



UNIVERSIDAD MICHOACANA DE SAN NICOLÁS DE HIDALGO  
INSTITUTO DE FÍSICA Y MATEMÁTICAS

**LOCALIZACIÓN Y PROPAGACIÓN DE ONDAS EN  
MODELOS ALEATORIOS NO-HERMÍTICOS**

TESIS

para obtener el título de:

**Maestro en ciencias en el área de física**

Presenta:

**LIC. JUAN CARLOS PROA PRADO**

Asesor:

**DR. LUCA TESSIERI**

Morelia, Mich., agosto del 2016



# Índice general

<b>INTRODUCCIÓN</b>	<b>2</b>
<b>1. SISTEMAS ORDENADOS</b>	<b>4</b>
1.1. Introducción . . . . .	4
1.2. Estructura cristalina . . . . .	4
1.3. Red recíproca . . . . .	9
1.4. El teorema de Bloch . . . . .	11
1.5. Estructura de bandas . . . . .	14
1.5.1. Modelo de Kronig-Penney . . . . .	15
<b>2. SISTEMAS DESORDENADOS</b>	<b>20</b>
2.1. Modelos de sistemas desordenados . . . . .	20
2.1.1. Modelo de Anderson 1D . . . . .	22
2.2. Localización . . . . .	23
2.2.1. Criterios de localización . . . . .	23
2.2.2. Dependencia de la localización de las dimensiones de los modelos desordenados . . . . .	24
2.3. Localización en modelos 1D . . . . .	25
2.3.1. Matrices de transferencia . . . . .	25
2.3.2. Teorema de Furstenberg . . . . .	26
2.3.3. Conjetura de Borland . . . . .	27
2.4. El método de Thouless para el cálculo de la longitud de localización en el modelo de Anderson 1D . . . . .	28
2.4.1. Relación de Herbert-Jones-Thouless . . . . .	29
2.4.2. Funciones de Green y longitud de localización . . . . .	30
2.4.3. Longitud de localización para desorden débil . . . . .	32
2.4.4. Longitud de localización en el caso de desorden fuerte . . . . .	35
2.5. El método del mapa hamiltoniano . . . . .	35

2.5.1.	Correspondencia entre el modelo de Anderson y el “oscilador pateado” . . . . .	37
2.5.2.	La fórmula de Izrailev-Krokhin . . . . .	39
2.6.	Transiciones de localización-deslocalización en modelos 1D con desorden correlacionado . . . . .	43
2.6.1.	El problema inverso . . . . .	44
<b>3.</b>	<b>TRANSPORTE EN BARRERAS ALEATORIAS ACTIVAS</b>	<b>46</b>
3.1.	Definición del modelo . . . . .	47
3.2.	Coefficientes de transmisión y reflexión . . . . .	48
3.3.	Estudio numérico de la transmisión . . . . .	51
3.3.1.	Barrera activa determinista . . . . .	51
3.3.2.	Barrera activa con energías de sitio aleatorias . . . . .	52
3.3.3.	Barrera con coeficiente de amplificación/absorción aleatorio . . . . .	55
3.4.	Cálculo analítico de la matriz de transferencia . . . . .	56
	<b>CONCLUSIONES</b>	<b>64</b>

## Resumen

En el presente trabajo se estudiará la transmisión de ondas en medios activos aleatorios, es decir, en aquellos que presentan hamiltonianos con variable aleatorias  $\{\epsilon_n\}$  y además la ecuación de Schrödinger asociada contiene elementos de amplificación denotados como  $\{\gamma_n\}$ ,  $\gamma$ .

La tesis se divide en tres capítulos. En el primero se estudia los sistemas ordenados, particularmente se introducen los conceptos de estructura cristalina y de red recíproca. Posteriormente se estudia el teorema de Bloch y sus dos consecuencias.

En el segundo capítulo se aborda el estudio de sistemas desordenados con hamiltonianos hermíticos haciendo particular énfasis en sistemas unidimensionales. Finalmente en el tercer capítulo se analiza la transmisión de ondas en medios activos aleatorios de manera numérica, así mismo, se inicia la deducción analítica de una expresión para el coeficiente de transmisión considerando caso límite de desorden débil.

Palabras clave:

transmisión.

activos.

aleatorios.

numérica.

desorden.

## Abstract.

In this paper wave transmission will be studied in active random media, that is to say, in those with Hamiltonian with random variables  $\{\epsilon_n\}$  and also the equation Schrödinger contains elements associated amplification  $\{\gamma_n\}$  and  $\gamma$ .

The work is divided into three chapters. In the first study ordered systems, particularly the concepts of crystal structure and reciprocal lattice are introduced, subsequently Bloch's theorem and its two sequels studied.

In the second chapter the study of disordered systems is dealt with Hermitian hamiltianos with particular emphasis on one-dimensional systems.

Finally in the third chapter the transmission of waves in random media assets is analyzed numerically, likewise, analytical deduction begins an expression for the transmission coefficient considering the case of weak disorder.

# INTRODUCCIÓN

El tema central del presente trabajo es el estudio de la propagación de ondas en medios aleatorios activos, es decir, en medios aleatorios capaces de amplificar y/o absorber las ondas que se desplazan a través de ellos. Se ha estudiado un sistema unidimensional (1D) formado por una barrera activa aleatoria de  $N$  sitios, unida en sus extremos con dos conductores perfectos semi-infinitos. A cada uno de los sitios de la barrera activa aleatoria se asocia una energía de sitio  $\epsilon_n$  y un coeficiente local de amplificación o de absorción  $\gamma + \gamma_n$ . Se introduce desorden en el modelo a través de las energías de sitio  $\{\epsilon_n\}$ , mismas que tienen promedio nulo, y también a partir de las fluctuaciones  $\{\gamma_n\}$  del coeficiente de absorción alrededor de su valor medio  $\gamma$ . Tanto las  $\{\epsilon_n\}$  como las  $\{\gamma_n\}$  son variables aleatorias; el objetivo de esta tesis consiste en analizar cómo varía la propagación de ondas en el modelo en función de las propiedades estadísticas del desorden.

En la tesis se han obtenido algunos resultados numéricos para los propiedades de transmisión en una barrera aleatoria activa; en particular, los datos muestran que es posible servirse de las correlaciones del desorden para fortalecer la transmisión de ondas en algunas ventanas de energías y reducirlas en las regiones complementares del espectro energético. En el trabajo de tesis se ha empezado también un estudio analítico para el caso de una barrera delgada con desorden débil, obteniendo algunas expresiones preliminares para el coeficiente de transmisión.

El presente trabajo se divide en tres capítulos: en los primeros dos se resumen los resultados esenciales relativos a los estados electrónicos en sistemas cristalinos y en sistemas desordenados. El tercer y último capítulo representa la parte de investigación original de esta tesis y se enfoca en el estudio de la transmisión de ondas a través de una barrera activa aleatoria.

En el primer capítulo se introduce el concepto de estructura cristalina así como sus dos componentes: la red y la base; también se presenta el concepto

de red recíproca. Posteriormente se trata el tema central del capítulo, esto es, el teorema de Bloch y sus implicaciones. La primera de ellas consiste en que las funciones de onda en un sólido cristalino son ondas planas moduladas con el período de la red, lo que conlleva que los estados se extienden por todo el espacio. La segunda consecuencia que deriva del teorema de Bloch es que las energías permitidas se agrupan en bandas, separadas por regiones de energías prohibidas, como se muestra analizando el modelo de Kronig-Penney.

El segundo capítulo se enfoca en los modelos desordenados hermiticos 1D, con atención particular para el modelo de Anderson. En este capítulo se introduce la localización de Anderson y se presentan algunos de los resultados fundamentales sobre localización en modelos 1D. Se discuten también algunas de las técnicas que permiten calcular la longitud de localización en esta clase de modelos; más específicamente, se presentan la técnica de Thouless para el cálculo de la longitud de localización, basada en el uso de las funciones de Green, y el método del mapa hamiltoniano.

En el tercer capítulo se estudia la transmisión a través de barreras activas aleatorias. En la primera parte del capítulo se discuten algunos resultados numéricos, que muestran cómo las correlaciones del desorden tienen un efecto relevante sobre las propiedades de transmisión; en efecto, hemos observado que las correlaciones del desorden producen una disminución del coeficiente de transmisión en las ventanas de localización y un aumento fuera de ellas con respecto al caso de desorden sin correlación. En la segunda parte del capítulo se muestran algunas expresiones analíticas preliminares obtenidas para el coeficiente de transmisión en el caso de desorden débil y barrera delgada.



# Capítulo 1

## SISTEMAS ORDENADOS

### 1.1. Introducción

Los sólidos cristalinos son sistemas formados por la repetición ordenada sobre todo el espacio de una estructura base formada por uno o más átomos. En cambio los sólidos desordenados carecen de una estructura ordenada subyacente. Para entender mejor el concepto de desorden, es necesario analizar previamente algunas de las propiedades que caracterizan a los sólidos ordenados. Con este fin, en el presente capítulo se define el concepto de estructura cristalina y se discuten algunas de las características de los estados electrónicos en sólidos cristalinos.

### 1.2. Estructura cristalina

Intuitivamente un cristal es una colección de átomos dispuestos con regularidad en el espacio, como se muestra en la figura 1.1. Para definir formalmente un cristal es necesario introducir los conceptos de *red de Bravais* y de *base*. Una red de Bravais es el conjunto de puntos en el espacio definidos por medio de la ecuación vectorial:

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3 \quad (1.1)$$

donde  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  son tres vectores, no todos colineales, orientados de forma que el sistema de coordenadas formado por ellos es derecho. A los vectores  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$  y  $\mathbf{a}_3$  se les denomina como vectores primitivos o vectores de traslación y  $n_1, n_2, n_3$  son números enteros. Es importante subrayar que la elección de

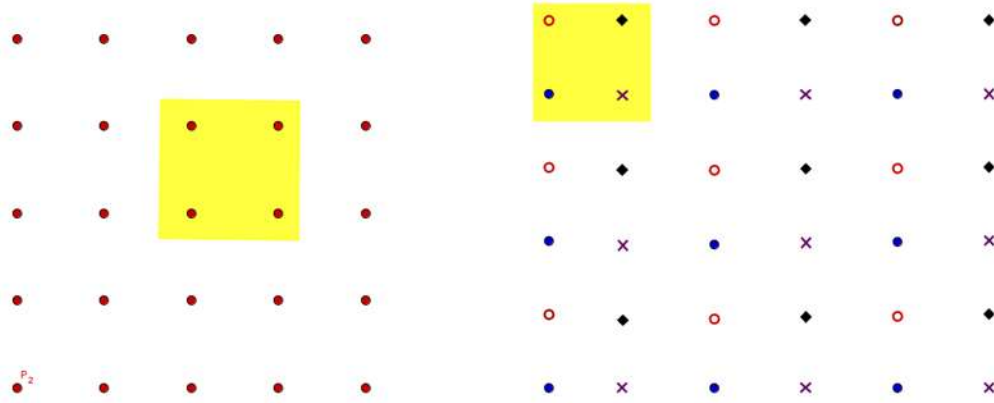


Figura 1.1: Imagen ilustrativa de la idea intuitiva de un cristal. Rodeada de un rectángulo se encuentra la estructura base.

los vectores primitivos no es única: en efecto, dada una terna de vectores primitivos, es posible construir ternas distintas pero equivalentes siguiendo el método enunciado en la siguiente proposición.

**Proposición 1.2.1** Sean  $\mathcal{R}$  la red generada por una terna de vectores primitivos  $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$  y  $\mathcal{R}'$  la red generada por otra terna de vectores  $(\mathbf{a}'_1, \mathbf{a}'_2, \mathbf{a}'_3)$ . Supongamos que valga la identidad

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{a}_3 \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} \mathbf{a}'_1 \\ \mathbf{a}'_2 \\ \mathbf{a}'_3 \end{pmatrix}, \quad (1.2)$$

donde  $\mathbf{M}$  es una matriz con elementos enteros y determinante unitario. Entonces las dos redes coinciden, esto es,  $\mathcal{R} = \mathcal{R}'$ .

**Demostración 1.2.1** Sea  $\mathbf{r} \in \mathcal{R}$

La demostración se basa en el hecho de que los elementos de la matriz  $\mathbf{M}^{-1}$  son enteros; esto es una consecuencia de la hipótesis de que los elementos de matriz de  $\mathbf{M}$  son enteros y también del hecho de que  $\mathbf{M}$  tiene determinante unitario. Ejemplos de vectores primitivos para la red cuadrada simple se muestran en la figura 1.2.

Un concepto fundamental para el análisis de las redes es el de celda primitiva. La celda primitiva asociada a una terna de vectores  $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$  es

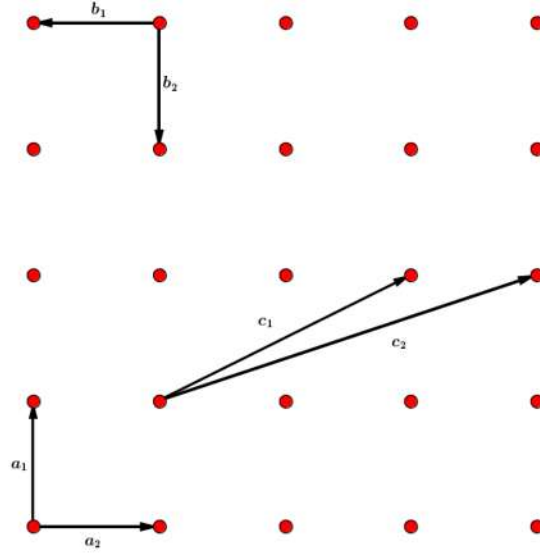


Figura 1.2: Figura correspondiente a tres parejas de vectores primitivos matemáticamente equivalentes para la red cuadrada simple

constituida por el paralelepípedo generado por estos vectores, cuyo volumen es igual a  $\Omega = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$ . La forma de la celda primitiva depende de la elección de los vectores primitivos, mientras que su volumen es independiente de tal elección. Para demostrar esta última afirmación consideremos dos ternas equivalentes de vectores primitivos  $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$  y  $(\mathbf{a}'_1, \mathbf{a}'_2, \mathbf{a}'_3)$  relacionadas mediante la ecuación (1.2). Resulta

$$\begin{aligned}
 \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) &= \mathbf{a}_1 \cdot [(m_{21}\mathbf{a}'_1 + m_{22}\mathbf{a}'_2 + m_{23}\mathbf{a}'_3) \times (m_{31}\mathbf{a}'_1 + m_{32}\mathbf{a}'_2 + m_{33}\mathbf{a}'_3)] \\
 &= \mathbf{a}_1 \cdot [(m_{21}m_{31} - m_{22}m_{31})(\mathbf{a}'_1 \times \mathbf{a}'_2) \\
 &\quad + (m_{21}m_{33} - m_{23}m_{31})(\mathbf{a}'_1 \times \mathbf{a}'_3) \\
 &\quad + (m_{22}m_{33} - m_{23}m_{32})(\mathbf{a}'_2 \times \mathbf{a}'_3)] \\
 &= m_{11}(m_{22}m_{33} - m_{23}m_{32})\mathbf{a}'_1 \cdot (\mathbf{a}'_2 \times \mathbf{a}'_3) \\
 &\quad + m_{12}(m_{21}m_{33} - m_{23}m_{31})\mathbf{a}'_2 \cdot (\mathbf{a}'_1 \times \mathbf{a}'_3) \\
 &\quad + m_{13}(m_{21}m_{32} - m_{22}m_{31})\mathbf{a}'_3 \cdot (\mathbf{a}'_1 \times \mathbf{a}'_2) \\
 &= \det \mathbf{M} [\mathbf{a}'_1 \cdot (\mathbf{a}'_2 \times \mathbf{a}'_3)] = \mathbf{a}'_1 \cdot (\mathbf{a}'_2 \times \mathbf{a}'_3).
 \end{aligned}$$

Dado un punto  $\mathbf{R}$  de la red, una celda de Wigner-Seitz se define como la región que encierra todos los puntos del espacio que son más cercanos a  $\mathbf{R}$  que a cualquier otro punto de la red. La construcción geométrica se

realiza uniendo con líneas rectas el punto individuado por el vector  $\mathbf{R}$  con sus vecinos cercanos. Sucesivamente, en el punto medio de cada una de estas rectas se trazan planos normales a las rectas mismas. La región más pequeña que queda limitada por estos planos constituye una celda de Wigner-Seitz. Un ejemplo gráfico se presenta en la figura 1.3.

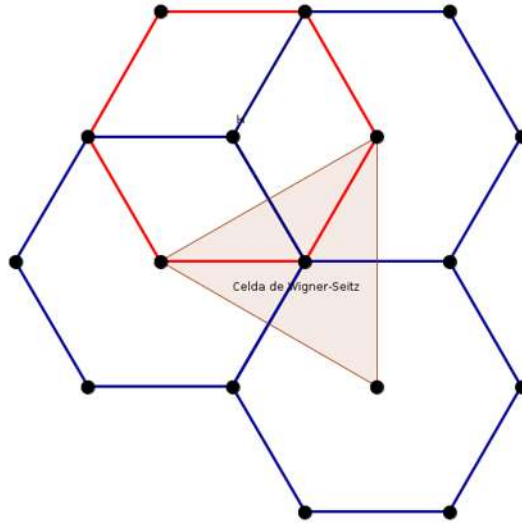


Figura 1.3: Celda de Wigner-Seitz para una red hexagonal.

A lado de la estructura de red, el segundo ingrediente fundamental para la definición de un cristal es el concepto de base. Una base se define como el conjunto de  $\nu$  átomos o iones que se encuentran dentro de una celda primitiva. Las posiciones de estos átomos dentro de la celda se identifican por medio de  $\nu$  vectores  $(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \dots, \mathbf{b}_\nu)$ . Ejemplos de bases se presentan en las figuras 1.4 y 1.5. Una estructura cristalina está formada por los tres vectores primitivos que definen a la red más los  $\nu$  vectores de la base. Cuando la base tiene únicamente un elemento decimos que se trata de un cristal simple. Cuando la base está formada de dos o más elementos, entonces decimos que el cristal es compuesto. En un cristal compuesto, las posiciones de los átomos del cristal

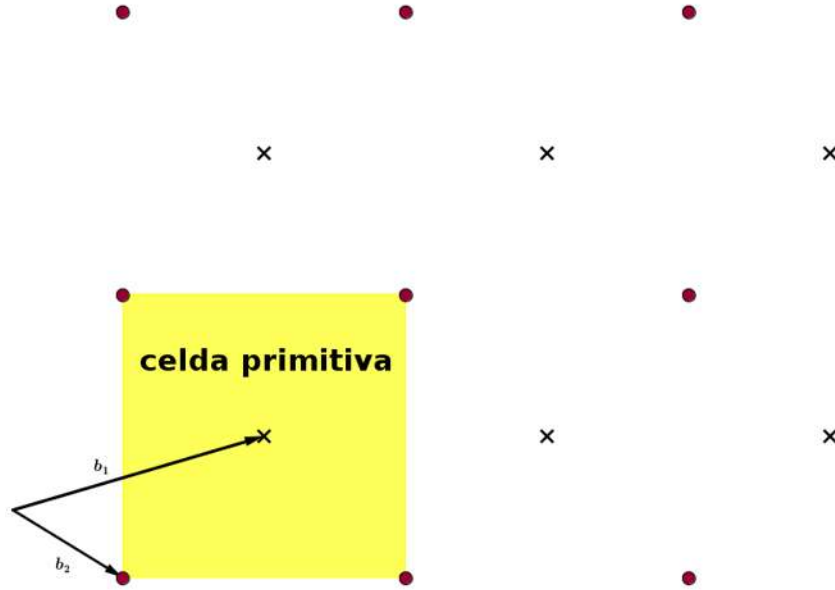


Figura 1.4: Una posible base para un sólido cristalino bidimensional formado por dos redes cuadradas que se interpenetran.

se identifican por medio de los vectores

$$\begin{aligned}
 \mathbf{R}_n^{(1)} &= \mathbf{b}_1 + n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 \\
 \mathbf{R}_n^{(2)} &= \mathbf{b}_2 + n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 \\
 &\vdots \\
 \mathbf{R}_n^{(\nu)} &= \mathbf{b}_\nu + n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3
 \end{aligned}$$

Las redes se clasifican por medio de la teoría de grupos sobre la base de sus propiedades de simetría. Existen cinco tipos de redes en dos dimensiones (oblicua, cuadrada, hexagonal, rectangular simple, rectangular centrada) y 14 en tres dimensiones [1, 2]. Las redes en dos dimensiones se presentan en la figura 1.6. Debido a que el tema central de la presente tesis son los sistemas desordenados no demostraremos las proposiciones anteriores.

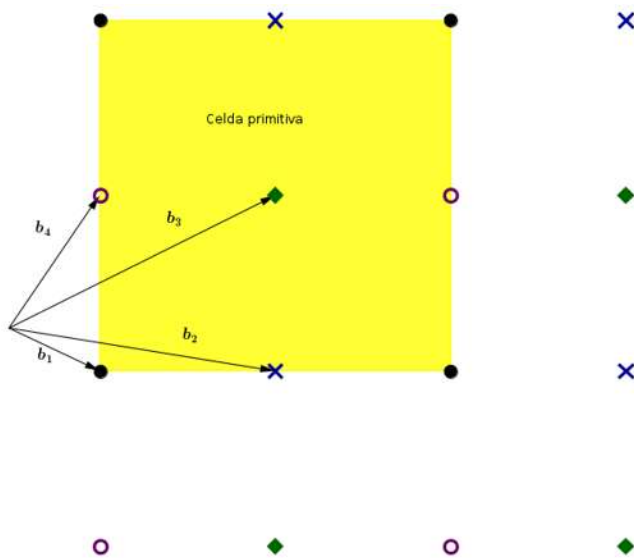


Figura 1.5: Vectores de base para la estructura formada por cuatro redes cuadradas superpuestas.

### 1.3. Red recíproca

Dada una terna de vectores primitivos  $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$ , es posible definir una terna de vectores  $(\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \mathbf{t}_3)$ , denominados *recíprocos*, por medio de las identidades

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{t}_j = 2\pi\delta_{ij}, \quad (1.3)$$

donde  $i, j \in \{1, 2, 3\}$ .

Examinando la ecuación (1.3) se determina que los vectores  $\mathbf{a}_2$  y  $\mathbf{a}_3$  son ortogonales al vector  $\mathbf{t}_1$ , que resulta por lo tanto paralelo a  $\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3$ . Como  $\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{t}_1 = 2\pi$ , entonces  $\mathbf{a}_1 \cdot (A\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) = 2\pi$ , donde  $A$  es un factor de proporcionalidad. Despejando  $A$  y sustituyendo  $\Omega = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$ , se desprende el valor para la constante  $A = \frac{2\pi}{\Omega}$ . Procediendo de manera semejante para los vectores  $\mathbf{b}_2$  y  $\mathbf{b}_3$  se muestra que los vectores primitivos se pueden escribir en

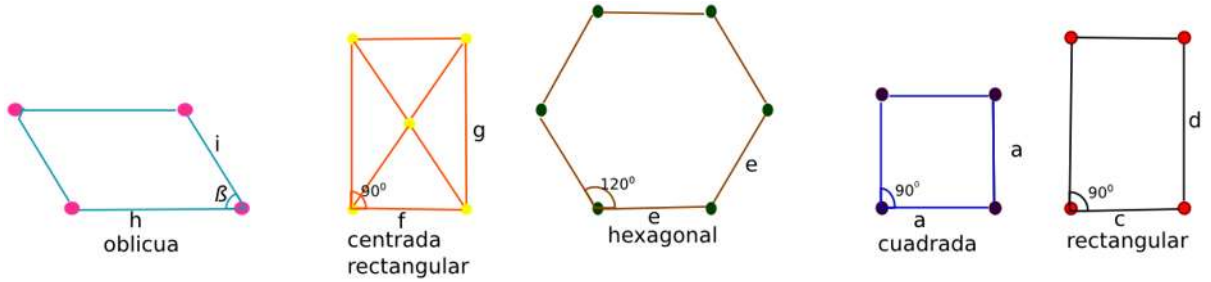


Figura 1.6: Los distintos tipos de redes en dos dimensiones

la siguiente forma

$$\mathbf{t}_1 = \frac{2\pi}{\Omega} \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3, \quad (1.4)$$

$$\mathbf{t}_2 = \frac{2\pi}{\Omega} \mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1, \quad (1.5)$$

$$\mathbf{t}_3 = \frac{2\pi}{\Omega} \mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2. \quad (1.6)$$

El conjunto de vectores dados por las combinaciones lineales:

$$\mathbf{t} = m_1 \mathbf{t}_1 + m_2 \mathbf{t}_2 + m_3 \mathbf{t}_3 \quad (1.7)$$

con  $m_1$ ,  $m_2$  y  $m_3$  enteros, recibe el nombre de red recíproca. La red recíproca es una red de Bravais. Por otra parte, la celda de Wigner-Seitz para la red recíproca recibe el nombre de primera zona de Brillouin.

Sea  $\mathbf{t}$  un vector de la red recíproca, efectuamos el producto punto de  $\mathbf{t}$  con un vector primitivo de la red directa (para fijar las ideas escogemos  $\mathbf{a}_1$ , en el entendido de que para cualquiera de los otros dos vectores el razonamiento es análogo). Utilizando la ecuación (1.3) se deduce que  $\mathbf{t} \cdot \mathbf{a}_1 = 2\pi m_1$  donde  $m_1$  es un entero. El producto punto de  $\mathbf{t}$  con cualquier vector de la forma  $l_1 \mathbf{a}_1$  es  $\mathbf{t} \cdot (l_1 \mathbf{a}_1) = 2\pi l_1 m_1$  donde  $l_1$  es un número entero. Generalizando para los vectores primitivos de la red directa  $\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ , tenemos la ecuación de un plano  $\mathbf{t} \cdot \mathbf{R}_i = 2\pi l$  donde  $i \in \{1, 2, 3\}$  y  $l$  es un número entero, por lo tanto los vectores de la red directa se ordenan en planos paralelos, perpendiculares a  $\mathbf{t}$ .

Hemos visto que resulta

$$\mathbf{t} \cdot \mathbf{a}_i = 2\pi m_i$$

para cualquier vector  $\mathbf{t}$  de la red recíproca. El recíproco también es verdadero, es decir, dado un vector  $\mathbf{q}$  tal que

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_i = 2\pi m_i \quad (1.8)$$

para los tres vectores primitivos, entonces  $\mathbf{q}$  pertenece a la red recíproca. Para demostrar lo anterior se escribe a  $\mathbf{q}$  como combinación lineal de los vectores  $\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \mathbf{t}_3$  por lo tanto  $\mathbf{q} = c_1 \mathbf{b}_1 + c_2 \mathbf{b}_2 + c_3 \mathbf{b}_3$  donde  $c_1, c_2$  y  $c_3$  son números reales. Posteriormente se realiza el producto punto de  $\mathbf{q}$  con  $\mathbf{a}_i$  y sustituimos en la ecuación (1.8). Se obtiene así que  $c_i 2\pi = 2\pi m_i$ , por lo que resulta  $c_i = m_i$ , condición suficiente para afirmar que  $\mathbf{q}$  es un vector de la red recíproca.

La importancia del resultado anterior se plasma en el siguiente teorema, que se demuestra de manera casi inmediata.

**Teorema 1.3.1** *Una onda plana  $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$  tiene la periodicidad de la red si y solamente si el vector de onda  $\mathbf{k}$  pertenece a la red recíproca.*

*Demostración.*

Supongamos que la onda plana tiene la periodicidad de la red, entonces  $\exp(i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{a}_i)) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$  lo que implica que  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i = 2\pi$  por lo que  $\mathbf{k}$  es un vector de la red recíproca. Invertiendo los argumentos anteriores se demuestra la otra implicación.

De la teoría de las series de Fourier y del teorema 1.3.1, se concluye que cualquier función periódica en el espacio directo puede ser desarrollada como una superposición de ondas planas en el espacio recíproco. Matemáticamente esto se expresa por medio de la ecuación

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{t}} f_{\mathbf{t}} e^{i\mathbf{t} \cdot \mathbf{r}} \quad (1.9)$$

donde los  $f_{\mathbf{t}}$  son coeficientes del desarrollo y la suma se realiza sobre todos los elementos de la red recíproca.

## 1.4. El teorema de Bloch

Uno de los principales teoremas para el estudio de los sólidos cristalinos es el teorema de Bloch del cual se desprenden dos consecuencias importantes:



1. las funciones de onda correspondientes al sólido cristalino son ondas planas moduladas con la periodicidad de la red;
2. Los niveles de energía permitidos se agrupan en bandas, separadas por intervalos de energías prohibidas.

Estos resultados se ilustran de manera separada en esta sección y en la siguiente.

Para introducir el teorema de Bloch, consideraremos el sistema físico formado por un electrón que se desplaza a través de una estructura cristalina; la ecuación de Schrödinger correspondiente es

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (1.10)$$

donde  $m$  es la masa del electrón y  $V(r)$  es un potencial que describe la interacción del electrón con los iones de la red y con los demás electrones. El sistema anterior representa una simplificación, en la que se considera un único electrón que se desplaza por una estructura cristalina. En esta aproximación se toma en cuenta la interacción electrón-electrón por medio de un potencial eficaz  $V(\mathbf{r})$  que representa tanto el efecto de la red iónica cuanto el de los demás electrones.

En el estudio de la ecuación (1.10) se eligen generalmente condiciones de fronteras periódicas (condiciones de Born-von Karman). Se considera que la separación entre átomos en las direcciones  $x$ ,  $y$  y  $z$  son respectivamente  $L_x$ ,  $L_y$  y  $L_z$ . Así las condiciones de frontera son

$$\begin{aligned} \psi(x + N_1L_x, y, z) &= \psi(x, y, z) \\ \psi(x, y + N_2L_y, z) &= \psi(x, y, z) \\ \psi(x, y, z + N_3L_z) &= \psi(x, y, z) \end{aligned}$$

donde  $N_1$ ,  $N_2$  y  $N_3$  son los números de átomos en las direcciones respectivas  $x$ ,  $y$  y  $z$ .

Cómo  $V(\mathbf{r})$  es una función periódica en la red directa, entonces la ecuación (1.9) implica que el potencial admite una representación en forma de serie de Fourier con vectores de onda de la red recíproca:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{t}} V_{\mathbf{t}} e^{i\mathbf{t}\cdot\mathbf{r}}. \quad (1.11)$$

Si  $V(\mathbf{r}) = 0$ , la ecuación de Schrödinger (1.10) toma la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (1.12)$$

Las soluciones a la ecuación (1.12) son ondas planas  $\psi(\mathbf{r}) = Ae^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + Be^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ . Las condiciones de frontera de Born-von Karman determinan los valores de los vectores de onda  $k$ , que resultan igual a

$$\mathbf{k} = \left( \frac{2\pi}{L_x}n_x, \frac{2\pi}{L_y}n_y, \frac{2\pi}{L_z}n_z \right),$$

con  $n_x, n_y$  y  $n_z$  enteros. Denotaremos por  $w_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  a la onda plana progresiva

$$w_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = Ae^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}},$$

que es solución de la ecuación de Schrödinger (1.12) con potencial nulo. Al aplicar el operador de Schrödinger  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})$  a  $w_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  se obtiene, después de sustituir  $V(\mathbf{r})$  por su respectiva serie de Fourier,

$$\hat{H}w_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m}Ae^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \sum_{\mathbf{t}_n} V_n Ae^{i(\mathbf{t}_n+\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}}.$$

El termino derecho de la ecuación anterior es una combinación lineal de las ondas planas  $(\dots e^{i(\mathbf{t}_{-1}+\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}}, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{t}_1)\cdot\mathbf{r}} \dots)$ , por lo que pertenece al espacio  $S_{\mathbf{k}}$  generado por las mismas. Al aplicar  $\hat{H}$  a  $s(\mathbf{r}) \in S_{\mathbf{k}}$  se deduce que  $\hat{H}s(\mathbf{r}) \in S_{\mathbf{k}}$ , por lo que  $S_{\mathbf{k}}$  es cerrado respecto a la aplicación de  $\hat{H}$ . Dado  $\mathbf{k}$  entonces cualquier  $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{t}$  genera a  $S_{\mathbf{k}}$ , por lo que realmente los únicos valores de  $\mathbf{k}$  que generan espacios  $S_{\mathbf{k}}$  sin elementos en común son los correspondientes a la primera zona de Brillouin.

En  $S_{\mathbf{k}}$  se encuentran particularmente las funciones propias de  $\hat{H}$ ; por lo que éstos (que se denotarán como  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ ) se pueden escribir por medio de la combinación lineal

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{t}} A_{\mathbf{t}}(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{t})\cdot\mathbf{r}}$$

Al reescribir la ecuación anterior en la forma:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{t}} A_{\mathbf{t}}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{t}\cdot\mathbf{r}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.13)$$

donde  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  es una función periódica, se obtiene el teorema de Bloch.

**Teorema 1.4.1 (Teorema de Bloch)** *Las soluciones de la ecuación de Schrödinger con un potencial periódico son ondas planas moduladas por una función que tiene la misma periodicidad del potencial.*

Como consecuencia de la ecuación (1.13) se deduce la igualdad  $\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r})$ , donde  $\mathbf{R}$  es un vector de la red directa. Resulta, en efecto,

$$\psi(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R})}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}).$$

## 1.5. Estructura de bandas

La segunda consecuencia del teorema de Bloch establece que los niveles de energía permitidos se agrupan en bandas, separadas por regiones de energías prohibidas. Una banda de energía prohibida corresponde a un intervalo de energías en el que no hay soluciones de la ecuación de Schrödinger (1.10). Una representación gráfica se encuentra en la figura 1.7.



Figura 1.7: Figura que representa las regiones de energía permitidas y los correspondientes intervalos de energía prohibidos

Una discusión general de los métodos de cálculo de los niveles energéticos en sistemas cristalinos rebasa los límites de esta tesis, que no se enfoca en

modelos cristalinos sino desordenados. Nos limitaremos a mostrar como el teorema de Bloch genera una estructura de bandas de energía en el caso, particularmente sencillo, del modelo unidimensional propuesto originalmente por Kronig y Penney en [3].

### 1.5.1. Modelo de Kronig-Penney

El modelo de Kronig-Penney describe el movimiento en una dimensión de un electrón que se desplaza a través de una serie infinita de barreras de potencial rectangulares de altura  $V_0$  y anchura  $b$ . Las barreras están separadas por regiones de potencial nulo de longitud  $w$ , por lo que el período del sistema es  $a = b + w$ . La representación gráfica se presenta en la figura 1.8. Para solucionar la ecuación de Schrödinger correspondiente al modelo

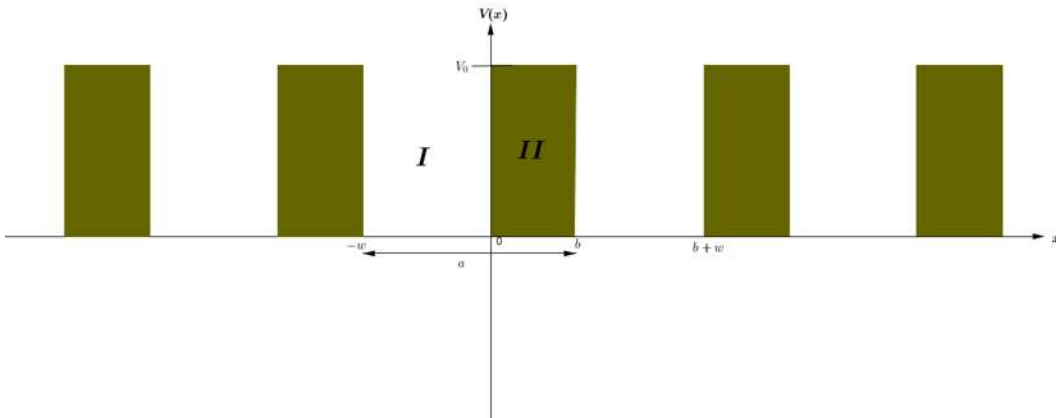


Figura 1.8: Representación gráfica del modelo de Kronig-Penney

de Kronig-Penney, es suficiente considerar una celda de la red, esto es, el intervalo  $[-w, b]$  formado por un pozo y una barrera. El teorema de Bloch, en efecto, nos permite obtener el valor de la función de onda en cualquier punto de la recta real una vez que se haya determinado  $\psi(x)$  en el intervalo fundamental  $[-w, b]$ . Cuando se soluciona la ecuación de Schrödinger, es necesario considerar dos casos: el caso  $E > V_0$  en que el electrón tiene una energía superior a la altura de las barreras y el caso complementario  $E < V_0$ . En lo que sigue supondremos que  $E < V_0$ ; la solución para  $E > V_0$  se obtiene con el mismo procedimiento.

La función de onda correspondiente a la región donde el potencial es nulo es una superposición de dos ondas planas de amplitudes  $A$  y  $B$ , esto es,

$$\psi_I(x) = Ae^{iqx} + Be^{-iqx},$$

donde  $q = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$  es el vector de onda en los pozos. En la región a potencial  $V = V_0$  las solución es:

$$\psi_{II}(x) = Ce^{\beta x} + De^{-\beta x}$$

donde  $\beta = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$  y  $C$  y  $D$  son amplitudes.

Integrando la ecuación de Schrödinger sobre un intervalo  $(-\epsilon, \epsilon)$  alrededor del origen se obtiene que

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \frac{d^2\psi}{dx^2} dx + \int_{-\epsilon}^{\epsilon} V(x)\psi(x)dx = E \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \psi(x)dx,$$

por lo que

$$-\frac{\hbar^2}{2m} [\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon)] + 2\epsilon V(\xi)\psi(\xi) = 2\epsilon E\psi(\xi),$$

donde  $\xi$  es un punto del intervalo  $(-\epsilon, \epsilon)$  tal como lo especifica el teorema del valor intermedio para integrales. Cuando  $\epsilon \rightarrow 0$ , se obtiene

$$\psi'(0^+) = \psi'(0^-) \tag{1.14}$$

donde  $0^+$  y  $0^-$  representan respectivamente el límite a cero por la derecha y por la izquierda. También

$$\psi(0^+) = \psi(0^-). \tag{1.15}$$

Por otro lado, la expresión del teorema de Bloch aplicada al caso presente se traduce en la condición

$$\psi(-w) = e^{ika}\psi(b). \tag{1.16}$$

Derivando la ecuación anterior se obtiene

$$\psi'(-w) = e^{ika}\psi'(b). \tag{1.17}$$

Las condiciones dadas por las ecuaciones (1.14), (1.15), (1.16), (1.17) se traducen en el sistema de cuatro ecuaciones con cuatro incógnitas

$$\begin{aligned}
A_1 + B_1 &= A_2 + B_2 \\
ikA_1 - ikB_1 &= \beta A_2 - \beta B_2 \\
e^{ika} [A_1 e^{-iqw} + B_1 e^{iqw}] &= A_2 e^{\beta b} + B_2 e^{-\beta b} \\
e^{ika} [-iqA_1 e^{-iqw} + iqB_1 e^{iqw}] &= A_2 \beta e^{\beta b} - B_2 \beta e^{-\beta b}.
\end{aligned}$$

Un sistema homogéneo de ecuaciones lineales tiene soluciones no nulas sólo si el determinante de la matriz asociada es igual a cero. Para el caso presente esta condición da

$$\det \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ iq & -iq & -\beta & \beta \\ e^{ika} e^{-iqw} & e^{ika} e^{iqw} & -e^{\beta b} & -e^{-\beta b} \\ -iqe^{ika} e^{-iqw} & ike^{ika} e^{iqw} & \beta e^{\beta b} & -\beta e^{-\beta b} \end{pmatrix} = 0. \quad (1.18)$$

Después de calcular el determinante, la ecuación (1.18) se traduce en la siguiente condición

$$\frac{\beta^2 - q^2}{2q\beta} \sinh(\beta b) \sin(qw) + \cosh(\beta b) \cos(qw) = \cos(ka). \quad (1.19)$$

Para mostrar cómo la ec. (1.19) implique la existencia de bandas de energía permitidas y prohibidas, es conveniente analizar el caso límite en el que la anchura  $b$  de las barreras tiende a cero mientras que su altura  $V_0$  diverge, manteniéndose constante el producto  $V_0 b$ . En este caso la ecuación (1.19) se reduce a

$$P \frac{\sin(qa)}{qa} + \cos(qa) = \cos(ka), \quad (1.20)$$

donde  $P = \frac{mV_0 b a}{\hbar^2}$ . Una representación gráfica del miembro izquierdo de la ecuación (1.20) se presenta en la figura 1.9. Los valores permitidos de la energía se obtienen determinando las soluciones de la ecuación (1.20). Es útil observar que  $\cos(ka) \in [-1, 1]$  por lo que la ecuación (1.20) carece de soluciones para todos los valores de  $q$  tales que  $|F(qa)| = \left| P \frac{\sin(qa)}{qa} + \cos(qa) \right| > 1$ . Debido a que la energía y el vector de onda  $q$  se relacionan por medio de la identidad

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} q^2, \quad (1.21)$$

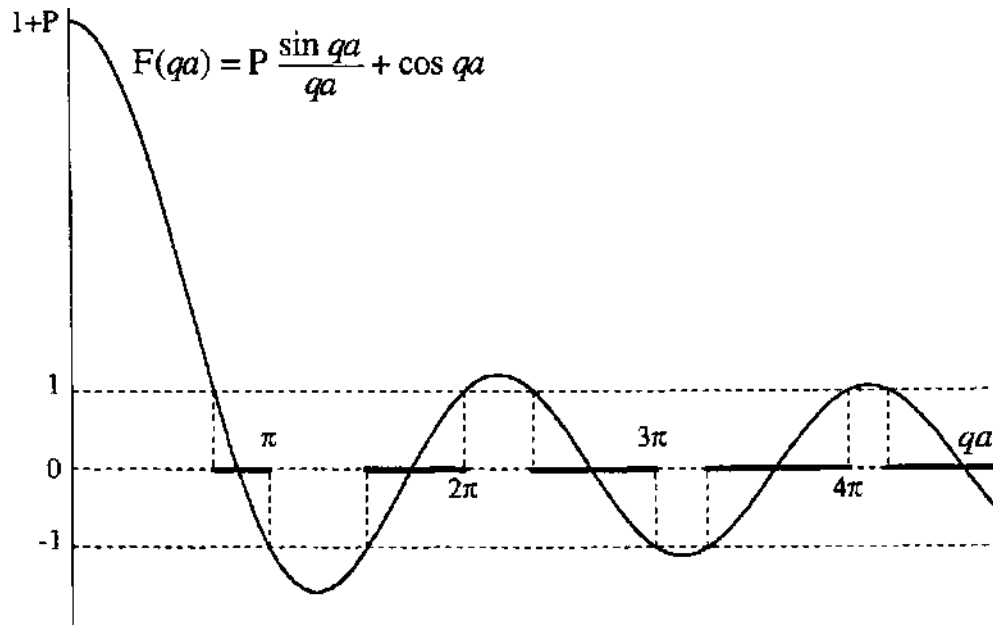


Figura 1.9: Gráfica de  $P \sin(qa)/qa + \cos(qa)$  como función de  $qa$  (reproducido del texto [4]).

esto significa que no hay estados en los intervalos de energía correspondientes a la condición  $|F(qa)| > 1$ .

La ecuación (1.20), aunada a la relación (1.21), permite determinar la estructura de banda del modelo de Kronig-Penney. De la ecuación (1.20) se obtienen infinitos valores  $q_n(k)$  del momento para cada valor del vector de Bloch  $k$ . Estas soluciones determinan a su vez los valores  $E_n(k)$  de la energía en las bandas. Un ejemplo de la estructura de bandas que se obtiene solucionando numéricamente la ecuación (1.20) se presenta en la figura 1.10.

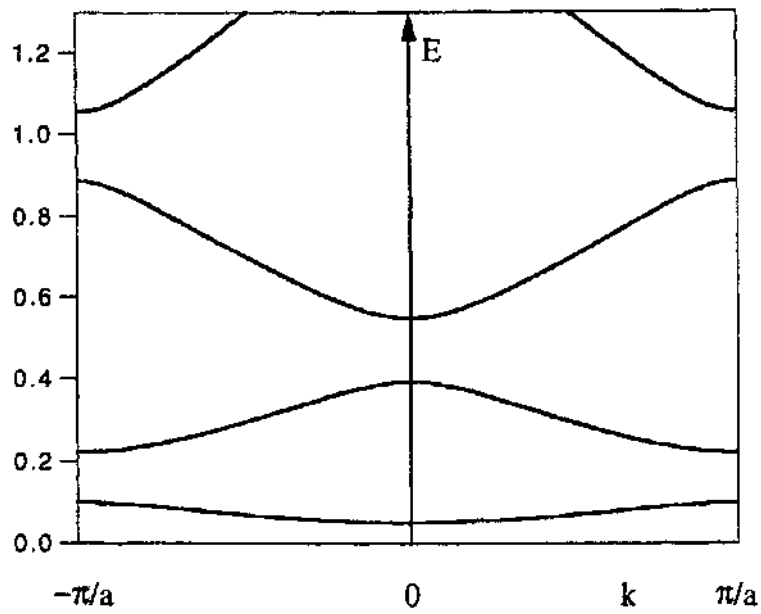


Figura 1.10: Gráfica de las bandas de energía más baja en el modelo de Kronig-Penney para  $P = \frac{3\pi}{2}$ . La energía  $E$  es gráfícada en función de los valores del vector de Bloch  $k$  en la primera zona de Brillouin. El valor de  $a$  es 10 veces el radio de Bohr (reproducido del texto [4]).



# Capítulo 2

## SISTEMAS DESORDENADOS

A lado de los sistemas cristalinos existen sólidos que carecen de una estructura espacial ordenada debido a la presencia de impurezas, dislocaciones o posiciones vacantes en la red. En estos sólidos la estructura de red o no está presente o es significativamente alterada respecto al caso de un cristal ideal. A este tipo de sólidos se les denomina “sólidos desordenados” o “sistemas desordenados”.

### 2.1. Modelos de sistemas desordenados

En esta sección se presentan algunos tipos de desorden y varios modelos que se utilizan frecuentemente para el estudio de sistemas desordenados.

Es posible considerar distintos tipos de desorden; algunos ejemplos al respecto se muestran en la figura 2.1.

Diversas topologías de desorden se encuentran en la figura 2.1. Dos de ellos: el desorden de tipo compositivo y el desorden estructural desempeñan un papel particularmente importante en el estudio de modelos desordenados. El desorden estructural surge cuando las posiciones de los átomos del sólido dejan de formar una red cristalina, mientras que en el caso del desorden compositivo átomos de dos o más tipos se distribuyen de manera aleatoria a lo largo de una red. Ambos tipos de desorden pueden hallarse simultáneamente en el mismo material.

Para definir matemáticamente un modelo desordenado se necesitan dos ingredientes. En primer lugar se debe introducir un hamiltoniano; éste, sin embargo, contiene necesariamente parámetros aleatorios asociados a los ras-

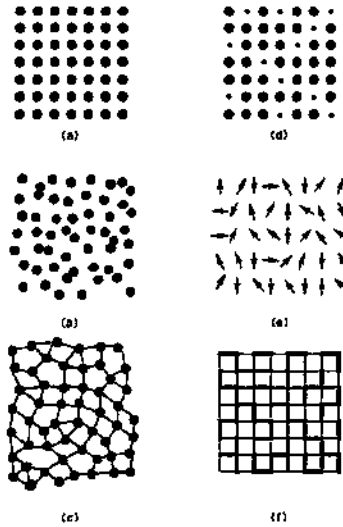


Figura 2.1: En esta figura se muestran diferentes tipos de desorden. En (a) se representa una estructura cristalina; las demás gráficas corresponden a varias topologías de desorden. En (b) se muestra un ejemplo de desorden estructural, con átomos idénticos ubicados en posiciones aleatorias; el modelo representado en (c) corresponde a un desorden topológico (que ocurre cuando las posiciones aleatorias de los átomos son tales que el número de vecinos cercanos es constante); en (d) se aprecia el caso más simple de desorden composicional, donde dos tipos diferentes de átomos ocupan al azar los sitios de una red cristalina; en (e) se representa una red geométrica en cuyos sitios se hallan espines con orientación aleatoria; el modelo (f) representa átomos idénticos conectados por dos diferentes tipos de potenciales. La figura está tomada del artículo [12].

gos desordenados del modelo. La definición del modelo desordenado, por lo tanto, no es completa si no se añade una descripción de las propiedades estadísticas de los parámetros aleatorios del hamiltoniano. Para aclarar este concepto, es útil considerar un par de modelos de sistemas desordenados de uso común.

Un modelo para estudiar electrones en sólidos con desorden estructural está dado por el hamiltoniano

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \sum_{j=1}^N V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j), \quad (2.1)$$

que describe un electrón (u otra partícula cuántica) que se mueve en el potencial creado por átomos o iones de un mismo tipo ubicados en posiciones aleatorias. En el modelo (2.1)  $m$  es la masa del electrón y  $V(\mathbf{r} - \mathbf{R})$  es el potencial asociado a la presencia de un átomo que se halla en la posición aleatoria  $\mathbf{R}$ . Para que el modelo resulte completamente definido, además del hamiltoniano (2.1) es necesario especificar la distribución de probabilidad  $P(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_N)$  de las posiciones aleatorias  $\{\mathbf{R}_i\}$  de los átomos.

Para estudiar la estructura de los estados electrónicos en sistemas que tienen desorden compositivo, se usan a menudo modelos de enlace fuerte, definidos por hamiltonianos de la forma

$$H = \sum_{j\nu} \epsilon_{j\nu} |j\nu\rangle\langle j\nu| + \sum_{j\nu, k\mu} |j\nu\rangle V_{j\nu, k\mu} \langle k\mu| \quad (2.2)$$

donde la variable  $\epsilon_{j\nu}$  corresponde a la energía del orbital  $\nu$ -ésimo centrado en el sitio  $j$ -ésimo de la red y  $V_{j\nu, k\mu}$  es la amplitud de transición entre el orbital  $\nu$ -ésimo en el sitio  $j$  y el orbital  $\mu$ -ésimo en el sitio  $k$ -ésimo. En el modelo (2.2) el desorden se introduce a través de las energías  $\epsilon_{j\nu}$  y de las amplitudes  $V_{j\nu, k\mu}$ , que son variables aleatorias. Esto implica que, para definir el modelo, además del hamiltoniano (2.2), es necesario introducir funciones de distribución para las variables aleatorias  $\{\epsilon_{j\nu}\}$  y  $\{V_{j\nu, k\mu}\}$ .

### 2.1.1. Modelo de Anderson 1D

El modelo de Anderson unidimensional es un caso particular del modelo de enlace fuerte (2.2). El modelo, introducido por P. W. Anderson en [9], queda definido por el hamiltoniano

$$H = \sum_n [|n\rangle\langle n+1| + |n\rangle\langle n-1| + |n\rangle\epsilon_n\langle n|], \quad (2.3)$$

donde las energías de sitio  $\epsilon_n$  son variables aleatorias independientes idénticamente distribuidas. La ecuación de Schrödinger correspondiente en la representación de los sitios es

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} + \epsilon_n \psi_n = E \psi_n, \quad (2.4)$$

donde  $\psi_n = \langle n|\psi\rangle$  es la amplitud de la función de onda en el  $n$ -ésimo sitio de una red infinita. Este modelo describe un electrón en una red; el electrón está sujeto a un potencial aleatorio y puede pasar por efecto túnel de un sitio a sus vecinos cercanos. Es uno de los modelos más sencillos para describir un sólido con desorden compositivo.

## 2.2. Localización

Anderson en su artículo [9] de 1958 observó que, bajo ciertas condiciones, un electrón que se mueve en un potencial aleatorio queda localizado en una región finita del espacio; esto significa que la función de onda del electrón es significativamente distinta de cero sólo en una región finita del sistema, mientras que lejos de la región de localización el módulo de la función de onda decrece exponencialmente con la distancia del centro de localización.

### 2.2.1. Criterios de localización

En la literatura se usan varios criterios para establecer si un estado electrónico es localizado. Los criterios que se emplean más comúnmente son los siguientes [12]:

1. **Comportamiento asintótico de la función de onda.** En este caso un estado se considera localizado si la envolvente de la función de onda  $\psi(\mathbf{r})$  decrece exponencialmente cuando  $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$ . En este caso resulta

$$\psi(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{|\mathbf{r}|}{l_{loc}}\right) \quad (2.5)$$

donde  $f(r)$  es un función acotada y el parámetro  $l_{loc}$  representa la *longitud de localización*.

La longitud de localización queda entonces definida por medio de la identidad

$$l_{loc}^{-1} = - \lim_{|\mathbf{r}| \rightarrow \infty} \frac{1}{|\mathbf{r}|} \log |\psi(\mathbf{r})|.$$

En el caso de un modelo definido sobre una red 1D, la definición anterior se traduce en la forma

$$l_{loc}^{-1} = - \lim_{|n| \rightarrow \infty} \frac{1}{|n|} \ln |\psi_n|. \quad (2.6)$$

2. **Razón de participación inversa (“inverse participation ratio”).** En esta definición, para decidir si un estado es localizado o no, se calcula la razón de participación inversa definida por medio de la ecuación [13]

$$P^{-1} = \sum_{\mathbf{r}} |\psi(\mathbf{r})|^4$$

donde  $\psi(\mathbf{r})$  es una función normalizada.

$P$  es una medida de la porción del espacio donde la amplitud de la función de onda difiere significativamente de cero. Es posible usar  $P$  para evaluar el diámetro  $R$  de la región de localización a través de la identidad  $R = P^{1/d}$  donde  $d$  es la dimensionalidad del modelo. Es importante observar que en general la longitud de localización  $l_{loc}$  definida mediante la identidad (2.5) no coincide con  $R$ .

3. **Transición a través de un potencial aleatorio.** El modulo cuadrado de una función de Green da la probabilidad de que un electrón en un estado de energía  $E$  efectúe la transición de una posición  $\mathbf{r}$  a una posición  $\mathbf{r}'$

$$t(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = | \langle \mathbf{r} | G(E^+) | \mathbf{r}' \rangle |^2.$$

A  $t(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$  se le denomina como la probabilidad de transición. Si el estado electrónico está localizado, la probabilidad de transición  $t(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$  decrece exponencialmente cuando  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$  tiende a infinito. Es posible entonces definir la longitud de localización en términos de  $t(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$  mediante la relación

$$\frac{2}{\lambda} = - \lim_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow \infty} \frac{\ln t(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}.$$

### 2.2.2. Dependencia de la localización de las dimensiones de los modelos desordenados

Un rasgo fundamental de la localización de Anderson es dado por el papel crucial que desempeña la dimensionalidad del sistema desordenado. En efecto, resulta que en sistemas uni- y bidimensionales cualquier desorden, por débil que sea, produce localización de todos los estados electrónicos. En cambio, en muestras desordenadas tridimensionales, si el desorden es débil se localiza sólo una parte de los estados electrónicos.

Estados localizados y extendidos ocupan regiones distintas del espectro energético, separadas por los llamados “bordes de movilidad” (concepto que introdujo Mott en [14]). Estados extendidos y localizados no pueden en efecto hallarse en el mismo intervalo de energía; para convencerse de esto es suficiente considerar que, si se encontrasen estados de ambos tipos en la misma región, los estados localizados serían inestables ya que cualquier perturbación del potencial produciría una hibridación de los estados localizados con

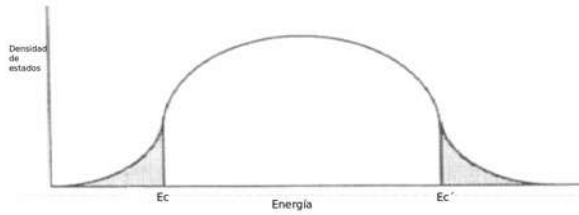


Figura 2.2: Imagen cualitativa de la densidad de estados en el modelo de Anderson para un sistema en tres dimensiones. Los estados en las colas son localizados mientras que en el centro son extendidos. Imagen tomada de [12].

los estados extendidos energéticamente próximos. La figura 2.2 presenta una representación esquemática de la densidad de estados en un modelo desordenado tridimensional, con las regiones de estados localizados y extendidos separadas por bordes de movilidad.

Si se aumenta la intensidad del desorden en un modelo tridimensional, crece la fracción de estados localizados y los bordes de movilidad se acercan entre ellos. Cuando la intensidad del desorden rebasa un umbral crítico, los bordes de movilidad se juntan y todos los estados se localizan, con lo que el material pasa de ser conductor a aislante en el límite de temperatura nula.

El comportamiento distinto de los modelos desordenados según su dimensionalidad ha encontrado una explicación en la teoría de un único parámetro de escalamiento (“single parameter scaling theory”) [10], que no discutiremos aquí debido al enfoque exclusivo de esta tesis en modelos 1D.

## 2.3. Localización en modelos 1D

La principal ventaja que ofrecen los modelos desordenados unidimensionales sobre los de mayor dimensión es que los cálculos analíticos y numéricos se vuelven más fáciles. Resulta entonces posible obtener resultados analíticos en una dimensión que no se pueden conseguir para sistemas de mayor dimensionalidad.

### 2.3.1. Matrices de transferencia

Una técnica que se emplea para el estudio de sistemas desordenados unidimensionales se basa en el uso de matrices de transferencia. Ilustraremos este

método aplicándolo al caso del modelo de Anderson 1D. Dada la ecuación de Schrödinger (2.4), es posible escribirla en la forma

$$\begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix} = \mathbf{T}_n \begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix},$$

donde  $\mathbf{T}_n$  es la matriz

$$\mathbf{T}_n = \begin{pmatrix} E - \epsilon_n & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

La matriz (2.7) constituye la matriz de transferencia en la representación de los sitios para el modelo de Anderson (2.4). Por medio de una multiplicación de matrices de transferencia, es posible construir una solución de la ecuación de Schrödinger (2.4) una vez que se conozcan los valores de la función de onda en dos sitios contiguos. En efecto resulta

$$\begin{pmatrix} \psi_{N+1} \\ \psi_N \end{pmatrix} = \mathbf{Q}_N \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_0 \end{pmatrix}, \quad (2.8)$$

donde

$$\mathbf{Q}_N = \begin{pmatrix} E - \epsilon_N & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdots \begin{pmatrix} E - \epsilon_1 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

### 2.3.2. Teorema de Furstenberg

La ecuación (2.8) vuelve posible construir la solución de la ecuación de Schrödinger (2.4) en términos de productos de matrices aleatorias. Esto conlleva la posibilidad de obtener propiedades de los estados electrónicos en el modelo de Anderson a partir de resultados matemáticos derivados para productos de matrices aleatorias. En este contexto, un resultado particularmente relevante está representado por el teorema de Furstenberg [15]. Este teorema, que representa una generalización de la ley de los grandes números al caso de variables no-conmutativas, puede enunciarse en la siguiente forma:

**Teorema 2.3.1 (Teorema de Furstenberg)** *Si  $G$  es un subgrupo no compacto de  $SL(m, R)$  tal que ningún subgrupo de  $G$  con número de elementos finito es reducible, entonces  $\|X_N \cdots X_1 x\|$  crece exponencialmente cuando  $N \rightarrow \infty$  con probabilidad 1 para todo  $x \neq 0$ ; más aún, el límite*

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \|X_N \cdots X_1 x\| = \lambda \quad (2.9)$$

existe, y el valor  $\lambda$  es positivo para todo  $x \neq 0$  y depende únicamente de la medida.

Si se demuestra que las hipótesis del teorema de Furstenberg están satisfechas para el conjunto  $\{\mathbf{T}_n\}$  de las matrices de transferencia (2.7), se puede afirmar que el límite

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \|\mathbf{Q}_N x\| = \lambda \quad (2.10)$$

existe y es positivo y determinista. Para poder llegar a esta conclusión, Ishii, en su trabajo de 1973 [11], demostró las siguientes proposiciones:

**Teorema 2.3.2** *Si  $G$  contiene al menos dos elementos de  $SL(2, R)$  con vectores propios no comunes, entonces se satisface las hipótesis del teorema de Furstenberg.*

Como consecuencia de la ecuación (2.8), del teorema anterior y del teorema de Furstenberg en [11] se demuestra que

**Teorema 2.3.3** *Para el modelo de Anderson se satisface la relación*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \{\psi_N^2 + \psi_{N+1}^2\} = 2\lambda_1 \quad (2.11)$$

para casi cualquier elección del conjunto de matrices  $\{T_n\}$  definidas por la ecuación (2.7) excepto para un conjunto de medida cero en la medida.

Finalmente se obtiene

**Teorema 2.3.4** *Con las mismas hipótesis del teorema anterior se satisface la ecuación (2.11) para casi cualquier conjunto de matrices  $P_N$  excepto para un conjunto de medida cero en la medida de Lebesgue.*

### 2.3.3. Conjetura de Borland

La identidad (2.10) demuestra que las soluciones de la ecuación de Schrödinger (2.4) que se obtengan por medio de las matrices de transferencia muestran un crecimiento exponencial, con tasa de crecimiento igual a  $\lambda$ . Una manera de relacionar el exponente de Lyapunov  $\lambda$  con la longitud de localización  $l_{loc}$  es a través de la denominada conjetura de Borland [16].

Un estado propio de la ecuación de Schrödinger (2.4) debería cumplir algunas condiciones de frontera, las cuales implican una cuantización de la



energía para un sistema finito. Para observar que esto generalmente no ocurre si solucionamos la ecuación (2.4) por medio del producto (2.8) de matrices de transferencia, considérense dos soluciones  $\psi^{(1)}$  y  $\psi^{(2)}$  obtenidas con la misma realización del desorden imponiendo respectivamente las condiciones iniciales en el lado izquierdo o derecho del sistema. Las dos funciones  $\psi^{(1)}$  y  $\psi^{(2)}$  no se empalman para casi todos los casos, debido a que la envolvente de  $\psi^{(1)}$  crece exponencialmente cuando  $n$  aumenta, mientras que la envolvente de  $\psi^{(2)}$  crece exponencialmente a medida que  $n$  decrezca. La falta de correspondencia entre  $\psi^{(1)}$  y  $\psi^{(2)}$  se debe a que se ha considerado la energía como un parámetro libre, así que la solución obtenida por medio de las matrices de transferencia en casi todos los casos no es un estado propio del sistema. La conjetura de Borland consiste en la hipótesis de que las soluciones  $\psi^{(1)}$  y  $\psi^{(2)}$  se junten solo para los valores de la energía correspondientes a los valores propios del hamiltoniano.

**Conjetura 2.3.1 (Conjetura de Borland)** *El exponente de Lyapunov  $\lambda$  evaluado para una energía  $E$  arbitraria es igual al inverso de la longitud de localización  $l_{loc}$  de los estados propios del sistema a energía  $E$  si estos existen.*

## 2.4. El método de Thouless para el cálculo de la longitud de localización en el modelo de Anderson 1D

A pesar de la relativa sencillez del modelo de Anderson 1D, no ha sido todavía posible obtener una expresión analítica de la longitud de localización que resulte válida para desorden de intensidad arbitraria. Los únicos resultados analíticos que se han obtenidos se aplican a los casos límites de desorden débil y de desorden fuerte; en esta sección derivaremos estos resultados siguiendo el método propuesto originalmente por Thouless (véase ([17] y las referencias allí contenidas). Consideraremos el caso de desorden *sin* correlaciones, que es el caso originalmente analizado en la investigación del modelo de Anderson (2.4).

Para este fin en la subsección 2.4.1 se deduce la relación de Herbert-Jones-Thouless, que se usará en la subsección 2.4.2 para derivar una expresión para la longitud de localización en términos de los elementos diagonales de la función de Green del modelo de Anderson. A partir de este resultado, en las

secciones 2.4.3 y 2.4.4 se derivan expresiones para la longitud de localización en los casos de desorden débil y fuerte.

### 2.4.1. Relación de Herbert-Jones-Thouless

Para obtener la longitud de localización (2.6), es útil servirse de la llamada relación de Herbert-Jones-Thouless, que pone en relación el inverso de la longitud de localización (o exponente de Lyapunov) con la densidad de estados en el modelo de Anderson (2.4). En lo que sigue derivaremos la relación de Herbert-Jones-Thouless siguiendo la exposición de [18].

La ecuación de Schrödinger (2.4) implica que, una vez que se hayan fijado los valores  $\psi_0$  y  $\psi_1$  de la función de onda en dos sitios de la red, es posible expresar  $\psi_N(E)$  como un polinomio de grado  $N - 1$  en la energía

$$\psi_N(E) = A \prod_{n=1}^{N-1} (E_n - E),$$

donde las  $\{E_n\}$  son las raíces del polinomio. La cantidad  $E_n - E$  puede ser tanto positiva como negativa dependiendo de si  $E_n$  es mayor o menor a  $E$ , por lo que puede escribirse como

$$(E_n - E) = |E_n - E| e^{i\phi_n}$$

donde la fase  $\phi_n$  toma los valores

$$\phi_n = \begin{cases} \pi & \text{si } E > E_n \\ 0 & \text{si } E < E_n \end{cases}.$$

De la relación anterior se obtiene que

$$\frac{1}{N} \ln \psi_N(E) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N-1} \ln |E_n - E| + \frac{i}{N} \sum_{n=1}^{N-1} \phi_n (E - E_n) + \frac{1}{N} \ln A.$$

Después de tomar el límite  $N \rightarrow \infty$ , se obtiene

$$\Lambda(E) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \psi_N(E) = \int_{-\infty}^E dE' \rho(E') \ln |E - E'| + i\pi \int_{-\infty}^E dE' \rho(E'), \quad (2.12)$$

donde  $\rho(E)$  es la densidad de estados.

La parte real de  $\Lambda(E)$  corresponde al inverso de la longitud de localización

$$\lambda = \int_{-\infty}^E dE' \rho(E') \ln |E - E'| = \text{Re}\{\Lambda(E)\}, \quad (2.13)$$

relación que se debe a Herbert y Jones por un lado y a Thouless por el otro [19]. La parte imaginaria de (2.12), en cambio, corresponde a la densidad integrada de estados

$$\eta(E) = \int_{-\infty}^E dE' \rho(E') = \frac{1}{\pi} \text{Im}\{\Lambda(E)\}.$$

### 2.4.2. Funciones de Green y longitud de localización

En esta subsección se deduce una expresión para la longitud de localización  $l_{loc}$  en términos de los elementos diagonales de la matriz de Green del modelo (2.4).

Dado un sistema con hamiltoniano  $H$ , las correspondientes funciones de Green anticipada y retardada se definen por medio de la identidad

$$G_{\pm}(E) = \frac{1}{E - H \pm i\epsilon}. \quad (2.14)$$

Consideremos el caso en que  $H$  corresponde al operador (2.3) definido sobre una red finita de  $N$  sitios. Si se supone que  $\{|\psi_{\alpha}\rangle\}$  representa un conjunto completo de autoestados normalizados de  $H$ , la ecuación (2.14) puede escribirse en la forma

$$\frac{1}{E - H \pm i\epsilon} = \sum_{\alpha} |\psi_{\alpha}\rangle \frac{1}{E - E_{\alpha} \pm i\epsilon} \langle \psi_{\alpha}|.$$

La identidad entre distribuciones

$$\frac{1}{x + i\epsilon} = P\left(\frac{1}{x}\right) - i\pi\delta(x), \quad (2.15)$$

permite representar las funciones de Green en la forma

$$G_{\pm}(E) = \sum_{\alpha} |\psi_{\alpha}\rangle \left[ P\left(\frac{1}{E - E_{\alpha}}\right) \mp i\pi\delta(E - E_{\alpha}) \right] \langle \psi_{\alpha}|.$$

Si se toma la parte real de  $G_{\pm}(E)$ , se obtiene entonces

$$\text{Re}G_{\pm}(E) = \sum_{\alpha} |\psi_{\alpha}\rangle P \left( \frac{1}{E - E_{\alpha}} \right) \langle \psi_{\alpha}|.$$

Los elementos diagonales en la representación de los sitios son

$$\text{Re}\langle n|G_{\pm}(E)|n\rangle = \sum_{\alpha} \langle n|\psi_{\alpha}\rangle P \left( \frac{1}{E - E_{\alpha}} \right) \langle \psi_{\alpha}|n\rangle = \sum_{\alpha} |\psi_{\alpha}(n)|^2 P \left( \frac{1}{E - E_{\alpha}} \right).$$

Si se suma sobre el índice de sitio  $i$  en la ecuación anterior, tomando en cuenta que los estados propios  $|\psi_{\alpha}\rangle$  son normalizados, se obtiene

$$\begin{aligned} \sum_n \text{Re}\langle n|G_{\pm}(E)|n\rangle &= \sum_n \sum_{\alpha} |\psi_{\alpha}(n)|^2 P \left( \frac{1}{E - E_{\alpha}} \right) \\ &= \sum_{\alpha} P \left( \frac{1}{E - E_{\alpha}} \right). \end{aligned}$$

Integrando ambos miembros de esta identidad respecto a la energía se llega a la identidad

$$\int^E \sum_n \text{Re}\langle n|G_{\pm}(E')|n\rangle dE' = \sum_{\alpha} P \left( \int^E \frac{1}{E - E_{\alpha}} \right) dE' = \sum_{\alpha} \ln |E - E_{\alpha}|.$$

Se divide ambos miembros de la ecuación anterior por el número  $N$  de sitios de la red y se toma el límite  $N \rightarrow \infty$ , se obtiene

$$\int^E \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_n \text{Re}(G_{\pm})_{nn}(E') dE' = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{\alpha} \ln |E - E_{\alpha}|.$$

Al comparar la relación anterior con la ecuación (2.13) se deduce

$$\lambda = \left\langle \int^E \text{Re}\langle n|G_{\pm}(E')|n\rangle dE' \right\rangle, \quad (2.16)$$

donde se ha introducido el símbolo  $\langle \dots \rangle$  para indicar el promedio sobre las realizaciones del desorden. La identidad (2.16) pone en relación la longitud de localización con los elementos diagonales de la función de Green del modelo de Anderson unidimensional (2.3). La función de Green, por otro lado, puede calcularse con técnicas perturbativas en los casos de desorden débil y de desorden fuerte: de esta forma se vuelve posible obtener expresiones analíticas de la longitud de localización en los casos límite mencionados, como se describe a continuación en las subsecciones 2.4.3 y 2.4.4

### 2.4.3. Longitud de localización para desorden débil

Consideraremos el modelo de Anderson (2.3) en el que las energías de sitio  $\{\epsilon_n\}$  son variables aleatorias independientes idénticamente distribuidas, con valor medio nulo

$$\langle \epsilon_n \rangle = 0 \quad (2.17)$$

y varianza igual a

$$\langle \epsilon_n^2 \rangle = \sigma^2. \quad (2.18)$$

La condición de desorden débil puede expresarse en la forma

$$\sigma^2 \ll 1. \quad (2.19)$$

Nótese que, en el caso de desorden débil, las identidades (2.17) y (2.18) son suficientes para definir las propiedades estadísticas de las energías de sitio (al menos mientras se restrinjan los cálculos al segundo orden en la intensidad del desorden  $\sigma$ ).

Si el desorden es débil, es conveniente escribir el hamiltoniano (2.3) como suma de dos términos

$$H = H_0 + H_I \quad (2.20)$$

donde

$$H_0 = \sum_n \{|n\rangle\langle n+1| + |n\rangle\langle n-1|\} \quad (2.21)$$

es el hamiltoniano de un electrón libre en una red 1D, mientras que

$$H_I = \sum_n |n\rangle\epsilon_n\langle n| \quad (2.22)$$

representa el efecto del desorden y puede interpretarse como corrección perturbativa al término (2.21).

Para calcular perturbativamente las funciones de Green  $G_{\pm}(E)$  del hamiltoniano (2.20), es útil servirse de la identidad de Dyson

$$G_{\pm}(E) = G_{\pm}^{(0)}(E) [1 + H_I G_{\pm}(E)] \quad (2.23)$$

donde  $G_{\pm}(E)$  son las funciones de Green (2.14) y los términos

$$G_{\pm}^{(0)}(E) = \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon}$$

representan las funciones de Green del sistema imperturbado (2.21). Aplicando iterativamente la identidad (2.23) se obtiene el desarrollo de las funciones de Green

$$\begin{aligned} G_{\pm}(E) &= G_{\pm}^{(0)}(E) + G_{\pm}^{(0)}(E)H_1G_{\pm}^{(0)}(E) + G_{\pm}^{(0)}(E)H_1G_{\pm}^{(0)}(E)H_1G_{\pm}^{(0)}(E) \\ &+ G_{\pm}^{(0)}(E)H_1G_{\pm}^{(0)}(E)H_1G_{\pm}^{(0)}(E)H_1G_{\pm}^{(0)}(E)H_1G_{\pm}^{(0)}(E) + \dots \end{aligned} \quad (2.24)$$

Si se sustituye el desarrollo (2.24) en la identidad (2.16), se obtiene el desarrollo para el exponente de Lyapunov

$$\lambda(E) = \lambda_0(E) + \lambda_1(E) + \lambda_2(E) + \dots \quad (2.25)$$

donde el término  $\lambda_n$  es proporcional a la  $n$ -ésima potencia de la intensidad del desorden  $\sigma^n$ . Las expresiones de los primeros sumandos del desarrollo (2.25) son

$$\lambda_0(E) = \text{Re} \int^E \langle i|G_{\pm}^{(0)}(E')|i \rangle dE' \quad (2.26)$$

para el término de orden cero,

$$\lambda_1(E) = \text{Re} \left\langle \sum_{k_1 k_2} \int^E \langle i|G_{\pm}^{(0)}(E')|k_1 \rangle \langle k_1|H_1|k_2 \rangle \langle k_2|G_{\pm}^{(0)}(E')|i \rangle dE' \right\rangle \quad (2.27)$$

para el término del primer orden y

$$\lambda_2(E) = \text{Re} \left\langle \sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} \int^E \langle i|G_{\pm}^{(0)}(E')|k_1 \rangle \langle k_1|H_1|k_2 \rangle \langle k_2|G_{\pm}^{(0)}(E')|k_3 \rangle \langle k_3|H_1|k_4 \rangle \langle k_4|G_{\pm}^{(0)}(E')|i \rangle dE' \right\rangle. \quad (2.28)$$

para el término de segundo orden.

Para evaluar los términos anteriores es necesario obtener una expresión explícita para los elementos de matriz del hamiltoniano perturbativo  $H_1$  y de la función de Green imperturbada  $G^{(0)}(E)$ . Dado el hamiltoniano (2.22), es inmediato obtener que sus elementos de matriz son

$$\langle m|H_1|l \rangle = \epsilon_m \delta_{ml}. \quad (2.29)$$

El primer paso para calcular  $\langle m|G_{\pm}^{(0)}|l \rangle$  consiste en observar que las autofunciones del hamiltoniano imperturbado (2.21) son ondas planas

$$\psi_{\mu}(n) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\mu n}$$

y que los autovalores correspondientes de la energía son

$$E(\mu) = 2 \cos \mu. \quad (2.30)$$

Si se imponen condiciones de frontera periódicas

$$\psi_\mu(0) = \psi_\mu(N)$$

se obtiene que el número de onda toma los valores

$$\mu = \frac{2\pi}{N}n \quad \text{con} \quad n = -\frac{N}{2}, -\frac{N}{2} + 1, \dots, \frac{N}{2}.$$

Una vez determinadas las autofunciones de  $H_0$  es posible escribir

$$\begin{aligned} \langle m|G_\pm^{(0)}(E)|l\rangle &= \sum_\mu \langle m|\psi_\mu\rangle \frac{1}{E - E(\mu) \pm i\epsilon} \langle \psi_\mu|l\rangle \\ &= \sum_\mu \psi_\mu(m) \psi_\mu^*(l) \frac{1}{E - E(\mu) \pm i\epsilon}. \end{aligned}$$

Sustituyendo en la relación anterior las expresiones explícitas de autovalores y autofunciones de  $H_0$  se obtiene

$$\langle m|G_\pm^{(0)}(E)|l\rangle = \sum_{-N/2}^{N/2+1} \frac{\exp [i\frac{2\pi}{N}n(m-l)]}{E - 2 \cos(\mu) \pm i\epsilon}.$$

En el límite  $N \rightarrow \infty$  es posible pasar al continuo y transformar la suma en una integral

$$\langle m|G_\pm^{(0)}(E)|l\rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{e^{i\mu(m-l)}}{E - 2 \cos \mu \pm i\epsilon} d\mu. \quad (2.31)$$

La integral (2.31) puede calcularse con el método de los residuos. El resultado final es

$$\langle m|G_\pm^{(0)}(E)|l\rangle = \pm i \frac{e^{i\mu|m-l|}}{\text{sen } \mu}. \quad (2.32)$$

Si se sustituye la identidad (2.32) en la expresión (2.26), se obtiene inmediatamente que el término de orden cero del desarrollo (2.25) es nulo, ya que los elementos diagonales de la función de Green imperturbada son puramente imaginarios. El término del primer orden es también nulo, ya que la ecuación (2.17) implica que el valor medio de los elementos de matriz (2.29)

sea también cero. El primer término no banal es el término (2.28). Después de unas manipulaciones algebraicas, se obtiene que

$$\lambda_2 = \frac{\sigma^2}{8 \sin^2 \mu} = \frac{\sigma^2}{2(4 - E^2)}. \quad (2.33)$$

La expresión (2.33) se conoce como fórmula de Thouless y representa el inverso de la longitud de localización del modelo de Anderson 1D en el caso de desorden débil sin correlaciones.

#### 2.4.4. Longitud de localización en el caso de desorden fuerte

En el caso de desorden fuerte, la descomposición (2.20) del hamiltoniano (2.3) sigue siendo apropiada, pero el término (2.22) se vuelve dominante respecto al término (2.21). En aproximación de orden cero, los autovalores de  $H$  coinciden con los autovalores de  $H_I$ , esto es, con las energías de sitio aleatorias  $\{\epsilon_n\}$ . Si se supone que estas variables tienen una distribución uniforme en el intervalo  $[-W/2, W/2]$ , se puede concluir que la densidad de estados del modelo es aproximadamente igual a

$$\rho(E) \simeq \begin{cases} \frac{1}{W} & \text{si } E \in \left[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}\right], \\ 0 & \text{si } E \notin \left[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}\right]. \end{cases} \quad (2.34)$$

Si se sustituye la densidad de estados (2.34) en la relación de Herbert-Jones-Thouless (2.13), se obtiene

$$\lambda = \frac{1}{2} \ln \left( \frac{W^2 - 4E^2}{4} \right) + \frac{E}{W} \ln \left( \frac{W + 2E}{W - 2E} - 1 \right).$$

En el límite  $W \gg 1$  la relación anterior se reduce a

$$\lambda \approx \ln \left( \frac{W}{2} \right) - 1. \quad (2.35)$$

## 2.5. El método del mapa hamiltoniano

El método de Thouless, analizado en la Sec. 2.4, permite obtener la longitud de localización de los estados electrónicos en el modelo de Anderson (2.4)



con desorden débil sin correlaciones. Aunque es posible extender la aplicación del método al caso de desorden con correlaciones espaciales, resulta conveniente analizar este último caso haciendo uso de un método alternativo, llamado método del mapa hamiltoniano. Este método, introducido por F. M. Izrailev y S. Ruffo [20, 21] se basa en la correspondencia entre el modelo de Anderson (2.4) cuántico y un oscilador paramétrico clásico y permite obtener una mejor comprensión física del proceso de localización. En este enfoque, los estados electrónicos del modelo cuántico corresponden a órbitas del oscilador clásico en el espacio de fases. Más específicamente, los estados localizados corresponden a trayectorias no acotadas del oscilador, mientras que los estados extendidos tienen su contraparte en trayectorias acotadas.

En esta sección consideramos el modelo de Anderson (2.4) con desorden débil *correlacionado*. Supondremos que las energías de sitio  $\{\epsilon_n\}$  son variables aleatorias con promedio y varianza definidos por las ecuaciones (2.17) y (2.18). Nos enfocaremos en el caso de desorden débil, definido por la condición (2.19). Sin embargo, generalizaremos los resultados de la sección 2.4, ya que dejaremos caer la hipótesis de independencia de las energías de sitio. Supondremos que estas variables se caractericen por una función de correlación binaria

$$\langle \epsilon_n \epsilon_{n+k} \rangle = \sigma^2 \chi(k). \quad (2.36)$$

Consideraremos por el momento el caso de un genérico correlador binario  $\chi(k)$ , cuya forma especificaremos sólo en las aplicaciones de los resultados generales obtenidos. Como ya hemos observado en la sección 2.4.3, en la aproximación de desorden débil no es necesario definir las propiedades estadísticas de las energías de sitio especificando las funciones de correlaciones de más de dos puntos. En efecto, mientras se desarrollen los cálculos en aproximación del segundo orden en  $\sigma$ , las identidades (2.17), (2.18) y (2.36) resultan suficientes para determinar completamente la longitud de localización de los estados electrónicos. El conocimiento de las funciones de correlación de tres, cuatro o más punto se vuelve necesario sólo si se quieren obtener resultados en aproximaciones de orden superior al segundo en  $\sigma$ .

### 2.5.1. Correspondencia entre el modelo de Anderson y el “oscilador pateado”

En el método del mapa hamiltoniano se considera un oscilador paramétrico con hamiltoniana de la forma

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \left[ 1 + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \xi_n \delta(t - n\tau) \right] x^2, \quad (2.37)$$

donde las variables  $\{\xi_n\}$  son aleatorias. Las ecuaciones dinámicas del oscilador (2.37) son

$$\begin{aligned} \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial x} = -m\omega^2 x \left[ 1 + \sum_n \xi_n \delta(t - n\tau) \right] \\ \dot{x} &= \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Si se integran las ecuaciones dinámicas (2.38) sobre un período entre dos variaciones impulsivas del momento (“patadas”), se obtiene un mapa hamiltoniano. Sea  $t_n = \tau n$ . Es conveniente dividir el intervalo  $[t_n, t_{n+1}]$  entre dos patadas en dos subintervalos e integrar por separado las ecuaciones dinámicas (2.38) en los intervalos de tiempo  $[t_n^-, t_n^+]$  y  $[t_n^+, t_{n+1}^-]$ . En el entorno  $[t_n^-, t_n^+]$  las ecuaciones (2.38) adquieren la forma

$$\begin{aligned} \dot{p} &= -m\omega^2 x \xi_n \delta(t - n\tau) \\ \dot{x} &= \frac{p}{m}. \end{aligned}$$

Después de integrar las ecuaciones anteriores en el entorno  $[t_n^-, t_n^+]$  se obtiene

$$\begin{aligned} p(t_n^+) &= p(t_n^-) - m\omega^2 x(t_n^-) \xi_n \\ x(t_n^+) &= x(t_n^-). \end{aligned} \quad (2.39)$$

Por otro lado en el intervalo  $[t_n^+, t_{n+1}^-]$  las ecuaciones dinámicas (2.38) se reducen a

$$\begin{aligned} \dot{p} &= -m\omega^2 x \\ \dot{x} &= \frac{p}{m} \end{aligned}$$

y la integración de las ecuaciones anteriores en el intervalo entre dos patadas da

$$\begin{aligned} p(t_{n+1}^-) &= p(t_n^+) \cos(\omega\tau) - m\omega x(t_n^+) \sin(\omega\tau) \\ x(t_{n+1}^-) &= x(t_n^+) \cos(\omega\tau) + \frac{p(t_n^+)}{m\omega} \sin(\omega\tau). \end{aligned} \quad (2.40)$$

La composición de los mapas (2.39) y (2.40) conduce al mapa hamiltoniano

$$\begin{aligned} p(t_{n+1}^-) &= \cos(\omega\tau)p(t_n^-) - [m\omega^2\xi_n \cos(\omega\tau) + m\omega \sin(\omega\tau)]x(t_n^-), \\ x(t_{n+1}^-) &= \frac{1}{m\omega} \sin(\omega\tau)p(t_n^-) + [\cos(\omega\tau) - \omega\xi_n \sin(\omega\tau)]x(t_n^-). \end{aligned}$$

cuya representación matricial es

$$\begin{pmatrix} p_{n+1} \\ x_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\omega\tau) & -m\omega[\sin(\omega\tau) + \omega\xi_n \cos(\omega\tau)] \\ \frac{1}{m\omega} \sin(\omega\tau) & \cos(\omega\tau) - \omega\xi_n \sin(\omega\tau) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_n \\ x_n \end{pmatrix}. \quad (2.41)$$

En la ecuación (2.41) se han introducido las notaciones abreviadas  $x_n = x(t_n^-)$  y  $p_n = p(t_n^-)$ .

La equivalencia entre el oscilador paramétrico (2.37) y el modelo de Anderson (2.4) aparece si se eliminan los momentos del mapa hamiltoniano (2.41). Se obtiene en efecto

$$x_{n+1} + x_{n-1} + \omega\xi_n \sin(\omega\tau)x_n = 2 \cos(\omega\tau)x_n. \quad (2.42)$$

La ecuación anterior tiene la misma estructura de la ecuación de Schrödinger (2.4) del modelo de Anderson unidimensional. Para asegurar la correspondencia entre los dos modelos, los parámetros respectivos deben satisfacer las identidades

$$E = 2 \cos(\omega\tau) \quad (2.43)$$

y

$$\xi_n = \frac{\epsilon_n}{\omega \sin(\omega\tau)}. \quad (2.44)$$

La ecuación (2.43) pone en relación la frecuencia imperturbada del oscilador estocástico (2.37) con la energía del modelo de Anderson (2.4) con desorden débil. La identidad (2.44), por otro lado, establece una correspondencia entre las variables aleatorias de los dos modelos.

La identidad matemática de la ecuación (2.42) y de la ecuación de Schrödinger (2.4) para el modelo de Anderson hace posible estudiar la estructura de los estados electrónicos en términos de las trayectorias del oscilador paramétrico.

## 2.5.2. La fórmula de Izrailev-Krokhin

La longitud de localización inversa, definida mediante la fórmula (2.6), se puede expresar en la forma

$$\lambda = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \ln \left( \frac{\psi_{n+1}}{\psi_n} \right). \quad (2.45)$$

En términos de las variables dinámicas del oscilador paramétrico, el exponente de Lyapunov (2.45) puede escribirse

$$\lambda = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \ln \left( \frac{x_{n+1}}{x_n} \right). \quad (2.46)$$

Para el cálculo del exponente de Lyapunov (2.46) es conveniente operar una transformación canónica y pasar de las variables cartesianas  $(p, x)$  a las variables acción-ángulo  $(J, \theta)$  del oscilador, definidas por medio de las relaciones

$$\begin{aligned} p_n &= \sqrt{2mJ_n\omega} \cos(\theta_n), \\ x_n &= \sqrt{\frac{2J_n}{m\omega}} \sin(\theta_n). \end{aligned} \quad (2.47)$$

En términos de las variables acción-ángulo, el mapa hamiltoniano (2.41) toma la forma

$$\begin{aligned} \cos(\theta_{n+1}) &= \frac{1}{D_n} [\cos(\theta_n + \omega\tau) - \omega\xi_n \cos(\omega\tau) \sin(\theta_n)] \\ \sin(\theta_{n+1}) &= \frac{1}{D_n} [\sin(\theta_n + \omega\tau) - \omega\xi_n \sin(\omega\tau) \sin(\theta_n)] \end{aligned}, \quad (2.48)$$

donde

$$D_n^2 = \frac{J_{n+1}}{J_n} = 1 - 2\omega\xi_n \cos(\theta_n) \sin(\theta_n) + \omega^2\xi_n^2 \sin^2(\theta_n). \quad (2.49)$$

Por otro lado, si se pasa de las variables cartesianas a las variables acción-ángulo por medio de la ecuación (2.47), el exponente de Lyapunov (2.46) puede escribirse

$$\lambda = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2N} \sum_{n=1}^N \ln \left( \frac{J_{n+1}}{J_n} \right) + \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \left[ \frac{\sin(\theta_{N+1})}{\sin(\theta_1)} \right]. \quad (2.50)$$

El segundo término en el miembro derecho de la ecuación anterior resulta despreciable para la mayor parte de los valores de la energía  $E$  y se vuelve importante sólo en los entornos de los bordes de la banda de energía, esto es, cuando  $|E| \rightarrow 2^-$  [20]. En el interior de la banda de energía se puede entonces reducir la expresión (2.50) a

$$\lambda \simeq \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2N} \sum_{n=1}^N \ln \left( \frac{J_{n+1}}{J_n} \right). \quad (2.51)$$

Introduciendo la ecuación (2.49) en (2.51) se obtiene

$$\lambda = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2N} \sum_{n=1}^N \ln [1 - 2\omega\xi_n \cos(\theta_n) \sin(\theta_n) + \omega^2 \xi_n^2 \sin^2(\theta_n)]. \quad (2.52)$$

En el caso de desorden débil, se puede desarrollar el miembro derecho de la ecuación anterior en potencias de  $\xi_n$ . Si se trunca el desarrollo al segundo orden en  $\xi_n$ , se obtiene

$$\lambda = \frac{\omega^2 \langle \xi_n^2 \rangle}{8} [1 + 2\langle \cos(2\theta_n) \rangle + \langle \cos(4\theta_n) \rangle] - \frac{\omega}{2} \langle \xi_n \sin(2\theta_n) \rangle, \quad (2.53)$$

donde se han usado los paréntesis angulares para indicar los promedios temporales de variables aleatorias, esto es,

$$\langle A_n \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N A_n.$$

Es posible evaluar los promedios de las funciones trigonométricas en el miembro derecho de la ecuación (2.53) si se toma en cuenta que la variable angular adquiere rápidamente una distribución uniforme. En efecto, a partir del mapa (2.48) es posible obtener para la variable angular el mapa explícito

$$\theta_{n+1} = \theta_n + \omega\tau + \omega\xi_n \sin^2 \theta_n + O(\sigma^2). \quad (2.54)$$

Es fácil ver que, si se itera el mapa (2.54), la variable angular toma valores en modo uniforme en el intervalo  $[0, 2\pi]$ , a no ser que  $\omega$  sea un múltiple racional de  $\pi$ . Si se dejan a un lado estos casos (que corresponden a valores resonantes de la energía), se puede asumir que la distribución de la variable angular alcance rápidamente la forma

$$\rho(\theta) = \frac{1}{2\pi}. \quad (2.55)$$

Si se hace uso de la distribución (2.55) para evaluar el exponente de Lyapunov (2.53), se obtiene

$$\lambda = \frac{\omega^2}{8} \langle \xi_n^2 \rangle - \frac{\omega}{2} \langle \xi_n \sin(2\theta_n) \rangle. \quad (2.56)$$

En el caso de desorden *sin correlaciones*, las variables  $\theta_n$  y  $\xi_n$  son independientes, por lo que el correlador ruido-ángulo en la ecuación (2.56) es nulo:

$$\langle \xi_n \sin(2\theta_n) \rangle = \langle \xi_n \rangle \langle \sin(2\theta_n) \rangle = 0.$$

Esto implica que la longitud de localización inversa (2.56) se reduce a la forma

$$\lambda = \frac{\omega^2}{8} \langle \xi_n^2 \rangle = \frac{\sigma^2}{8(1 - E^2/4)},$$

que es la fórmula de Thouless (2.33) ya obtenida en la Sección 2.4.3.

Si el desorden presenta correlaciones, el correlador ruido-ángulo  $\langle \xi_n \sin(2\theta_n) \rangle$  deja de ser nulo y es necesario evaluarlo. Para este fin es conveniente introducir la familia de correladores ruido-ángulo

$$q_k = \langle \xi_n e^{i2\theta_{n-k}} \rangle. \quad (2.57)$$

Nótese que

$$\langle \xi_n \sin(2\theta_n) \rangle = \text{Im } q_0. \quad (2.58)$$

Si se hace uso del mapa (2.54), en aproximación del segundo orden en  $\sigma$  se obtiene que los correladores (2.57) obedecen a la relación recursiva

$$q_{k-1} = e^{i2\omega\tau} \left[ \langle q_k + 2i\omega \langle \xi_n \xi_{n-k} \rangle \langle e^{i2\theta_{n-k}} \sin^2 \theta_{n-k} \rangle \right] + o(\sigma^2).$$

Después de promediar sobre la variable angular con la distribución uniforme (2.55), se obtiene

$$q_{k-1} = e^{i2\omega\tau} \left( q_k - \frac{i}{2} \omega \langle \xi_n \xi_{n-k} \rangle \right) \quad (2.59)$$

Si se multiplica ambos miembros de la ecuación anterior por  $e^{i2\omega T(k-1)}$  y se suma sobre todos los valores del índice  $k$ , se deriva que

$$q_0 = -i \frac{\omega}{2} \sum_{k=1}^{\infty} e^{i2\omega\tau k} \langle \xi_n \xi_{n-k} \rangle.$$

Sustituyendo este resultado en (2.58) se deduce que

$$\langle \xi_n \sin(2\theta) \rangle = -\frac{\omega}{2} \sum_{k=1}^{\infty} \langle \xi_n \xi_{n-k} \rangle \cos(2\omega\tau k). \quad (2.60)$$

Si se sustituye la expresión (2.60) en la ecuación (2.56), se obtiene que la longitud de localización inversa para el modelo de Anderson con desorden débil correlacionado es

$$\lambda = \frac{\langle \xi_n^2 \rangle}{8 \sin^2 \omega\tau} \left[ 1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \chi(k) \cos(2\omega\tau k) \right]. \quad (2.61)$$

En términos de las variables del modelo de Anderson, el resultado (2.61) puede escribirse

$$\lambda = \frac{\sigma^2}{8(1 - E^2/4)} W(\mu) \quad (2.62)$$

donde

$$W(\mu) = 1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \chi(k) \cos(2\mu k). \quad (2.63)$$

El parámetro  $\mu = \omega\tau$  se relaciona a la energía del electrón a través de la identidad (2.30). La expresión (2.62), que se debe a F. M. Izrailev y A. Krokhin [8], generaliza la fórmula de Thouless (2.33) al caso de desorden con correlaciones.

La fórmula de Izrailev-Krokhin (2.62) da la longitud de localización como producto de dos factores. El primero de ellos representa la longitud de localización en ausencia de correlación, mientras que el segundo factor es la densidad espectral del ruido (2.63), esto es, la transformada de Fourier de la función de correlación binaria. Un caso particular de gran interés se da cuando la densidad espectral se vuelve nula en un cierto intervalo de energías, pues en este caso se produce una deslocalización-localización efectiva, como se discutirá en la siguiente sección.

Es importante notar que la ecuación (2.62) falla cerca del centro y de los bordes de la banda. Para estas energías la frecuencia imperturbada del oscilador paramétrico toma valores cercanos a  $\omega\tau = 0, \pm\pi$  y  $\omega\tau = \pi/2$ . En estos casos la distribución de la variable angular deja de ser uniforme y la derivación de la fórmula (2.62) pierde entonces su validez.

## 2.6. Transiciones de localización-deslocalización en modelos 1D con desorden correlacionado

La importancia fundamental de la fórmula de Izrailev-Krokhin (2.62) estriba en la posibilidad de obtener bordes de movilidad efectivos en modelos estrictamente 1D. El teorema de Furstenberg y la conjetura de Borland, presentados en las secciones 2.3.2 y 2.3.3, parecen en efecto excluir la posibilidad de estados extendidos en modelos 1D. Sin embargo, el teorema de Furstenberg puede aplicarse sólo al caso de modelos con desorden *sin* correlaciones espaciales. La presencia de correlaciones espaciales abre la posibilidad de construir modelos desordenados 1D con un continuo de estados electrónicos extendidos, como se deduce de la fórmula de Izrailev-Krokhin (2.62) que implica que, si la densidad espectral del desorden (2.63) se vuelve nula en un intervalo continuo de energías, la longitud de localización diverge en este mismo intervalo.

Es necesario precisar que esta conclusión es válida sólo en la aproximación de segundo orden en  $\sigma$ : en efecto, el exponente de Lyapunov (2.62) representa únicamente el término  $\lambda_2$  del desarrollo (2.25) de la longitud de localización inversa. El hecho de que resulte  $\lambda_2 = 0$  en un intervalo de energías no implica obviamente que los términos de orden superior sean también nulos; de hecho, se sabe que los términos de orden superior no son generalmente iguales a cero [22]. Sin embargo, en los intervalos de energía donde  $\lambda_2 = 0$ , la longitud de localización es una magnitud de orden  $l_{loc} \sim 1/\sigma^3$  (o, más comúnmente,  $l_{loc} \sim 1/\sigma^4$ ) mientras que fuera de estos intervalos resulta  $l_{loc} \sim 1/\sigma^2$ . Para desorden débil esto significa que la longitud de localización se incrementa enormemente cuando el término  $\lambda_2$  se vuelve nulo y, en un sistema de talla finita  $L$ , los estados para los cuales  $\lambda_2 = 0$  pueden llegar a considerarse realmente extendidos si  $L \lesssim 1/\sigma^3$ . Esto significa que es posible obtener transiciones de localización-deslocalización efectivas en sistemas 1D con desorden correlacionado. Esta conclusión, obtenida en el trabajo pionero de F. M. Izrailev y A. Krokhin [8], ha producido un enorme incremento del interés para modelos desordenados 1D. Una reseña de la actividad de investigación llevada a cabo en los últimos quince años sobre este tema puede encontrarse en el artículo de revisión [21].

Es importante observar que la existencia de “bordes de movilidad” efectivos en modelos 1D se asocia a potenciales aleatorios con correlaciones de



largo alcance. Consideremos por ejemplo un potencial con densidad espectral (2.63) de la forma

$$W(E) = \begin{cases} 0 & \text{si } |E| < 1, \\ 3/2 & \text{si } 1 < |E| < 2. \end{cases} \quad (2.64)$$

Por medio de la teoría de las transformadas de Fourier, es fácil invertir la identidad (2.63) y obtener la función de correlación binaria a partir de la densidad espectral. Se obtiene así

$$\chi(k) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} W(\mu) \cos(2k\mu) d\mu. \quad (2.65)$$

Aplicando la relación (2.65) al caso del potencial con densidad espectral (2.64) se deduce que el correlador binario correspondiente es

$$\chi(k) = \frac{3}{2\pi k} \sin\left(\frac{2\pi k}{3}\right).$$

Se trata de un correlador que decrece con ley de potencia para  $|k| \rightarrow \infty$ , lo que muestra que el potencial aleatorio del ejemplo considerado tiene efectivamente correlaciones espaciales de largo alcance. Debe sin embargo observarse que no todos los potenciales con correlaciones espaciales de largo alcance generan bordes de movilidad efectivos.

### 2.6.1. El problema inverso

Las fórmulas (2.62) y (2.63) permiten obtener la longitud de localización de los estados electrónicos en el modelo de Anderson una vez que se conozca el correlador binario (2.36). Sin embargo, es posible plantearse también el problema inverso, esto es, determinar un potencial aleatorio que produzca bordes de movilidad pre-establecidos. El problema inverso presenta un interés teórico, pero también práctico, ya que su solución permite la creación de dispositivos experimentales que funcionan como filtros para partículas cuánticas u ondas electromagnéticas.

Desde un punto de vista matemático el problema consiste en generar una sucesión aleatoria con densidad espectral predefinida. Este objetivo se puede conseguir con un apropiado filtraje de un ruido blanco.

Como primer paso, se genera entonces un “ruido blanco”, esto es, una sucesión  $\{r_n\}$  con

$$\langle r_n \rangle = 0 \quad \text{y} \quad \langle r_n r_m \rangle = \delta_{nm}.$$

Sucesivamente se calculan los coeficientes

$$c_l = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \sqrt{\sigma^2 W(\mu)} e^{i2\mu l} d\mu = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} \sqrt{\sigma^2 W(\mu)} \cos(2\mu l) d\mu,$$

que permiten “filtrar” el ruido blanco por medio del producto de convolución

$$\epsilon_n = \sum_{l=-\infty}^{\infty} c_l r_{n-l}. \quad (2.66)$$

La sucesión (2.66) representa el ruido de color con la densidad espectral  $W(\mu)$  predefinida. La fórmula (2.66) vuelve posible la fabricación de dispositivos que resultan transparentes para ondas o partículas en un dado intervalo de frecuencias o energías y opacos fuera de este intervalo. Estas ideas se han realizado experimentalmente con guías de microondas y cristales fotónicos; una reseña de los resultados experimentales puede encontrarse en [21].

## Capítulo 3

# TRANSPORTE EN BARRERAS ALEATORIAS ACTIVAS

Los modelos desordenados discutidos en el capítulo 2 comparten la característica de ser sistemas en los que la probabilidad electrónica se conserva. Matemáticamente esto se refleja en el carácter *hermítico* de los hamiltonianos de los modelos considerados. En muchos problemas de interés físico, sin embargo, las ondas que se propagan en medios aleatorios sufren procesos de absorción o de amplificación. Aun en modelos electrónicos, el número de electrones puede variar por inyección de los mismos en el dispositivo. En estos casos el hamiltoniano del modelo correspondiente debe ser un operador no-hermítico.

El objetivo de esta tesis consiste en llevar a cabo un estudio preliminar de los procesos de localización en medio activos. Para este fin se requiere modificar el modelo de Anderson (2.3) incluyendo en ello términos no-hermíticos para describir los procesos de absorción o amplificación. El carácter no-hermítico del nuevo modelo no permite la aplicación directa del método de Thouless presentado en la Sección 2.4 o del método del mapa hamiltoniano introducido en la Sección 2.5. Por esta razón usaremos en nuestro estudio el método de las matrices de transferencia, que puede aplicarse a este caso sin necesidad de modificaciones.

Este capítulo se estructura como sigue. En la Sección 3.1 se introduce el modelo de barrera aleatoria activa que representa nuestro objeto de estudio. En la Sección 3.2 se obtienen expresiones para los coeficientes de transmisión y reflexión en términos de los elementos de la matriz de transferencia total. Se presentan los resultados numéricos obtenidos en la Sección 3.3; concluimos

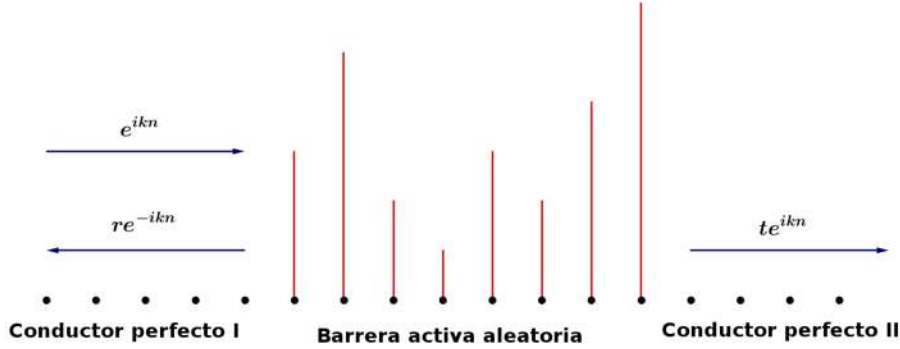


Figura 3.1: Barrera activa aleatoria entre dos conductores perfectos

discutiendo algunos resultados analíticos preliminares en la Sección 3.4.

### 3.1. Definición del modelo

En el presente capítulo se estudia la transmisión a través de una barrera activa aleatoria de  $N$  sitios situada entre dos conductores perfectos semi-infinitos. El hamiltoniano asociado a la barrera activa aleatoria es

$$H = \sum_n [|n\rangle\langle n+1| + |n\rangle\langle n-1| + |n\rangle(\epsilon_n + i\gamma + i\gamma_n)\langle n|] \quad (3.1)$$

y la ecuación de Schrödinger correspondiente tiene la forma

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} + (\epsilon_n + i\gamma + i\gamma_n)\psi_n = E\psi_n. \quad (3.2)$$

En las ecuaciones (3.1) y (3.2) el símbolo  $\epsilon_n$  corresponde a la  $n$ -ésima energía de sitio,  $\gamma$  es el valor medio del coeficiente de absorción en la barrera y  $\gamma_n$  representa la fluctuación de tal coeficiente en el sitio  $n$ -ésimo.

Indicaremos con los números romanos I y II los conductores perfectos a la izquierda y a la derecha de la barrera. La ecuación de Schrödinger correspondiente a tales regiones es

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} = E\psi_n.$$

Una representación gráfica del modelo se presenta en la figura 3.1.

Las propiedades estadísticas del modelo se definen considerando que las energías de sitio  $\epsilon_n$  y las fluctuaciones del coeficiente de absorción  $\gamma_n$  son variables aleatorias con promedio nulo

$$\begin{aligned}\langle \epsilon_n \rangle &= 0 \\ \langle \gamma_n \rangle &= 0\end{aligned}\tag{3.3}$$

y valores cuadráticos medios

$$\begin{aligned}\langle \epsilon_n^2 \rangle &= \sigma_1^2, \\ \langle \gamma_n^2 \rangle &= \sigma_2^2, \\ \langle \gamma_n \epsilon_n \rangle &= \sigma_3^2.\end{aligned}\tag{3.4}$$

Consideramos además conocidos los correladores binarios normalizados

$$\begin{aligned}\frac{\langle \epsilon_n \epsilon_{n+k} \rangle}{\langle \epsilon_n^2 \rangle} &= \chi_1(k), \\ \frac{\langle \gamma_n \gamma_{n+k} \rangle}{\langle \gamma_n^2 \rangle} &= \chi_2(k), \\ \frac{\langle \epsilon_n \gamma_{n+k} \rangle + \langle \gamma_n \epsilon_{n+k} \rangle}{\langle \epsilon_n \gamma_n \rangle} &= \chi_3(k).\end{aligned}\tag{3.5}$$

En el presente trabajo nos enfocamos en el estudio de una barrera con desorden débil

$$\sigma_i^2 \ll 1 \quad \text{con} \quad i = 1, 2, 3.\tag{3.6}$$

Debido a que el desorden es débil no es necesario especificar las propiedades estadísticas del modelo con más detalle de cuanto hagan las ecuaciones (3.3), (3.4) y (3.5).

## 3.2. Coeficientes de transmisión y reflexión

El objetivo de este trabajo es estudiar las propiedades de transmisión y reflexión de la barrera aleatoria activa (3.1). Nos serviremos del método de las matrices de transferencias, introducido en la Sección 2.3.1 para el modelo de Anderson 1D.

Como ya se hizo en aquel caso, se puede poner la ecuación de Schrödinger (3.2) en la forma matricial

$$\begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix} = \mathbf{T}_n \begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix}\tag{3.7}$$

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

$$\mathbf{T}_n = \begin{pmatrix} E - \eta_n - i\gamma & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

con  $\eta_n = \epsilon_n + i\gamma_n$ .

Para calcular el coeficiente de transmisión es conveniente pasar de las matrices de transferencia (3.8) en representación de los sitios a las matrices correspondientes en representación de las ondas planas. Se introducen las amplitudes  $A_n$  y  $B_n$  de las ondas planas progresiva y regresiva con energía  $E = 2 \cos(k)$  mediante las ecuaciones

$$\begin{aligned} \psi_n &= A_n e^{ikn} + B_n e^{-ikn}, \\ \psi_{n-1} &= A_n e^{ik(n-1)} + B_n e^{-ik(n-1)}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Definimos la  $n$ -ésima matriz de transferencia  $\mathbf{Q}_n$  en representación de las ondas planas mediante la ecuación

$$\begin{pmatrix} A_{n+1} e^{ikn} \\ B_{n+1} e^{-ikn} \end{pmatrix} = \mathbf{Q}_n \begin{pmatrix} A_n e^{ik(n-1)} \\ B_n e^{-ik(n-1)} \end{pmatrix}. \quad (3.10)$$

Para pasar de las matrices  $\mathbf{T}_n$  a las matrices  $\mathbf{Q}_n$  se puede poner en forma matricial la ecuación (3.9) y escribir

$$\begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ik} & e^{-ik} \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_n e^{ik(n-1)} \\ B_n e^{-ik(n-1)} \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Sustituyendo la identidad (3.11) en la ecuación (3.7) se obtiene

$$\mathbf{Q}_n = \begin{pmatrix} e^{ik} & e^{-ik} \\ 1 & 1 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} E - \eta_n + i\gamma & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik} & e^{-ik} \\ 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

Después de unos cálculos algebraicos, se puede poner la matriz de transferencia (3.12) en la forma

$$\mathbf{Q}_n = \mathbf{Q}^{(0)} + \mathbf{Q}_n^{(1)} \quad (3.13)$$

donde el primer sumando del miembro derecho es una matriz determinista, que no depende del índice de sitio,

$$\mathbf{Q}^{(0)} = \begin{pmatrix} e^{ik} \left(1 - \frac{\gamma}{2 \sin k}\right) & e^{-ik} \frac{\gamma}{2 \sin k} \\ e^{ik} \frac{\gamma}{2 \sin(k)} & e^{-ik} \left(1 + \frac{\gamma}{2 \sin(k)}\right) \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

mientras que el segundo sumando es una matriz aleatoria dada por

$$\mathbf{Q}_n^{(1)} = \frac{1}{2i \sin(k)} \begin{pmatrix} -\eta_n e^{ik} & -\eta_n e^{-ik} \\ \eta_n e^{ik} & \eta_n e^{-ik} \end{pmatrix}.$$

Si se multiplican las matrices de transferencia (3.13) a lo largo de la barrera se obtiene la matriz de transferencia total

$$\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_N \mathbf{Q}_{N-1} \mathbf{Q}_{N-2} \cdots \mathbf{Q}_1, \quad (3.15)$$

por medio de la cual se relacionan las amplitudes  $A_{N+1}$  y  $B_{N+1}$  de las ondas en el conductor II con las amplitudes  $A_0$  y  $B_0$  de las ondas en conductor I,

$$\begin{pmatrix} A_{N+1} e^{ikN} \\ B_{N+1} e^{-ikN} \end{pmatrix} = \mathbf{Q} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}. \quad (3.16)$$

Nos interesa estudiar la reflexión y transmisión de una onda plana monocromática de energía  $E = 2 \cos(k)$ . Consideramos entonces soluciones de la ecuación de Schrödinger en los conductores de la forma

$$\psi_n = \begin{cases} e^{ikn} + r_N e^{-ikn} & \text{para } n = -1, -2, \dots \\ t_N e^{ikn} & \text{para } n = N+1, N+2, \dots \end{cases} \quad (3.17)$$

donde  $r_N$  es la amplitud de la onda reflejada mientras que  $t_N$  es la amplitud de la onda transmitida a través del segmento desordenado. Comparando las ecuaciones (3.17) y (3.16) se obtiene

$$\begin{pmatrix} t_N e^{ikN} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{Q}_{11} & \mathcal{Q}_{12} \\ \mathcal{Q}_{21} & \mathcal{Q}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-ik} \\ r_N e^{ik} \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

donde  $\mathcal{Q}_{ij}$  es el elemento  $ij$  de la matriz (3.15)

Despejando las amplitudes  $t_N$  y  $r_N$  del sistema de ecuaciones (3.18) se llega a la conclusión de que

$$t_N = \frac{1}{\mathcal{Q}_{22}} e^{-ik(N+1)} \quad (3.19)$$

y

$$r_N = -\frac{\mathcal{Q}_{21}}{\mathcal{Q}_{22}} e^{-i2k}. \quad (3.20)$$

Los coeficientes de transmisión y reflexión se obtienen tomando el módulo cuadrado de las amplitudes (3.19) y (3.20)

$$T_N = |t_N|^2 = \frac{1}{|\mathcal{Q}_{22}|^2} \quad (3.21)$$

y

$$R_N = |r_N|^2 = \frac{|\mathcal{Q}_{21}|^2}{|\mathcal{Q}_{22}|^2}. \quad (3.22)$$

Las ecuaciones (3.21) y (3.22) expresan los coeficientes de transmisión y reflexión de la barrera en función de los elementos de la matriz de transferencia total (3.15). El estudio de la transmisión de ondas en la barrera aleatoria activa (3.1) queda así reducido al cálculo de la matriz (3.15).

### 3.3. Estudio numérico de la transmisión

En esta sección se presentan los resultados obtenidos numéricamente para el coeficiente de transmisión en la barrera (3.1). Se ha evaluado el coeficiente de transmisión por medio de un programa FORTRAN que calcula la matriz de transferencia total (3.15) multiplicando  $N$  matrices de transferencia (3.13). El caso de una barrera activa *sin* desorden se discute en la Subsección 3.3.1. En la Subsección 3.3.2 se considera una barrera activa con energías de sitio aleatorias. Concluimos en 3.3.3 con el análisis de una barrera con energías de sitio constantes y coeficiente de amplificación/absorción aleatorio.

#### 3.3.1. Barrera activa determinista

Para evidenciar el efecto del desorden, hemos estudiado en primer lugar el comportamiento de una barrera activa *sin desorden*. Las figuras 3.2 y 3.3 muestran cómo varía en este caso el coeficiente de transmisión en función de la longitud de la barrera. Los datos representados se han obtenido para una onda incidente de energía  $E = 0$  (centro de la banda). En la figura 3.2 la barrera amplifica la onda incidente con coeficiente de amplificación  $\gamma = -0.1$ . En la figura 3.3 la barrera absorbe la onda incidente, con coeficiente de absorción  $\gamma = 0.1$ .



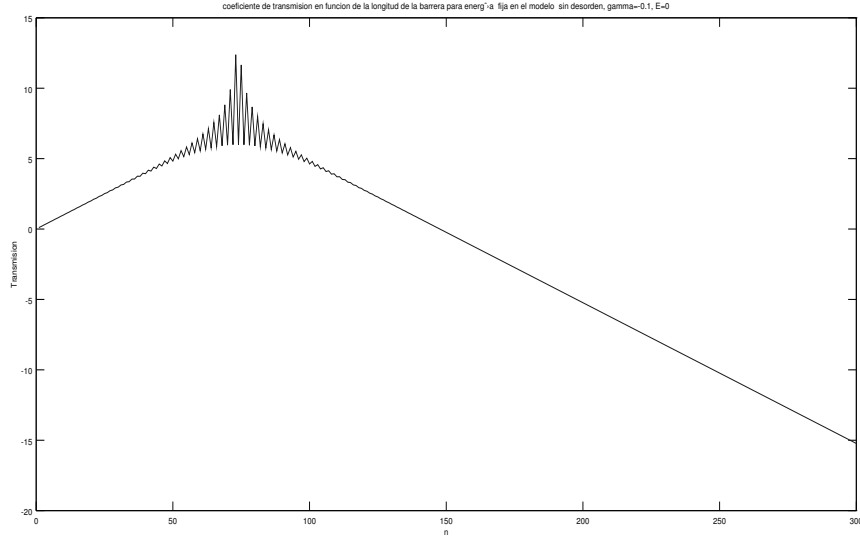


Figura 3.2: Logaritmo del coeficiente de transmisión  $\ln T_N$  para  $E = 0$  en función de la longitud  $N$  de la barrera. Se considera el caso de una barrera sin desorden y con coeficiente de amplificación  $\gamma = -0.1$ .

El comportamiento del coeficiente de transmisión en función de la energía de la onda incidente se ha estudiado considerando una barrera de  $N = 300$  sitios con absorción/amplificación débil ( $\gamma = \pm 0.1$ ) y fuerte ( $\gamma = \pm 4$ ). Las figuras 3.4 y 3.5 representan el coeficiente de transmisión para  $\gamma = \pm 0.1$ ; las figuras 3.6 y 3.7 corresponden a los valores  $\gamma = \pm 4$ .

### 3.3.2. Barrera activa con energías de sitio aleatorias

Para simplificar el estudio de los efectos del desorden, hemos considerado por separado el modelo (3.1) sin fluctuaciones espaciales del coeficiente de

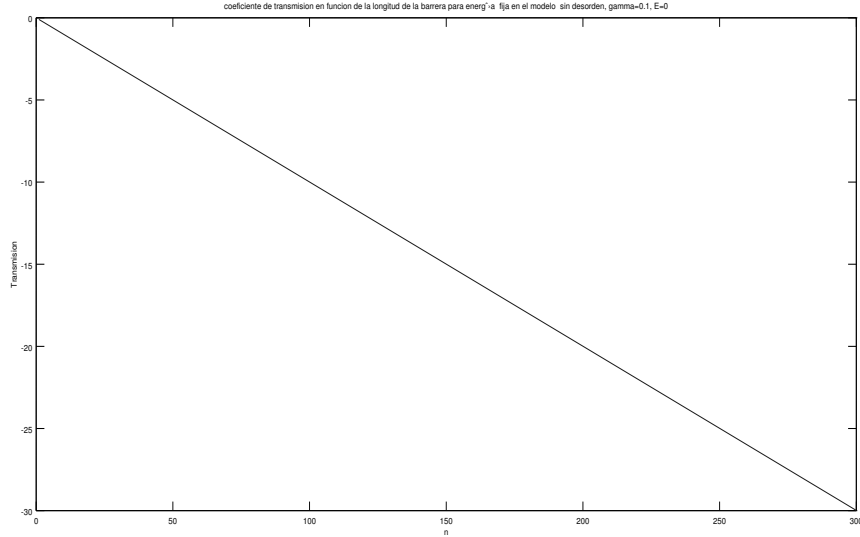


Figura 3.3: Logaritmo del coeficiente de transmisión  $\ln T_N$  para  $E = 0$  en función de la longitud  $N$  de la barrera. Se considera el caso de una barrera sin desorden y con coeficiente de absorción  $\gamma = 0.1$ .

absorción/amplificación y el mismo modelo con energías de sitio nulas y coeficiente de absorción/amplificación aleatorio. En esta subsección supondremos que  $\gamma_n = 0$ , en la subsección siguiente consideraremos el caso  $\epsilon_n = 0$ .

Para evidenciar el efecto de las correlaciones de las energías de sitio, hemos considerado en primer lugar el caso de variables  $\{\epsilon_n\}$  sin correlaciones. Las figuras 3.8 y 3.9 muestran el comportamiento del coeficiente de transmisión en una barrera activa de  $N = 200$  sitios con fluctuaciones de las energías de sitio de intensidad  $\sigma_1^2 = 0.04$  y con coeficiente de amplificación  $\gamma = \pm 0.1$ . En las figuras se muestra el valor medio del logaritmo del coeficiente de transmisión que se ha obtenido con un promedio sobre 100 realizaciones del desorden.

Hemos estudiado el efecto de las correlaciones del desorden considerando el caso de energías de sitio con correlaciones de largo alcance, del tipo discutido en la Sección 2.6. Más específicamente, hemos considerado el caso de

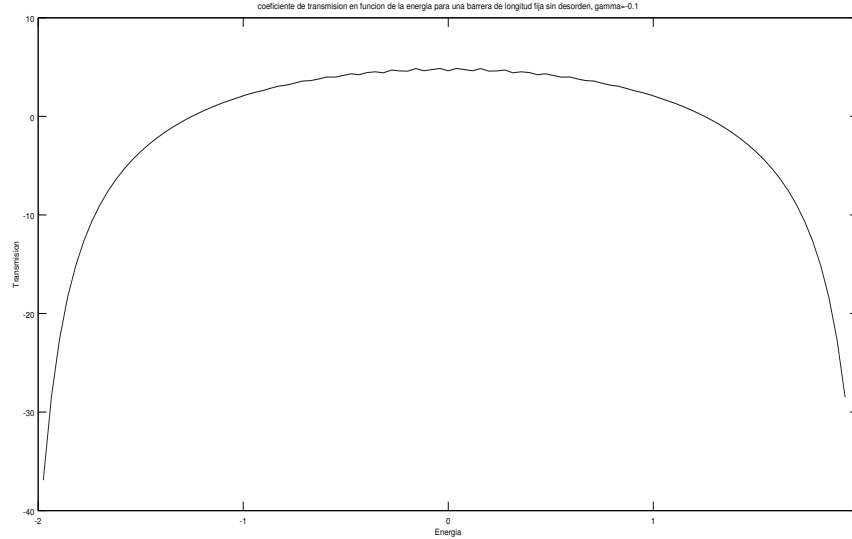


Figura 3.4: Logaritmo del coeficiente de transmisión  $\ln T_N$  en función de la energía de la onda incidente. Se considera el caso de una barrera de  $N = 300$  sitios, sin desorden y con coeficiente de amplificación  $\gamma = -0.1$ .

correlaciones que, en el modelo de Anderson 1D sin disipación, crean ventanas de estados fuertemente localizados en los intervalos de energía  $[-0.9, -0.7]$  y  $[0.7, 0.9]$  y delocalizan los estados en el resto de la banda de energía.

Los resultados numéricos obtenidos muestran que estas ventanas de estados fuertemente localizados se mantienen también en presencia de amplificación o absorción, como muestran las figuras 3.10 y 3.11.

Si se compara la figura 3.8 con la figura 3.10 y la figura 3.9 con la figura 3.11, es fácil ver que el efecto de las correlaciones del desorden es disminuir el coeficiente de transmisión en las ventanas de localización y aumentarlo fuera de ellas respecto al caso de desorden sin correlaciones.

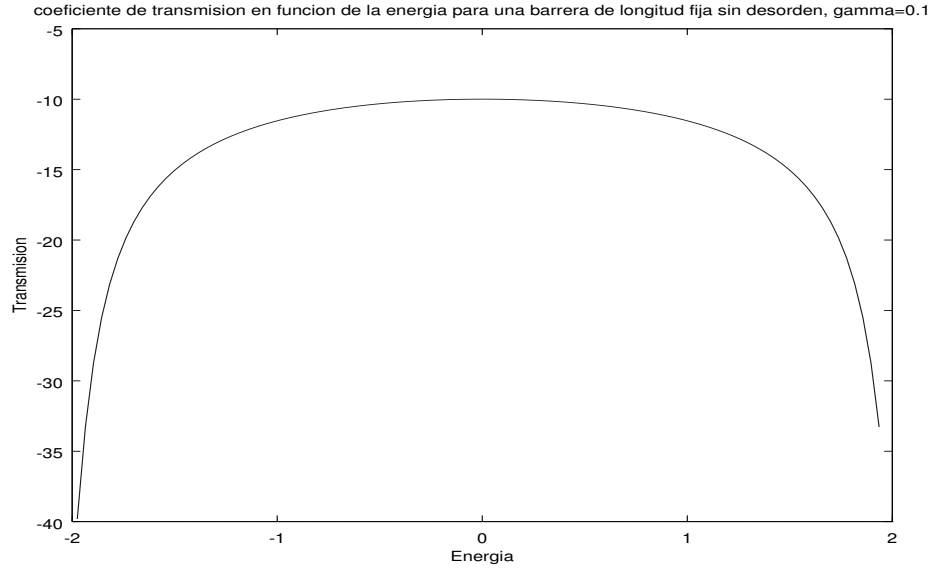


Figura 3.5: Logaritmo del coeficiente de transmisión  $\ln T_N$  en función de la energía de la onda incidente. Se considera el caso de una barrera de  $N = 300$  sitios, sin desorden y con coeficiente de absorción  $\gamma = 0.1$ .

### 3.3.3. Barrera con coeficiente de amplificación/absorción aleatorio

Concluimos el estudio de las correlaciones del desorden considerando el caso de una barrera del tipo (3.1) con  $\epsilon_n = 0$  y con coeficiente de amplificación/absorción aleatorio con valor medio nulo,  $\gamma = 0$ , y fluctuaciones de intensidad  $\langle \gamma_n^2 \rangle = 0.01$ . Hemos construido las variables  $\{\gamma_n\}$  con las mismas correlaciones de las energías de sitio de la subsección anterior. Sin embargo, mientras en el caso anterior las correlaciones generaban ventanas de localización en los intervalos de energía  $[-0.9, -0.7]$  y  $[0.7, 0.9]$ , en el caso presente producen amplificación de la transmisión en estas mismas ventanas, como muestra la Fig. 3.12.

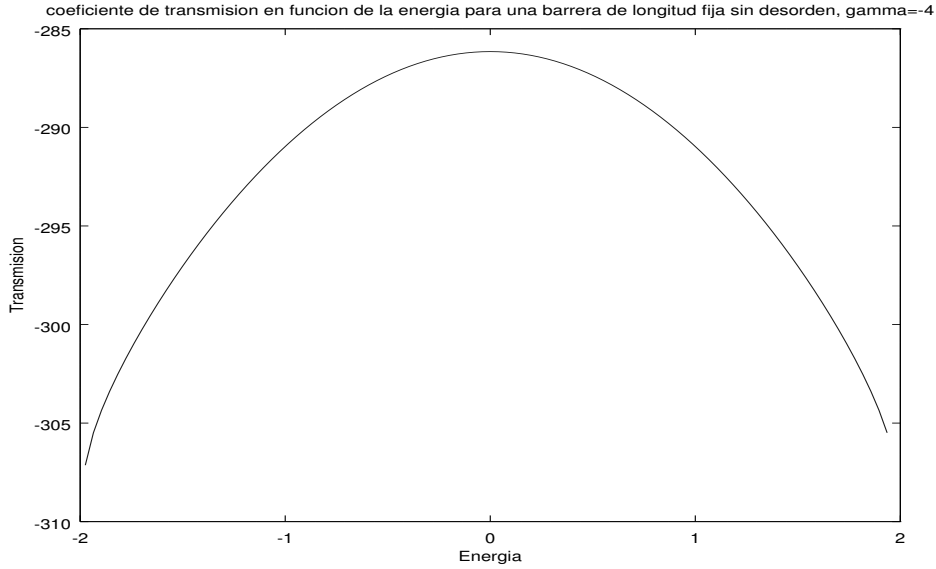


Figura 3.6: Logaritmo del coeficiente de transmisión  $\ln T_N$  en función de la energía de la onda incidente. Se considera el caso de una barrera de  $N = 300$  sitios, sin desorden y con coeficiente de amplificación  $\gamma = -4$ .

### 3.4. Cálculo analítico de la matriz de transferencia

Las ecuaciones (3.19) y (3.20) expresan las amplitudes de transmisión y reflexión en función de los elementos de la matriz de transferencia (3.15). Resulta por lo tanto conveniente tener expresiones analíticas para estos elementos de matriz. En el caso de desorden débil, identificado por la condición (3.6), y de barreras delgadas (esto es, tales que  $N\gamma \ll 1$ ), es posible llevar a cabo un cálculo perturbativo de la matriz (3.15).

Si se toma en cuenta que la matriz (3.15) está dada por el producto de matrices de la forma (3.13), es claro que el problema se reduce al desarrollo de una matriz producto del tipo

$$\mathbf{M}_N = (\mathbf{A} + \epsilon \mathbf{B}_N)(\mathbf{A} + \epsilon \mathbf{B}_{N-1})(\mathbf{A} + \epsilon \mathbf{B}_{N-2}) \cdots (\mathbf{A} + \epsilon \mathbf{B}_1) \quad (3.23)$$

donde  $A$  es una matriz constante, las matrices  $\mathbf{B}_n$  dependen del índice de sitio  $n$  y  $\epsilon$  es un parámetro perturbativo,  $\epsilon \ll 1$ . Si se desarrolla el producto (3.23)

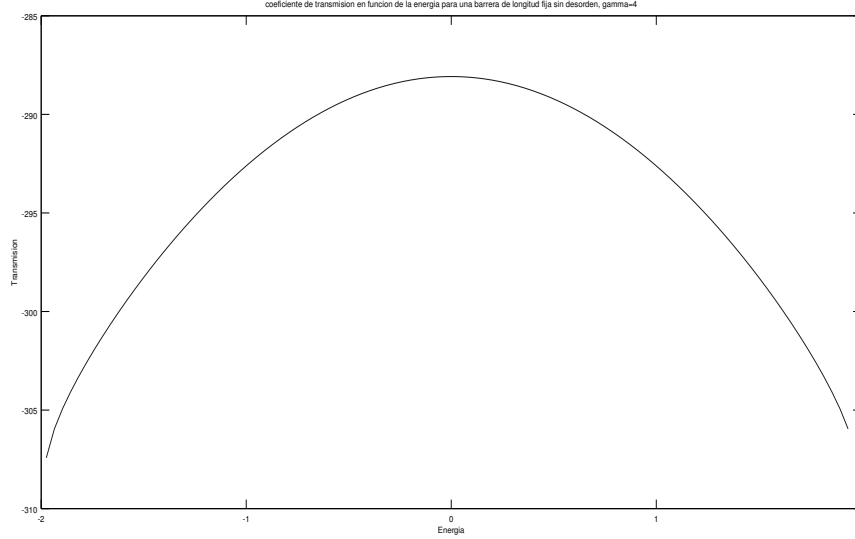


Figura 3.7: Logaritmo del coeficiente de transmisión  $\ln T_N$  en función de la energía de la onda incidente. Se considera el caso de una barrera de  $N = 300$  sitios, sin desorden y con coeficiente de absorción  $\gamma = 4$ .

en potencias de  $\epsilon$ , se obtiene

$$\begin{aligned}
 \mathbf{M}_N &= \mathbf{A}^N + \epsilon \sum_{k=1}^N \mathbf{A}^{N-k} \mathbf{B}_k \mathbf{A}^{k-1} + \epsilon^2 \sum_{k=1}^N \sum_{l < k} \mathbf{A}^{N-k} \mathbf{B}_k \mathbf{A}^{k-l-1} \mathbf{B}_l \mathbf{A}^{l-1} \\
 &+ \epsilon^3 \sum_{k=1}^N \sum_{l < k} \sum_{s < l} \mathbf{A}^{N-k} \mathbf{B}_k \mathbf{A}^{k-l-1} \mathbf{B}_l \mathbf{A}^{l-s-1} \mathbf{B}_s \mathbf{A}^{s-1} + \dots
 \end{aligned} \tag{3.24}$$

Si se aplica el desarrollo (3.24) al caso presente, se puede escribir la matriz (3.15) en la forma

$$\mathcal{Q} = \mathcal{Q}^{(0)} + \mathcal{Q}^{(1)} + \mathcal{Q}^{(2)} + \dots \tag{3.25}$$

El término de orden cero del desarrollo (3.25) es

$$\mathcal{Q}^{(0)} = [\mathbf{Q}^{(0)}]^N. \tag{3.26}$$

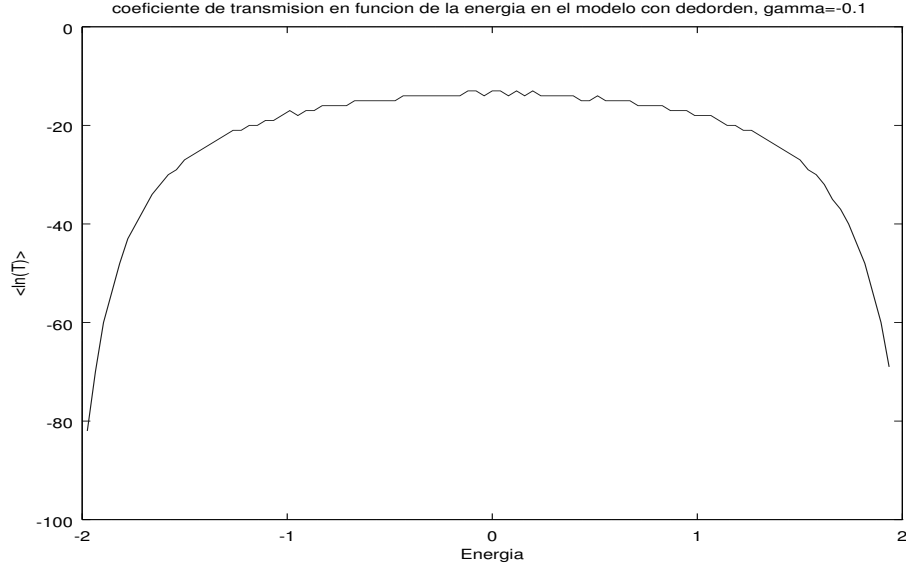


Figura 3.8:  $\langle \ln T_N \rangle$  en función de la energía  $E$  de la onda incidente. Se considera el caso de una barrera de  $N = 200$  sitios, con fluctuaciones de las energías de sitio de intensidad  $\sigma_1^2 = 0.04$  y con coeficiente de amplificación  $\gamma = -0.1$ .

El término de primer orden en  $\sigma_i$  es

$$\mathbf{Q}^{(1)} = \sum_{n=1}^N [\mathbf{Q}^{(0)}]^{N-n} \mathbf{Q}_n^{(1)} [\mathbf{Q}^{(0)}]^{n-1}, \quad (3.27)$$

mientras que el término de segundo orden es

$$\mathbf{Q}^{(2)} = \sum_{n=1}^N \sum_{l < n} [\mathbf{Q}^{(0)}]^{N-n} \mathbf{Q}_n^{(1)} [\mathbf{Q}^{(0)}]^{n-l} \mathbf{Q}_l^{(1)} [\mathbf{Q}^{(0)}]^{l-1}. \quad (3.28)$$

Para poder calcular los términos del desarrollo (3.25) es necesario determinar todas las potencias de la matriz (3.14). La manera más conveniente consiste en diagonalizar esta matriz, que puede escribirse en la forma

$$\mathbf{Q}^{(0)} = \mathbf{V} \begin{pmatrix} e^{iq} & 0 \\ 0 & e^{-iq} \end{pmatrix} \mathbf{V}^{-1} \quad (3.29)$$

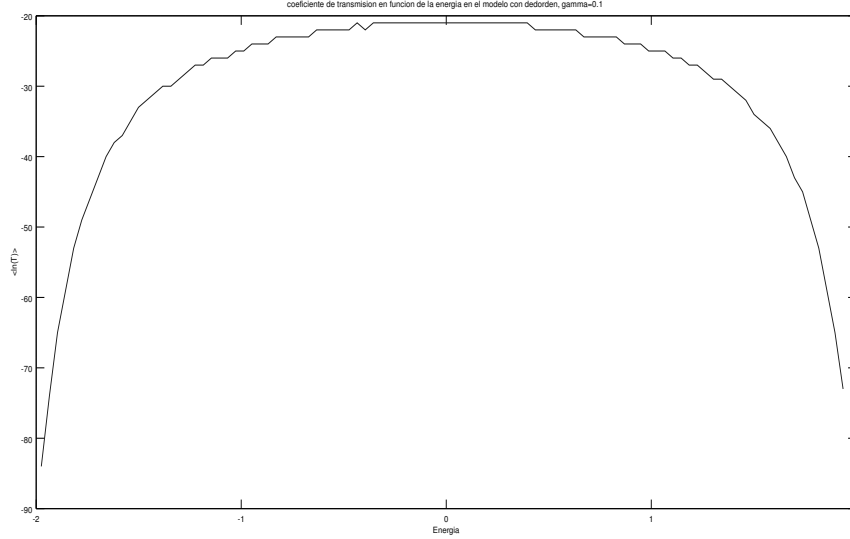


Figura 3.9:  $\langle \ln T_N \rangle$  en función de la energía  $E$  de la onda incidente. Se considera el caso de una barrera de  $N = 200$  sitios, con fluctuaciones de las energías de sitio de intensidad  $\sigma_1^2 = 0.04$  y con coeficiente de absorción  $\gamma = 0.1$ .

donde

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} \frac{\frac{\gamma}{2 \sin(k)} e^{-ik}}{\left(1 - \frac{\gamma}{2 \sin(k)}\right) e^{ik} - e^{iq}} & \frac{\frac{\gamma}{2 \sin(k)} e^{-ik}}{\left(1 - \frac{\gamma}{2 \sin(k)}\right) e^{ik} - e^{-iq}} \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

mientras que los autovalores de  $\mathbf{Q}^{(0)}$  resultan ser

$$e^{\pm iq} = \cos(k) - i \frac{\gamma}{2} \pm i \sqrt{1 - \left(\cos(k) - i \frac{\gamma}{2}\right)^2}. \quad (3.30)$$

Una vez que se dispone de la descomposición (3.29) de la matriz (3.14), es posible escribir las potencias de  $\mathbf{Q}_0^n$  en la forma sencilla

$$[\mathbf{Q}^{(0)}]^n = \mathbf{V} \begin{pmatrix} e^{iqn} & 0 \\ 0 & e^{-iqn} \end{pmatrix} \mathbf{V}^{-1}. \quad (3.31)$$

Sustituyendo la identidad (3.31) en los términos del desarrollo (3.25), es posible obtener representaciones explícitas de los elementos de la ma-



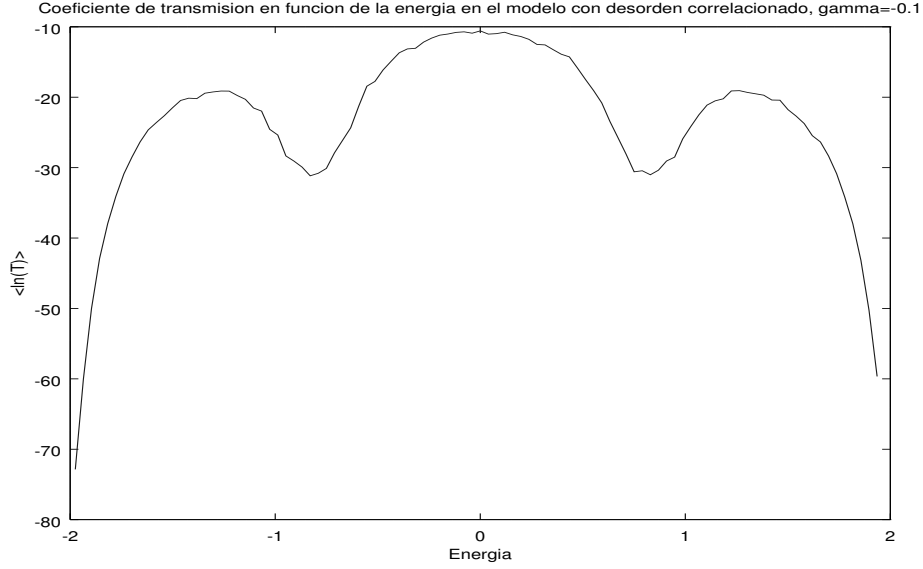


Figura 3.10:  $\langle \ln T_N \rangle$  en función de la energía  $E$  de la onda incidente. Se considera el caso de una barrera de  $N = 200$  sitios, con fluctuaciones de las energías de sitio de intensidad  $\sigma_1^2 = 0.04$  y con coeficiente de amplificación  $\gamma = -0.1$ . Las correlaciones del desorden crean ventanas de localización en los intervalos  $[-0.9, -0.7]$  y  $[0.7, 0.9]$ .

triz (3.15). Los elementos del término de orden cero (3.26) son

$$\begin{aligned}
 \left[ \mathbf{Q}^{(0)} \right]_{11} &= \frac{2i \sin(k) \sin(q(N+1)) - 2(1 - \cos(q)e^{-ik}) \sin(qN)}{2i \sin(k) \sin(q)} \\
 \left[ \mathbf{Q}^{(0)} \right]_{12} &= -\frac{\gamma e^{-ik} \sin(qN)}{2 \sin(k) \sin(q)} \\
 \left[ \mathbf{Q}^{(0)} \right]_{21} &= \frac{\gamma e^{ik} \sin(qN)}{2 \sin(k) \sin(q)} \\
 \left[ \mathbf{Q}^{(0)} \right]_{22} &= \frac{-2i \sin(k) \sin q(N-1) + 2(1 - \cos(q)e^{-ik}) \sin(qN)}{2i \sin(k) \sin(q)}.
 \end{aligned} \tag{3.32}$$

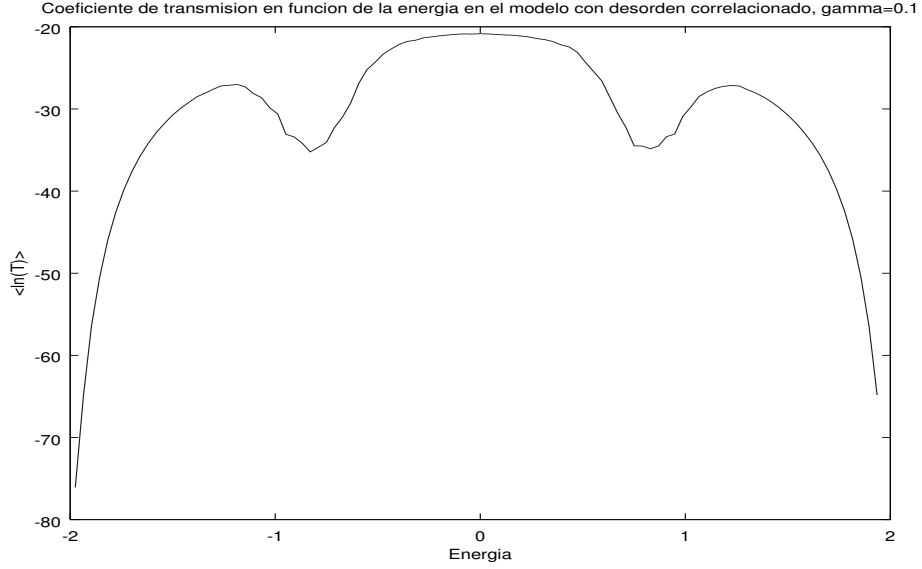


Figura 3.11:  $\langle \ln T_N \rangle$  en función de la energía  $E$  de la onda incidente. Se considera el caso de una barrera de  $N = 200$  sitios, con fluctuaciones de las energías de sitio de intensidad  $\sigma_1^2 = 0.04$  y con coeficiente de absorción  $\gamma = 0.1$ . Las correlaciones del desorden crean ventanas de localización en los intervalos  $[-0.9, -0.7]$  y  $[0.7, 0.9]$ .

Los elementos de matriz del término del primer orden (3.27) son

$$\begin{aligned}
\left[ \mathbf{Q}^{(1)} \right]_{11} &= \frac{ie^{ik}}{2 \sin(k) \sin^2(q)} \sum_{n=1}^N \eta_n [\sin(q(N-n+1)) - e^{-ik} \sin(q(N-n))] \\
&\times [\sin(qn) - \sin(q(n-1))e^{-ik}] \\
\left[ \mathbf{Q}^{(1)} \right]_{12} &= \frac{ie^{-ik}}{2 \sin(k) \sin^2(q)} \sum_{n=1}^N \eta_n [\sin(q(N-n+1)) - e^{ik} \sin(q(N-n))] \\
&\times [\sin(qn) - \sin(q(n-1))e^{-ik}] \\
\left[ \mathbf{Q}^{(1)} \right]_{21} &= \frac{e^{ik}}{2 \sin(k) \sin^2(q)} \sum_{n=1}^N \eta_n [\sin(q(N-n+1)) - e^{ik} \sin(q(N-n))] \\
&\times [\sin(qn) - \sin(q(n-1))e^{-ik}] \\
\left[ \mathbf{Q}^{(1)} \right]_{22} &= \frac{e^{-ik}}{2 \sin(k) \sin^2(q)} \sum_{n=1}^N \eta_n [\sin(q(N-n+1)) - e^{ik} \sin(q(N-n))] \\
&\times [\sin(qn) - e^{ik} \sin(q(n-1))] .
\end{aligned} \tag{3.33}$$

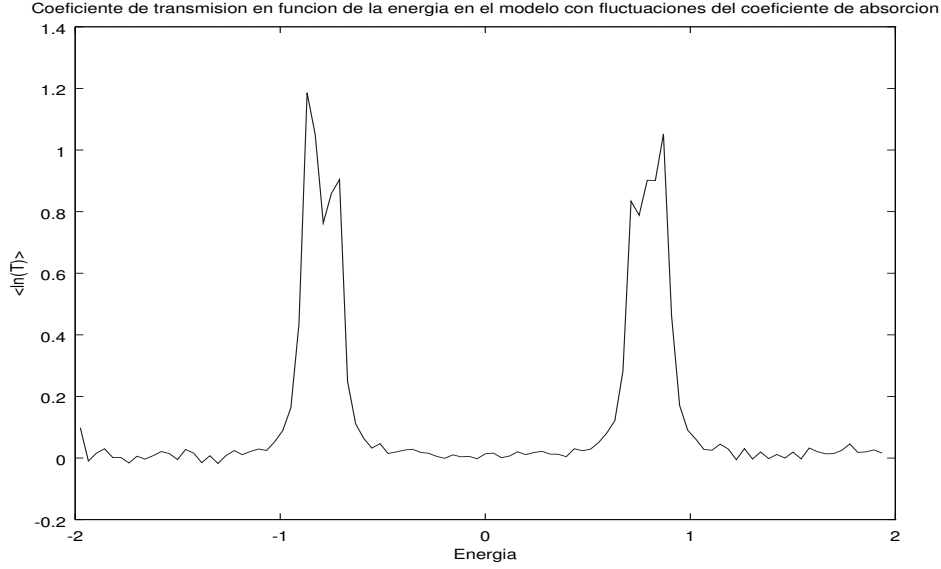


Figura 3.12:  $\langle \ln T_N \rangle$  en función de la energía  $E$  de la onda incidente. Se considera el caso de una barrera de  $N = 200$  sitios, con coeficiente de amplificación/absorción aleatorio con  $\gamma = 0$  y  $\langle \gamma_n^2 \rangle = 0.01$ . Las correlaciones de las variables  $\{\gamma_n\}$  crean ventanas de transmisión en los intervalos  $[-0.9, -0.7]$  y  $[0.7, 0.9]$ . Las energías de sitio son nulas  $\epsilon_n = 0$ .

En cuanto al término de segundo orden (3.28), sus elementos de matriz son

$$\begin{aligned}
 \left[ \mathcal{Q}^{(2)} \right]_{11} &= \frac{e^{ik}}{2i \sin(k) \sin^3(q)} \sum_{n=1}^N \sum_{l < n} \eta_n \eta_l \sin(q(n-l)) \\
 &\times [\sin(q(N-n+1)) - e^{-ik} \sin(q(N-n))] [\sin(ql) - e^{-ik} \sin(q(l-1))] \\
 \left[ \mathcal{Q}^{(2)} \right]_{12} &= \frac{e^{-ik}}{2i \sin(k) \sin^3(q)} \sum_{n=1}^N \sum_{l < n} \eta_n \eta_l \sin(q(n-l)) \\
 &\times [\sin(q(N-n+1)) - e^{-ik} \sin(q(N-n))] [\sin(ql) - e^{ik} \sin(q(l-1))] \\
 \left[ \mathcal{Q}^{(2)} \right]_{21} &= \frac{ie^{ik}}{2 \sin(k) \sin^3(q)} \sum_{n=1}^N \sum_{l < n} \eta_n \eta_l \sin(q(n-l)) \\
 &\times [\sin(q(N-n+1)) - e^{ik} \sin(q(N-n))] [\sin(ql) - e^{-ik} \sin(q(l-1))] \\
 \left[ \mathcal{Q}^{(2)} \right]_{22} &= \frac{ie^{-ik}}{2 \sin(k) \sin^3(q)} \sum_{n=1}^N \sum_{l < n} \eta_n \eta_l \sin(q(n-l)) \\
 &\times [\sin(q(N-n+1)) - e^{ik} \sin(q(N-n))] [\sin(ql) - e^{ik} \sin(q(l-1))] .
 \end{aligned} \tag{3.34}$$

Las fórmulas anteriores muestran que es posible un cálculo analítico de la matriz de transferencia total (3.15) y, por ende, de los coeficientes de transmisión (3.21) y de reflexión (3.22). Sin embargo, las expresiones (3.32), (3.33) y (3.34) resultan ser de limitada utilidad práctica, porque contienen una dependencia implícita del vector de onda  $k$  de la onda incidente a través de la magnitud compleja  $q$  definida por la ecuación (3.30). Para poder extraer información física de los términos (3.32), (3.33) y (3.34), es entonces necesario obtener  $q$  como función explícita de  $k$  y  $\gamma$  y sustituir el resultado en las expresiones (3.32), (3.33) y (3.34). Se trata de un trabajo que queda todavía por hacerse.

# CONCLUSIONES

Las propiedades de transporte en medios aleatorios activos constituyen el tema de esta tesis. Se ha enfocado el análisis en un modelo de barrera 1D con amplificación/absorción y desorden compositivo. Se ha considerado desorden con el tipo de correlaciones espaciales que, en modelos hermiticos 1D, producen bordes de movilidad efectivos.

Un objetivo de la tesis consistía en aclarar si este tipo de efectos podía darse también en modelos no-hermíticos. Los resultados numéricos muestran que es efectivamente posible servirse de las correlaciones del desorden para crear ventanas de energía con buena transmitividad separadas por regiones opacas.

Una comprensión total de las propiedades de transporte requiere que se complementen los resultados numéricos con una expresión analítica del coeficiente de transmisión. En esta tesis se ha dado un primer paso en esta dirección, obteniendo fórmulas preliminares para los elementos de la matriz de transferencia (3.15). Estas expresiones, sin embargo, requieren una elaboración ulterior, pues contienen una dependencia implícita de la energía de la onda incidente que vuelve difícil extraer información física de ellas.

Los resultados obtenidos en esta tesis permiten concluir que sería importante llevar a conclusión el trabajo analítico empezado, para poder llegar a una comprensión más completa de las propiedades de transporte en medios aleatorios activos.

# Bibliografía

- [1] N. W. Ashcroft, N. Mermin, “*Solid State Physics*”, Holt, Rinehart and Winston, New York (1976)
- [2] M. Hamermesh, “*Group Theory and its Application to Physical Problems*”, Addison Wesley, Reading (1962)
- [3] R. de L. Kronig, W. G. Penney, *Proc. Roy. Soc. (Series A)* **130**, 499 (1931)
- [4] G. Grosso, G. Pastori Parravicini, “*Solid State Physics*”, Academic Press, Amsterdam (2003)
- [5] J. C. Flores, *J. Phys. Condens. Matter* **1**, 8471 (1989)
- [6] A. Bovier, *J. Phys. A* **25**, 1021 (1992)
- [7] J.M. Luck, *Phys Rev B* **39** 5834 (1989)
- [8] F. M. Izrailev, A. A. Krokhin, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 4063 (1999)
- [9] P.W. Anderson, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958)
- [10] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, T. V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.* **42**, p. 673 (1979)
- [11] K. Ishii, *Suppl. Progr. Theor. Phys.*, **53**, 77 (1973)
- [12] B. Kramer, A. MacKinnon, *Rep. Prog. Phys.* **56**, 1469 (1993)
- [13] F. J. Wegner, *Z. Phys B* **36**, 209 (1980)
- [14] N.F. Mott, *Adv. in Phys.* **16** 49 (1967)

- [15] H. Furstenberg, H. Kesten, *Ann. Math. Stat. JI* 457 (1960)
- [16] R. E. Borland *Proc. R. Soc. London A* **274**, 529 (1960)
- [17] D. J. Thouless, en *Ill-condensed Matter*, editores: R. Balian, R. Maynard, G. Toulouse, pág. 1, North Holland Amsterdam, (1979)
- [18] A. Crisanti, G. Paladin, A. Vulpiani, *Products of Random Matrices in Statistical Physics*, Springer-Verlag, Berlin (1993)
- [19] D. C. Herbert, R. Jones, *J. Phys. C: Solid St. Phys.*, **4**, 1145, (1971); D. J. Thouless, *J. Phys. C*, **5**, 77 (1972)
- [20] T. Kottos, G. P. Tsironis, F. M. Izrailev, *J. Phys.: Condens. Matter* **9**, p. 1777 (1997); F. M. Izrailev, S. Ruffo, L. Tessieri, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **31**, 5263 (1998)
- [21] F. M. Izrailev, A. A. Krokhin, N. M. Makharov, *Phys. Rep.* **512**, 125 (2012)
- [22] L. Tessieri, *J. Phys. A: Math. Gen.* **35** 9585 (2002); E. Gurevich, O. Kenneth, *Phys. Rev. A* **79** 063617 (2009)