



Universidad Michoacana de
San Nicolás de Hidalgo



Instituto de física y matemáticas

LOCALIZACIÓN Y TRANSPORTE EN MEDIOS
ALEATORIOS EN UNA Y DOS DIMENSIONES

T E S I S

para obtener el título de:

Maestro en Ciencias en el Área de Física

P r e s e n t a :

Gabino Corona Patricio

Asesor:

Dr. en Física Luca Tessieri

Morelia Michoacán, Febrero de 2017

Índice general

1. Sistemas cristalinos	1
1.1. Red de Bravais	1
1.2. Estructuras cristalinas	5
1.3. Ejemplos de estructuras cristalinas	5
1.4. Red recíproca	7
1.5. Potencial cristalino	8
1.6. Operador de traslación y las condiciones de frontera de Born-von Karman	9
1.7. Teorema de Bloch	10
1.8. Modelo de Kronig-Penney	12
2. Sistemas desordenados: localización	15
2.1. Tipos de desorden	15
2.2. Modelos unidimensionales	18
2.3. Localización	20
2.4. Dimensionalidad espacial y localización	22
2.5. Matrices de transferencia	24
3. Modelo de Anderson unidimensional	27
3.1. Modelo de Anderson “sin desorden”	27
3.2. Matrices de transferencia y localización : Teoremas de Furstenberg y Oseledec	29
3.3. Relación de Herbert-Jones-Thouless	31
3.4. Modelo de Anderson con desorden débil y fuerte	32
3.5. Desorden débil con correlación: método del mapa hamiltoniano	33
4. Modelo bidimensional	41
4.1. Matriz de transferencia para el modelo bidimensional	41
4.2. Coeficiente de transmisión para el modelo	49
4.3. Ecuación de Helmholtz	52
4.4. Conclusiones	52

ÍNDICE GENERAL

5. Conclusiones **55**

Resumen

En los sistemas cristalinos se tienen estados extendidos y energías que se agrupan en forma de bandas. Los sistemas cristalinos (sistemas ordenados) son una idealización y no existen en la naturaleza; por esta razón, es necesario estudiar los sistemas desordenados. El fenómeno conocido como localización de Anderson ocurre en algunos sistemas desordenados; la localización se manifiesta a través de un decaimiento exponencial de la función de onda a partir del centro de localización. De acuerdo a la teoría del único parámetro de escala (propuesta por Abrahams, Anderson y Ramakrishnan) los estados electrónicos siempre se localizan en muestras aleatorias en una y dos dimensiones, sin importar la intensidad del desorden; mientras que en modelos en tres dimensiones, cuando la intensidad del desorden se aproxima a un valor crítico, los estados localizados y extendidos pueden coexistir (ver [16]), estos ocupan regiones distintas del espectro de energías, separadas por bordes de movilidad. En modelos 1D, todos los estados electrónicos se localizan; sin embargo, cuando el desorden presenta correlaciones de largo alcance, se pueden producir bordes de movilidad efectivos [23]. En esta tesis, analizamos las propiedades de transmisión de una barrera aleatoria en 2D, formada por una sucesión de N barreras circulares separadas por pozos en los que el potencial es nulo. El desorden se introduce en el modelo dando valores aleatorios a las alturas de las barreras. Usamos el método de matrices de transferencia para obtener una expresión formal para el coeficiente de transmisión y discutimos como este resultado puede usarse para un análisis numérico de las propiedades del modelo.

Palabras clave

Sistemas desordenados, localización de Anderson, matriz de transferencia.

ÍNDICE GENERAL

Abstract

In crystal systems the electronic eigenstates are extended and the eigenenergies gather into bands. Crystal systems (ordered systems) are an idealisation and do not exist in nature; for this reason it is necessary to study disordered systems. The phenomenon known as Anderson localisation takes place in some disordered systems; the localisation manifests itself through the exponential decay of the wavefunction away from a localisation centre. The dimensionality of the disordered models plays a relevant role in the Anderson localisation. According to the single parameter scaling theory (proposed by Abrahams, Anderson and Ramakrishnan), electronic states are always localised in one- and two-dimensional random samples, regardless of the strength of disorder, while in three-dimensional models, when the disorder strength lies below the threshold value, both localised and extended states exist (see [16]); they occupy different regions of the energy spectrum, separated by mobility edges. In 1D models all the electronic states are localised; however, when disorder presents specific long-range correlations, effective mobility edges can be produced [23]. In this thesis we analyse the transmission properties of a 2D random barrier, formed by a sequence of N circular barrier separated by zero-potential wells. Disorder is introduced in the model via the random heights of the barriers. We use the transfer matrix approach to obtain a formal expression for the transmission coefficient and discuss how this result can be used for a numerical analysis of the properties of the model.

Keywords

Disordered systems, Anderson localization, transfer matrix.

ÍNDICE GENERAL

Agradecimientos

Quiero expresar mi agradecimiento a mi asesor Luca Tessieri Bernardini por todo el apoyo que me brindó para realizar este trabajo; por sus observaciones, sus sugerencias y correcciones. A Olivier Charles-Albert Sarbach por su revisión detallada y sus observaciones. A Francisco Manuel Plascencia Suárez por su ayuda para la elaboración de imágenes.

También quiero agradecer a los maestros que me han motivado académica y emocionalmente

Luca Tessieri

Jesús Iván Mejía Navarro

Marta Patricia Silva Renteria Joaquín Estevez Delgado

José Manuel Fernández Gallardo

Petronila Patricio Cruz

sin su apoyo, nada hubiera sido posible.

ÍNDICE GENERAL

Introducción

En 1958, Anderson llegó a la conclusión de que, si en una muestra aleatoria la intensidad del desorden es suficientemente fuerte, los estados se localizan [8]. Se ha demostrado rigurosamente, por medio del método de matrices de transferencia, que en los sistemas unidimensionales los estados siempre se localizan, no importa que tan pequeña sea la intensidad del desorden [12].

Abrahams, Anderson, Licciardello y Ramakrishnan formularon la teoría del único parámetro de escala; la cual predice que en muestras aleatorias en una y dos dimensiones siempre se manifestará el fenómeno de localización por muy pequeña que sea la intensidad del desorden, mientras que en muestras en tres dimensiones hay una transición de localización-delocalización [16].

A pesar de que la teoría del único parámetro de escala predice que en una dimensión los estados se localizan en presencia de desorden, se ha demostrado que se pueden obtener bordes de movilidad efectivos cuando el desorden presenta correlaciones [23].

El descubrimiento de que es posible producir bordes de movilidad efectivos en modelos unidimensionales ha reavivado el interés por esta clase de sistemas y ha llevado a los investigadores que trabajan en esta área a preguntarse si efectos análogos se pueden producir en modelos bidimensionales. En esta tesis, después de analizar las propiedades ya conocidas de los modelos 1D, presentamos un modelo bidimensional cuyo estudio podría ayudar a comprender mejor las propiedades de los modelos 2D. El modelo está constituido por una sucesión de barreras circulares, separadas por pozos de potencial nulo. Se introduce desorden en el modelo considerando barreras de altura aleatoria. Debido a la simetría circular del modelo, éste se puede reducir a un modelo de dimensión efectiva igual a uno. Por esta razón se espera que, si el desorden presenta específicas correlaciones de largo alcance, el modelo presente una transición de localización-delocalización. Esto debería reflejarse en las propiedades de transmisión de la barrera. En esta tesis se ha empezado el análisis del modelo; más específicamente, hemos derivado una expresión analítica para el coeficiente de transmisión a través de la barrera. La expresión obtenida tiene un carácter formal, pero puede usarse para el estudio numérico de las propiedades de transporte, que representa el próximo paso en el estudio del modelo y que todavía no se ha llevado a cabo.

Esta tesis se divide en cinco capítulos. En el primer capítulo estudiamos las propieda-

ÍNDICE GENERAL

des de los sistemas cristalinos; en el segundo los sistemas desordenados y exponemos algunos modelos; en el tercero nos enfocamos en el modelo de Anderson en una dimensión; en el cuarto exponemos el modelo propuesto y la deducción de la fórmula clave para el cálculo del coeficiente de transmisión y en el último las conclusiones.

Sistemas cristalinos

Se dice que un sistema es cristalino si sus unidades repiten patrones regulares en todo el espacio. Las unidades que componen al cristal pueden ser átomos, iones, moléculas, un grupo de átomos, etc. En este capítulo sólo daremos una descripción de los cristales desde el punto de vista geométrico.

1.1. Red de Bravais

Una *red de Bravais* es un arreglo infinito discreto de puntos con forma y orientación que aparece exactamente igual, desde cualquier punto en el que se mire. Una red de Bravais también se puede definir como el conjunto de todos los puntos con vectores posición \mathbf{R} de la forma

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

donde \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 y \mathbf{a}_3 son tres vectores no coplanares; n_1 , n_2 y n_3 son números enteros. Los vectores \mathbf{a}_i se llaman *vectores primitivos* o *vectores fundamentales de traslación* y se dice que generan a la red. De la definición de red de Bravais, podemos notar que la elección de vectores primitivos no es única; esto significa que podemos describir la misma red de Bravais con diferentes (un número infinito de) conjuntos de vectores primitivos (Ver Fig. 1.1).

Al paralelepípedo formado por los vectores \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 y \mathbf{a}_3 usualmente se le llama *celda primitiva* y su volumen es $\Omega = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$. Un volumen es una celda primitiva si al trasladarse a lo largo de todos los vectores en una red de Bravais, llena todo el espacio sin dejar huecos y sin traslaparse. Debido a que no hay un único conjunto de vectores primitivos, tampoco hay una forma única de escoger una celda primitiva para una red de Bravais dada, ver Fig. 1.2. Ésto puede verse si en vez de los vectores primitivos \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 y \mathbf{a}_3 consideramos la terna de vectores $\tilde{\mathbf{a}}_1$, $\tilde{\mathbf{a}}_2$ y $\tilde{\mathbf{a}}_3$ generada por la transformación

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{a}}_1 &= m_{11}\mathbf{a}_1 + m_{12}\mathbf{a}_2 + m_{13}\mathbf{a}_3 \\ \tilde{\mathbf{a}}_2 &= m_{21}\mathbf{a}_1 + m_{22}\mathbf{a}_2 + m_{23}\mathbf{a}_3 \\ \tilde{\mathbf{a}}_3 &= m_{31}\mathbf{a}_1 + m_{32}\mathbf{a}_2 + m_{33}\mathbf{a}_3 \end{aligned} \quad (1.2)$$

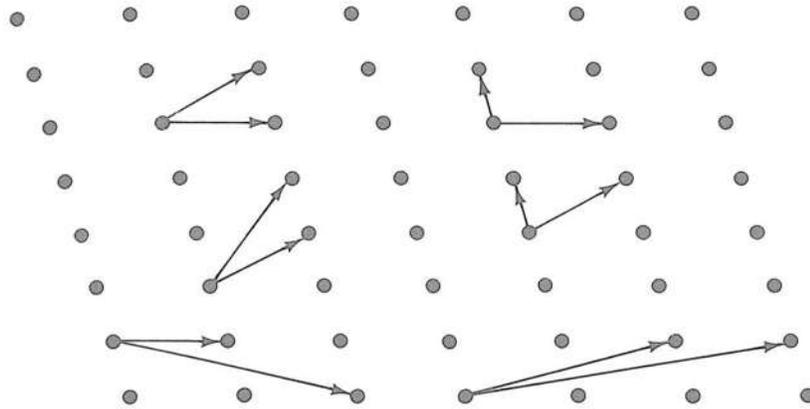


Figura 1.1: Ejemplo de red Bravais bidimensional: posibles conjuntos de vectores primitivos. Figura tomada de Ref. [2].

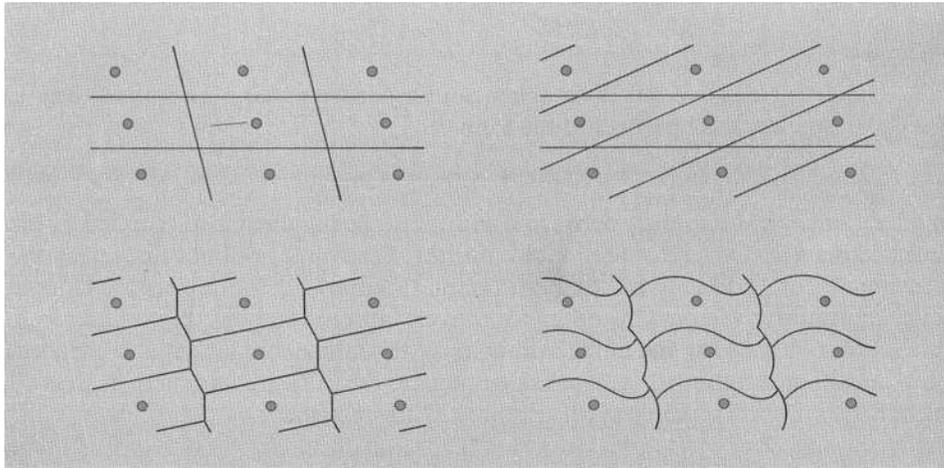


Figura 1.2: Posibles celdas primitivas para un ejemplo de red bidimensional. Figura tomada de Ref. [2].

donde m_{ij} (con $i, j = 1, 2, 3$) son números enteros y elementos de la matriz de transformación M con determinante 1. Si la matriz M tiene elementos enteros y su determinante es 1, entonces los elementos de su matriz inversa M^{-1} también son enteros. Al calcular la matriz inversa, lo que hacemos es construir la matriz de cofactores, hallar la matriz transpuesta de esta última y, finalmente, dividir por el determinante de la matriz M ; al construir la matriz de cofactores y calcular su transpuesta sólo multiplicamos y sumamos enteros y por tanto el resultado que tenemos es un entero y al dividir por el determinante de M , éste no es afectado puesto que $\det M = 1$: así, la inversión de la transformación (1.1) muestra que el conjunto de puntos generado por \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 y \mathbf{a}_3 coincide con el conjunto de puntos $\{\tilde{\mathbf{a}}_n\}$ generado por $\tilde{\mathbf{a}}_1$, $\tilde{\mathbf{a}}_2$ y $\tilde{\mathbf{a}}_3$. Además, los volúmenes $\tilde{\Omega} = \tilde{\mathbf{a}}_1 \cdot (\tilde{\mathbf{a}}_2 \times \tilde{\mathbf{a}}_3)$ y $\Omega = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$ son iguales, ésto debido a que

$\det M = 1$; por lo tanto, el volumen de una celda primitiva no depende de la elección de los vectores primitivos.

El número de distintas redes de Bravais está determinado por las simetrías. En dos dimensiones las diferentes redes de Bravais son cinco: oblicua, rectangular (primitiva y centrada), cuadrada y hexagonal. En tres dimensiones, las posibles simetrías dan origen a catorce redes de Bravais agrupadas en siete sistemas cristalinos: triclinico, monocíclico, ortorrómbico (primitivo, centrado en el cuerpo, centrado en las caras), romboédrico, tetragonal (primitivo o centrado en las bases), hexagonal, cúbico (primitivo, centrado en el cuerpo, centrado en las caras); esta clasificación se basa en la igualdad o desigualdad de las aristas a , b y c del paralelepípedo y los ángulos α , β y γ formado por cada par de aristas, así como los puntos adicionales de la red en el centro de las caras o en el centro de la celda. En la Fig. 1.3 se muestran las 14 redes de Bravais.

CAPÍTULO 1. SISTEMAS CRISTALINOS

Sistema cristalino	Redes de Bravais			
	Primitivo	Centrado en las bases	Centrado en el cuerpo	Centrado en las caras
Triclínico $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$				
Monoclínico $a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = \frac{\pi}{2} \neq \beta$				
Ortorómbico $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$				
Romboédrico $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq \frac{\pi}{2}$				
Tetragonal $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$				
Hexagonal $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \frac{\pi}{2}$ $\gamma = \frac{2\pi}{3}$				
Cúbico $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$				

Figura 1.3: Clasificación de las catorce redes de Bravais dentro de los siete sistemas cristalinos. Figura modificada de [1].

CAPÍTULO 1. SISTEMAS CRISTALINOS

el Xenón. Hay muchos elementos monoatómicos con estructura cúbica centrada en las caras, algunos de ellos son: Plata, Aluminio, Oro, Cobre, Paladio, Platino y otros [1]. La estructura cristalina de los metales alcalinos se obtiene repitiendo periódicamente un cubo centrado en el cuerpo, es decir, una celda cúbica convencional con átomos en las esquinas y en los centros de un cubo de arista a . Los vectores primitivos de la red de Bravais son

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(-1, 1, 1) \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(1, -1, 1) \quad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(1, 1, -1).$$

El volumen de esta celda primitiva es $a^3/2$. Las constantes de red para los metales alcalinos son: $a = 3.49\text{Å}$ para el Litio; $a = 4.23\text{Å}$ para el Sodio; $a = 5.23\text{Å}$ para el Potasio; 5.59Å para el Rubidio; $a = 6.05\text{Å}$ para el Cesio. Algunos otros elementos que cristalizan en estructura monoatómica cúbica centrada en el cuerpo son el Cromo con $a = 2.88\text{Å}$, Molibdeno con $a = 3.15\text{Å}$, Wolframio con $a = 3.16\text{Å}$, Hierro con $a = 2.87\text{Å}$ y Bario con $a = 5.03\text{Å}$.

Como ejemplo de cristales compuestos tenemos el cloruro de sodio. Su estructura cristalina se puede describir por medio de una red fcc desplazada por $(a/2)(1, 1, 1)$ a lo largo de la diagonal de la celda cúbica convencional; una de las dos subredes fcc está compuestas por cationes Na^+ (vector posición $\mathbf{0}$) y la otra por aniones Cl^- (vector posición $(a/2)(1, 1, 1)$), con $a = 5.63\text{Å}$, ver Fig. 1.4. Los vectores primitivos y vectores de la base del NaCl son

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= \frac{a}{2}(0, 1, 1) & \mathbf{a}_2 &= \frac{a}{2}(1, 0, 1) & \mathbf{a}_3 &= \frac{a}{2}(1, 1, 0). \\ \mathbf{d}_1 &= \mathbf{0} & \mathbf{d}_2 &= \frac{a}{2}(1, 1, 1) \end{aligned} \tag{1.4}$$

En la estructura del cloruro de sodio, cada anión en una subred dada tiene seis cationes

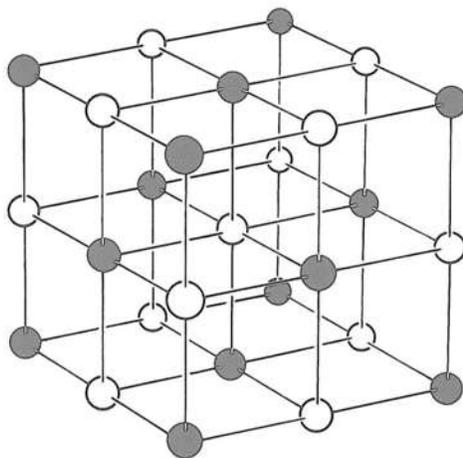


Figura 1.4: Estructura del NaCl [2].

vecinos (pertenecientes a otras subredes) a una distancia de $a/2$ y doce aniones a una distancia de $a/\sqrt{2}$) etc. Otros cristales compuestos con el mismo arreglo que el NaCl son: fluoruro de litio con $a = 4.02\text{\AA}$, $a = 5.77\text{\AA}$ para el bromuro de plata; telurio de bario con $a = 6.99\text{\AA}$; seleniuro de estaño con $a = 6.02\text{\AA}$ y el nitrato de zirconio con $a = 4.61\text{\AA}$ [2].

1.4. Red recíproca

Consideremos un conjunto de puntos \mathbf{R} que constituyen una red de Bravais y una onda plana $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$. Para un vector \mathbf{k} general, la onda plana $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ no tendrá la misma periodicidad de la red de Bravais; sin embargo, lo tendrá para ciertos vectores de onda específicos. Al conjunto de todos esos vectores de onda \mathbf{K} que dan origen a ondas planas con la misma periodicidad que la de la red de Bravais se conoce como su *red recíproca*. La condición para que un vector \mathbf{K} pertenezca a la red recíproca de una red de Bravais con puntos \mathbf{R} es que

$$e^{i\mathbf{K}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R})} = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}$$

para todo \mathbf{r} y para todos los puntos \mathbf{R} de la red. Factorizando $e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}$ y dividiendo, podemos redefinir a la red recíproca como el conjunto de todos los vectores \mathbf{K} que satisfacen

$$e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} = 1 \tag{1.5}$$

para todo \mathbf{R} de la red de Bravais. Es importante mencionar que no porque un conjunto de vectores satisfaga (1.5) ya será una red recíproca, la red recíproca proviene forzosamente de una red de Bravais.

La red recíproca de una red de Bravais es, a su vez, también una red de Bravais. Si dos vectores \mathbf{K}_1 y \mathbf{K}_2 satisfacen (1.5) entonces $\mathbf{K}_1 + \mathbf{K}_2$ también satisface (1.5) y por tanto su diferencia también la satisface. Sean \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 y \mathbf{a}_3 vectores primitivos de la red de Bravais directa, entonces los vectores primitivos de la red recíproca están dados por

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \\ \mathbf{b}_2 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \\ \mathbf{b}_3 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}. \end{aligned} \tag{1.6}$$

Podemos verificar que (1.6) son vectores primitivos de la red recíproca y de una red de Bravais si notamos que $\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$, donde δ_{ij} es la delta de Kronecker. Todo vector \mathbf{k} se puede escribir como combinación lineal de los vectores \mathbf{b}_i

$$\mathbf{k} = k_1\mathbf{b}_1 + k_2\mathbf{b}_2 + k_3\mathbf{b}_3.$$

CAPÍTULO 1. SISTEMAS CRISTALINOS

Sea \mathbf{R} cualquier punto de la red directa con vector de posición

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3, \quad (1.7)$$

donde n_i son números enteros. Usando $\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$ tenemos que

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{R} = 2\pi(k_1n_1 + k_2n_2 + k_3n_3).$$

Para que $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$ sea uno para todo \mathbf{R} , $\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}$ debe ser 2π veces un número entero, es decir, el producto $k_1n_1 + k_2n_2 + k_3n_3$ debe ser un entero; esto implica que k_1 , k_2 y k_3 deben ser enteros para que \mathbf{K} sea red recíproca. Dado que k_i son enteros, los puntos con vector posición

$$\mathbf{k} = k_1\mathbf{b}_1 + k_2\mathbf{b}_2 + k_3\mathbf{b}_3. \quad (1.8)$$

constituyen una red de Bravais tomando a \mathbf{b}_1 , \mathbf{b}_2 y \mathbf{b}_3 como vectores primitivos.

Por ejemplo, consideremos la red cúbica simple con arista a , sus vectores primitivos son

$$\mathbf{a}_1 = a\hat{\mathbf{x}} \quad \mathbf{a}_2 = a\hat{\mathbf{y}} \quad \mathbf{a}_3 = a\hat{\mathbf{z}}$$

y los vectores primitivos de la red recíproca son

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= 2\pi \frac{a^2\hat{\mathbf{y}} \times \hat{\mathbf{z}}}{a^3\hat{\mathbf{x}} \cdot (\hat{\mathbf{y}} \times \hat{\mathbf{z}})} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)\hat{\mathbf{x}} \\ \mathbf{b}_2 &= 2\pi \frac{a^2\hat{\mathbf{z}} \times \hat{\mathbf{x}}}{a^3\hat{\mathbf{y}} \cdot (\hat{\mathbf{z}} \times \hat{\mathbf{x}})} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)\hat{\mathbf{y}} \\ \mathbf{b}_3 &= 2\pi \frac{a^2\hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{y}}}{a^3\hat{\mathbf{z}} \cdot (\hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{y}})} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)\hat{\mathbf{z}} \end{aligned} \quad (1.9)$$

esta red cúbica tiene como red recíproca una red cúbica simple, cuya celda cúbica primitiva tiene arista $2\pi/a$.

Si hacemos lo mismo para la *red cúbica centrada en el cuerpo* tomando como celda primitiva convencional un cubo de arista a , su red recíproca será una *red cúbica centrada en las caras* y su celda primitiva convencional es también un cubo pero de arista $4\pi/a$. Para una red de Bravais cúbica centrada en las caras con un cubo de arista a como celda primitiva convencional, su red recíproca es una red cúbica centrada en el cuerpo con un cubo de arista $4\pi/a$ como celda primitiva convencional.

1.5. Potencial cristalino

Para entender por qué algunos materiales son buenos conductores y otros son aislantes debemos tomar el efecto de la red sobre los niveles de energía de los electrones. Si nos enfocamos en un sólo electrón, éste “verá” un potencial efectivo $U(\mathbf{r})$; en éste está incluida tanto la interacción del electrón con todos los átomos del sólido como su interacción con los otros electrones. Descompongamos el potencial

U en dos partes: $U(\mathbf{r}) = U_e(\mathbf{r}) + U_i(\mathbf{r})$, donde $U_e(\mathbf{r})$ está asociado a la interacción electrón-electrón y $U_i(\mathbf{r})$ representa la interacción con los iones fijos de la red. Estudiar a fondo el potencial $U_e(\mathbf{r})$ es muy complicado porque no es periódico y para calcularlo necesitamos conocer los estados de los demás electrones, pero esto es lo que queremos determinar; afortunadamente estas interacciones son débiles y se pueden despreciar [3]. Por otro lado, podemos escribir el potencial iónico como

$$U_i(\mathbf{r}) = \sum_j u_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j),$$

donde $u_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$ representa el potencial asociado a un ión localizado en el punto de la red con vector posición \mathbf{R}_j y la suma es sobre todos los iones, por tanto el potencial $U_i(\mathbf{r})$ hereda la periodicidad de la red.

1.6. Operador de traslación y las condiciones de frontera de Born-von Karman

Consideremos un cristal en una dimensión con espaciamiento de red a , imaginemos que podemos recorrer la red dando N pasos de longitud a , es decir, supongamos que la red está constituida por N puntos; suponiendo que esto no afectará sus propiedades intensivas, podemos imponer condiciones de frontera sobre las funciones de onda ψ de la forma

$$\psi(x) = \psi(x + Na) \tag{1.10}$$

Extendamos esta condición a una red de Bravais con vectores primitivos \mathbf{a}_i ($i = 1, 2, 3$), donde las aristas pueden cubrirse con N_1 pasos en la dirección \mathbf{a}_1 , N_2 en la dirección \mathbf{a}_2 y N_3 en la dirección \mathbf{a}_3 (o sea, en total hay $N = N_1N_2N_3$ celdas). Entonces (1.10) puede generalizarse como

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r} + N_1\mathbf{a}_1) &= \psi(\mathbf{r}) \\ \psi(\mathbf{r} + N_2\mathbf{a}_2) &= \psi(\mathbf{r}) \\ \psi(\mathbf{r} + N_3\mathbf{a}_3) &= \psi(\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{1.11}$$

a estas ecuaciones se les conoce como *condiciones de frontera de Born-von Karman* o condiciones de frontera periódicas.

Para todo vector \mathbf{R} de una red de Bravais, definimos el *operador de traslación* $T_{\mathbf{R}}$ como aquel que cuando opera sobre una función $f(\mathbf{r})$ produce sobre ésta una traslación

$$T_{\mathbf{R}}f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{R}).$$

Veamos las propiedades del operador $T_{\mathbf{R}}$. Si aplicamos dos traslaciones sucesivas $T_{\mathbf{R}}$ y $T_{\mathbf{R}'}$ sobre una función propia o autofunción de $T_{\mathbf{R}}$: $f(\mathbf{r})$, tenemos que

$$T_{\mathbf{R}}T_{\mathbf{R}'}f(\mathbf{r}) = T_{\mathbf{R}}(T_{\mathbf{R}'}f(\mathbf{r})) = T_{\mathbf{R}}(f(\mathbf{r} + \mathbf{R}')) = f(\mathbf{r} + \mathbf{R} + \mathbf{R}') = T_{\mathbf{R} + \mathbf{R}'}f(\mathbf{r}) = T_{\mathbf{R}' + \mathbf{R}}f(\mathbf{r}). \tag{1.12}$$

CAPÍTULO 1. SISTEMAS CRISTALINOS

Sea $\lambda_{\mathbf{R}}$ un valor propio de $T_{\mathbf{R}}$ y $\lambda_{\mathbf{R}'}$ el de $T_{\mathbf{R}'}$; queremos hallar el valor propio del operador $T_{\mathbf{R}+\mathbf{R}'}$, aplicando éste a $f(\mathbf{r})$ vemos que

$$T_{\mathbf{R}+\mathbf{R}'}f(\mathbf{r}) = T_{\mathbf{R}}(T_{\mathbf{R}'}f(\mathbf{r})) = T_{\mathbf{R}}(\lambda_{\mathbf{R}'}f(\mathbf{r})) = \lambda_{\mathbf{R}'}(T_{\mathbf{R}}f(\mathbf{r})) = \lambda_{\mathbf{R}}\lambda_{\mathbf{R}'}f(\mathbf{r}) \quad (1.13)$$

De la propiedad (1.13) es fácil ver que para un número natural n , $T_n f(\mathbf{r}) = \lambda_{\mathbf{R}}^n f(\mathbf{r})$

Ahora calculemos los valores propios o autovalores λ_a del operador de traslación T_a en una dimensión. Sea a el espaciamiento de red y N el número de celdas, si aplicamos T_{Na} sobre una función (propia de T_a) de onda $\psi(x)$ se obtiene

$$T_{Na}\psi(x) = \psi(x + Na) = \lambda_a^N \psi(x).$$

De las condiciones de Born-von Karman tenemos que $\psi(x + Na) = \psi(x)$, entonces $\lambda_a^N = 1$. Los valores propios del operador T_a son

$$\lambda_{a,m} = e^{i2\pi m/N}$$

donde $m = 0, 1, 2, \dots, N - 1$; así, el operador de traslación tiene N valores propios. Podemos extender este resultado a nuestra red de Bravais con vectores primitivos \mathbf{a}_i ($i = 1, 2, 3$) generada por N_1 pasos en la dirección \mathbf{a}_1 , N_2 en la dirección \mathbf{a}_2 y N_3 en la dirección \mathbf{a}_3 . De (1.12) y (1.13) tenemos que, para $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$,

$$\begin{aligned} T_{n_1\mathbf{a}_1+n_2\mathbf{a}_2+n_3\mathbf{a}_3}\psi(\mathbf{r}) &= \lambda_{\mathbf{a}_1}^{n_1} \lambda_{\mathbf{a}_2}^{n_2} \lambda_{\mathbf{a}_3}^{n_3} \psi(\mathbf{r}) \\ &= e^{i2\pi n_1 m_1/N_1} e^{i2\pi n_2 m_2/N_2} e^{i2\pi n_3 m_3/N_3} \psi(\mathbf{r}) \\ &= e^{i(2\pi n_1 m_1/N_1 + 2\pi n_2 m_2/N_2 + 2\pi n_3 m_3/N_3)} \psi(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (1.14)$$

Multiplicando y dividiendo el exponente por a_i tenemos que el exponente de e es

$$i \left(2\pi n_1 a_1 \frac{m_1}{a_1 N_1} + 2\pi n_2 a_2 \frac{m_2}{N_2 a_2} + 2\pi n_3 a_3 \frac{m_3}{N_3 a_3} \right). \quad (1.15)$$

Así, $\lambda_{\mathbf{R}}$ siempre se podrá escribir de la forma

$$\lambda_{\mathbf{R}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \quad (1.16)$$

donde $\mathbf{k} = (m_1/N_1)\mathbf{b}_1 + (m_2/N_2)\mathbf{b}_2 + (m_3/N_3)\mathbf{b}_3$ y los vectores $\{\mathbf{b}_j\}$ ($j=1,2,3$) satisfacen $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$. Al vector \mathbf{k} se le conoce como *vector de onda de Bloch* y como podemos notar, es real. En este caso para un vector de onda de Bloch, se tendrá el mismo número de funciones propias que el de celdas ($N_1 N_2 N_3$).

1.7. Teorema de Bloch

Teorema de Bloch. Consideremos el hamiltoniano que describe a un electrón en un cristal $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r})$, donde $U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r} + \mathbf{R})$; entonces, *las funciones propias $\psi(\mathbf{r})$ de H se pueden expresar de la forma*

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.17)$$

donde $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ es una función con la misma periodicidad de la red ($u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R})$) y \mathbf{k} es un vector de onda de Bloch. Al número n se le conoce como *índice de banda* y su función es especificar la función propia debido a que, dado un vector de onda de Bloch \mathbf{k} , a éste le corresponden varias funciones propias. Hay otro modo de enunciar el teorema de Bloch: *Las funciones propias de H se pueden escoger de modo que a cada función propia $\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ le corresponda un vector de onda \mathbf{k} tal que*

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.18)$$

para todo \mathbf{R} perteneciente a la red de Bravais.

Demostración. Primero, observemos que el hamiltoniano H hereda la periodicidad de la red $H(\mathbf{r}) = H(\mathbf{r} + \mathbf{R})$. Una de las propiedades del operador $T_{\mathbf{R}}$ es que conmuta con el hamiltoniano $H(\mathbf{r})$; si ψ es una función propia de H , entonces $T_{\mathbf{R}}H(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = H(\mathbf{r} + \mathbf{R})\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = H(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = H(\mathbf{r})T_{\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r})$, esto significa que podemos elegir una base en la que ψ es una función propia de $T_{\mathbf{R}}$ entonces también lo es de H [4]. De (1.16) tenemos que

$$T_{\mathbf{R}}\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \lambda_{\mathbf{R}}\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.19)$$

esto demuestra el teorema de Bloch.

No es difícil ver que (1.17) implica (1.18) y viceversa. Hagamos el argumento de $\psi_{n,\mathbf{k}}$ igual a $\mathbf{r} + \mathbf{R}$, luego

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

Para demostrar que (1.18) implica (1.17) multipliquemos (1.18) por $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$, así

$$e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R})}\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.20)$$

La periodicidad de esta expresión nos garantiza que podemos escribir

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} [e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})] = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

si hacemos $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ igual a $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. La información que podemos extraer del teorema de Bloch en la forma (1.17) es la siguiente: *Se puede construir un sistema completo de funciones propias de H dado por ondas planas de amplitud modulada con periodicidad de la red.*

La función propia del hamiltoniano cristalino en la forma $\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ posee las siguientes propiedades:

- Tiene la forma de una onda plana, lo cual implica que el electrón se propaga en el cristal *como si fuera una partícula libre* y el efecto de la función $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ es modular esta onda de modo que su amplitud oscile periódicamente de celda en celda; por lo tanto, podemos decir que *los estados son extendidos*. Dado que el electrón interactúa con la red de Bravais, no es libre: esta interacción queda determinada por la función $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$.
- Los niveles energéticos del electrón se agrupan en bandas [3].

1.8. Modelo de Kronig-Penney

Para obtener una idea del mecanismo que lleva a la formación de bandas permitidas y bandas prohibidas es muy útil analizar el modelo de Kronig-Penney [5]. El modelo de Kronig-Penney consiste en una sucesión de barreras rectangulares de anchura b separadas por una distancia w como se muestra en la Fig. 1.5. La región $-w < x < 0$ (o sea el pozo) está representada por el número romano I, la región $0 < x < b$ (la barrera) por II y la constante de red a por $a = b + w$. La ecuación de Schrödinger

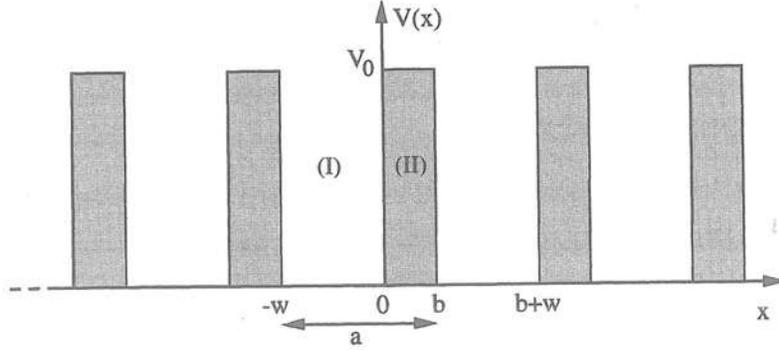


Figura 1.5: Modelo de Kronig-Penney: Potencial formado por una sucesión de barreras rectangulares idénticas y equiespaciadas. Figura tomada de Ref. [1].

estacionaria en una dimensión es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (1.21)$$

La solución general de la ecuación de Schrödinger para $0 < E < V_0$ en la región I tiene la forma

$$\psi_I(x) = Ae^{iqx} + Be^{-iqx} \quad \text{con} \quad q(E) = \sqrt{2mE/\hbar^2}$$

mientras que en la región II

$$\psi_{II}(x) = Ce^{\beta x} + De^{-\beta x} \quad \text{con} \quad \beta(E) = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$$

donde β y q son los vectores de propagación de onda del electrón en la barrera y el pozo respectivamente. Las constantes A , B , C y D quedarán determinadas por las condiciones de frontera:

$$\psi_I(x)|_{x=0} = \psi_{II}(x)|_{x=0} \quad \left(\frac{d\psi_I}{dx} \right) \Big|_{x=0} = \left(\frac{d\psi_{II}}{dx} \right) \Big|_{x=0} \quad (1.22)$$

y

$$\psi_{II}(b) = e^{ika}\psi_I(-w) \quad \left(\frac{d\psi_{II}}{dx} \right) \Big|_{x=b} = e^{ika} \left(\frac{d\psi_I}{dx} \right) \Big|_{x=-w}. \quad (1.23)$$

El par de ecuaciones (1.22) viene de las condiciones de continuidad para la función de onda y su derivada. El par de ecuaciones (1.23) tiene su origen del teorema de Bloch aunado a la condición de continuidad de la derivada de la función de onda siendo k el vector de onda de Bloch (unidimensional). Imponiendo estas condiciones de frontera obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} A + B &= C + D \\ iqA - iqB &= C\beta - D\beta \\ Ce^{\beta b} + De^{-\beta b} &= e^{ika}Ae^{-iqw} + e^{ika}Be^{iqw} \\ C\beta e^{\beta b} - D\beta e^{-\beta b} &= e^{ika}Aie^{-iqw} - e^{ika}Bie^{iqw}. \end{aligned}$$

Se trata de un sistema de ecuaciones lineales homogéneo de cuatro incógnitas. Para que el sistema tenga solución el determinante asociado a éste debe ser nulo

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ iq & -iq & -\beta & \beta \\ -e^{ika-iqw} & -e^{ika+iqw} & e^{\beta b} & e^{-\beta b} \\ -iqe^{ika-iqw} & iqe^{ika+iqw} & \beta e^{\beta b} & -\beta e^{-\beta b} \end{vmatrix} = 0.$$

El cálculo de este determinante nos conduce a la siguiente expresión

$$\frac{\beta^2 - q^2}{2\beta q} \sinh \beta b \sin qw + \cosh \beta b \cos qw = \cos ka. \quad (1.24)$$

Con el fin de estudiar cómo se forman las bandas, hagamos $b \rightarrow 0$ y $V_0 \rightarrow \infty$ manteniendo el producto $V_0 b$ constante; la sucesión de barreras se reduce a un caso particular: una sucesión de barreras deltiformes equiespaciadas. Así, la ecuación (1.24) se simplifica considerablemente a

$$P \frac{\sin qa}{qa} + \cos qa = \cos ka \quad (1.25)$$

donde $P = mV_0ba/\hbar^2$ es un parámetro adimensional. Analicemos el significado de esta ecuación; sea $F(qa) = P \sin qa/(qa) + \cos qa$, para un valor de k , tendremos intersecciones de la curva $F(q)$ con una recta horizontal $y = \cos ka = \text{constante}$: cada punto de intersección determina un valor de qa y, como $q = \sqrt{2mE\hbar^2}$, obtenemos un valor permitido para E . En algunos intervalos $P \sin qa/(qa) + \cos qa > 1$ y por tanto no habrá intersecciones con $y = \cos ka$, a estos intervalos se les conoce como *bandas prohibidas*. Por otro lado, de los valores propios del operador de traslación, sabemos que k toma N valores distintos, esto da origen a N rectas horizontales y a varias intersecciones en intervalos en donde $|\cos ka| \leq 1$, es decir, qa toma valores dentro de cada uno de estos intervalos o bien, la energía sólo puede tomar valores correspondientes a estos intervalos: *se dice que las energías permitidas se agrupan en bandas*.

Sistemas desordenados: localización

Como vimos en el capítulo anterior, los sistemas cristalinos repiten patrones regulares en el espacio donde se definen y, debido a la simetría traslacional, un electrón que se mueve en un cristal queda descrito por una *función de onda de Bloch*, sus estados son extendidos y sus energías se agrupan en bandas; sin embargo, todos estos resultados vienen de una idealización porque no existen cristales puros en la vida real (esto debido a la presencia de impurezas en algunos sitios, huecos y otros defectos de la estructura cristalina).

En este trabajo, cuando hablemos de sistemas ordenados, nos referiremos a sistemas cristalinos; así, definimos a un *sistema desordenado* como aquel que no es un sistema cristalino. En esta capítulo veremos algunos ejemplos de desorden, introduciremos los conceptos de *localización* y *longitud de localización* y expondremos algunos ejemplos de modelos con desorden.

2.1. Tipos de desorden

Existen dos tipos de desorden: *compositivo* y *estructural*. Veamos en qué consiste cada uno.

- *Desorden compositivo.* Éste aparece en modelos dotados de una estructura geométrica subyacente, pero carentes de un orden en su composición, por ejemplo, se puede tratar de una aleación con átomos de dos o más tipos que ocupen los sitios de la red de Bravais aleatoriamente. Este tipo puede describirse por medio del hamiltoniano $H = p^2/2m + \sum_{i=1}^N V_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$; donde los vectores \mathbf{R}_i corresponden a los sitios de una red de Bravais, mientras que V_i representa un potencial de tipo *i*ésimo. Para definir completamente el modelo se necesita especificar la probabilidad de cada potencial. En la Figura 2.1 tenemos un ejemplo de modelo unidimensional con desorden compositivo.
- *Desorden estructural.* El modelo con este tipo de desorden ya no posee una es-

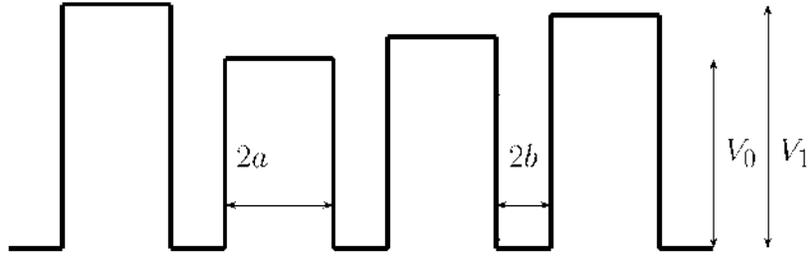


Figura 2.1: Este modelo está formado por barreras rectangulares de la misma anchura y equiespaciadas pero con potenciales aleatorios V_i , la aleatoriedad de los V_i es la que da origen al desorden compositivo. Figura tomada de [10]

estructura geométrica pero tiene el mismo tipo de átomos. En la Figura 2.2 se muestra un ejemplo de modelo unidimensional con este tipo de desorden.

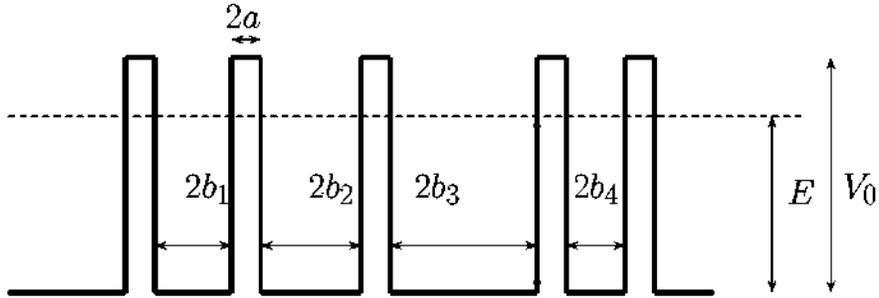


Figura 2.2: Este modelo está formado por barreras rectangulares idénticas (misma anchura y altura) pero separadas por distancias aleatorias. Figura tomada de [10]

Estos modelos pueden describirse por medio de hamiltonianos de la forma $H = p^2/2m + \sum_{i=1}^N V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ donde $V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ describe la interacción del electrón con el i -ésimo átomo situado en la posición \mathbf{R}_i . Las posiciones \mathbf{R}_i son variables aleatorias; sin embargo, para definir un modelo, no es suficiente el hamiltoniano, se requiere de las características estadísticas del modelo.

Si partimos de un cristal ideal, podemos construir varios modelos desordenados. Por ejemplo, modelos con desorden estructural como vidrios y semiconductores amorfos pueden obtenerse rompiendo la simetría del cristal, o bien, un modelo simple de aleación (desorden compositivo) puede generarse sustituyendo dos o más tipos de átomos en una red, distribuyéndolos aleatoriamente, ver Figura 2.3.

Es importante señalar que, para definir completamente un modelo, se necesitan dar las propiedades estadísticas de los parámetros aleatorios, es decir, dar una distribución

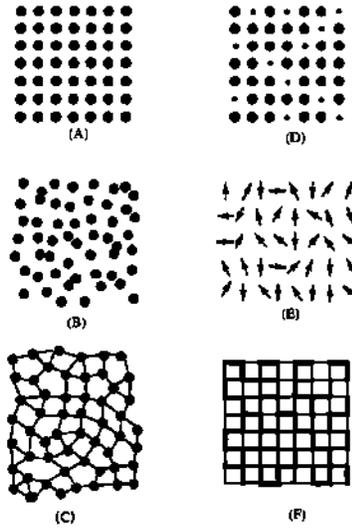


Figura 2.3: (A) Sistema inicial: un cristal perfecto. (B) Ahora se ha roto la simetría del sistema inicial: átomos del mismo tipo ocupan posiciones al azar (desorden estructural). (C) Cuando en cada posición el número de átomos vecinos es el mismo, se dice que el sistema está *desordenado topológicamente*. (D) Se han colocado dos tipos átomos aleatoriamente en los puntos de la red de Bravais inicial. (E) Ahora tenemos un arreglo de espines con orientación al azar en cada punto de la red inicial. (F) Se tiene una red de átomos idénticos en posiciones regulares, pero las amplitudes de salto de los electrones de un átomo a otro son variables aleatorias; *esto corresponde a desorden fuera de la diagonal*. Figura tomada de Ref. [6]

de probabilidad; como observó Philip Warren Anderson en su ponencia de Premio Nobel: “But there is a very important fundamental truth about random systems we must always keep in mind: no real atom is an average atom, nor is an experiment ever done on an ensemble of samples. What we really need to know is the probability distribution of $\text{Im}\Sigma$, not its average, because it’s only each specific instance we are interested in. I would like to emphasize that this is the important, and deeply new, step taken here: the willingness to deal with distributions, not averages” [8].

Un ejemplo de modelos con desorden estructural es el que modela a metales amorfos, vidrios metálicos o semiconductores altamente dopados, aquí el hamiltoniano H es

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

donde \mathbf{p} es el operador de momento, m es la masa efectiva de la partícula y V_j es la energía potencial de un átomo en la posición \mathbf{R}_j . En este caso nuestro parámetro es la posición \mathbf{R}_j . Si suponemos que las posiciones \mathbf{R}_j son variables independientes e idénticamente distribuidas y Ω es el volumen, la distribución de probabilidad está dada

por

$$P(\{\mathbf{R}_j\}) = \frac{1}{\Omega^N}$$

Ahora, presentamos otro ejemplo de sistema desordenado: *el modelo de enlace fuerte*. Este modelo se utiliza para estudiar las funciones propias para electrones en las capas más internas de los átomos de la red (en esa región ya no funciona la aproximación de electrones casi libres).

$$H = \sum_{n,\alpha} |n, \alpha\rangle \epsilon_{n,\alpha} \langle n, \alpha| + \sum_{n,\alpha,m,\beta} |n, \alpha\rangle V_{n\alpha,m\beta} \langle m, \beta| \quad (2.2)$$

donde

- α y β son los números cuánticos orbitales electrónicos.
- n y m son los índices de sitio.
- $\epsilon_{n,\alpha}$ son las energías de sitio.
- $V_{n,\alpha,m,\beta}$ son las amplitudes de salto correspondientes a la amplitud de probabilidad de que el electrón pase de un estado $|m, \beta\rangle$ a un estado $|n, \alpha\rangle$.
Los parámetros aleatorios son las energías de sitio $\epsilon_{n,\alpha}$ y las amplitudes de transición $V_{n,\alpha,m,\beta}$

2.2. Modelos unidimensionales

En esta sección presentaremos algunos ejemplos de modelos unidimensionales, cada uno con su hamiltoniano y función de distribución de sus parámetros aleatorios.

Ecuación dinámica para una cadena armónica con desorden isotópico

$$m_n \frac{d^2 q_n}{dt^2} = kq_{n+1} - 2kq_n + kq_{n-1}, \quad (n = 1, 2, \dots, N)$$

donde k es la constante elástica, q_n y m_n son el desplazamiento de la posición de equilibrio y la masa efectiva del n -ésimo átomo respectivamente. Se pueden escoger condiciones de frontera de tipo diverso: típicamente se eligen condiciones de frontera fijas o libres; otra opción es imponer condiciones de frontera periódicas.

Modelo de Anderson en una dimensión

Es un caso especial del modelo de enlace fuerte. En una dimensión, suponiendo que la amplitud de salto $V_n = V$, (2.2) se reduce a

$$H = \sum_n |n\rangle \epsilon_n \langle n| + V \sum_n [|n+1\rangle \langle n| + |n\rangle \langle n+1|].$$

CAPÍTULO 2. SISTEMAS DESORDENADOS: LOCALIZACIÓN

En la representación de los sitios, tenemos que el modelo de Anderson está dado por la ecuación de Schrödinger

$$V(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) + \epsilon_n \psi_n = E\psi_n. \quad (2.3)$$

Las energías de sitio son variables aleatorias independientes e idénticamente distribuidas con distribución uniforme

$$p(\epsilon_n) = \begin{cases} \frac{1}{w} & \text{si } \epsilon_n \in [-\frac{w}{2}, \frac{w}{2}] \\ 0 & \text{si } \epsilon_n \notin [-\frac{w}{2}, \frac{w}{2}] \end{cases}$$

Modelo de Lloyd unidimensional

Este modelo está representado por la ecuación de Schrödinger

$$i \frac{da_n}{dt} = \epsilon_n a_n + a_{n+1} + a_{n-1}, \quad (n = 1, 2, \dots, N),$$

donde a_n es la amplitud de probabilidad y ϵ_n la energía del electrón en el n -ésimo sitio. En este modelo la distribución de probabilidad de las energías de sitio ϵ_n es

$$P(\{\epsilon_n\}) = \prod_n P(\epsilon_n)$$

con

$$P_{i\delta}(\epsilon_n) = \frac{1}{\pi} \frac{\delta}{\epsilon_n^2 + \delta^2}, \quad (n = 1, 2, \dots, N).$$

La distribución de probabilidad de las ϵ_n es la distribución de Cauchy [9]

Aleación aleatoria unidimensional

Está representado por la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} + \sum_{n=0}^N V_n \delta(x - nl)\psi(x) = E\psi, \quad (0 \leq x \leq Nl)$$

donde $\psi(x)$ es la función de onda de un electrón, V_n es la intensidad del n -ésimo potencial deltiforme y l es la distancia que separa los potenciales. Los potenciales V_n son variables aleatorias independientes e idénticamente distribuidas; a cada valor V_n le corresponde una probabilidad P_i , las variables aleatorias V_n toman valores acotados inferior y superiormente por un parámetro finito V :

$$-V \leq V_n \leq V.$$

En este modelo también se pueden imponer condiciones periódicas $\psi(0) = \psi(Nl) = 0$.

Aleación aleatoria con distribución de Cauchy de los potenciales V_n

La ecuación de Schrödinger es la misma:

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} + \sum_{n=0}^N V_n \delta(x - nl)\psi(x) = E\psi, \quad (0 \leq x \leq Nl),$$

pero la distribución de probabilidad de los potenciales V_n , cómo su nombre lo dice, es de Cauchy

$$P_{V+i\delta}(V_n) = \frac{1}{\pi} \frac{\delta}{(V_n - \bar{h})^2 + \delta^2}. \quad -\infty < V_n < \infty \quad (n = 1, 2, \dots, N)$$

Líquido unidimensional

Está representado por la ecuación

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi, \quad 0 = x_o < x < x_N$$

en donde el potencial $V(x)$ está definido como

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x_{n-1} \leq x \leq x_n - d \\ v(x - x_n + d) & \text{si } x_n - d \leq x \leq x_n \end{cases}$$

siendo $v(x)$ el potencial atómico común. La forma del potencial se representa en la Fig. 2.4.

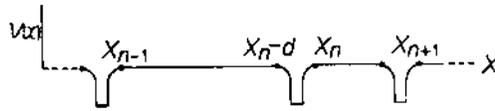


Figura 2.4: Potencial desordenado del líquido unidimensional, figura tomada de Ref. [12] .

2.3. Localización

Sea $\psi(\mathbf{r})$ una función de onda de una partícula cuántica en un medio desordenado. Se dice que la función de onda está *localizada* si su envolvente decae exponencialmente desde algún punto en el espacio, es decir,

$$|\psi(\mathbf{r})| \sim e^{-|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|/\xi}$$

donde ξ es la *longitud de localización*, ver Fig. 2.5. En esta sección daremos algunos criterios en términos de propiedades de transporte para definir estados localizados.

Comportamiento asintótico de las funciones de onda

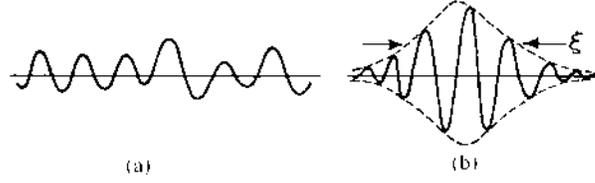


Figura 2.5: Ejemplos de funciones de onda típicas de (a) estado extendido y (b) estado localizado con longitud de localización ξ .

El comportamiento asintótico de un estado localizado usualmente se describe por medio de la longitud de decaimiento de su envolvente: longitud de localización, es decir

$$\psi(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r})e^{-r/\xi}$$

donde $f(\mathbf{r})$ es una función aleatoria centrada en el origen. Si un estado es extendido, $\xi = \infty$.

Número de participación inverso

Para saber si un estado está localizado, es suficiente considerar el segundo momento de la densidad de probabilidad

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

Si P diverge, entonces el estado es extendido. Cuando P converge a un número finito el estado está localizado.

Ausencia de difusión

Se puede evaluar la conductividad por medio de la fórmula de Kubo; si los estados son localizados la conductividad se vuelve nula cuando la temperatura del sistema tiende a cero. La fórmula de Kubo está dada por

$$\begin{aligned} \sigma(T, \omega) = & \lim_{\Omega \rightarrow \infty} \frac{\pi^2 e^2}{m^2 \omega \Omega} \sum_{\alpha} \sum_{\beta \neq \alpha} |\langle \alpha | p | \beta \rangle|^2 \\ & \times [f(E_{\alpha}) - f(E_{\beta})] \delta(E_{\alpha} - E_{\beta} - \hbar\omega). \end{aligned}$$

Donde $f(E_{\alpha})$ es la función de Fermi, $E_{\alpha, \beta}$ son las energías propias correspondientes a los estados propios $|\alpha\rangle$ y $|\beta\rangle$, T y ω son las temperatura y la frecuencia del campo eléctrico respectivamente. p es la proyección del operador de momento sobre la dirección del campo eléctrico.

Si los estados son localizados, la conductividad se vuelve nula cuando la temperatura del sistema tiende a cero.

Transmisión a través de potenciales aleatorios

Consideremos la función de Green, asociada a un sistema con hamiltoniano H , definida de la siguiente forma [13]

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E^\pm) = \left\langle \mathbf{r} \left| \frac{1}{E \pm i\eta - H} \right| \mathbf{r}' \right\rangle.$$

Resulta que el cuadrado del módulo de la función de Green definida de esta forma es la probabilidad de que un electrón pase de un sitio \mathbf{r} a otro \mathbf{r}' ,

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

Si t decae exponencialmente para distancias grandes, entonces la distancia de difusión media es finita. Ahora, la longitud de localización ξ se puede definir usando el decaimiento exponencial t como

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

2.4. Dimensionalidad espacial y localización

La dimensión de la muestra desordenada desempeña un papel importante en los fenómenos de localización. Si se usa la técnica de las matrices de transferencia (que introduciremos en la siguiente sección), es posible mostrar que en modelos desordenados unidimensionales todos los estados electrónicos se localizan, independientemente de la intensidad del desorden. Es posible mostrar que lo mismo ocurre en muestras bidimensionales. En tres dimensiones, como veremos más adelante, se tiene una transición delocalización-localización cuando se introduce desorden.

Abrahams, Anderson, Licciardello y Ramakrishnan formularon la *teoría del único parámetro de escala* [16]. La idea es que la conductancia de un hipercubo de tamaño $(2L)^d$ dependa de un sólo parámetro: la conductancia de un hipercubo de tamaño L^d (es decir, $g(2L) = f[g(L)]$). Propusieron que la derivada logarítmica

$$\beta(g) \equiv \frac{d \ln g}{d \ln L} = \frac{L}{g} \frac{dg}{dL}$$

es una función que depende sólo de la conductividad. Aquí $g = G/(e^2/\hbar)$ es la conductancia adimensional y G es la conductancia. Analicemos la función $\beta(g)$ para cada régimen.

En el régimen metálico, la conductancia está dada por la ley de Ohm; así, para un hipercubo d -dimensional

$$g(L) = \sigma L^{d-2}.$$

CAPÍTULO 2. SISTEMAS DESORDENADOS: LOCALIZACIÓN

Para el caso de desorden fuerte todos los estados serán localizados, por lo tanto, se espera que

$$g(L) \propto e^{-L/\xi}$$

Así,

$$\beta \propto \begin{cases} d - 2 & \text{para valores grandes de } g \text{ (estados extendidos)} \\ \ln g & \text{pequeños valores de } g \text{ (estados localizados)} \\ 0 & \text{para puntos críticos } g = g_c \end{cases}$$

Vemos que la derivada logarítmica es positiva para estados extendidos en 3D pero negativa para estados localizados. Un punto fijo en el que $\beta(g_c) = 0$ corresponde a una transición metal-aislante y esto sólo ocurre para $d = 3$, ver Fig. 2.6

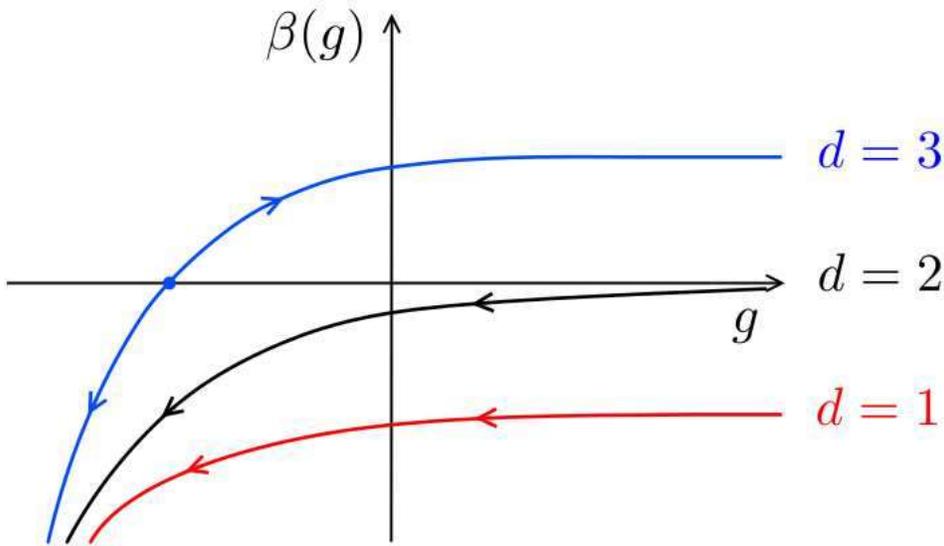


Figura 2.6: Esta figura ha sido construida de acuerdo al comportamiento asintótico de $\beta(g)$ en 1D, 2D y 3D asumiendo continuidad de ésta. Podemos ver que para los casos 1D y 2D, $\beta \leq 0$; para el caso 3D, la curva interseca $\beta = 0$. Las flechas indican el sentido de la variación conforme aumenta el tamaño de la muestra: si $\beta < 0$, la flecha apuntará hacia valores más pequeños de g , pero si $\beta > 0$, la flecha apuntará hacia valores grandes de g . Así, vemos que para 1D y 2D, g decrece con el aumento del tamaño de la muestra, y por tanto, en estos casos el sistema es aislante. Para el caso 3D, si la conductancia es grande inicialmente, entonces $\beta > 0$ y las flechas apuntarán a los valores más grandes de g ; esto significa que la conductancia crece con el aumento de la muestra. Por otro lado, en el caso 3D, si la intensidad del desorden es suficientemente grande de modo que $\beta < 0$ inicialmente, g decrecerá conforme se aumente el tamaño de la muestra: el punto de separación en donde $\beta = 0$ entre estos comportamientos es la transición metal-aislante.

De acuerdo con esta teoría, en una y dos dimensiones, no importa que tan débil sea la intensidad del desorden: los sistemas se localizarán. Para tres dimensiones, predice

la posibilidad de coexistencia de estados extendidos y localizados, donde los estados extendidos pueden existir en una o varias energías y los estados localizados en las demás, teniendo así, una transición de delocalización-localización. A la energía E_c que separa los estados localizados de los no localizados se le conoce como *borde de movilidad* [17].

2.5. Matrices de transferencia

Un método para estudiar la propagación de ondas en sistemas unidimensionales es el de *matrices de transferencia* [1, 4, 10]. El método de matrices de transferencia ha sido de gran importancia para el estudio de fenómenos de transporte en sistemas desordenados unidimensionales [6, 12]. El efecto del desorden queda descrito por las matrices de transferencia (de hecho, éstas se vuelven aleatorias).

Matriz de transferencia para una barrera rectangular
Consideremos el potencial

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{si } a < x < b \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases}$$

Denotemos por I a la región izquierda de la barrera, II a la barrera y III a la región derecha de la barrera. La solución de la ecuación de Schrödinger para las regiones I, II y III (caso $0 < E < V_0$) son

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \\ \psi_{II}(x) &= C_1 e^{\beta x} + D_1 e^{-\beta x} \\ \psi_{III}(x) &= A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx} \end{aligned} \quad (2.4)$$

donde $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ y $\beta = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$. En la región I y II tenemos como solución una superposición de ondas planas: e^{ikx} representa una onda plana que se propaga hacia la derecha y e^{-ikx} una que se propaga hacia la izquierda, ver Fig. 2.7. Las constantes A_1 , B_1 , C_1 , D_1 , A_2 y B_2 están relacionadas por las condiciones de continuidad de $\psi(x)$ y $d\psi(x)/dx$; estas condiciones de frontera nos permiten expresar C_1 y D_1 en términos de A_1 y B_1 y a A_2 y B_2 en términos de C_1 y D_1 . Por lo tanto, las constantes A_2 y B_2 se pueden expresar en términos de A_1 y B_1 : definimos la matriz de transferencia \mathbf{M} por medio de la relación

$$\begin{bmatrix} A_2 \\ B_2 \end{bmatrix} = \mathbf{M} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} \quad (2.5)$$

La matriz \mathbf{M} conecta los coeficientes de la función de onda de la región I con los de la región III. Esta no es la única forma de matriz de transferencia, la forma de ésta puede cambiar según el modelo o lo que se necesite estudiar.

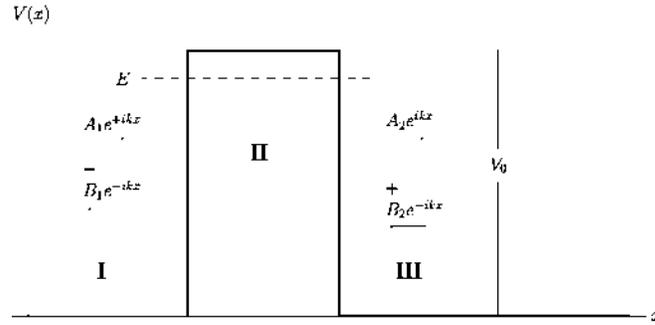


Figura 2.7: Barrera rectangular. En la parte izquierda y derecha de la barrera la función de onda es una suma de ondas planas: una que se propaga hacia la derecha (e^{+ikx}) y otra hacia la izquierda (e^{-ikx}).

Matriz de transferencia para el modelo de Anderson 1D

Supongamos que conocemos la función de onda en los sitios $(n - 1)$ -ésimo y n -ésimo para

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

Podemos construir una solución para el modelo de Anderson 1D en el sitio $(n + 1)$ -ésimo. Para este caso es útil definir a la matriz de transferencia \mathbf{T}_n por medio de la siguiente identidad

$$\begin{bmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{bmatrix} = \mathbf{T}_n \begin{bmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{bmatrix} \tag{2.6}$$

donde

$$\mathbf{T}_n = \begin{bmatrix} E - \varepsilon_n & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Modelo de Anderson unidimensional

Hasta 1958, se creía que los estados localizados correspondían a estados ligados de un electrón en impurezas [11]. En marzo de 1958, Philip Warren Anderson publicó su artículo *Absence of Diffusion in Certain Random Lattices*. Anderson consideró un modelo de enlace fuerte para electrones en un cristal, modelo que ahora se conoce como *modelo de Anderson*. En este modelo se introduce el desorden a través de las energías de sitio, que son variables aleatorias independientes e idénticamente distribuidas con distribución uniforme. A partir del estudio de este modelo en tres dimensiones, Anderson llegó a la conclusión de que *si el desorden es suficientemente fuerte, los estados del sistema se vuelven localizados* [8].

En el caso unidimensional, el modelo de Anderson se define por la ecuación (2.3), una vez que se haya puesto $V = 1$, toma la forma

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} + \varepsilon_n \psi_n = E\psi_n. \quad (3.1)$$

El desorden, como mencionamos antes, se introduce en el modelo a través de las energías de sitio ε_n que son variables aleatorias independientes con distribución uniforme.

3.1. Modelo de Anderson “sin desorden”

Sin desorden, tenemos que (3.1) se reduce a

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

Para este caso, esperamos que la solución sea de la forma

$$\psi_n = Ae^{\pm i\mu n}, \quad (3.3)$$

con $\mu \in \mathbb{R}$. Sustituyendo (3.3) en (3.2)

$$Ae^{\pm i\mu(n+1)} + Ae^{\pm i\mu(n-1)} = Ae^{\pm i\mu n} [e^{\pm i\mu} + e^{\mp i\mu}] = EAe^{\pm i\mu n}$$

CAPÍTULO 3. MODELO DE ANDERSON UNIDIMENSIONAL

y dividiendo por $e^{\pm i\mu n}$, encontramos que la relación de dispersión para la energía de los electrones es

$$E = 2 \cos \mu$$

La energía está restringida al intervalo $(-2, 2)$, a este intervalo se le conoce como *banda de energía* o simplemente: *la banda*; y es que sólo para este intervalo se tienen soluciones físicamente aceptables. Veamos qué pasa con los estados para valores de energía fuera del intervalo $(-2, 2)$. En (3.3) supusimos que μ era real pero es posible que sea complejo, en tal caso la solución de (3.2) son estados ψ_n de la forma

$$\psi_n = B e^{\pm \mu n}$$

sustituyendo en (3.2) tenemos

$$B e^{\pm \mu(n+1)} + B e^{\pm \mu(n-1)} = E B e^{\pm \mu n}$$

dividiendo por $e^{\pm \mu n}$, obtenemos la relación de dispersión

$$E = e^{n\mu} + e^{-n\mu} = 2 \cosh \mu n$$

Para valores de energía fuera del intervalo $(-2, 2)$, se tienen funciones de onda que crecen exponencialmente, y por tanto, no son físicamente aceptables.

Estos resultados pueden obtenerse con el método de *matrices de transferencia*. Para el caso sin desorden $\varepsilon = 0$ y la matriz de transferencia de (3.6) se reduce a

$$\mathbf{T}_n = \begin{bmatrix} E & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Los autovalores de esta matriz son

$$t_{\pm} = \frac{E \pm \sqrt{E^2 - 4}}{2}.$$

Para energías $|E| > 2$, los autoestados correspondientes a t_{\pm} son

$$\psi_{n_{\pm}} = B e^{\pm \mu n} \quad \text{con } \mu = \cosh^{-1} \left(\frac{E}{2} \right),$$

mientras que para energías $|E| < 2$ los autoestados son

$$\psi_{n_{\pm}} = A e^{\pm i\mu n} \quad \text{con } \mu = \cos^{-1} \left(\frac{E}{2} \right).$$

3.2. Matrices de transferencia y localización : Teoremas de Furstenberg y Oseledec

Cuando se introduce desorden en el sistema, las matrices de transferencia asociadas a éste se vuelven aleatorias. Si queremos construir una solución ψ_N de (3.1) en el N -ésimo sitio a partir de dos soluciones conocidas en el 0-ésimo y en el primer sitio, necesitamos realizar un producto de N matrices de transferencia aleatorias. Estamos interesados en las propiedades asintóticas del producto de un número grande de matrices aleatorias, estas propiedades quedan descritas por los exponentes de Lyapunov relacionados con los autovalores de dicho producto [18]. En esta sección presentaremos los teoremas de Furstenberg y Oseledec para después aplicarlos al modelo de Anderson. El teorema de Furstenberg proporciona información sobre el producto de matrices aleatorias $\mathbf{P}_N = \mathbf{T}_1 \mathbf{T}_2 \dots \mathbf{T}_N$ en el límite $N \rightarrow \infty$.

Sean $SL(m, \mathbf{R})$ el grupo de transformaciones lineales unimodulares de \mathbb{R}^m a \mathbb{R}^m y μ una medida definida sobre el espacio. Sea G el subgrupo cerrado más pequeño de $SL(m, \mathbb{R})$ que contiene soporte de μ . Consideremos la sucesión de matrices aleatorias $\{\mathbf{X}_n\}$ de G independientes e idénticamente distribuidas. Sean $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^m$ un vector y \mathbf{P}_N un producto de matrices aleatorias de modo que $\mathbf{P}_N \mathbf{u} = \mathbf{X}_N \cdot \mathbf{X}_{N-1} \dots \mathbf{X}_2 \cdot \mathbf{X}_1 \mathbf{u}$.

Teorema de Furstenberg [14]. Si G es un subgrupo de $SL(m, \mathbb{R})$ tal que

- (a) G no es compacto
- (b) G contiene subgrupos de índice finito irreducibles

entonces, con probabilidad de 1, resulta

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \|\mathbf{X}_N \cdot \mathbf{X}_{N-1} \dots \mathbf{X}_2 \cdot \mathbf{X}_1 \mathbf{u}\| = \gamma > 0 \quad (3.4)$$

para cualquier vector $\mathbf{u} \neq 0$.

El teorema de Furstenberg no toma en cuenta las tasas de crecimiento exponenciales inferiores asociadas a los autovalores de la matriz $\mathbf{P}_N^\dagger \mathbf{P}_N$, el teorema de Oseledec sí considera este aspecto:

Teorema multiplicativo ergódico de Oseledec [15]. Supongamos que $\ln \|\mathbf{X}_N\| < \infty$, donde $\|\cdot\|$ es una norma genérica. Entonces

$$\lim_{N \rightarrow \infty} [\mathbf{P}_N^\dagger \mathbf{P}_N]^{(\frac{1}{2N})} = \mathbf{V} \quad (3.5)$$

La matriz \mathbf{V} tiene m autovalores reales y positivos e^{λ_i} repetidos según su multiplicidad. Los exponentes $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_m$ representan los exponentes de Lyapunov característicos. Si la sucesión $\{\mathbf{X}_n\}$ es ergódica, el espectro de exponentes de Lyapunov es

CAPÍTULO 3. MODELO DE ANDERSON UNIDIMENSIONAL

independiente de la realización de $\{\mathbf{X}_n\}$.

Si $m = 2$, G satisface las condiciones para que se cumpla el teorema de Furstenberg sólo si contiene al menos dos elementos de $SL(2, \mathbb{R})$ sin autovalores en común [12].

Aplicación del teorema de Furstenberg al modelo de Anderson

El grupo G formado por las matrices

$$\mathbf{T}_n = \begin{bmatrix} E - \varepsilon_n & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

y por sus productos contiene dos matrices sin autovalores en común si $\varepsilon_n \neq 0$. Del teorema previo, vemos que este grupo satisface el teorema de Furstenberg. Por lo tanto, con probabilidad 1, resulta

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \|\mathbf{T}_N \cdot \mathbf{T}_{N-1} \dots \mathbf{T}_2 \cdot \mathbf{T}_1 \mathbf{u}_0\|^2 = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln [|\psi_{N+1}|^2 + |\psi_N|^2] = 2\gamma(E) > 0$$

donde

$$\mathbf{u}_N = \begin{bmatrix} \psi_{N+1} \\ \psi_N \end{bmatrix} = \mathbf{T}_N \cdot \mathbf{T}_{N-1} \dots \mathbf{T}_2 \cdot \mathbf{T}_1 \mathbf{u}_0 \quad (3.6)$$

y \mathbf{u}_0 es un vector cuyas entradas (a saber, ψ_0 y ψ_1) son condiciones iniciales. Esto implica un crecimiento exponencial de las soluciones ψ_N [20].

Crecimiento exponencial y la conjetura de Borland

Para casi cualquier solución inicial, ψ_N en vez de decrecer, crece exponencialmente para N muy grandes a una razón correspondiente al exponente de Lyapunov λ_1 del producto \mathbf{P}_N . No es suficiente que ψ_N satisfaga la ecuación de Schrödinger (3.1) para todo N (lo cual queda garantizado gracias a las matrices de transferencia). Un autoestado debe satisfacer ciertas condiciones de frontera para que sea físicamente aceptable y este no es generalmente el caso. Construyamos dos soluciones $\Psi_{\text{izquierda}}$ y Ψ_{derecha} con la misma realización de desorden e impongamos condiciones iniciales en los bordes izquierdo o derecho. Sucede que:

- i) Si comenzamos desde el extremo izquierdo y aumentamos N , la envolvente de Ψ_{derecha} crecerá exponencialmente de acuerdo al teorema de Furstenberg.
- ii) Si comenzamos desde el extremo derecho, la envolvente de $\Psi_{\text{izquierda}}$ crecerá exponencialmente por el teorema de Furstenberg.

Esto se debe a que, en general, E no es un autovalor de la ecuación de Schrödinger, pues hemos tomado a E como parámetro libre sin tomar en cuenta que las condiciones de frontera implican que los niveles de energía dependen de ε_n , por tanto, la solución Ψ obtenida por medio de matrices de transferencia no es un autoestado del sistema. Para ciertos valores de energía E que correspondan a los autovalores del hamiltoniano,

podremos embonar las soluciones Ψ_{derecha} y $\Psi_{\text{izquierda}}$.

Conjetura de Borland. El exponente de Lyapunov evaluado en un valor arbitrario de energía E es igual al inverso de localización de los autoestados del sistema con energía E [19].

3.3. Relación de Herbert-Jones-Thouless

Una propiedad especial de los autoestados unidimensionales es que pueden diferenciarse unos de otros por el número de nodos en cada autoestado y el número de estados con energías menores a E queda determinado por el número de nodos. Una consecuencia de esta propiedad es que existe una relación entre la tasa de decaimiento exponencial de la función de onda con la densidad de estados. Para su demostración se utilizan las propiedades de las funciones de Green [21]. En esta sección derivaremos la expresión de Thouless para un caso particular: el modelo de Anderson en una dimensión.

Sea $\mathbf{u}_0 = (\psi_0, \psi_1)$, de la ecuación (3.1) tenemos que para cualquier energía E la función de onda ψ_{N+1} en el sitio $N + 1$ es un polinomio de grado N en E , así

$$\psi_{N+1}(E) = C \prod_{n=1}^N (E_n - E) \quad (3.7)$$

donde E_n son los ceros de $\psi_N(E)$ y C es una constante de normalización. Las energías $\{E_n\}$ son autovalores de una cadena de longitud N con condiciones $\psi_{N+1} = \psi_0 = 0$. Cada factor $E_n - E$ tendrá el signo según E sea mayor o menor a E_n ; escribamos cada factor en forma polar

$$(E_n - E) = |E_n - E| e^{i\phi_n} \quad \text{con} \quad \phi_n = \pi \text{sgn}(E - E_n). \quad (3.8)$$

Sustituyendo (3.8) en (3.7) y tomando el logaritmo de los dos miembros obtenemos

$$\frac{1}{N+1} \ln \psi_{N+1}(E) = \frac{1}{N+1} \sum_{n=1}^N \ln |E - E_n| + \frac{i\pi}{N+1} \sum_{n=1}^N \text{sgn}(E - E_n) + \frac{1}{N+1} \ln C. \quad (3.9)$$

Esta cantidad debe promediarse sobre todas las realizaciones y, en el caso límite, la suma sobre todos los estados puede reemplazarse por una integral sobre la densidad de estados (a menos que dos estados tengan un espaciamiento exponencial pequeño en N). Denotando la densidad de estados promedio por $\rho(E)$, tenemos

$$\begin{aligned} \Lambda(E) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \langle \ln \psi_N(E) \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dE' \rho(E') \ln |E - E'| + i\pi \int_{-\infty}^E dE' \rho(E'). \end{aligned} \quad (3.10)$$

El término real no es más que el inverso de la longitud de localización

$$\xi^{-1} = \int_{-\infty}^{\infty} dE' \rho(E') \ln |E - E'| = \text{Re}\{\Lambda(E)\} \quad (3.11)$$

y la ecuación (3.11) se conoce como la *fórmula de Herbert-Jones-Thouless* mientras que el integrando de la parte compleja de (3.3) es la densidad de estados.

3.4. Modelo de Anderson con desorden débil y fuerte

Calculemos el inverso de longitud de localización λ usando la relación de Herbert-Jones-Thouless para el caso de desorden fuerte. Recordemos que el modelo de Anderson 1D, con $V = 1$, está definido por

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

con distribución de probabilidad para las energías de sitio

$$p(\varepsilon_n) = \begin{cases} \frac{1}{w} & \text{si } \varepsilon_n \in [-\frac{w}{2}, \frac{w}{2}] \\ 0 & \text{si } \varepsilon_n \notin [-\frac{w}{2}, \frac{w}{2}] \end{cases}$$

En el caso del desorden fuerte $\varepsilon \gg 1$. De (3.1) vemos que los autovalores E_n coinciden con las energías de sitio, es decir, $E_n = \varepsilon_n$. Para aplicar la relación de Herbert-Jones-Thouless, necesitamos hallar la densidad de estados $\rho(E')$; dado que para el caso de desorden fuerte los autovalores de la energía coinciden con las energías de sitio en primera aproximación y la distribución de las energías de sitio es uniforme, tenemos que

$$\rho(E') = \begin{cases} \frac{1}{w} & \text{si } \varepsilon_n \in [-\frac{w}{2}, \frac{w}{2}] \\ 0 & \text{si } \varepsilon_n \notin [-\frac{w}{2}, \frac{w}{2}] \end{cases},$$

sustituyendo esta expresión en (3.11), obtenemos

$$\xi^{-1} = \int_{-\infty}^{\infty} dE' \rho(E') \ln |E - E'| = \int_{-w/2}^{w/2} \frac{1}{w} \ln |E - E'| dE'$$

si hacemos el cambio de variable $x = E - E'$ y usamos $\int \ln x dx = x \ln x - x + \text{constante}$, tendremos que

$$\begin{aligned} \xi^{-1} &= - \int_{E+w}^{E-w} \frac{1}{w} \ln |x| dx = \\ &= -\frac{1}{w} \left[\left(E - \frac{w}{2} \right) \ln \left(\frac{w}{2} - E \right) - \left(E - \frac{w}{2} \right) \right] \\ &\quad + \frac{1}{w} \left[\left(E + \frac{w}{2} \right) \ln \left(\frac{w}{2} + E \right) - \left(E + \frac{w}{2} \right) \right] \\ &= \frac{1}{2} \ln (w^2 - 4E^2) + \frac{E}{w} \ln \frac{w + 2E}{w - 2E} - 1. \end{aligned}$$

En el interior de la banda $|E| \ll w$ la expresión se reduce a

$$\lambda \approx \ln \frac{w}{2} - 1.$$

3.5. Desorden débil con correlación: método del mapa hamiltoniano

Consideremos el modelo de Anderson en una dimensión (con $V = 1$)

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} + \varepsilon_n \psi_n = E \psi_n. \quad (3.12)$$

Supongamos que las energías de sitio ε_n son variables aleatorias independientes e idénticamente distribuidas con promedio $\langle \varepsilon \rangle$ y que el desorden es débil, es decir,

$$\sigma^2 = \langle \varepsilon_n^2 \rangle \ll 1$$

El modelo de Anderson (3.1) se puede estudiar por medio del método del mapa hamiltoniano [22]. La función de Hamilton del oscilador paramétrico está dada por la ecuación

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2 \left[1 + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \xi_n \delta(t - nT) \right], \quad (3.13)$$

donde p y q son el momento y la posición respectivamente. Se trata de un oscilador clásico cuya frecuencia está perturbada por una sucesión de “patadas” con intensidades aleatorias ξ_n a tiempos regulares T .

$$\omega(t) = \omega_0 \sqrt{1 + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \xi_n \delta(t - nT)}.$$

Ahora bien, en el n -ésimo instante, $t = t_n = nT$. Queremos ver cómo se comportan p y q antes y después de la n -ésima patada. Sean t_n^- el valor de t inmediatamente antes del n -ésimo instante y t_{n+1}^- el valor de t inmediatamente antes de t_{n+1} . Para determinar cómo están relacionados $p(t_{n+1}^-)$ y $q(t_{n+1}^-)$ con $p(t_n^-)$ y $q(t_n^-)$ usaremos el método de matrices de transferencia introducido en la sección 2.5. Tomemos la forma de la matriz de transferencia definida por

$$\begin{bmatrix} p(t_{n+1}^-) \\ q(t_{n+1}^-) \end{bmatrix} = \mathbf{P} \begin{bmatrix} p(t_n^-) \\ q(t_n^-) \end{bmatrix}.$$

Sin embargo, no es inmediato ver la forma de la matriz \mathbf{P} . La idea es construir \mathbf{P} por medio de otras dos matrices de transferencia, para ello, consideremos el intervalo $[t_n, t_{n+1}]$ y dividamos éste en otros dos, $[t_n^-, t_n^+]$ y $[t_n^+, t_{n+1}^-]$. Si definimos \mathbf{Q} y \mathbf{R} de tal forma que

$$\begin{bmatrix} p(t_{n+1}^-) \\ q(t_{n+1}^-) \end{bmatrix} = \mathbf{Q} \begin{bmatrix} p(t_n^+) \\ q(t_n^+) \end{bmatrix} \quad \text{y} \quad \begin{bmatrix} p(t_n^+) \\ q(t_n^+) \end{bmatrix} = \mathbf{R} \begin{bmatrix} p(t_n^-) \\ q(t_n^-) \end{bmatrix},$$

tenemos que $\mathbf{P} = \mathbf{QR}$.

CAPÍTULO 3. MODELO DE ANDERSON UNIDIMENSIONAL

Empecemos con la matriz \mathbf{R} , del hamiltoniano vemos que

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -m\omega^2 q \left[1 + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \xi_n \delta(t - nT) \right] \quad (3.14)$$

y

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = p/m \quad (3.15)$$

En el intervalo $[t_n^-, t_n^+]$ las ecuaciones se pueden reducir a

$$\dot{p} \approx m\omega^2 q \xi_n \delta(t - t_n) \quad \text{y} \quad \dot{q} = p/m,$$

integrando llegamos a

$$p(t_n^+) - p(t_n^-) = -m\omega^2 \xi_n q(t_n^-) \quad \text{y} \quad q(t_n^-) = q(t_n^+),$$

o, en forma matricial

$$\begin{bmatrix} p(t_n^+) \\ q(t_n^+) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -m\omega^2 \xi_n \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p(t_n^-) \\ q(t_n^-) \end{bmatrix},$$

de donde vemos que

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} 1 & -m\omega^2 \xi_n \\ 0 & 1 \end{bmatrix},$$

Por otro lado, en el intervalo $[t_n^+, t_{n+1}^-]$, las ecuaciones (2) y (3) toman la forma del oscilador armónico simple

$$\dot{p} = -m\omega^2 q \quad \text{y} \quad \dot{q} = p/m,$$

resolviendo, con $t_{n+1}^- - t_n^+ = T$, tenemos

$$\begin{cases} p(t_{n+1}^-) = -m\omega q(t_n^+) \sin \omega T + p(t_n^+) \cos \omega T \\ q(t_{n+1}^-) = q(t_n^+) \cos \omega T + \frac{p(t_n^+)}{m\omega} \sin \omega T \end{cases}.$$

Esto en forma matricial nos da

$$\begin{bmatrix} p(t_{n+1}^-) \\ q(t_{n+1}^-) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \omega T & -m\omega \sin \omega T \\ \sin \omega T / m\omega & \cos \omega T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p(t_n^+) \\ q(t_n^+) \end{bmatrix}$$

por lo que

$$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} \cos \omega T & -m\omega \sin \omega T \\ \sin \omega T / m\omega & \cos \omega T \end{bmatrix}.$$

Usando estas matrices de transferencia y tomando en cuenta que $\mathbf{P} = \mathbf{QR}$, se obtiene

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} \cos \omega T & -m\omega \sin \omega T \\ \sin \omega T / m\omega & \cos \omega T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \omega T & -m\omega^2 \xi_n \cos \omega T - m\omega \sin \omega T \\ \sin \omega T / m\omega & -\omega \xi_n \sin \omega T + \cos \omega T \end{bmatrix},$$

por lo tanto

$$\begin{bmatrix} p(t_{n+1}^-) \\ q(t_{n+1}^-) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \omega T & -m\omega^2 \xi_n \cos \omega T - m\omega \sin \omega T \\ \sin \omega T / m\omega & -\omega \xi_n \sin \omega T + \cos \omega T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p(t_n^-) \\ q(t_n^-) \end{bmatrix}.$$

Haciendo $p(t_{n+1}^-) = p_{n+1}$, $q(t_{n+1}^-) = q_{n+1}$, $p(t_n^-) = p_n$ y $q(t_n^-) = q_n$ llegamos al siguiente sistema

$$\begin{cases} p_{n+1} = (\cos \omega T) p_n - (m\omega^2 \xi_n \cos \omega T + m\omega \sin \omega T) q_n \\ q_{n+1} = (\sin \omega T / m\omega) p_n + (\cos \omega T - \omega \xi_n \sin \omega T) q_n \end{cases}, \quad (3.16)$$

que se conoce como *mapa hamiltoniano*. Al eliminar p_n encontramos la relación recursiva

$$q_{n+1} \cos \omega T - q_n = p_{n+1} \sin \omega T / m\omega$$

de modo que

$$q_n \cos \omega T - q_{n-1} = p_n \sin \omega T / m\omega.$$

Sustituyendo esta relación en la segunda expresión del mapa hamiltoniano obtenemos la siguiente identidad

$$q_{n+1} + q_{n-1} + \omega \xi \sin \omega T q_n = 2 \cos \omega T q_n, \quad (3.17)$$

Si comparamos la ecuación (3.17) y (3.12) se obtiene la correspondencia

$$\underbrace{q_{n+1}}_{\psi_{n+1}} + \underbrace{q_{n-1}}_{\psi_{n-1}} + \underbrace{\omega \xi \sin \omega T}_{\varepsilon_n} \underbrace{q_n}_{\psi_n} = \underbrace{2 \cos \omega T}_E \underbrace{q_n}_{\psi_n}$$

Los parámetros de los modelos (3.17) y (3.12) deben obedecer a las relaciones

$$\begin{cases} \varepsilon_n = \omega \xi_n \sin \omega T \\ E = 2 \cos \omega T \end{cases}$$

Es conveniente expresar el mapa hamiltoniano en términos de las variables de acción

$$\begin{aligned} p_n &= \sqrt{2mJ_n} \cos \theta_n \\ q_n &= \sqrt{\frac{2J_n}{m\omega}} \sin \theta_n \end{aligned} \quad (3.18)$$

teniendo así

$$\cos \theta_{n+1} = \frac{1}{D_n} [\cos (\theta_n + \omega T) - \omega \xi_n \cos \omega T \sin \theta_n] \quad (3.19)$$

y

$$\sin \theta_{n+1} = \frac{1}{D_n} [\sin (\theta_n + \omega T) - \omega \xi_n \sin \omega T \sin \theta_n], \quad (3.20)$$

donde

$$D_n^2 = \frac{J_{n+1}}{J_n} = 1 - 2\omega \xi_n \cos \theta_n \sin \theta_n + \omega^2 \xi^2 \sin^2 \theta_n. \quad (3.21)$$

Gracias a la analogía entre el modelo de Anderson $1D$ y el sistema (3.13) podemos encontrar el exponente de Lyapunov, así

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\xi} &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \log \left| \frac{\psi_{n+1}}{\psi_n} \right| = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \log \left| \frac{q_{n+1}}{q_n} \right| \\
 &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \log \left| \sqrt{\frac{J_{n+1}}{J_n}} \frac{\sin \theta_{n+1}}{\sin \theta_n} \right| \\
 &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \log \left| \sqrt{\frac{J_{n+1}}{J_n}} \right| + \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \log \left| \frac{\sin \theta_{n+1}}{\sin \theta_n} \right|. \tag{3.22}
 \end{aligned}$$

Para valores de energía lejanos de los bordes de la banda [23], el segundo término se reduce a

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \log \left| \frac{\sin \theta_{n+1}}{\sin \theta_n} \right| = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \log \left| \frac{\sin \theta_N}{\sin \theta_1} \right| = 0,$$

por lo que

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\xi} &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \log \left| \sqrt{\frac{J_{n+1}}{J_n}} \right| = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^N \frac{1}{2N} \log \frac{J_{n+1}}{J_n} = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^N \frac{1}{2N} \log D_n^2 \\
 &= \left\langle \frac{1}{2} \log D_n^2 \right\rangle
 \end{aligned}$$

o bien

$$\frac{1}{\xi} = \left\langle \frac{1}{2} \log D_n^2 \right\rangle = \frac{1}{2} \left\langle [1 - 2\omega\xi_n \sin \theta_n \cos \theta_n + \omega^2 \xi_n^2 \sin^2 \theta_n]^2 \right\rangle.$$

Usando el desarrollo de $\log(1 + \alpha) = \alpha - \alpha^2/2 + \dots$

$$\frac{1}{\xi} = \left\langle \frac{1}{2} \log D_n^2 \right\rangle = \frac{1}{2} \left\langle -2\omega\xi_n \sin \theta_n \cos \theta_n + \omega^2 \xi_n^2 \sin^2 \theta_n - 2\omega^2 \xi_n^2 \sin^2 \theta_n \cos^2 \theta_n + \dots \right\rangle$$

y empleando $\sin^2 \theta = (1 - \cos 2\theta)/2$ y $\cos^2 \theta = (1 + \cos 2\theta)/2$ se obtiene

$$\frac{1}{\xi} = \frac{\omega^2}{8} \langle \xi_n^2 \rangle - \frac{\omega}{2} \langle \xi_n \sin 2\theta_n \rangle - \frac{\omega^2}{4} \langle \xi_n^2 \cos 2\theta_n \rangle + \frac{\omega^2}{8} \langle \xi_n^2 \cos 4\theta_n \rangle + \dots \tag{3.23}$$

El término $\langle \xi_n \sin \theta_n \rangle$ es nulo cuando el desorden no tiene correlaciones. Para calcular los promedios $\langle \xi_n^2 \cos 2\theta_n \rangle$ y $\langle \xi_n^2 \cos 4\theta_n \rangle$ se necesita conocer la distribución $\rho(\theta)$ para el mapeo angular. Un camino es asumir una función de distribución constante

$$\rho(\theta) = \frac{1}{2\pi}. \tag{3.24}$$

Con esta distribución obtenemos

$$\frac{1}{\xi} = \frac{\omega^2}{8} \langle \xi_n^2 \rangle = \frac{\langle \varepsilon \rangle^2}{8(1 - E^2/4)}. \quad (3.25)$$

Sin embargo, las predicciones de esta expresión para el centro de la banda difieren de resultados obtenidos numéricamente. La suposición (3.24) es correcta cuando ωT es un múltiplo irracional de π pero falla cuando es racional (ver [23]). Para $\omega T = \pi/s$ con s entero, el mapa angular tiene órbitas periódicas de periodo $2s$ sin desorden; si introducimos desorden, las órbitas dejarán de ser estrictamente periódicas: la distribución de la variable angular en vez de ser uniforme tendrá una modulación. Esta modulación es el origen de la falla de la fórmula de Thoules para $\omega T = 0$ o $\omega T = \pm\pi$ y en el centro de la banda (son los únicos valores en donde se ven anomalías). De algún modo, respecto a estas anomalías en la longitud de localización, podemos decir que se tratan de efectos de resonancia. A pesar de que hay más valores resonantes de la energía, estos no contribuyen al exponente de Lyapunov.

Queremos estudiar el efecto de las correlaciones para valores no resonantes de energía. Definamos el correlador

$$\mathbf{q}_k = \langle \xi_n e^{i2\theta_{n-k}} \rangle.$$

Estamos interesados en la parte imaginaria de \mathbf{q}_k . De (3.19) y (3.20) podemos escribir

$$\tan \theta_{n+1} = \frac{\sin(\theta_n + \omega T) - \omega \xi_n \sin \omega T \sin \theta_n}{\cos(\theta_n + \omega T) - \omega \xi_n \cos \omega T \sin \theta_n}. \quad (3.26)$$

Esta ecuación puede reescribirse como

$$\frac{\tan(\theta_n + \omega T) - \omega \xi_n \sin \omega T \sin \theta_n / \cos(\theta_n + \omega T)}{1 - \omega \xi_n \cos \omega T \sin \theta_n / \cos(\theta_n + \omega T)}.$$

Usando el hecho de que el desorden es débil, al desarrollar en serie de Taylor nos queda

$$\begin{aligned} \tan \theta_{n+1} &= \left[\tan(\theta_n + \omega T) - \frac{\omega \xi_n \sin \omega T \sin \theta_n}{\cos(\theta_n + \omega T)} \right] \left[1 + \frac{\omega \xi_n \cos \omega T \sin \theta_n}{\cos(\theta_n + \omega T)} + \dots \right] \\ &= \tan(\theta_n + \omega T) + \frac{\omega \xi_n \cos \omega T \sin \theta_n \sin(\theta_n + \omega T)}{\cos^2(\theta_n + \omega T)} - \frac{\omega \xi_n \sin \omega T \sin \theta_n}{\cos(\theta_n + \omega T)} + \dots \\ &= \tan(\theta_n + \omega T) + \frac{\omega \xi_n \sin \theta_n}{\cos^2(\theta_n + \omega T)} [\cos \omega T \sin(\theta_n + \omega T) - \sin \omega T \sin \theta_n \cos(\theta_n + \omega T)] + \dots \\ &= \tan(\theta_n + \omega T) + \frac{\omega \xi_n \sin \theta_n}{\cos^2(\theta_n + \omega T)} [\sin(\theta_n + \omega T - \omega T)] + \dots \\ &= \tan(\theta_n + \omega T) + \frac{\omega \xi_n \sin^2 \theta_n}{\cos^2(\theta_n + \omega T)} + \dots \end{aligned}$$

CAPÍTULO 3. MODELO DE ANDERSON UNIDIMENSIONAL

o bien

$$\theta_{n+1} = \arctan \left[\tan(\theta_n + \omega T) + \frac{\omega \xi_n \sin^2 \theta_n}{\cos^2(\theta_n + \omega T)} + \dots \right].$$

Si desarrollamos $\arctan \theta_n$ en serie de Taylor alrededor del punto $\tan(\theta_n + \omega T)$ obtenemos

$$\begin{aligned} \theta_{n+1} &= \theta_n + \omega T + \frac{1}{1 + \tan^2(\theta_n + \omega T)} \cdot \frac{\omega \xi_n \sin^2 \theta_n}{\cos^2(\theta_n + \omega T)} + \dots \\ &= \theta_n + \omega T + \omega \xi_n \sin^2 \theta_n + \dots \end{aligned} \quad (3.27)$$

Sustituyendo esta última expresión en $\mathbf{q}_k = \langle \xi_n e^{i2\theta_{n-k}} \rangle$ para $k - 1$, se obtiene

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_{k-1} &= \langle \xi_n e^{i2\theta_{n+1-k}} \rangle = \left\langle \xi_n e^{i2[\theta_{n-k} + \omega T + \omega \xi_{n-k} \sin^2 \theta_{n-k} + \dots]} \right\rangle \\ &= \left\langle \xi_n e^{i2\theta_{n-k}} e^{2i\omega T} e^{i2\omega \xi_{n-k} \sin^2 \theta_{n-k}} \right\rangle \\ &= e^{2i\omega T} \left\langle \xi_n e^{i2\theta_{n-k}} \left(e^{i2\omega \xi_{n-k} \sin^2 \theta_{n-k}} \right) \right\rangle. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Desarrollando el término $\left(e^{i2\omega \xi_{n-k} \sin^2 \theta_{n-k}} \right)$ y despreciando los términos de segundo y mayor orden

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_{k-1} &= e^{2i\omega T} \left\langle \xi_n e^{i2\theta_{n-k}} \left(1 + i2\omega \xi_{n-k} \sin^2 \theta_{n-k} + \dots \right) \right\rangle \\ &= e^{2i\omega T} \left\langle \xi_n e^{i2\theta_{n-k}} \right\rangle + 2i\omega e^{2i\omega T} \left\langle \xi_n \xi_{n-k} e^{i2\theta_{n-k}} \sin^2 \theta_{n-k} \right\rangle. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Como el desorden es débil, podemos hacer uso de la aproximación

$$\left\langle \xi_n \xi_{n-k} e^{i2\theta_{n-k}} \sin^2 \theta_{n-k} \right\rangle = \langle \xi_n \xi_{n-k} \rangle \langle e^{i2\theta_{n-k}} \sin^2 \theta_{n-k} \rangle. \quad (3.30)$$

Sustituyendo (3.30) en (3.29) se llega a la identidad

$$\mathbf{q}_{k-1} = e^{2i\omega T} \mathbf{q}_k + 2i\omega e^{2i\omega T} \langle \xi_n \xi_{n-k} \rangle \langle e^{i2\theta_{n-k}} \sin^2 \theta_{n-k} \rangle \quad (3.31)$$

El factor $\langle e^{i2\theta_{n-k}} \sin^2 \theta_{n-k} \rangle$ nos da

$$\langle e^{i2\theta_{n-k}} \sin^2 \theta_{n-k} \rangle = \int_0^{2\pi} e^{i2\theta} \sin^2 \theta d\theta = -\frac{1}{4}. \quad (3.32)$$

Sea

$$\chi(n) = \frac{\langle \xi_k \xi_{n+k} \rangle}{\langle \xi_k^2 \rangle} \quad \text{o bien} \quad \langle \xi_n \xi_{n+k} \rangle = \langle \xi_n^2 \rangle \chi(k). \quad (3.33)$$

A partir de (3.32) y (3.33), (3.31) se puede escribir como

$$\mathbf{q}_{k-1} = e^{2i\omega T} \mathbf{q}_k - \frac{i\omega}{2} e^{2i\omega T} \langle \xi_n^2 \rangle \chi(k)$$

Al multiplicar los dos miembros por $e^{i2\omega Tk - i2\omega T}$ y sumar sobre k , llegamos a

$$\sum_{k=1}^{\infty} \mathbf{q}_{k-1} e^{i2\omega Tk - i2\omega T} = \sum_{k=1}^{\infty} e^{2i\omega Tk} \mathbf{q}_k e^{i2\omega Tk} - \frac{i\omega}{2} \langle \xi_n^2 \rangle \sum_{k=1}^{\infty} \chi(k) e^{i2\omega Tk}.$$

Esto nos da como resultado

$$\mathbf{q}_0 = -\frac{i\omega}{2} \langle \xi_n^2 \rangle \sum_{k=1}^{\infty} \chi(k) e^{i2\omega Tk}.$$

Con este resultado, podemos calcular $\langle \xi_n \sin 2\theta_n \rangle$. La parte imaginaria de \mathbf{q}_0 es

$$\langle \xi_n \sin 2\theta_n \rangle = \text{Im} \mathbf{q}_0 = -\frac{\omega}{2} \langle \xi_n^2 \rangle \sum_{k=1}^{\infty} \chi(k) \cos(2\omega Tk) \quad (3.34)$$

Sustituyendo (3.34) en la ecuación (3.36), para valores de energías no resonantes, obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{1}{\xi} &= \frac{\omega^2}{8} \langle \xi_n^2 \rangle - \frac{\omega}{2} \langle \xi_n \sin 2\theta_n \rangle \\ &= \frac{\omega^2 \langle \xi_n^2 \rangle}{8} \left[1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \chi(k) \cos(2\omega Tk) \right]. \end{aligned} \quad (3.35)$$

La expresión

$$\frac{1}{\xi} = \frac{\omega^2 \langle \xi_n^2 \rangle}{8} \left[1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \chi(k) \cos(2\omega Tk) \right] \quad (3.36)$$

es la *fórmula de Izrailev-Krokhin* [25]. La longitud de localización es el producto de dos factores:

- El primero es la expresión de Thouless

$$\frac{\omega^2 \langle \xi_n^2 \rangle}{8}$$

- El segundo

$$\left[1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \chi(k) \cos(2\omega Tk) \right],$$

el cual técnicamente se conoce como la densidad espectral

En el capítulo 3 vimos que cuando en una dimensión se tiene desorden, todos los estados se localizan. Sin embargo, es posible que el segundo factor de (3.36) se anule para ciertos intervalos de frecuencias; si esto ocurre, la expresión para el exponente de Lyapunov será cero y, por tanto, la longitud de localización divergerá. Si la longitud de localización diverge en un intervalo continuo de valores de la energía, significa que se tiene una transición localización-delocalización; es decir, se tienen bordes de movilidad en un modelo unidimensional.

Modelo bidimensional

En este capítulo se considera la localización de Anderson en un modelo aleatorio bidimensional. Se analiza la transmisión de ondas a través de una barrera aleatoria con simetría circular, constituida por una sucesión de N barreras de potencial con perfil rectangular en la dirección radial. Se introduce desorden en el modelo considerando barreras rectangulares de anchura fija y altura aleatoria. Se analizan las propiedades de transporte del modelo en términos del coeficiente de transmisión a través de la barrera; éste se determina por medio de la técnica de las matrices de transferencia. En ausencia de desorden se espera que las energías permitidas se agrupen en forma de bandas. Si introducimos desorden, las matrices de transferencia se volverán aleatorias y tenemos que estudiar productos de matrices aleatorias. Si el desorden tiene correlaciones, es posible que aparezcan bordes de movilidad, es decir, tendremos una transición localización-delocalización.

4.1. Matriz de transferencia para el modelo bidimensional

Consideremos una barrera aleatoria bidimensional con simetría circular, constituida por una sucesión de N barreras de potencial concéntricas (centro en el origen) con perfil rectangular en la dirección radial (Fig. 4.1). Una antena emite una onda circular desde el centro de las barreras hacia afuera de éstas. La n -ésima barrera tiene altura V_n y anchura b ; las barreras están equiespaciadas una distancia a (ver Fig. 4.2). Este modelo está descrito por

$$V_n(\rho) = \begin{cases} V_n & \text{para } (n-1)(a+b) + n_0a < \rho < (n-1)(a+b) + n_0a + b \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (4.1)$$

donde ρ es la coordenada radial, $n = 1, 2, \dots, N$. La primer barrera está a una distancia $\rho_1 = n_0a$ del centro; la n -ésima barrera está a una distancia $\rho_n = (n-1)(a+b) + n_0a$.

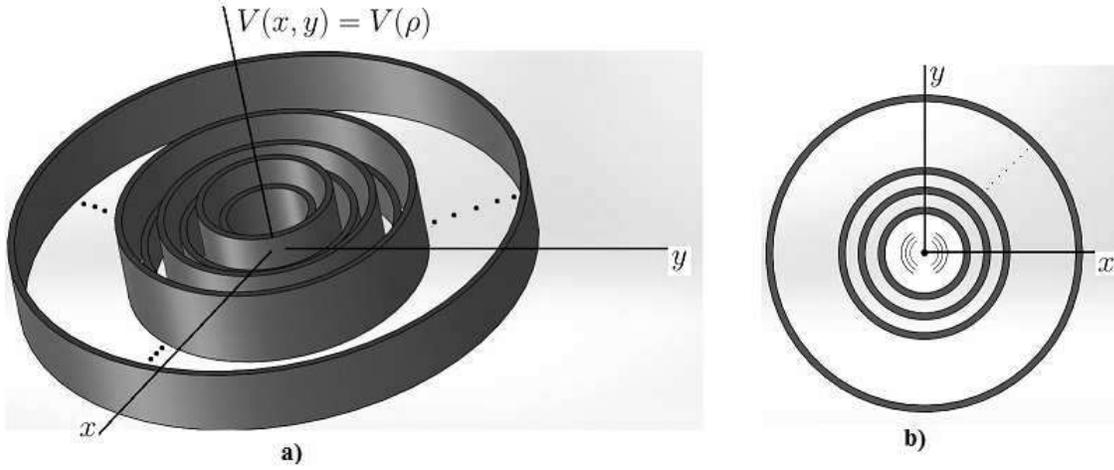


Figura 4.1: a) N barreras con simetría circular, concéntricas y centradas en el origen. b) Desde el centro una antena emite ondas que se propagan radialmente desde el centro hacia afuera de las barreras.

El método que vamos a usar para estudiar este modelo será el de matrices de transferencia. Llamemos al n -ésimo pozo región I, región II a su inmediata barrera posterior y región III al $(n + 1)$ -ésimo pozo.

Antes de poder hablar de matrices de transferencia necesitamos resolver la ecuación de Schrödinger en las regiones I, II y III. Consideraremos el caso $0 < E < V_n$ para este modelo.

La ecuación de Schrödinger en la región I es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = E\psi. \quad (4.2)$$

usando el operador ∇^2 en coordenadas polares, se obtiene

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right). \quad (4.3)$$

Expresemos la función de onda como un producto de funciones de cada una de las variables

$$\psi = R(\rho)\Phi(\phi). \quad (4.4)$$

Sustituyendo (4.4) en (4.3)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\Phi \frac{d^2 R}{d\rho^2} + R \frac{1}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \frac{R}{\rho^2} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} \right) = R\Phi E.$$

Si proponemos $d^2 \Phi / d\phi^2 = -\nu^2 \Phi$ con ν entero, tenemos que

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left(k^2 - \frac{\nu^2}{\rho^2} \right) R = 0, \quad (4.5)$$

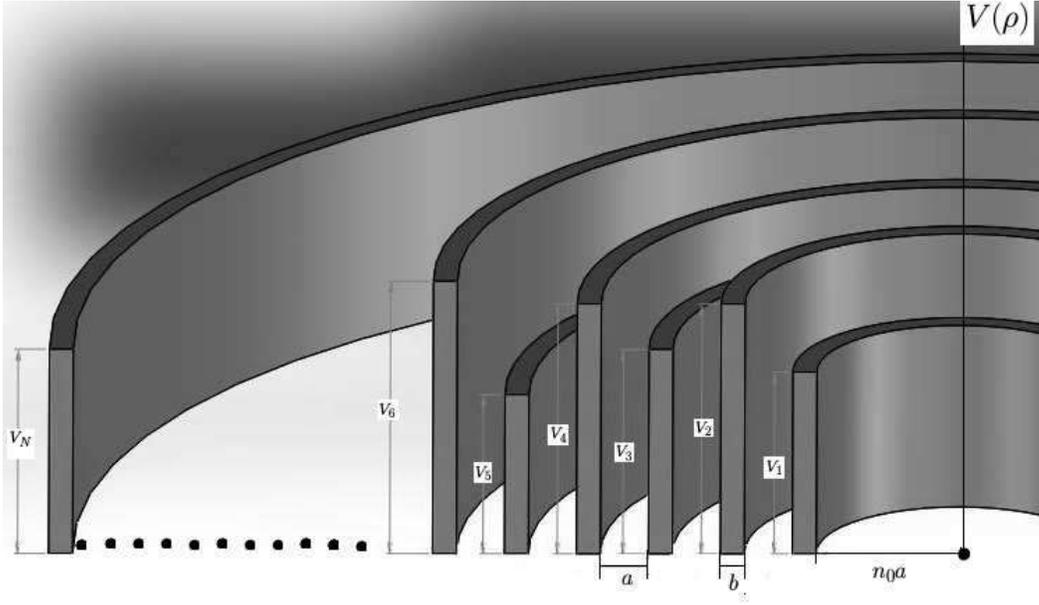


Figura 4.2: Sección transversal de N barreras con alturas V_1, V_2, \dots, V_N equiespaciadas una distancia a y con grosor b .

donde $k \equiv \sqrt{2mE/\hbar^2}$. Sea $z = k\rho$, de la regla de la cadena se tiene que $\frac{dR}{d\rho} = \frac{dR}{dz} \frac{dz}{d\rho} = k \frac{dR}{dz}$, (4.5) se convierte en

$$\frac{d^2 R}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{dR}{dz} + \left(1 - \frac{\nu^2}{z^2}\right) R = 0. \quad (4.6)$$

Se trata de la ecuación de Bessel. Proponemos como solución en la región I las funciones de Hankel

$$R_I(z) = A_n H_\nu^{(1)}(z) + B_n H_\nu^{(2)}(z),$$

donde $H_\nu^{(1)}(z)$ es la función de Hankel de primer especie y juega el papel de la onda plana e^{ikx} que se propaga hacia la derecha y $H_\nu^{(2)}(z)$ es la función de Hankel de segunda especie y juega el papel de la onda plana e^{-ikx} en el análogo caso unidimensional (ver Fig. 4.3).

Del mismo modo, la solución en el siguiente pozo (región III) será

$$R_{III}(z) = A_{n+1} H_\nu^{(1)}(z) + B_{n+1} H_\nu^{(2)}(z)$$

Queremos expresar los coeficientes A_{n+1} y B_{n+1} en función de A_n y B_n . Definimos la matriz de transferencia $\mathbf{M}(n)$ por medio de la expresión

$$\begin{bmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{bmatrix} = \mathbf{M}(n) \begin{bmatrix} A_n \\ B_n \end{bmatrix} \quad (4.7)$$

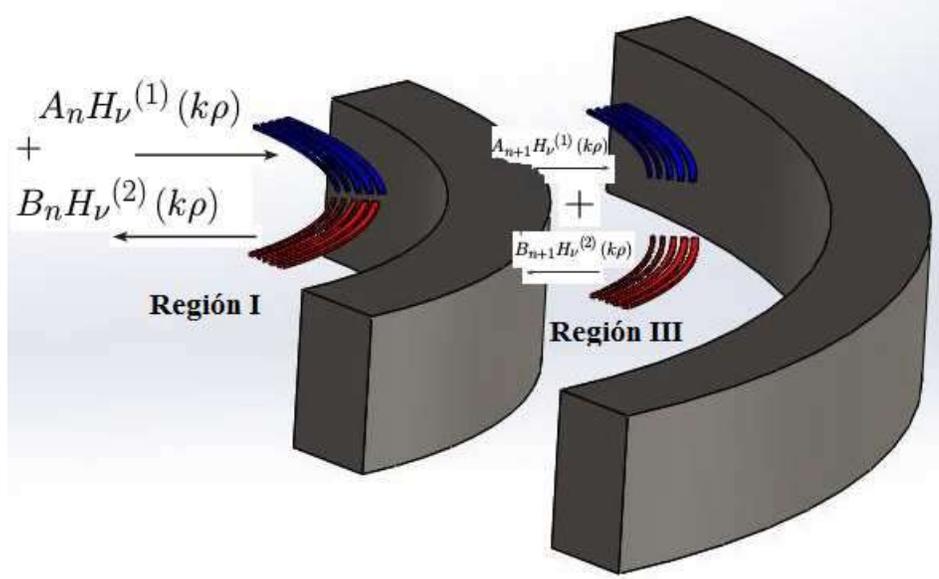


Figura 4.3: $H_\nu^{(1)}(z)$ representa una onda circular que va desde el centro hacia afuera radialmente (en azul) y $H_\nu^{(2)}(z)$ representa una onda circular que va desde afuera hacia el centro (en rojo). La solución de la ecuación de Schrödinger en los pozos es una superposición de dos ondas de este tipo.

Al igual que en la matriz del mapa hamiltoniano, es necesario definir otra matriz para conectar a las regiones I y III: esa matriz dependerá de la solución $R(\rho)$ en la región II. Sea $\mathbf{M}_{\text{I,II}}(n)$ la matriz de transferencia que conecta las regiones I y II, y $\mathbf{M}_{\text{II,III}}(n)$ la matriz que conecta II y III.

En la región II (n -ésima barrera) la ecuación de Schrödinger es

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V_n\psi = E\psi; \quad (4.8)$$

sustituyendo ∇^2 en coordenadas polares, obtenemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial\psi}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial\psi}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}\right) + V_n\psi = E\psi$$

y usando el método de separación de variables una vez más, con $\psi = R(\rho)\Phi(\phi)$, la ecuación de Schrödinger adquiere la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\Phi\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho}\Phi\frac{dR}{d\rho} + \frac{1}{\rho^2}R\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}\right) + V_nR\Phi = ER\Phi.$$

Dividiendo por $-\frac{\hbar^2}{2m}\Phi$

$$\left(\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{dR}{d\rho} + \frac{1}{\rho^2}R\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}\right) + \frac{2m(E - V_n)}{\hbar^2}R = 0.$$

Si proponemos $\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = -\nu^2\Phi$ tenemos que

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left(-\frac{\nu^2}{\rho^2} + \frac{2m(E - V_n)}{\hbar^2} \right) R = 0,$$

con $\beta_n \equiv \sqrt{2m(V_n - E)/\hbar^2}$ la ecuación nos da

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left(-\beta_n^2 - \frac{\nu^2}{\rho^2} \right) R = 0. \quad (4.9)$$

Sea $w = i\beta_n\rho$ (donde $i^2 = -1$), entonces $\frac{dw}{d\rho} = i\beta_n$. Usando la regla de la cadena $\frac{dR}{d\rho} = i\beta_n \frac{dR}{dw}$, (4.9) se convierte en

$$\frac{d^2R}{dw^2} + \frac{1}{w} \frac{dR}{dw} + \left(1 - \frac{\nu^2}{w^2} \right) R = 0. \quad (4.10)$$

La solución de (4.10) es de la forma:

$$R_{II} = C_n H_\nu^{(1)}(w) + D_n H_\nu^{(2)}(w) \quad (4.11)$$

Definimos la matrices $\mathbf{M}_{I,II}(n)$ y $\mathbf{M}_{II,III}(n)$ por medio de la relaciones

$$\begin{bmatrix} C_n \\ D_n \end{bmatrix} = \mathbf{M}_{I,II}(n) \begin{bmatrix} A_n \\ B_n \end{bmatrix} \quad \text{y} \quad \begin{bmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{bmatrix} = \mathbf{M}_{II,III}(n) \begin{bmatrix} C_n \\ D_n \end{bmatrix}.$$

Las componentes de estas matrices estarán determinadas por las condiciones de continuidad de R y $\frac{dR}{d\rho}$. Empecemos con la deducción de las componentes de la matriz $\mathbf{M}_{I,II}(n)$. Las condiciones de continuidad son:

$$R_I \Big|_{\rho=\rho_n-b} = R_{II}(i\beta_n\rho) \Big|_{\rho=\rho_n-b} \quad \text{y} \quad \frac{dR_I}{d\rho} \Big|_{\rho=\rho_n-b} = \frac{dR_{II}}{d\rho} \Big|_{\rho=\rho_n-b}. \quad (4.12)$$

Teniendo así

$$A_n H_\nu^{(1)}(k\rho_n - kb) + B_n H_\nu^{(2)}(k\rho_n - kb) = C_n H_\nu^{(1)}(i\beta_n\rho - i\beta_n b) + D_n H_\nu^{(2)}(i\beta_n\rho - i\beta_n b) \quad (4.13)$$

y

$$kA_n H_\nu^{(1)'}(k\rho_n - kb) + kB_n H_\nu^{(2)'}(k\rho_n - kb) = i\beta_n C_n H_\nu^{(1)'}(i\beta_n\rho - i\beta_n b) + i\beta_n D_n H_\nu^{(2)'}(i\beta_n\rho - i\beta_n b). \quad (4.14)$$

CAPÍTULO 4. MODELO BIDIMENSIONAL

Multiplicando (4.13) por $i\beta_n CH_\nu^{(1)'}(i\beta_n\rho - i\beta_nb)$ y (4.14) por $CH_\nu^{(1)}(i\beta_n\rho - i\beta_nb)$ y restándolas, encontramos que

$$D_n = \frac{\pi(\rho_n - b)i}{4} \left[kH_\nu^{(1)}(i\beta_n\rho - i\beta_nb)H_\nu^{(1)'}(k\rho_n - kb) \right. \\ \left. - i\beta_n H_\nu^{(1)'}(i\beta_n\rho - i\beta_nb)H_\nu^{(1)}(k\rho_n - kb) \right] A_n \\ + \frac{\pi(\rho_n - b)i}{4} \left[kH_\nu^{(1)}(i\beta_n\rho - i\beta_nb)H_\nu^{(2)'}(k\rho_n - kb) \right. \\ \left. - i\beta_n H_\nu^{(1)'}(i\beta_n\rho - i\beta_nb)H_\nu^{(2)}(k\rho_n - kb) \right] B_n, \quad (4.15)$$

donde hemos usado la identidad $H^{(1)}(z)H^{(2)'}(z) - H^{(1)'}(z)H^{(2)}(z) = -4i/(\pi z)$. Si ahora multiplicamos (4.13) por $i\beta_n H_\nu^{(2)'}(i\beta_n\rho - i\beta_nb)$ y (4.14) por $H_\nu^{(2)}(i\beta_n\rho - i\beta_nb)$, las restamos, hallamos

$$C_n = \frac{\pi(\rho_n - b)i}{4} \left[i\beta_n H_\nu^{(2)'}(i\beta_n\rho - i\beta_nb)H_\nu^{(1)}(k\rho_n - kb) \right. \\ \left. - kH_\nu^{(2)}(i\beta_n\rho - i\beta_nb)H_\nu^{(1)'}(k\rho_n - kb) \right] A_n \\ + \frac{\pi(\rho_n - b)i}{4} \left[i\beta_n H_\nu^{(2)'}(i\beta_n\rho - i\beta_nb)H_\nu^{(2)}(k\rho_n - kb) \right. \\ \left. - kH_\nu^{(2)}(i\beta_n\rho - i\beta_nb)H_\nu^{(2)'}(k\rho_n - kb) \right] B_n \quad (4.16)$$

Así, las componentes de la matriz $\mathbf{M}_{\mathbf{I},\mathbf{II}}(n)$ son:

$$[\mathbf{M}_{\mathbf{I},\mathbf{II}}(n)]_{11} = \frac{\pi(\rho_n - b)i}{4} \left[i\beta_n H_\nu^{(2)'}(i\beta_n\rho - i\beta_nb)H_\nu^{(1)}(k\rho_n - kb) \right. \\ \left. - kH_\nu^{(2)}(i\beta_n\rho - i\beta_nb)H_\nu^{(1)'}(k\rho_n - kb) \right] \quad (4.17)$$

$$[\mathbf{M}_{\mathbf{I},\mathbf{II}}(n)]_{12} = \frac{\pi(\rho_n - b)i}{4} \left[i\beta_n H_\nu^{(2)'}(i\beta_n\rho - i\beta_nb)H_\nu^{(2)}(k\rho_n - kb) \right. \\ \left. - kH_\nu^{(2)}(i\beta_n\rho - i\beta_nb)H_\nu^{(2)'}(k\rho_n - kb) \right] \quad (4.18)$$

$$[\mathbf{M}_{\mathbf{I},\mathbf{II}}(n)]_{21} = \frac{\pi(\rho_n - b)i}{4} \left[kH_\nu^{(1)}(i\beta_n\rho - i\beta_nb)H_\nu^{(1)'}(k\rho_n - kb) \right. \\ \left. - i\beta_n H_\nu^{(1)'}(i\beta_n\rho - i\beta_nb)H_\nu^{(1)}(k\rho_n - kb) \right] \quad (4.19)$$

y

$$[\mathbf{M}_{\mathbf{I},\mathbf{II}}(n)]_{22} = \frac{\pi(\rho_n - b)i}{4} \left[kH_\nu^{(1)}(i\beta_n\rho - i\beta_nb)H_\nu^{(2)'}(k\rho_n - kb) \right. \\ \left. - i\beta_n H_\nu^{(1)'}(i\beta_n\rho - i\beta_nb)H_\nu^{(2)}(k\rho_n - kb) \right] \quad (4.20)$$

Ahora, encontremos las componentes de la matriz $\mathbf{M}_{\text{II,III}}(n)$. Aplicando las condiciones de continuidad para la R_{II} y R_{III}

$$R_{II}(i\beta_n\rho)\Big|_{\rho=\rho_n} = R_{III}(k\rho)\Big|_{\rho=\rho_n} \quad \text{y} \quad \frac{dR_{II}}{d\rho}\Big|_{\rho=\rho_n} = \frac{dR_{III}}{d\rho}\Big|_{\rho=\rho_n},$$

tenemos el sistema de ecuaciones

$$C_n H_\nu^{(1)}(i\beta_n\rho) + D_n H_\nu^{(2)}(i\beta_n\rho) = A_{n+1} H_\nu^{(1)}(k\rho_n) + B_{n+1} H_\nu^{(2)}(k\rho_n) \quad (4.21)$$

$$i\beta_n C_n H_\nu^{(1)'}(i\beta_n\rho) + i\beta_n D_n H_\nu^{(2)'}(i\beta_n\rho) = k A_{n+1} H_\nu^{(1)'}(k\rho_n) + k B_{n+1} H_\nu^{(2)'}(k\rho_n) \quad (4.22)$$

Multiplicando (4.21) por $k H_\nu^{(1)'}(k\rho_n)$, (4.22) por $H_\nu^{(1)}(k\rho_n)$ y restando, obtenemos las siguientes expresiones para A_{n+1} y B_{n+1}

$$\begin{aligned} A_{n+1} = & \frac{\pi\rho_n i}{4} \left[k H_\nu^{(1)}(i\beta_n\rho_n) H_\nu^{(2)'}(k\rho_n) - i\beta_n H_\nu^{(2)}(k\rho_n) H_\nu^{(1)'}(i\beta_n\rho_n) \right] C_n \\ & + \frac{\pi\rho_n i}{4} \left[k H_\nu^{(2)}(i\beta_n\rho_n) H_\nu^{(2)'}(k\rho_n) - i\beta_n H_\nu^{(2)}(k\rho_n) H_\nu^{(2)'}(i\beta_n\rho_n) \right] D_n \end{aligned} \quad (4.23)$$

$$\begin{aligned} B_{n+1} = & \frac{\pi\rho_n i}{4} \left[i\beta_n H^{(1)}(k\rho_n) H^{(1)'}(i\beta_n\rho_n) - k H^{(1)}(i\beta_n\rho_n) H^{(1)'}(k\rho_n) \right] C_n \\ & + \frac{\pi\rho_n i}{4} \left[i\beta_n H^{(1)}(k\rho_n) H^{(2)'}(i\beta_n\rho_n) - k H^{(2)}(i\beta_n\rho_n) H^{(1)'}(k\rho_n) \right] D_n \end{aligned} \quad (4.24)$$

de donde vemos que las componentes de la matriz $\mathbf{M}_{\text{II,III}}(n)$ son

$$[M_{\text{II,III}}(n)]_{11} = \frac{\pi\rho_n i}{4} \left[k H_\nu^{(1)}(i\beta_n\rho_n) H_\nu^{(2)'}(k\rho_n) - i\beta_n H_\nu^{(2)}(k\rho_n) H^{(1)'}(i\beta_n\rho_n) \right]$$

$$[M_{\text{II,III}}(n)]_{12} = \frac{\pi\rho_n i}{4} \left[k H_\nu^{(2)}(i\beta_n\rho_n) H_\nu^{(2)'}(k\rho_n) - i\beta_n H_\nu^{(2)}(k\rho_n) H_\nu^{(2)'}(i\beta_n\rho_n) \right]$$

$$[M_{\text{II,III}}(n)]_{21} = \frac{\pi\rho_n i}{4} \left[i\beta_n H_\nu^{(1)}(k\rho_n) H_\nu^{(1)'}(i\beta_n\rho_n) - k H_\nu^{(1)}(i\beta_n\rho_n) H_\nu^{(1)'}(k\rho_n) \right]$$

$$[M_{\text{II,III}}(n)]_{22} = \frac{\pi\rho_n i}{4} \left[i\beta_n H_\nu^{(1)}(k\rho_n) H_\nu^{(2)'}(i\beta_n\rho_n) - k H_\nu^{(2)}(i\beta_n\rho_n) H_\nu^{(1)'}(k\rho_n) \right]$$

Ahora que tenemos las matrices $\mathbf{M}_{\text{I,II}}(n)$ y $\mathbf{M}_{\text{II,III}}(n)$, podemos encontrar la matriz $\mathbf{M}(n)$ realizando el producto $\mathbf{M}_{\text{II,III}}(n) \cdot \mathbf{M}_{\text{I,II}}(n)$; expresión que conecta los coeficientes de los pozos colindantes de la n -ésima barrera. Cada barrera queda especificada por su potencial V_n y a su vez, por $\beta_n \equiv \sqrt{\frac{2m(V_n - E)}{\hbar^2}}$. De ahora en adelante, escribiremos \mathbf{M}_n en vez de $\mathbf{M}(n)$. Las entradas de la matriz \mathbf{M}_n serán

$$\begin{aligned}
 [\mathbf{M}_n]_{11} = & -\frac{\pi^2 \rho_n (\rho_n - b)}{16} \left\{ \left[k H_\nu^{(1)}(i\beta_n \rho_n) H_\nu^{(2)'}(k\rho_n) \right. \right. \\
 & - i\beta_n H_\nu^{(2)}(k\rho_n) H_\nu^{(1)'}(i\beta_n \rho_n) \left. \right] \left[i\beta_n H_\nu^{(2)'}(i\beta_n \rho_n - i\beta_n b) H_\nu^{(1)}(k\rho_n - kb) \right. \\
 & - k H_\nu^{(2)}(i\beta_n \rho_n - i\beta_n b) H_\nu^{(1)'}(k\rho_n - kb) \left. \right] + \left[k H_\nu^{(2)}(i\beta_n \rho_n) H_\nu^{(2)'}(k\rho_n) \right. \\
 & - i\beta_n H_\nu^{(2)}(k\rho_n) H_\nu^{(2)'}(i\beta_n \rho_n) \left. \right] \left[k H_\nu^{(1)}(i\beta_n \rho_n - i\beta_n b) H_\nu^{(1)'}(k\rho_n - kb) \right. \\
 & \left. \left. - i\beta_n H_\nu^{(1)'}(i\beta_n \rho_n - i\beta_n b) H_\nu^{(1)}(k\rho_n - kb) \right] \right\}, \quad (4.25)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\mathbf{M}_n]_{12} = & -\frac{\pi^2 \rho_n (\rho_n - b)}{16} \left\{ \left[k H_\nu^{(1)}(i\beta_n \rho_n) H_\nu^{(2)'}(k\rho_n) \right. \right. \\
 & - i\beta_n H_\nu^{(2)}(k\rho_n) H_\nu^{(1)'}(i\beta_n \rho_n) \left. \right] \left[i\beta_n H_\nu^{(2)'}(i\beta_n \rho_n - i\beta_n b) H_\nu^{(2)}(k\rho_n - kb) \right. \\
 & - k H_\nu^{(2)}(i\beta_n \rho_n - i\beta_n b) H_\nu^{(2)'}(k\rho_n - kb) \left. \right] + \left[k H_\nu^{(2)}(i\beta_n \rho_n) H_\nu^{(2)'}(k\rho_n) \right. \\
 & - i\beta_n H_\nu^{(2)}(k\rho_n) H_\nu^{(2)'}(i\beta_n \rho_n) \left. \right] \left[k H_\nu^{(1)}(i\beta_n \rho_n - i\beta_n b) H_\nu^{(2)'}(k\rho_n - kb) \right. \\
 & \left. \left. - i\beta_n H_\nu^{(1)'}(i\beta_n \rho_n - i\beta_n b) H_\nu^{(2)}(k\rho_n - kb) \right] \right\}, \quad (4.26)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\mathbf{M}_n]_{21} = & -\frac{\pi^2 \rho_n (\rho_n - b)}{16} \left\{ \left[i\beta_n H_\nu^{(1)}(k\rho_n) H_\nu^{(1)'}(i\beta_n \rho_n) \right. \right. \\
 & - k H_\nu^{(1)}(i\beta_n \rho_n) H_\nu^{(1)'}(k\rho_n) \left. \right] \left[i\beta_n H_\nu^{(2)'}(i\beta_n \rho_n - i\beta_n b) H_\nu^{(1)}(k\rho_n - kb) \right. \\
 & \left. - k H_\nu^{(2)}(i\beta_n \rho_n - i\beta_n b) H_\nu^{(1)'}(k\rho_n - kb) \right] \\
 & + \left[i\beta_n H_\nu^{(1)}(k\rho_n) H_\nu^{(2)'}(i\beta_n \rho_n) \right. \\
 & \left. - k H_\nu^{(2)}(i\beta_n \rho_n) H_\nu^{(1)'}(k\rho_n) \right] \left[k H_\nu^{(1)}(i\beta_n \rho - i\beta_n b) H_\nu^{(1)'}(k\rho_n - kb) \right. \\
 & \left. \left. - i\beta_n H_\nu^{(1)'}(i\beta_n \rho_n - i\beta_n b) H_\nu^{(1)}(k\rho_n - kb) \right] \right\} \quad (4.27)
 \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}
 [\mathbf{M}_n]_{22} = & -\frac{\pi^2 \rho_n (\rho_n - b)}{16} \left\{ \left[i\beta_n H_\nu^{(1)}(k\rho_n) H_\nu^{(1)'}(i\beta_n \rho_n) \right. \right. \\
 & - k H_\nu^{(1)}(i\beta_n \rho_n) H_\nu^{(1)'}(k\rho_n) \left. \right] \left[i\beta_n H_\nu^{(2)'}(i\beta_n \rho - i\beta_n b) H_\nu^{(2)}(k\rho_n - kb) \right. \\
 & \quad \left. - k H_\nu^{(2)}(i\beta_n \rho_n - i\beta_n b) H_\nu^{(2)'}(k\rho_n - kb) \right] \\
 & + \left[i\beta_n H_\nu^{(1)}(k\rho_n) H_\nu^{(2)'}(i\beta_n \rho_n) \right. \\
 & - k H_\nu^{(2)}(i\beta_n \rho_n) H_\nu^{(1)'}(k\rho_n) \left. \right] \left[k H_\nu^{(1)}(i\beta_n \rho_n - i\beta_n b) H_\nu^{(2)'}(k\rho_n - kb) \right. \\
 & \quad \left. - i\beta_n H_\nu^{(1)'}(i\beta_n \rho_n - i\beta_n b) H_\nu^{(2)}(k\rho_n - kb) \right] \left. \right\}. \quad (4.28)
 \end{aligned}$$

Con la condición inicial

$$\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix}$$

y las matrices de transferencia, podemos encontrar $(A_2, B_2) = \mathbf{v}_2 = \mathbf{M}_1 \mathbf{v}_1$; $(A_3, B_3) = \mathbf{v}_3 = \mathbf{M}_2 \mathbf{v}_2 = \mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1 \mathbf{v}_1$, y así sucesivamente. De modo que

$$\mathbf{v}_N = \mathbf{M}_{N-1} \mathbf{M}_{N-2} \dots \mathbf{M}_3 \mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1 \mathbf{v}_1.$$

Por lo tanto, \mathbf{v}_1 y \mathbf{v}_N están relacionados por medio de la matriz de transferencia

$$\mathbf{M} \equiv \mathbf{M}_{N-1} \mathbf{M}_{N-2} \dots \mathbf{M}_3 \mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1.$$

4.2. Coeficiente de transmisión para el modelo

La solución en el primer pozo del modelo definido en la sección anterior es

$$R_1(\rho) = A_1 H_\nu^{(1)}(k\rho) + B_1 H_\nu^{(2)}(k\rho)$$

mientras que en el último pozo (N -ésimo) la función de onda es

$$R_N(\rho) = A_N H_\nu^{(1)}(k\rho).$$

El efecto de todas las barreras puede obtenerse por medio de una barrera efectiva (ver Fig. 4.4) Queremos estudiar la transmisión parcial de la onda incidente. La densidad de probabilidad (o flujo) para una función de onda $\Psi(\mathbf{r})$ está dada por

$$\mathbf{J} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi(\mathbf{r}) \nabla \Psi^*(\mathbf{r}) - \Psi^*(\mathbf{r}) \nabla \Psi(\mathbf{r})).$$

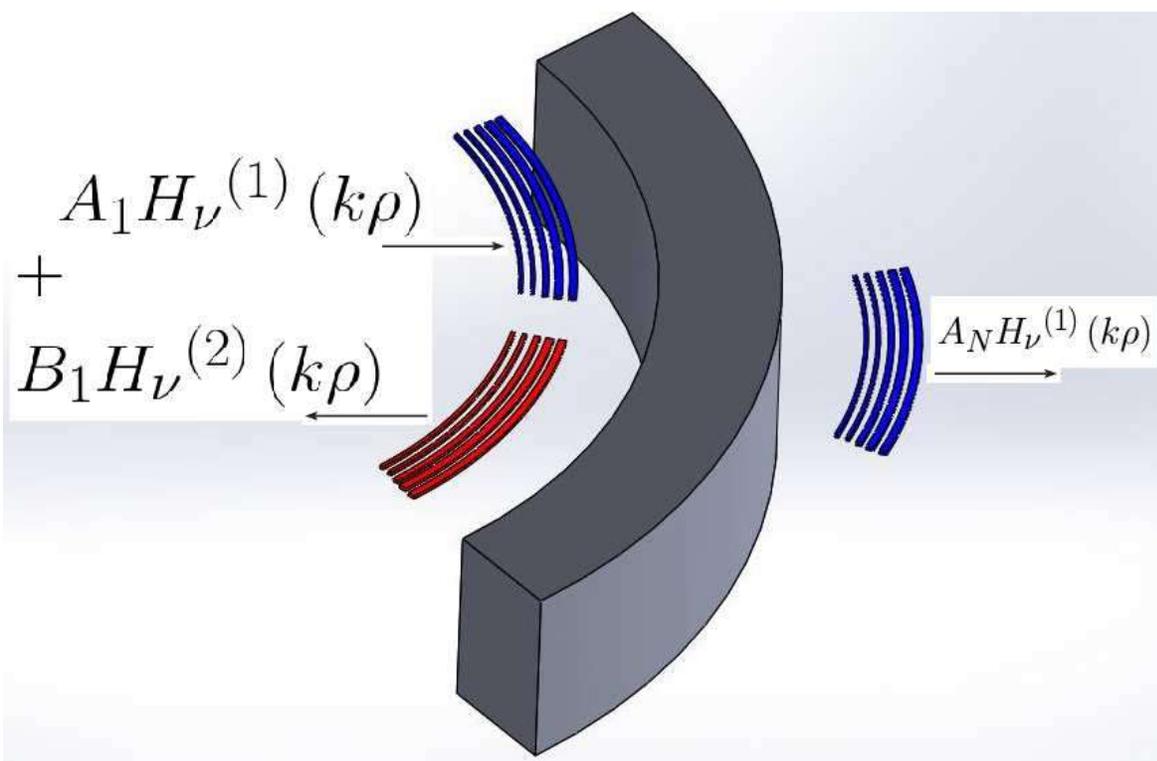


Figura 4.4: En esta figura se muestra la barrera efectiva, ésta tiene el efecto de la interacción de la onda $A_1 H_\nu^{(1)}(k\rho)$ con todas las barreras. Al final, se obtiene la onda $A_N H_\nu^{(1)}(k\rho)$.

El coeficiente de transmisión se define como la razón de la densidad de corriente transmitida $|\mathbf{J}_{transmitida}|$ a la densidad de corriente incidente $|\mathbf{J}_{incidente}|$, es decir

$$T = \frac{|\mathbf{J}_{transmitida}|}{|\mathbf{J}_{incidente}|}. \quad (4.29)$$

En nuestro caso, la onda incidente es $\psi_i = A_1 H_\nu^{(1)}(k\rho)$; como ψ_i sólo depende de ρ , la densidad de corriente incidente es

$$\begin{aligned}
 \mathbf{J}_{incidente} &= \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi_i \frac{\partial}{\partial \rho} \psi_i^* - \psi_i^* \frac{\partial}{\partial \rho} \psi_i \right) \hat{\rho} \\
 &= \frac{i\hbar}{2m} \left(A_1 H_\nu^{(1)}(k\rho) \frac{\partial}{\partial \rho} [A_1 H_\nu^{(1)}(k\rho)]^* - [A_1 H_\nu^{(1)}(k\rho)]^* \frac{\partial}{\partial \rho} A_1 H_\nu^{(1)}(k\rho) \right) \hat{\rho} \\
 &= \frac{i\hbar}{2m} \left(A_1 A_1^* H_\nu^{(1)}(k\rho) \frac{\partial}{\partial \rho} [H_\nu^{(1)}(k\rho)]^* - A_1^* A_1 [H_\nu^{(1)}(k\rho)]^* \frac{\partial}{\partial \rho} H_\nu^{(1)}(k\rho) \right) \hat{\rho} \\
 &= \frac{i\hbar}{2m} \left(A_1 A_1^* H_\nu^{(1)}(k\rho) \frac{\partial}{\partial \rho} [H_\nu^{(2)}(k\rho)] - A_1^* A_1 [H_\nu^{(2)}(k\rho)] \frac{\partial}{\partial \rho} H_\nu^{(1)}(k\rho) \right) \hat{\rho} \\
 &= \frac{i\hbar}{2m} \left(k A_1 A_1^* H_\nu^{(1)}(k\rho) H_\nu^{(2)'}(k\rho) - k A_1^* A_1 H_\nu^{(2)}(k\rho) H_\nu^{(1)'}(k\rho) \right) \hat{\rho} \\
 &= \frac{i\hbar k |A_1|^2}{2m} \left(H_\nu^{(1)}(k\rho) H_\nu^{(2)'}(k\rho) - H_\nu^{(2)}(k\rho) H_\nu^{(1)'}(k\rho) \right) \hat{\rho} \\
 &= \frac{i\hbar k |A_1|^2}{2m} W \left(H_\nu^{(1)}(k\rho), H_\nu^{(2)}(k\rho) \right) \hat{\rho}. \quad (4.30)
 \end{aligned}$$

donde $W \left(H_\nu^{(1)}(k\rho), H_\nu^{(2)}(k\rho) \right)$ es el wronskiano de $H_\nu^{(1)}(k\rho)$ y $H_\nu^{(2)}(k\rho)$. Del mismo modo, para la onda transmitida $\psi_t = A_N H_\nu^{(1)}(k\rho)$, la intensidad de corriente transmitida es

$$\begin{aligned}
 \mathbf{J}_{transmitida} &= \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi_t \frac{\partial}{\partial \rho} \psi_t^* - \psi_t^* \frac{\partial}{\partial \rho} \psi_t \right) \hat{\rho} \\
 &= \frac{i\hbar k |A_N|^2}{2m} W \left(H_\nu^{(1)}(k\rho), H_\nu^{(2)}(k\rho) \right) \hat{\rho}. \quad (4.31)
 \end{aligned}$$

Por lo tanto

$$T = \frac{|A_N|^2}{|A_1|^2} \quad (4.32)$$

La matriz de transferencia \mathbf{M} nos permite expresar A_N en términos de A_1 . De la sección anterior, sabemos que

$$\begin{bmatrix} A_N \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} \quad (4.33)$$

de donde vemos que

$$A_N = \frac{\det M}{M_{22}} A_1 \quad (4.34)$$

Sustituyendo (4.34) en (4.32), se obtiene

$$\begin{aligned}
 T &= \frac{|A_N|^2}{|A_1|^2} = \left| \frac{\det M}{M_{22}} A_1 \right|^2 \frac{1}{|A_1|^2} \\
 &= \frac{|\det M|^2}{|M_{22}|^2}. \quad (4.35)
 \end{aligned}$$

Hemos encontrado una expresión exacta para T suponiendo que conocemos la matriz de transferencia total \mathbf{M} ; sin embargo, se requiere de un trabajo ulterior para volverla explícita. Este resultado se puede utilizar para calcular numéricamente el coeficiente de transmisión.

4.3. Ecuación de Helmholtz

Existe un paralelismo entre la ecuación de Schrödinger para el modelo bidimensional y la ecuación de Helmholtz; veamos por qué. Las ondas electromagnéticas satisfacen la ecuación de onda

$$\nabla^2 F(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} F(\mathbf{r}, t) \quad (4.36)$$

donde F es la función de onda y v es la rapidez a la que se propaga la onda. Aquí, $|F|^2$ no representa una densidad de probabilidad; F puede representar el campo eléctrico E o el campo magnético B . Cuando las ondas electromagnéticas son monocromáticas (la dependencia es de la forma $F = f(\mathbf{r})e^{i\omega t}$), la ecuación de onda se reduce a la ecuación de Helmholtz

$$\nabla^2 f + k^2 f = 0$$

donde $v = \omega/k$.

Si ahora escribimos la ecuación de Schrödinger para el n -ésimo pozo del modelo bidimensional, vemos que

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = E\psi \quad (4.37)$$

puede reescribirse como

$$\nabla^2 \psi + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right) \psi = 0. \quad (4.38)$$

que no es más que la ecuación de Helmholtz.

Hasta ahora, hemos interpretado al modelo bidimensional como un problema de transmisión de electrones en dispositivos de estado sólido; sin embargo, el paralelismo entre las ecuaciones de Schrödinger y Helmholtz nos permite también interpretarlo como un problema de transmisión de ondas electromagnéticas.

4.4. Conclusiones

En este trabajo se presenta un modelo bidimensional para el cual, debido a su simetría, la ecuación de Schrödinger se reduce a una ecuación diferencial unidimensional cuya solución es una superposición de funciones de Hankel de primer y segunda especie, es decir, ondas circulares salientes y entrantes que se propagan a través de las barreras. Se mostró cómo se puede determinar el coeficiente de transmisión por medio de la técnica de matrices de transferencia. Las fórmulas analíticas obtenidas permiten

plantear el estudio de las propiedades de transmisión con métodos numéricos. En el caso en el que no haya desorden (todas las alturas de las barreras sean iguales) se espera que aparezca una estructura de bandas. En el modelo con desorden, los estados se localizarán, pero, si el desorden tiene correlaciones, podemos obtener una transición localización-delocalización, formándose bordes de movilidad efectivos.

Capítulo 5

Conclusiones

Los modelos unidimensionales nos ayudan a comprender las propiedades de sistemas físicos reales, por ejemplo el modelo de Kronig Penney a entender cómo es que se presenta la estructura de banda en los sistemas cristalinos, el modelo de Anderson 1D cómo la intensidad del desorden hace que los estados se localicen.

Proponemos un modelo bidimensional que consiste en una barrera formada por una superposición de N barreras circulares, y, debido a su simetría, se reduce a un modelo unidimensional. Sabemos que en los sistemas unidimensionales, por muy pequeña que sea la intensidad del desorden, los estados electrónicos se localizarán. Para estudiar las propiedades de transporte, calculamos una fórmula analítica para el coeficiente de transmisión, y, a pesar de que es exacta, no es suficiente para hacer un estudio más profundo pero nos sirve para plantear el estudio con métodos numéricos. Este estudio queda todavía por hacer.

En ausencia de desorden, es de esperar que se den intervalos de energía para los cuales el coeficiente de transmisión es distinto de cero e intervalos en los que es nulo, recuperando una estructura de bandas.

Dado que nuestro modelo se puede reducir a uno unidimensional, se espera que aparezcan bordes de movilidad si introducimos desorden con correlación de largo alcance. El modelo bidimensional queda descrito por la ecuación de Schrödinger; sin embargo, ésta se reduce a la ecuación de Helmholtz, esto significa que el modelo puede interpretarse como el estudio de propagación de ondas electromagnéticas. Se trata de una ecuación que describe dos procesos distintos: transmisión de electrones en dispositivos de estado sólido y transmisión de ondas electromagnéticas.

La posibilidad de aplicar los resultados teóricos tanto a la propagación de electrones en dispositivos de estado sólidos cuanto a la propagación de ondas electromagnéticas en guías de onda es importante, porque abre la posibilidad de verificar las predicciones teóricas en experimentos con microondas, como ya se ha hecho en el caso de modelos estrictamente unidimensionales [10].

Bibliografía

- [1] Giuseppe Grosso and Giuseppe Pastori Parravicini (2000), *Solid State Physics*. ACADEMIC PRESS.
- [2] Ashcroft, Neil W., and N.D. Mermin, *Solid State Physics*. Thomson Learning (1976).
- [3] M. Ali Omar, *ELEMENTARY SOLID STATE PHYSICS: Principles and Applications*. Addison-Wesley (1975).
- [4] Cohen-Tannoudji, C., B. Diu and F. Lalce., *Quantum Mechanics*. John Wiley & Sons, New York (1977).
- [5] R. de L. Kronig, W. G. Penney, *Proc. Roy. Soc. (Series A)* **130**, 499 (1931).
- [6] Kramer, MacKinnon, *Rep. Prog. Phys.* 56, 1469 (1993).
- [7] Richard J. D. Tilley. *Understanding Solids: The Science of Materials*. Wiley (2004)
- [8] P. W. Anderson, *Rev. Mod. Phys.* **50**, 191 (1978).
- [9] P. Lloyd, “Exactly solvable model of electronic states in a three dimensional disordered Hamiltonian: no-existence of localized states”, *J. Phys. C2* (1969) 1717.
- [10] Peter Markoš, Costas M. Soukoulis, *Wave Propagation: From Electrons to Photonic Crystals and Left-Handed Materials*. Princeton University Press, (2008).
- [11] E. Abrahams, *50 years of Anderson Localization*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd (2010).
- [12] Ishii, K., Localization of eigenstates and transport phenomena in one-dimensional disordered systems. *Prog. Theor. Phys. Supp.* **53**, 77 (1973)
- [13] Economou, E. N., *Green’s Functions in Quantum Physics*, 2nd ed. Springer, Berlin (1979).

BIBLIOGRAFÍA

- [14] H. Furstenberg, Noncommuting random products. *Trans. Amer. Math. Soc.* **18** (1963), 377.
- [15] V. I. Oseledec, A multiplicative ergodic theorem. Lyapunov characteristic numbers for dynamical systems, *Trudy Moskov. Mat. Obšč.* 19 (1968). 197-221.
- [16] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello and T. V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.* 42, 673 (1979).
- [17] Mott N. F. and Davis E. A. *Electronic Processes in Non-Crystalline materials 2nd edition, Oxford:Clarendon (1979)*
- [18] Dr. Andrea Crisanti, Professor Dr. Giovanni Paladin, Professor Dr. Angelo Vulpiani, *Products of Random Matrices in Statistical Physics.* Springer-Verlag.
- [19] Borland R.E. (1963): *Proc. R. Soc. London A* 274 529.
- [20] H. Matsuda K. Ishii, “Localization of Normal Modes and Energy Transport in Disordered Harmonic Chain”. *Suppl. Prog. Theor. Phys.* 45 (1970) 56.
- [21] Thouless D.J. (1972): *J. Phys. C* 5 77
- [22] F. M. Izrailev, A. A. Krokhin, N. M. Makarov, Anomalous Localization in Low-Dimensional Systems with Correlated Disorder.
- [23] L. Tessieri, I. F. Herrera-González, F. M. Izrailev, Anomalous localisation near the band centre in the 1D Anderson model: Hamiltonian map approach.
- [24] D. J. Thouless, p.1 in “La matière mal condensée - Ill-Condensed Matter”, R. Balian, R. Maynard, G. Toulouse eds., North-Holland (Amsterdam) and World Scientific (Singapore), 1979
- [25] F. M. Izrailev, S. Ruffo, L. Tessieri, *J. Phys. A: Math. Gen.* **31**, 5263 (1998)