvalores alrededor del 100.º eigenvalor son aparentemente invariantes ante estas deformaciones. Sin embargo, la densidad de probabilidad se modificada en comparación al estado sin deformar, lo que se puede

apreciar en la figura 41.

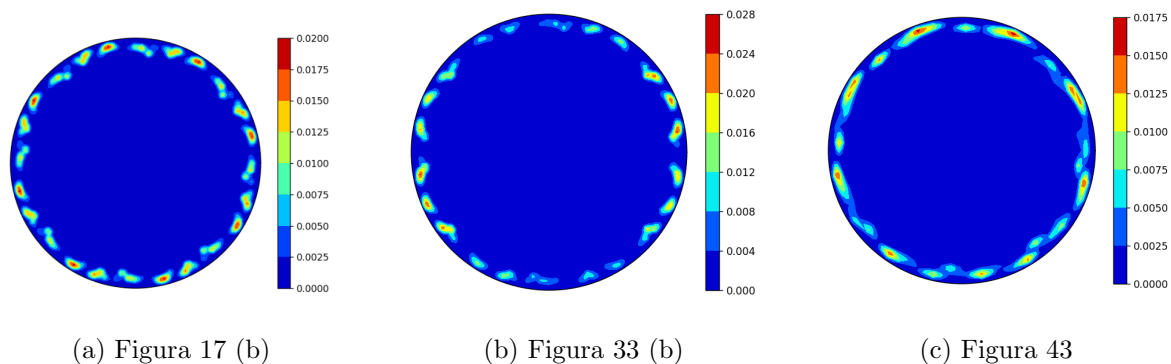


Figura 41: Comparación del mapa de densidad de probabilidad alrededor del  $100^\circ$  sitio, siendo la figura (a) el mapa de densidad de probabilidad del cristal hiperbólico  $\{8, 3\}$  sin deformar y las figuras (b) y (c) son los mapas de densidad de probabilidad del cristal deformado, siendo (b).

Es razonable suponer que la deformación en sitios aledaños afecta la estructura del eigenvector asociado a un eigenvalor específico, lo que explica por qué los mapas de densidad de probabilidad son diferentes. Ahora, por completitud mostraremos cómo esta deformación afecta la densidad de probabilidad en distintas regiones del cristal.

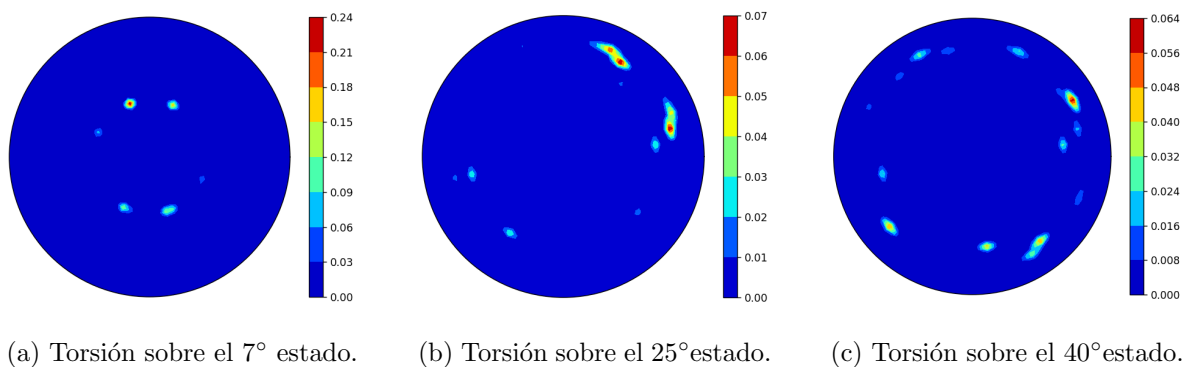


Figura 42: Mapas de densidad de probabilidad después de la torsión en distintos sitios del cristal  $\{8, 3\}$ .

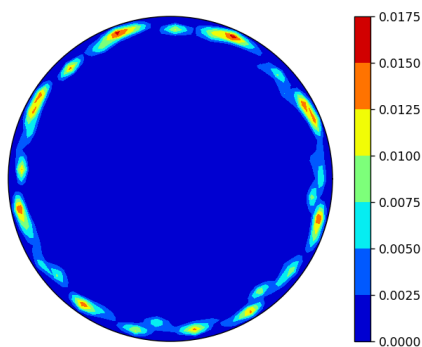


Figura 43: Torsión sobre el  $100^\circ$  estado.

A partir de los resultados obtenidos, se interpreta que la ruptura de la simetría rotacional del cristal hiperbólico  $\{8, 3\}$  junto con la contracción de los sitios del cristal; induce una condensación de estados en la frontera. Lo que es consistente con la naturaleza de esta clase de deformaciones, ya que al girar o al contraer el cristal hiperbólico se está haciendo que sitios donde naturalmente no hay transferencia electrónica esta exista. Por otro lado, los estados de la segunda capa se ven significativamente afectados por la deformación torcional. Sin embargo la mayor densidad de probabilidad se concentra alrededor del sitio de interés como se observa en la figura 42 (b) y 42 (c). Estos resultados nos dan indicios de la viabilidad de las propuestas para el estudio de deformaciones mecánicas en cristales hiperbólicos. Ahora, en la siguiente sección discutirán algunas ideas y posibles trabajos futuros.

### III.7. Trabajo futuro

Los resultados obtenidos en esta tesis, junto con los estudios previos de Oliva-Leyva y Wang (2017) y Zhang *et al.* (2022), abren nuevas líneas de investigación en el estudio de propiedades físicas de sistemas con geometría hiperbólica. Algunas de estas posibles direcciones incluyen el análisis de invariantes topológicos, la generación de campos pseudo-magnéticos mediante deformaciones, las interacciones con paquetes de fotones y el comportamiento de partículas libres confinadas en potenciales hiperbólicos.

En particular, estudios recientes como el de Lenggenhager *et al.* (2022) han demostrado experimentalmente la viabilidad de estos sistemas, utilizando la discretización del espacio hiperbólico mediante el modelo de disco de Poincaré. Esta aproximación abre la puerta a investigaciones en cristalografía en espacios no euclidianos, empleando tanto las técnicas desarrolladas en este trabajo como las propuestas en la literatura citada.

Por último, cabe resaltar el papel de la energía como cantidad escalar clave para explorar la elasticidad en sistemas cristalinos, tanto euclidianos como hiperbólicos. En esta tesis, a través del análisis espectral de los eigenvalores, se observó la ruptura de estados degenerados en el cristal hiperbólico  $\{8, 3\}$  (ver figura 35). Este fenómeno sugiere posibles interpretaciones y herramientas para describir mejor los comportamientos únicos de sistemas en espacios hiperbólicos, planteando preguntas para investigaciones futuras en esta área.

## Capítulo IV

### CONCLUSIONES

En este trabajo de tesis se desarrolló una metodología para describir deformaciones en cristales en un espacio hiperbólico bidimensional utilizando el modelo de disco de Poincaré. Utilizando relaciones teóricas y herramientas computacionales se implementó la aproximación de amarre fuerte para determinar el hamiltoniano de sitio para el cristal hiperbólico  $\{8, 3\}$ . Como parte de este proceso se contruyó una relación de recurrencia que permite calcular la cantidad de sitios por capa en cualquier cristal hiperbólico compuesto por polígonos regulares. Este resultado nos permitió estudiar el espectro de eigenvalores para el cristal hiperbólico  $\{8, 3\}$ , donde se identificaron bandas planas de energía asociadas a estados degenerados del cristal. Para visualizar la distribución de probabilidad asociada a los eigenvectores del hamiltoniano de sitio, se implementaron mapas de densidad de probabilidad, que demostraron ser útiles para el análisis de deformaciones en cristales hiperbólicos .

Basándonos en los resultados anteriores y empleando la teoría de la elasticidad en el espacio euclidiano, se propuso un método para realizar deformaciones mecánicas en cristales hiperbólicos. Tras aplicar estas deformaciones, se observó un cambio significativo en el espectro de eigenvalores después de la deformación sobre el cristal hiperbólico  $\{8, 3\}$ , evidenciado por la ruptura de la degeneración de los estados del hamiltoniano de sitio. Los espectros de eigenvalores y obtenemos después de aplicar la contracción y al aplicar la torsión propuesta en la ecuación (85), mostraron una notable similitud a los reportados por Boettcher *et al.* (2022), quienes presentan una metodología para generar

y describir cristales hiperbólicos. A diferencia de este trabajo de tesis, en el estudio de Boettcher *et al.* (2022) se consideraron cristales con condiciones de frontera abiertas, generando escalones de energía (separaciones entre niveles de energías). En esta tesis se consideraron condiciones de frontera cerradas donde todos los sitios están conectados, lo que resulta en un espectro continuo. Sin embargo, al introducir deformaciones, fue posible generar espectros de eigenvalores de frontera abierta.

El estudio de los cristales hiperbólicos continúa siendo un tema de gran interés para los físicos de estado sólido, debido a sus posibles aplicaciones áreas como los aislantes topológicos (Zhang *et al.* (2022); Huang *et al.* (2024)). Este campo involucra diversas áreas de estudio, tales como las fases geométricas y el efecto Hall cuántico, lo cual es viable gracias a la naturaleza bidimensional de estos materiales (Liu *et al.* (2022)). Además, se han estudiado de forma teórica la teoría de bandas hiperbólicas mostrando diversas aplicaciones en la física teórica (como lo ilustran trabajos destacados, entre ellos el de Kienzle y Rayan (2022)), Espero lado espero que este estudio, al ser uno de los primeros en español, contribuya a motivar el estudio de esta clase de cristales.

## Bibliografía

- Axler, S. (1997). *Linear Algebra Done Right*. Undergraduate Texts in Mathematics. Springer New York. ISBN 9780387982595.
- Boettcher, I., Gorshkov, A. V., Kollár, A. J., Maciejko, J., Rayan, S., y Thomale, R. (2022). Crystallography of hyperbolic lattices. *Phys. Rev. B*, **105**: 125118.
- Carroll, S., Carroll, S., y Addison-Wesley (2004). *Spacetime and Geometry: An Introduction to General Relativity*. Addison Wesley. ISBN 9780805387322.
- Herstein, I. (1974). *Algebra moderna: grupos, anillos, campos, teoría de Galois*. Biblioteca de matemática superior. Trillas.
- Huang, L., He, L., Zhang, W., Zhang, H., Liu, D., Feng, X., Liu, F., Cui, K., Huang, Y., Zhang, W., y Zhang, X. (2024). Hyperbolic photonic topological insulators.
- Kienzle, E. y Rayan, S. (2022). Hyperbolic band theory through higgs bundles. *Advances in Mathematics*, **409**: 108664.
- Kollár, A. J., Fitzpatrick, M., y Houck, A. A. (2019). Hyperbolic lattices in circuit quantum electrodynamics. *Nature*, **571**(7763): 45,50.
- Landau, L. (2013). *The Classical Theory of Fields*. COURSE OF THEORETICAL PHYSICS. Elsevier Science. ISBN 9781483293288.
- Landau, L., Lifshitiĭ, E., Kosevich, A., Lifshitz, E., y Pitaevskii, L. (1986). *Theory of Elasticity: Volume 7*. Course of theoretical physics. Elsevier Science. ISBN 9780750626330.
- Lascrain Orive, A. (2005). *Una Introduccion a la Geometria Hiperbolica Bidimensional*. Prensas de ciencias. UNAM, Facultad de Ciencias. ISBN 9789703226498.
- Lenggenhager, P. M., Stegmaier, A., Upreti, L. K., Hofmann, T., Helbig, T., Vollhardt, A., Greiter, M., Lee, C. H., Imhof, S., Brand, H., KieĀyling, T., Boettcher, I., Neupert, T., Thomale, R., y BzduĀjek, T. (2022). Simulating hyperbolic space on a circuit board. *Nature Communications*, **13**(1).
- Liu, Z.-R., Hua, C.-B., Peng, T., y Zhou, B. (2022). Chern insulator in a hyperbolic lattice. *Phys. Rev. B*, **105**: 245301.
- Maciejko, J. y Rayan, S. (2022). Automorphic bloch theorems for hyperbolic lattices. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **119**(9): e2116869119.
- Oliva-Leyva, M. y Wang, C. (2017). Low-energy theory for strained graphene: an approach up to second-order in the strain tensor. *Journal of Physics: Condensed Matter*, **29**(16): 165301.

- Ramos-Sánchez, S. y Vidal, O. (2018). *Relatividad para futuros físicos*. Textos contemporáneos. Copit-Arxives. ISBN 9781938128189.
- Sadd, M. (2010). *Elasticity: Theory, Applications, and Numerics*. Elsevier Science. ISBN 9780080477473.
- Simon, S. (2013). *The Oxford Solid State Basics*. OUP Oxford. ISBN 9780199680764.
- Tinkham, M. (2012). *Group Theory and Quantum Mechanics*. Dover Books on Chemistry. Dover Publications. ISBN 9780486131665.
- Zhang, W., Yuan, H., Sun, N., Sun, H., y Zhang, X. (2022). Observation of novel topological states in hyperbolic lattices. *Nature Communications*, **13**(1).

# Apéndice A

## Cálculo computacional

### A.1. Generación del cristal

En esta sección se proporciona la implementación en el lenguaje de programación Fortran 90 de la metodología desarrollada en la sección sección III.1 para el conteo de sitios. En la función llamada shellsites (sitios por capa) se utiliza un ciclo anidado por medio de la sentencia if y por el bucle do para calcular la cantidad de sitios por capa partiendo de un parámetro llamado como número de capa (denotado como  $s$ ).

```

FUNCTION shellsites (m)
USE constantes , Only:p,q,s
implicit none
! in variables
integer          :: m ! numero de capa
! out variables
integer          :: sitios de capa (shell sites)
! work variables
integer          :: j , k , MO , suma , Enes ( s )
      integer          :: a ( s )
Enes(1)=p
MO=-1
      a(1)=-8
if ( s .gt. 1 ) then

```

```

do k=1,s-1
    suma=0
do j=1,k
if (j.gt.2) then
    a(j-1)=a(j-2)+(MO**(j-1))*Enes(j-1)
endif
suma=(p-q)*Enes(j)
    Enes(j+1)=suma
    if (j.gt.1) then
        Enes(j+1)=Enes(j)*(p-q)+a(j-1)*(p-2)*(MO**(j))
    endif
endif
enddo
enddo

endif

shellsites=Enes(m)
    !write(*,*) a
END FUNCTION shellsites

```

Para la obtener el hamiltoniano de sitio utilizando la función shellsities se implementa una nueva subrutina llamada TotalSites que calcula la cantidad total de sitios en el cristal hiperbólico sumando la cantidad de sitios por capa del cristal, como se presenta a continuación

```

FUNCTION TotalSites(k)
    implicit none
    ! in variables

```

```

integer          :: k ! numero de capa
! work variables
integer          :: j
Integer          :: ShellSites , TotalSites
complex*16      :: LambdaPlus , LambdaMinus , Enek

TotalSites=0
if (k.GE.1) then
    do j=1,k
        TotalSites=TotalSites+ShellSites(j)
    enddo
endif

END FUNCTION TotalSites

```

Para construir el Hamiltoniano de sitio para un cristal hiperbólico regular haciendo uso de la subrutina shellsites y la subrutina TotalSites se implementa la función MatrizIncidencia, que genera una matriz para describir las conexiones entre los sitios del cristal. Esta función crea una matriz cuadrada MI de dimensión  $N \times N$ , donde cada entrada  $MI(i, j)$  es 1 si existe una conexión entre los sitios  $i$  y  $j$ , y 0 en caso contrario.

Esta matriz es esencial para construir el hamiltoniano de sitio, ya que se considera que el parametro  $t$  sea igual a 1 y por lo tanto los elementos de la matriz son iguales a los elementos del hamiltoniano de sitio.

```

SUBROUTINE MatrizIncidencia(MI,N)
  USE Constantes , only: S,P,Q
  implicit none
  Integer      :: ShellSites , TotalSites
  integer      :: N,i,j,k
  integer      :: sk,st , siteI , siteJ
  integer      :: indiceExt , stExt , REGi,REGim
  integer      :: MI(N,N)
  integer      :: Registro(N)
  !making zero the matrix
  MI=MI*0
  do k=1,N
    Registro(k)=0
  end do

  ! Closed chain in a shell
  do k=1,S !run over shells
    sk=ShellSites(k)
    st=TotalSites(k-1)
    do siteI=1,sk
      do siteJ=1,sk

        i=siteI+st
        j=siteJ+st
        if ((siteI-siteJ).eq.1) then

```

```

        MI(i , j)=1
        MI(j , i)=1
        Registro (i)=Registro (i)+1
        Registro (j)=Registro (j)+1
    endif
enddo

enddo

MI(st+1, st+sk)=1
MI(st+sk , st+1)=1
!WRITE(*,*) 'conectado boundary ', st+1, 'con ', st+sk
Registro (st+1)=Registro (st+1)+1
Registro (st+sk)=Registro (st+sk)+1
enddo

!Connecting shells
do k=1,S-1 !run over shells
    sk=ShellSites(k) !numero de sitios en la capa a proyectar
    st=TotalSites(k-1) !numero total de sitios hasta
    la capa antes de la capa a proyectar
    indiceExt=1
    stExt=TotalSites(k)
    do siteI=1,sk
        i=siteI+st
        Registro(i), 'sitio proyectado ', indiceExt+stExt
        if (Registro(i).lt.Q) then

```

```

MI(i , indiceExt+stExt)=1
MI(indiceExt+stExt , i)=1
!WRITE(*,*) 'conectado layers ', i , ' con ', indiceExt+stExt
Registro(i)=Registro(i)+1
Registro(indiceExt+stExt)=Registro(indiceExt+stExt)+1
if (Registro(i+1).eq.Q) then
    indiceExt=indiceExt+(P-4)
else
    indiceExt=indiceExt+(P-3)
endif

```

## A.2. Aplicación de las deformaciones

En esta sección mostramos como se implementan las propuestas de deformación deducidas en la sección III.4, para ello se define la subrutina distorsión, en ella implementamos las deformaciones anteriormente mencionadas redefiniendo a cada posición inicial del cristal hiperbólico usando estas deformaciones.

```
SUBROUTINE Distorsion(XY,DXY,N)
```

```

    al= 0.5! constante para la parte torcional
    i=1
    j=2
    call Posiciones(N,XY)
    do i=1 , N
        !Codigo para expansion y contraccion

```

```

xi=XY(i,1)
yi=XY(i,2)
norm= sqrt(xi**2+yi**2)
DXY(i,1)= xi+ xi*((1-norm**2)**2) /2
DXY(i,2)= yi+ yi*((1-norm**2)**2) /2

!Codigo para aplicar la torcion
xi=XY(i,1)
yi=XY(i,2)
th= ATAN2(yi,xi)
norm= sqrt(xi**2+yi**2)
g= th+al*(1.d0-(norm)**2)**2
DXY(i,1)= norm*(COS(g))
DXY(i,2)= norm*(SIN(g))
DXY(i,1)= xi
DXY(i,2)= yi

enddo
END SUBROUTINE

```

Por otro lado, en la subrutina Deformed mostramos cómo se modifica el parámetro de tunelamiento, esto con base a la ecuación (69) y modificamos los elementos de matriz del hamiltoniano de sitio (o de la matriz de incidencia) para reflejar los efectos de la deformación directamente en el hamiltoniano. Con estas modificaciones se calculan los eigenvalores y los eigenvectores el hamiltoniano deformado.

```
SUBROUTINE Deformed(N)
```

```
  HMT="(F8.5,A3)"
```

```

OPEN(62,FILE='Deform.dat',STATUS='UNKNOWN')

call Hamiltonian(A,N)
call Posiciones(N,XY)

!distancia de equilibrio
i=1
j=2
xi=XY(i,1)
yi=XY(i,2)
xj=XY(j,1)
yj=XY(j,2)
d0=Dhyp(xi,yi,xj,yj)

!Aplicamos la deformacion
call Distorsion(XY,DXY,N)

do i=1, N
  xi=DXY(i,1)
  yi=DXY(i,2)
  do j=1, i
    xj=DXY(j,1)
    yj=DXY(j,2)
    d=Dhyp(xi,yi,xj,yj)-d0
    tij=dexp(-Beta*(d/d0)) !Cambio del parametro de tuneleo
  enddo
enddo

```

```

        A(i , j)=t ij *A(i , j)
        if (j .ne. i) A(j , i)=t ij *A(j , i)
    enddo
enddo

!CLOSE(62 , STATUS='KEEP')

call EIGENVALORES(A,N,Energias , Eigenvec)
do i=1,N
    write (62 ,*) i ,Energias(i)
end do
CLOSE(62 , STATUS='KEEP')

call Hamiltonian(A,N)
OPEN(59 , FILE='New_Ei.dat ' , STATUS='UNKNOWN')
do i=1,N
    write(59 ,*) i , (Eigenvec(j , i) , j=1,N)
end do
CLOSE(59)
END SUBROUTINE

```

### A.3. Densidad de probabilidad

En esta sección se presenta cómo se generaron los gráficos de densidad de probabilidad utilizando los datos obtenidos en los dos secciones anteriores. Primeramente definimos un mapa polar por medio de las siguientes funciones.

```
[language=Python]
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import matplotlib.cm as cm

a = np.linspace(0,2*np.pi,50) #este da los angulos
b = np.linspace(0,1,50) #este da los radios
A,B = np.meshgrid(a, b)
c = np.random.random(A.shape)
```

Después de ello utilizamos la ecuación (47), donde se considera la aportación de cada sitio del cristal sobre el mapa polar y por ultimo se grafica el mapa de densidad de probabilidad.

```
def ex(xi ,yi ,xo ,yo):
    sig=0.03
    exp=np.exp(-(xi-xo)**2 /sig**2)*np.exp(-(yi-yo)**2 /sig**2)
    return exp

xs=[]
ys=[]
q= np.zeros((len(a), len(a)))
for i in range (len(a)):
    for j in range(len(a)):
        bi=b[j]
        ai=a[i]
        x=bi*np.cos(ai)
        y=bi*np.sin(ai)
        xs.append(x)
```

```
ys.append(y)

pi=0

for p in range (len(eigen)):

    xj = posis [p][0]
    yj = posis [p][1]
    e2= eigen [24][p]
    e= ex(x, y, xj, yj)
    pi= pi+(np.dot(e2, e2))*e
    q[j, i]=pi

# Crear una figura polar
ax = plt.subplot(111, polar=True)
ax.grid(False)
ax.set_xticklabels ([])
ax.set_yticklabels ([])
ctf = ax.contourf(a, b, q, cmap='jet')
plt.colorbar(ctf)
plt.show()
```