

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

Tesis de maestría:

**MODELO DE KRONIG-PENNEY CON  
DESORDEN COMPOSITIVO Y  
ESTRUCTURAL: ANÁLISIS  
PERTURBATIVO**

Presenta:

**Lic. Julio César Hernández Herrejón**

Asesor:

**Dr. Luca Tessieri**

Morelia, Diciembre 2007

# Índice general

. Índice general	1
. <b>Introducción</b>	<b>3</b>
<b>1. Sistemas desordenados unidimensionales: introducción</b>	<b>7</b>
1.1. Modelos de sistemas desordenados . . . . .	7
1.2. Localización de Anderson . . . . .	11
1.3. Sistemas desordenados unidimensionales . . . . .	13
1.4. Resultados analíticos para modelos 1D: la técnica de las matrices de transferencia . . . . .	14
1.5. La relación de Herbert y Jones . . . . .	17
1.6. Superredes y guías de onda: aplicaciones experimentales de los modelos desordenados 1D . . . . .	19
<b>2. Método del mapa hamiltoniano</b>	<b>21</b>
2.1. Introducción . . . . .	21
2.2. El método del mapa hamiltoniano . . . . .	22
2.3. Análisis del modelo de Anderson . . . . .	24
2.4. Desorden correlacionado . . . . .	27
2.5. Correlaciones espaciales de largo alcance y efectos de deslocalización . . . . .	30
<b>3. Modelo de Kronig-Penney con desorden compositivo y estructural</b>	<b>33</b>
3.1. Introducción . . . . .	33
3.2. Teorema de Bloch . . . . .	34
3.3. El modelo de Kronig-Penney . . . . .	36
3.4. Modelo de Kronig-Penney con desorden . . . . .	39

3.5. El mapa hamiltoniano . . . . .	42
3.6. El exponente de Lyapunov . . . . .	48
3.7. Resultados para el modelo de Kronig-Penney con desorden . .	51
. <b>Conclusiones</b>	<b>54</b>
. <b>Bibliografía</b>	<b>55</b>

# Introducción

El estudio de los estados electrónicos y de las propiedades de transporte en medios desordenados ha revestido un gran interés en el ámbito de la física moderna desde que P. W. Anderson mostró en su trabajo pionero que los electrones en medios desordenados pueden quedar confinados en regiones limitadas del espacio [1].

En el ámbito de los sistemas desordenados el estudio de los modelos unidimensionales (1D) con desorden correlacionado representa una línea de investigación que ha tenido un rápido desarrollo en los últimos años. La atención hacia este tipo de sistemas se debe en buena medida al descubrimiento reciente del papel fundamental que desempeñan las correlaciones espaciales del desorden en la determinación de la estructura de los estados electrónicos. En efecto, los primeros estudios que en los años '60 analizaron la localización de Anderson en cadenas 1D se enfocaron en modelos totalmente aleatorios, es decir, con desorden carente de toda correlación espacial [2]. Para esta clase de modelos 1D se comprobó que cualquier grado de desorden, por pequeño que sea, produce localización exponencial de *todos* los electrones [2], a diferencia de lo que ocurre en los modelos tridimensionales (3D) donde los electrones resultan completamente localizados sólo si el grado de desorden es suficientemente grande. Estos resultados engendraron el convencimiento generalizado que en las cadenas 1D no existen estados extendidos y, consecuentemente, que no puede producirse una transición metal-aislante análoga a la que ocurre en muestras 3D cuando la intensidad del desorden rebasa un umbral crítico.

Sin embargo, en los últimos años se ha ido aclarando que las correlaciones espaciales del desorden pueden alterar significativamente las propiedades de localización de los estados electrónicos, hasta el punto de producir estados electrónicos extendidos aún en sistemas 1D. F. de Moura y M. Lyra fueron los primeros en mostrar numéricamente que secuencias de energías de sitio con correlaciones específicas de largo alcance pueden engendrar un *conjunto*

*continuo* de estados extendidos [3]. Sus resultados numéricos encontraron una justificación teórica en el trabajo de F. Izrailev y A. Krokhin, que derivaron una relación analítica entre la longitud de localización y los correladores binarios de las energías de sitio [4].

Debido a estos descubrimientos, los modelos 1D con desorden correlacionado han sido el objeto de una intensa actividad de investigación en la última década. Las predicciones teóricas se han verificado experimentalmente tanto analizando los estados electrónico en superredes de semiconductores [5] cuanto considerando la transmisión de microondas en una guía de onda monomodal con una sucesión aleatoria de dispersores correlacionados [6]. Los recientes avances teóricos incluyen la aplicación de los resultados obtenidos inicialmente para estados electrónicos en redes discretas a problemas distintos como la propagación de ondas en guías con una superficie corrugada [7] o la deslocalización de estados electrónicos en modelos casi-1d [8].

En los primeros trabajos dedicados al efecto de las correlaciones de largo alcance del desorden se consideraron modelos con desorden diagonal (esto es, modelos en los que las únicas variables aleatorias son las energías de sitio que atan al electrón a los sitios de la red). Sin embargo, las investigaciones sucesivas han ido extendiéndose a modelos hamiltonianos de fuerte enlace con desorden tanto en la diagonal principal cuanto fuera de ella. En estos modelos, no sólo las energías de sitio, sino también las probabilidades de que un electrón salte de un sitio a un sitio cercano son variables aleatorias. Entre las investigaciones recientes en este campo, se puede mencionar el trabajo en el que Izrailev y colaboradores consideraron un modelo con potencial de Kronig-Penney aperiódico [9]; más recientemente, el grupo de H. Cheragchi ha estado analizando la transición localización-deslocalización en modelos 1D con desorden fuera de la diagonal principal [10]. El estudio de modelos de fuerte enlace con desorden correlacionado en la diagonal principal y fuera de ella representa entonces un sujeto de gran interés en el ámbito de la física de la materia condensada.

El modelo de Kronig-Penney 1D es uno de los más estudiados para analizar las características de los electrones en potenciales periódicos. El modelo describe la dinámica de un electrón en un potencial constituido por una sucesión de centros dispersores puntuales que se representan matemáticamente por medio de “deltas de Dirac”. Se puede demostrar que la ecuación de Schrödinger estacionaria del electrón es equivalente a una ecuación discreta que puede interpretarse como la ecuación de Schrödinger para un modelo discreto con hamiltoniano de fuerte enlace.

El interés para el modelo de Kronig-Penney se debe a que es uno de los sistemas más sencillos entre aquellos que tengan estados electrónicos en forma de ondas de Bloch (esto es, ondas planas moduladas con la periodicidad de la red). Por esta razón el modelo se utiliza para estimar el ancho de banda en superredes de semiconductores (véase por ejemplo [11]). Debido a la importancia de este sistema resulta natural analizar como se modifican los estados electrónicos y las propiedades de transporte en el caso en que se introduzca desorden en el modelo de Kronig-Penney.

El desorden puede ser tanto estructural (esto es, las posiciones de los átomos no coinciden con los sitios de una red cristalina) cuanto compositivo (esto es, se sustituyen al azar algunos átomos con impurezas). Desde un punto de vista físico el desorden puede ser el producto de la involuntaria pero inevitable presencia de impurezas o imperfecciones de la red; sin embargo, puede también ser el efecto de la deliberada construcción de un potencial aleatorio para dotar un material de particulares propiedades de transporte.

Las finalidades de este trabajo de tesis son dos. En primer lugar, se ha estudiado la estructura de los estados electrónicos del modelo de Kronig-Penney con desorden estructural y compositivo que es un ejemplo importante de modelo de fuerte enlace con desorden en la diagonal principal y fuera de ella. Los resultados obtenidos constituyen la base para analizar los fenómenos de deslocalización que puedan producir correlaciones de largo alcance del desorden y estudiar los efectos combinados debidos a la presencia conjunta de desorden estructural y compositivo.

El segundo objetivo de la tesis consiste en extender el llamado “método del mapa hamiltoniano” al modelo de Kronig-Penney con desorden estructural y compositivo. Este método se basa en la posibilidad de establecer una correspondencia entre redes desordenadas 1D y osciladores estocásticos clásicos; en esta perspectiva, los estados electrónicos en modelos desordenados tienen su homólogo en las trayectorias de un oscilador clásico con frecuencia perturbada por un ruido. Consecuentemente se vuelve posible estudiar la naturaleza de las funciones de onda electrónicas y las propiedades de transporte en medios desordenados analizando la dinámica de un sistema clásico estocástico oportunamente definido [12, 13].

El método se ha aplicado exitosamente al estudio de modelos con desorden *diagonal*, mientras que en el caso de desorden fuera de la diagonal el uso del método dinámico se había limitado hasta ahora a modelos particulares [14]. En esta tesis se ha logrado extender el uso del método dinámico a una clase más amplia de sistemas con desorden fuera de la diagonal principal,

reduciendo el estudio de los estados electrónicos en estos sistemas al análisis de las trayectorias de osciladores estocásticos de varios tipos. Más específicamente, se ha reducido el estudio del modelo de Kronig-Penney con desorden estructural y compositivo a el de un “oscilador pateado” en el que tanto la intensidad cuanto los instantes de las patadas son variables aleatorias.

# Capítulo 1

## Sistemas desordenados unidimensionales: introducción

### 1.1. Modelos de sistemas desordenados

La descripción de los estados electrónicos en materiales cristalinos es relativamente sencilla, debido a la presencia de simetría de traslación. La invariancia del hamiltoniano electrónico respecto a traslaciones de la red cristalina hace que las funciones de onda de los electrones sean ondas de Bloch, esto es, ondas planas moduladas con la periodicidad de la red. Esto implica que los estados electrónicos sean extendidos, por lo que los electrones resultan libres de moverse sin restricciones a través de todo el sistema. Sin embargo, es muy difícil tener un sistema cristalino sin defectos o impurezas, que rompen la simetría traslatoria de la red. En muestras tridimensionales, mientras la cantidad de defectos sea pequeña, se puede analizar la estructura de los estados electrónicos con métodos perturbativos, usando los conceptos desarrollados para sistemas cristalinos. Sin embargo, cuando la intensidad del desorden rebasa un cierto umbral, se vuelve imposible describir los estados electrónicos en términos de ondas de Bloch y es necesario aplicar nuevos métodos.

El ejemplo más sencillo de sistema ordenado se da considerando una colección de átomos idénticos en los sitios de una red cristalina  $d$ -dimensional, esto es, en los puntos individuados por los vectores

$$\mathbf{r} = \sum_{i=1}^d n_i \mathbf{a}_i$$

donde los vectores  $\mathbf{a}_i$  representan los generadores de una celda elemental de

la red y los coeficientes  $n_i$  son números enteros relativos. Partiendo de un sistema cristalino de este tipo se puede crear un sistema con desorden *estructural* si se desplazan los átomos de los sitios de la red y se les asigna una posición aleatoria en el espacio. Se puede también romper la simetría traslatoria de la red, aun manteniendo su estructura geométrica, si se sustituyen al azar algunos de los átomos originales con otros de tipos distintos. En este caso se clasifica el desorden como de tipo *compositivo*. Físicamente los átomos distintos pueden ser impurezas; otra posibilidad es que el material sea una aleación de dos o más especies distintas. Obviamente se pueden tener muestras de materiales donde se combinan tanto desorden estructural cuanto desorden compositivo.

Desde un punto de vista matemático, un modelo que podemos utilizar para describir sistemas con desorden estructural es el siguiente:

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

donde  $\mathbf{p}$  es el momento de la partícula cuántica (a la que llamaremos “electrón”),  $m$  es la masa efectiva del electrón y  $V_j$  es la energía potencial debida al átomo en la posición  $\mathbf{R}_j$ . En este modelo las posiciones de los átomos en el espacio son variables aleatorias, por lo que es necesario especificar la distribución  $P(\{\mathbf{R}_j\})$  correspondiente para definir completamente el modelo. En el caso en que las posiciones de los átomos son totalmente aleatorias y estadísticamente independientes las unas de las otras, por ejemplo, se puede considerar una distribución uniforme

$$P(\{\mathbf{R}_j\}) = \Omega^{-N},$$

donde  $\Omega$  es el volumen de la muestra y  $N$  es el número total de átomos.

Un modelo apropiado para describir muestras con desorden compositivo es representado por un hamiltoniano del tipo llamado “de enlace fuerte” (“tight-binding”, en inglés), esto es,

$$H = \sum_{j\nu} \epsilon_{j\nu} |j\nu\rangle\langle j\nu| + \sum_{j\nu, k\mu} V_{j\nu, k\mu} |j\nu\rangle\langle k\mu| \quad (1.1)$$

donde el símbolo  $\epsilon_{j\nu}$  representa la energía potencial en el sitio  $j$ -ésimo para un electrón que se halle en el estado cuántico  $|\nu\rangle$  mientras que los coeficientes  $V_{j\nu, k\mu}$  representan las amplitudes de transición  $|j, \nu\rangle \rightarrow |k, \mu\rangle$ . En los kets

$|j\nu\rangle$  el índice latino  $j$  representa el sitio de la red mientras el índice griego  $\nu$  representa un conjunto completo de números cuánticos que individualizan el estado cuántico del electrón. En la representación de los sitios, el hamiltoniano tiene elementos diagonales dados por las energías de sitio mientras que los elementos fuera de la diagonal principal son dados por los coeficientes  $V_{j\nu,k\mu}$  (también llamados “elementos de salto” o “hopping elements”). En este modelo tanto las energías de sitio cuanto las amplitudes de transición son variables aleatorias, cuyas propiedades estadísticas deben especificarse para definir completamente el modelo.

Una de las variantes más sencillas del modelo (1.1) se da cuando los elementos de salto son deterministas y las únicas variables aleatorias son las energías de sitio: en este caso se habla de “desorden de tipo diagonal”. El modelo más elemental de esta categoría se obtiene considerando amplitudes de transición  $V_{j\nu,k\mu}$  que toman un valor constante y distinto de cero sólo cuando los sitios  $j$ -ésimo y  $k$ -ésimo son primeros vecinos. En este caso las propiedades estadísticas del modelo se caracterizan por una distribución de probabilidad del tipo

$$P(\{\epsilon_{j\nu}\}, \{V_{j\nu,k\mu}\}) = P_\epsilon(\{\epsilon_{j\nu}\}) \prod_{j\nu,k\mu} \begin{cases} \delta(V_{j\nu,k\mu} - V) & \text{si } j, k \text{ son primeros} \\ & \text{vecinos,} \\ \delta(V_{j\nu,k\mu}) & \text{otro caso.} \end{cases}$$

Si además se supone que las energías de sitio son variables aleatorias independientes, la distribución  $P_\epsilon(\{\epsilon_{j\nu}\})$  se factoriza en un producto de la forma

$$P_\epsilon(\{\epsilon_{j\nu}\}) = \prod_{j\nu} p(\epsilon_{j\nu}). \quad (1.2)$$

En el caso específico en que haya un único estado cuántico para cada sitio (“one-orbital model”), el operador hamiltoniano en representación de los sitios es una matriz tridiagonal con elementos aleatorios en la diagonal principal.

Como ya lo hemos mencionado, la descripción de aleaciones constituye una aplicación de los modelos de fuerte enlace del tipo (1.1). Si se considera una aleación binaria en la que los átomos componentes de tipo  $A$  y  $B$  ocupan sitios de la red en forma totalmente aleatoria, las distribuciones de probabilidad que aparecen en el miembro derecho de la ec. (1.2) pueden escribirse en la forma

$$p(\epsilon_{j\nu}) = \frac{1}{2}[\delta(\epsilon_{j\nu} - \epsilon_A) + \delta(\epsilon_{j\nu} - \epsilon_B)].$$

Otro ejemplo de modelo de fuerte enlace, de importancia fundamental, es representado por el modelo de Anderson, que en el caso 1D resulta definido por la ecuación de Schrödinger estacionaria

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} + \epsilon_n \psi_n = E \psi_n \quad (1.3)$$

donde  $\psi_n = \langle n | \psi \rangle$  representa el valor de la función de onda electrónica en el sitio  $n$ -ésimo de la red. En este modelo los coeficientes de salto se ponen iguales a 1, con lo que se fija la escala de energía para medir las energías de sitio  $\epsilon_n$ . El índice  $n$  toma valores enteros  $n = 1, 2, \dots, N$ ; las condiciones de frontera se pueden escoger con libertad mientras el tamaño de la red sea mucho mayor de la región espacial en la que la función de onda electrónica es significativamente distinta de cero. El modelo de Anderson puede generalizarse fácilmente para describir muestras desordenadas  $d$ -dimensionales; sin embargo, debido a que esta tesis se enfoca en modelos unidimensionales, nos limitaremos a considerar el caso 1D.

El modelo de Anderson, además de describir el comportamiento de un electrón en una red con potencial aleatorio, puede servir para analizar otros sistemas físicos. Por ejemplo, si se considera una cadena de partículas de masas aleatorias atadas elásticamente a sus posiciones de equilibrio, la dinámica de la cadena es definida por un sistema de ecuaciones de la forma

$$m_n \frac{d^2 u_n}{dt^2} = u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1},$$

donde  $u_n$  y  $m_n$  son respectivamente el desplazamiento respecto a la posición de equilibrio y la masa de la  $n$ -ésima partícula. Se consideran constantes elásticas unitarias; es común considerar condiciones a la frontera del tipo  $u_0 = u_{N+1} = 0$ . Asumiendo que las soluciones estacionarias tengan una dependencia temporal del tipo  $u_n \propto \exp(-i\omega t)$ , las ecuaciones dinámicas de la cadena toman la forma

$$-m_n \omega^2 u_n = u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}$$

que es matemáticamente equivalente a la ecuación de Schrödinger estacionaria (1.3) del modelo de Anderson.

Para completar esta rápida introducción a los sistemas desordenados 1D, podemos mencionar algunos de los otros modelos de uso más frecuente para el estudio de la estructura de los estados electrónicos y de las propiedades de transporte en muestras desordenadas.

Un modelo relevante para el análisis de sistemas unidimensionales queda definido por medio de la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2}(x) + \sum_{n=0}^N V_n \delta(x - nl) \psi(x) = E\psi(x) \quad (\text{con } 0 < x < Nl).$$

Esta ecuación describe el comportamiento de un electrón en un potencial formado por una sucesión de barreras puntuales posicionadas a distancia constante pero con intensidades  $V_n$  aleatorias. Se trata de una variante del conocido modelo de Kronig-Penney, del que se diferencia por la presencia de desorden compositivo.

Otro modelo afín al precedente (llamado “modelo de líquido 1D”) es representado por la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2}(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad \text{con } 0 = x_0 < x < x_N$$

donde el potencial  $V(x)$  es constituido por la suma de  $N$  potenciales atómicos  $v(x)$  sin sobreposiciones, esto es,

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

En la ecuación precedente  $v(x)$  es el potencial atómico común; las longitudes  $l_n = x_n - x_{n-1} - d$  de los intervalos de potencial nulo son variables aleatorias independientes con una distribución común.

## 1.2. Localización de Anderson

Un estado electrónico se dice (exponencialmente) *localizado* si la envolvente de la función de onda decrece exponencialmente a grandes distancias del centro de localización (esto es, del punto en el que el módulo de la función de onda es máximo). Físicamente, el hecho de que las colas de la función de onda decrezcan exponencialmente significa que la probabilidad de encontrar al electrón es significativamente distinta de cero solo en una región finita del espacio: en otras palabras, el electrón queda confinado en una parte limitada de la muestra. Los estados electrónicos localizados contrastan entonces con las ondas de Bloch típicas de las estructuras cristalinas, que se extienden a toda la red.

En un trabajo pionero de los años '50 del siglo pasado [1], P. W. Anderson mostró que en muestras desordenadas tridimensionales se produce localización de *todos* los estados electrónicos cuando la intensidad del desorden rebasa un cierto umbral crítico: este fenómeno es hoy conocido como “localización de Anderson”. En muestras unidimensionales la presencia de desorden altera aun más fuertemente la estructura de los estados electrónicos respecto al caso cristalino ya que el desorden, sin importar lo débil que sea, induce la localización completa de *todos* los estados electrónicos (lo mismo parece ocurrir en muestras desordenadas bidimensionales). La localización de los electrones repercute en las propiedades de transporte del material, que a temperatura del cero absoluto pasa de conductor a aislante (la llamada transición metal-aislante o MIT). Esta manifestación de la localización de los estados electrónicos explica porque el título del trabajo original de Anderson era “ausencia de difusión en ciertas redes desordenadas” (en original, “Absence of Diffusion in Certain Random Lattices”) [1].

Es importante subrayar que el mecanismo físico que causa la localización es la interferencia destructiva entre las ondas de probabilidad creadas por los procesos de dispersión que sufre el electrón al desplazarse en un potencial aleatorio. A fin de comprender mejor estos mecanismos consideremos el movimiento de una partícula en un potencial aleatorio  $V(x)$  en el caso unidimensional. Supongamos que el potencial  $V(x)$  sea acotado superiormente y que resulte  $V(x) \leq E_0$  para todo valor de la posición  $x$ . En el caso de una partícula clásica es posible determinar por medio de simples consideraciones energéticas si la partícula queda confinada en un pozo de potencial (localización) o si puede irse al infinito: el primer caso se da si la energía de la partícula resulta  $E < E_0$ ; el segundo si  $E > E_0$ . En el caso cuántico la situación se modifica debido a dos factores. Por un lado, aun si la energía de la partícula es menor del valor crítico  $E_0$ , la partícula puede escapar de cualquier pozo de potencial por medio de procesos de tunelaje. Por otro lado, la condición  $E > E_0$  no garantiza que la partícula vaya al infinito porque la onda de probabilidad asociada sufre repetidos procesos de dispersión y reflexión que generan ondas electrónicas que pueden interferir destructivamente y hacer que la función de onda decrezca exponencialmente al infinito. Los procesos de tunelaje y de interferencia destructiva compiten: la localización de Anderson se da cuando la segunda domina respecto a la primera, mientras que el tunelaje desempeña un papel esencial en la construcción de ondas de Bloch para los electrones de las capas más internas (“core electrons”) en un sistema cristalino.

Un parámetro fundamental para la descripción cuantitativa de la localización es representado por la *longitud de localización*. En los casos ordinarios de localización, la envolvente de la función de onda decrece exponencialmente, por lo que resulta natural definir (el inverso de) la longitud de localización por medio de la relación

$$l_{\text{loc}}^{-1} = - \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{1}{r} \log |\psi(r)|. \quad (1.4)$$

Para un estado localizado exponencialmente la longitud de localización es finita,  $l_{\text{loc}} > 0$ , mientras que diverge para un estado extendido.

La longitud de localización es el parámetro fundamental para el análisis de los estados electrónicos localizados y es el que utilizaremos en esta tesis; sin embargo, cabe mencionar que en la literatura se utilizan también otros indicadores para determinar la naturaleza localizada o extendida de los estados electrónicos. En particular, se utiliza bastante a menudo la llamada razón de participación inversa (“inverse participation ratio”), definida (para estados normalizados) por medio de la relación

$$P^{-1} = \sum_i |\psi_i|^4.$$

La razón de participación inversa representa una medida de la porción de espacio donde la función de onda es notablemente diferente de cero.

También es posible analizar la localización enfocándose en las propiedades de transporte de una muestra en vez de considerar directamente la estructura de los estados electrónicos: en este caso resulta conveniente definir la longitud de localización a partir del decremento exponencial del coeficiente de transmisión de un electrón desde un sitio  $\mathbf{r}$  a un sitio  $\mathbf{r}'$  por medio de la fórmula

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

### 1.3. Sistemas desordenados unidimensionales

En el estudio de los sistemas desordenados, los sistemas 1D desempeñan un papel particularmente relevante. Existen varias razones por las cuales los modelos en una dimensión son interesantes:

- Es posible obtener resultados analíticos mucho más detallados para modelos 1D que para modelos de dimensionalidad superior. Los modelos

1D representan entonces una piedra de toque para evaluar los límites de ciertas aproximaciones y la validez de nuevas técnicas analíticas y numéricas.

- A pesar de que los modelos estrictamente 1D pueden parecer abstractos y sin gran interés físico, en la práctica estos modelos han encontrado concretas aplicaciones experimentales, sobre todo en el estudio de superredes y guías de onda.
- Recientemente se ha descubierto que las correlaciones espaciales de largo alcance del potencial aleatorio pueden producir transiciones del tipo metal-aislante aun en sistemas 1D, con lo que el comportamiento de estos modelos ha resultado ser mucho más complejo de lo que se creía anteriormente.

En lo que sigue discutiremos algunos de los resultados analíticos que se han obtenido para los sistemas desordenados 1D con desorden *sin correlaciones*, para luego analizar algunas de las aplicaciones prácticas de los modelos 1D. El análisis de los efectos que producen las correlaciones espaciales del desorden se discute en el capítulo siguiente.

## 1.4. Resultados analíticos para modelos 1D: la técnica de las matrices de transferencia

Un instrumento matemático muy importante en el estudio de los sistemas desordenados 1D es representado por las matrices de transferencia [15] (véase además [16]). Estas matrices inscriben el análisis de los estados electrónicos en el marco conceptual de la teoría de las matrices aleatorias y permiten dar una demostración de la propiedad específica de los sistemas desordenados 1D, esto es, el hecho que cualquier desorden, independientemente de su intensidad, causa la localización de *todos* los estados electrónicos.

Para mostrar como funciona la técnica de las matrices de transferencia, podemos considerar el caso paradigmático del modelo de Anderson 1D definido por la ecuación de Schrödinger (1.3). Esta ecuación puede escribirse en forma matricial

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

donde el simbolo  $\mathbf{T}_n$  representa la  $n$ -ésima matriz de transferencia, esto es,

$$\mathbf{T}_n = \begin{pmatrix} E - \epsilon_n & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.5)$$

Dadas las condiciones iniciales  $\psi_0$  y  $\psi_1$ , la solución de la ecuación (1.3) puede construirse por medio de un producto de matrices de transferencia

$$\begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix} = \mathbf{T}_n \mathbf{T}_{n-1} \cdots \mathbf{T}_1 \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_0 \end{pmatrix} \quad (1.6)$$

En ausencia de potencial aleatorio, esto es, si  $\epsilon_n = 0$ , la ecuación de Schrödinger (1.3) describe una partícula libre y las soluciones estacionarias que no divergen para  $n \rightarrow \pm\infty$  son sobreposiciones de ondas planas de la forma

$$\psi_n = A e^{ikn} + A^* e^{-ikn}. \quad (1.7)$$

Los autovalores correspondientes de la energía son  $E = 2 \cos k$  con  $k$  real; en ausencia de potencial entonces los autovalores de la energía forman una banda de amplitud  $|E| \leq 2$ . Las soluciones (1.7) son ondas planas, esto es, estados extendidos y, de hecho, es fácil verificar que el inverso de la longitud de localización es cero

$$l_{\text{loc}}^{-1} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{2n} \log(\psi_n^2 + \psi_{n+1}^2) = 0.$$

En el modelo de Anderson el electrón no es libre, sino que se mueve en un potencial totalmente aleatorio. En el modelo de Anderson estándar las energías de sitio  $\epsilon_n$  son variables aleatorias independientes con una distribución común: esto implica que las matrices de transferencia (1.5) son matrices aleatorias. Debido a la relación (1.6), el análisis del comportamiento asintótico de los estados electrónicos pasa por el estudio de las propiedades de la matriz producto

$$\mathbf{T}_n \mathbf{T}_{n-1} \cdots \mathbf{T}_1$$

en el límite en que el número de factores tiende a infinito.

Estas propiedades pueden analizarse por medio del teorema de Furstenberg [17] que, *grosso modo*, representa una generalización de la ley de los grandes números al caso de variables aleatorias que no comuten entre si. Esta extensión se vuelve indispensable porque las matrices aleatorias  $\mathbf{T}_n$  son elementos del grupo lineal especial en dos dimensiones  $SL(2)$ , que no es abeliano.

Sin profundizar demasiado, nos limitamos a enunciar el teorema de Furstenberg. Supongamos que  $\mu$  sea una medida definida sobre el grupo  $SL(m, \mathbf{R})$  de las matrices unimodulares  $m$ -dimensionales que transforman el espacio  $\mathbf{R}^m$  en si mismo; sea además  $G$  el subgrupo más pequeño de  $SL(m, \mathbf{R})$  que contiene el soporte de  $\mu$ . Sea  $\{\mathbf{X}_n; n = 1, 2, 3, \dots\}$  una sucesión aleatoria de elementos de  $G$  con  $\mu$  como distribución común. El teorema de Furstenberg afirma que

*Si  $G$  es un subgrupo no-compacto de  $SL(m, \mathbf{R})$  tal que ningun subgrupo de  $G$  de índice finito es reducible, entonces  $\|\mathbf{X}_n \dots \mathbf{X}_1 x\|$  crece exponencialmente cuando  $n \rightarrow \infty$  con probabilidad 1 para cada  $x \neq 0$ . Más precisamente resulta:*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \|\mathbf{X}_n \dots \mathbf{X}_1 x\| = \gamma > 0$$

*con probabilidad 1 para cada  $x \neq 0$ , con  $\gamma$  que depende solo de  $\mu$ .*

El parámetro  $\gamma$  constituye la tasa de crecimiento exponencial o máximo exponente característico de Lyapunov.

Ishii [2] demostró que el teorema de Furstenberg puede aplicarse al subgrupo cerrado de  $SL(2, \mathbf{R})$  formado por las matrices de transferencia (1.5); es por lo tanto posible identificar las matrices  $\mathbf{T}_n$  con las variables  $\mathbf{X}_n$ . Consecuentemente, debido a la positividad del parámetro  $\gamma$ , resulta demostrado que las soluciones  $\psi_n$  de la ecuación de Schrödinger (1.3) crecen exponencialmente para casi cualquier condición inicial  $(\psi_0, \psi_1)$ .

El teorema de Furstenberg implica también otra consecuencia clave, esto es, el carácter *determinístico* de la tasa de crecimiento exponencial. En efecto, el teorema afirma que, con probabilidad igual a 1,  $\gamma$  depende solo de la medida  $\mu$ ; en el caso que estamos analizando, esto significa que el exponente de Lyapunov puede depender solo de la distribución de probabilidad  $p(\epsilon_n)$  de las energías de sitio pero no de las realizaciones específicas  $\{\epsilon_1, \dots, \epsilon_n, \dots\}$  del potencial aleatorio.

El teorema de Furstenberg permite entonces demostrar que las soluciones de la ecuación de Schrödinger (1.3) crecen exponencialmente; sin embargo esto no es suficiente para concluir que todos los estados del sistema desordenado (1.3) sean exponencialmente localizados, esto es, que la envolvente de la función de onda decrezca exponencialmente tanto a la derecha cuanto a la izquierda de algun sitio central de la red. Un autoestado del hamiltoniano, en efecto, además de ser una solución de la ecuación (1.3) debe satisfacer algunas condiciones de frontera que producen generalmente la cuantización de los valores de la energía.

En el razonamiento precedente, sin embargo, hemos considerado la energía como un parámetro libre, aunque en realidad depende, a través de las condiciones de frontera, de la realización específica del potencial aleatorio. Por esta razón, si se construyen con las matrices de transferencia dos soluciones  $\psi^{(1)}$  e  $\psi^{(2)}$  de la ecuación (1.3) que corresponden al mismo valor de la energía pero satisfacen condiciones de frontera especulares definidas respectivamente a las extremidades izquierda y derecha de la red, resulta que cuando  $n$  aumenta  $\psi^{(1)}$  crece exponencialmente mientras  $\psi^{(2)}$  decrece exponencialmente, sin que sea posible embonar las dos soluciones.

Sin embargo, es razonable pensar que para ciertos valores particulares de la energía, que corresponden a los autoestados del sistema, sea posible conectar la solución derecha con la izquierda. Esta suposición representa la *conjetura de Borland* [18]: esta conjetura establece una conexión entre crecimiento exponencial de las soluciones y localización de las mismas y vuelve posible identificar el inverso de la tasa de crecimiento  $\gamma$  con la longitud de localización.

## 1.5. La relación de Herbert y Jones

A principio de los años '70 del siglo XX, D. C. Herbert y R. Jones derivaron una relación [19], ulteriormente elaborada por D. J. Thouless [20], que establece una conexión valiosa entre la distribución de los niveles de energía del modelo de Anderson (1.3) y la longitud de localización de los estados electrónicos.

El razonamiento de Herbert y Jones puede aplicarse a cualquier modelo 1D de la forma

$$V\psi_{n+1} + V\psi_{n-1} + \epsilon_n\psi_n = E\psi_n \quad (1.8)$$

que se reduce a la forma (1.3) si se pone  $V = 1$ . El índice  $n$  de esta ecuación varía entre 1 y  $N$ ; se supone que  $\psi_0 = 0$ . Por simplicidad, consideraremos solo soluciones reales de la ecuación (1.8). El resultado de Herbert y Jones se basa en el estudio de la función de Green (o resolvente) del modelo (1.8). Tal función resulta definida por la ecuación

$$(E + \epsilon_i) G_{ij}(E) - V(G_{i+1,j}(E) + G_{i-1,j}(E)) = \delta_{ij}.$$

Los términos  $G_{ij}(E)$  son los elementos de la inversa de la matriz tridiagonal  $E\mathbf{I} - \mathbf{H}$ , donde  $\mathbf{H}$  es el hamiltoniano del sistema cuyos elementos de matriz son definido por la ecuación (1.8).

El elemento  $\mathbf{G}_{1N}$  se determina fácilmente, porque el cofactor del elemento de matriz  $(\mathbf{E}\mathbf{I} - \mathbf{H})_{1N}$  es  $(-V)^{N-1}$ , por lo que resulta

$$G_{1N}(E) = \frac{(-V)^{N-1}}{\det(\mathbf{E}\mathbf{I} - \mathbf{H})} = \frac{(-V)^{N-1}}{\prod_{\alpha=1}^N (E - E_\alpha)} \quad (1.9)$$

donde los símbolos  $E_\alpha$  denotan los autovalores del modelo (1.8).

Supongamos ahora que  $E_\beta$  sea un autovalor de  $\mathbf{H}$  y que  $\psi^{(\beta)}$  sea el autoestado correspondiente. La función  $\mathbf{G}_{1N}(E)$  tiene un polo de residuo  $\psi_1^{(\beta)}\psi_N^{(\beta)}$  para  $E = E_\beta$ ; la ecuación (1.9) permite entonces obtener el valor del producto  $\psi_1^{(\beta)}\psi_N^{(\beta)}$  que resulta igual a

$$\psi_1^{(\beta)}\psi_N^{(\beta)} = \frac{(-V)^{N-1}}{\prod_{\alpha \neq \beta}^N (E_\beta - E_\alpha)}.$$

Tomando el logaritmo del modulo de ambos miembros de esta identidad se obtiene

$$\log |\psi_1^{(\beta)}\psi_N^{(\beta)}| = (N-1) \log |V| - \sum_{\alpha \neq \beta} \log |E_\beta - E_\alpha|.$$

Si el estado  $\psi^{(\beta)}$  es localizado y tiene un máximo en un sitio dado  $i$  de la red, las amplitudes  $\psi_1^{(\beta)}$  y  $\psi_N^{(\beta)}$  deben ser del orden de  $\psi_1^{(\beta)} \sim \exp[-\gamma_\beta(i-1)]$  y  $\psi_N^{(\beta)} \sim \exp[-\gamma_\beta(N-i)]$ . El coeficiente de decremento exponencial de la función de onda es entonces

$$\gamma_\beta = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ \frac{1}{N-1} \sum_{\alpha \neq \beta} \log |E_\beta - E_\alpha| \right] - \log |V|.$$

Para una cadena larga y estadísticamente homogénea se puede sustituir la suma sobre los autoestados con una integral con lo que se obtiene

$$\gamma_\beta = \int dE' n(E') \log |E_\beta - E'| - \log |V| \quad (1.10)$$

donde  $n(E)$  es la densidad de estados.

La ecuación (1.10) representa la relación de Herbert y Jones. Esta fórmula permite determinar la longitud de localización si se conoce la densidad de los estados. Debido a que la densidad de los estados resulta proporcional a la parte imaginaria de la función de Green, la relación (1.10) reduce el cálculo de la longitud de localización a el de la función de Green.

Para el caso de desorden débil es posible determinar la función de Green usando técnicas perturbativas (que se basan esencialmente en la ecuación de Dyson); por este camino Thouless determinó la fórmula

$$\gamma = \frac{\sigma^2}{2} \frac{1}{4V^2 - E^2} \quad (1.11)$$

donde  $\sigma^2$  representa la varianza de la distribución  $p(\epsilon_n)$  para las energías de sitio en la ecuación (1.8) [21].

## 1.6. Superredes y guías de onda: aplicaciones experimentales de los modelos desordenados 1D

En esta sección se discuten brevemente algunas de las aplicaciones experimentales de los modelos desordenados 1D.

Las superredes de semiconductores son sistemas mesoscópicos de escala nanométrica, propuestos por Leo Esaki en 1970, quien recibió por ello el premio Nobel tres años más tarde. Las superredes de semiconductores consisten en una estructura formada por láminas muy finas (unos pocos nanómetros) de dos materiales semiconductores (por ejemplo GaAs y  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ ) dispuestos de manera alternada. Los portadores de carga presentes en el sistema se mueven bajo la acción de un potencial originado por las discontinuidades de las bandas de conducción y de valencia de ambos semiconductores, con una masa efectiva que es significativamente menor a la masa de un electrón libre.

Si la superred es periódica, es decir, las capas se repiten ordenadamente, entonces aparecen mini-bandas de energía, similares a las bandas de un cristal pero mucho más estrechas, y los estados electrónicos son extendidos. En cambio, cuando las anchuras de las láminas son aleatorias, se produce la localización de Anderson de los estados electrónicos. Cuando el desorden tiene correlaciones espaciales de tipo determinado, sin embargo, es posible obtener estados extendidos para valores particulares de la energía electrónica. Esto se refleja en las propiedades ópticas de la superred, como se ha comprobado experimentalmente [5].

Los modelos desordenados teóricos 1D tienen otra aplicación importante en el campo de las guías de onda. En este caso se explota la analogía

matemática entre la ecuación que describe la propagación de una onda electromagnética en una guía con índice de refracción aleatorio y la ecuación de Schrödinger estacionaria para una partícula cuántica en un potencial aleatorio. Un dispositivo experimental muy sencillo para representar una guía de onda con desorden es constituido por una guía con varios tornillos en la parte superior. En el experimento llevado a cabo (que se ideó para comprobar experimentalmente los efectos de las correlaciones de largo alcance del desorden) la distancia entre tornillos era constante y la variable aleatoria era representada por la longitud de los tornillos dentro la guía de onda. Los efectos de localización se pueden observar midiendo las propiedades de transmisión del dispositivo [6].

# Capítulo 2

## Método del mapa hamiltoniano

### 2.1. Introducción

Este capítulo se enfoca en la descripción de los lazos cuantitativos que unen dos campos de la investigación física que aparentemente carecen de conexiones: los fenómenos de localización en redes desordenadas 1D por una parte y la dinámica de osciladores clásicos estocásticos por la otra.

El interés actual para los sistemas desordenados 1D aumenta la importancia de una nueva técnica de análisis que se ha mostrado muy eficaz para el estudio de esta clase de modelos. El método se basa en la correspondencia que existe entre redes desordenadas 1D y osciladores estocásticos; en este enfoque los estados electrónicos en modelos desordenados tienen su homólogo en las trayectorias en el espacio de las fases de un oscilador clásico con frecuencia aleatoria. Consecuentemente se vuelve posible estudiar la naturaleza de las funciones de onda electrónicas y las propiedades de transporte en medios desordenados analizando la dinámica de un sistema clásico estocástico oportunamente definido. La correspondencia que se establece entre modelos desordenados 1D y osciladores estocásticos abre la posibilidad de interpretar los fenómenos de localización electrónica desde un punto de vista dinámico: así, por ejemplo, la localización de Anderson tiene un paralelo en la inestabilidad energética de un oscilador estocástico.

Vamos a mostrar como es posible establecer una correspondencia cuantitativa entre el modelo de Anderson 1D con desorden débil y un oscilador con frecuencia perturbada por un ruido. Las propiedades estadísticas de la frecuencia aleatoria dependen de las propiedades del desorden en el modelo

de Anderson equivalente: específicamente, el ruido del oscilador tiene correlaciones temporales (ruido coloreado) o carece de ellas (ruido blanco) según que el potencial aleatorio del electrón tenga o no correlaciones espaciales. Es posible describir el modelo de Anderson en términos de osciladores estocásticos tanto en el caso discreto cuanto en el caso continuo; dirigiremos la atención hacia el análisis del primer caso. Nuestra exposición se basa en los resultados publicados en varios trabajos; las referencias principales para el modelo discreto que se analiza en el resto del capítulo son [12, 13, 4]; una reseña de los resultados principales se encuentra también en [26].

## 2.2. El método del mapa hamiltoniano

En sus estudios de los sistemas desordenados, Anderson se enfrentó al problema de definir un modelo que fuese lo bastante sencillo como para que se pudiera estudiar con relativa facilidad, pero que al mismo tiempo conservase características esenciales de los sistemas desordenados reales. El modelo que propuso para el estudio de las redes desordenadas 1D y que ahora lleva su nombre es definido por la ecuación de Schrödinger estacionaria (1.3) y por una distribución de probabilidad para las energías de sitio  $\epsilon_n$ . En el modelo original de Anderson [1] las energías  $\epsilon_n$  son variables independientes con distribución uniforme en un intervalo de anchura dada; en este capítulo no restringiremos la atención a una distribución específica de las energías de sitio y solo supondremos que la media de las energías sea cero  $\langle \epsilon_n \rangle = 0$  y que el desorden sea débil, o sea que valga la condición

$$\langle \epsilon_n^2 \rangle = \sigma^2 \ll 1. \quad (2.1)$$

Aquí y en lo que sigue se usa el símbolo  $\langle \dots \rangle$  para indicar el promedio de una cantidad aleatoria sobre las distintas realizaciones físicas del desorden.

En el caso de desorden débil la red desordenada (1.3) resulta completamente equivalente a un “oscilador pateado” clásico, esto es, un oscilador armónico sometido a cambios instantáneos del momento a intervalos de tiempo regulares (las “patadas”) [12]. En términos matemáticos, un oscilador de este tipo resulta definido por la función hamiltoniana

$$H = \frac{p^2}{2} + \frac{1}{2}\omega^2(1 + \xi(t))x^2 \quad (2.2)$$

con

$$\xi(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \xi_n \delta(t - nT). \quad (2.3)$$

Los coeficientes  $\xi_n$  que aparecen en la definición del ruido (2.3) representan la intensidad de las patadas, es decir, son proporcionales a las variaciones repentinas del momento del oscilador que ocurren en los instantes  $t = nT$ . Técnicamente, cada patada se describe con una “delta de Dirac”  $\delta(t)$ , que constituye la idealización matemática de un proceso impulsivo (es decir, un proceso de intensidad muy fuerte y duración brevísima). En definitiva, el sistema dinámico (2.2) representa un oscilador armónico con frecuencia media  $\omega$  perturbada por el ruido  $\xi(t)$ .

Se puede demostrar la equivalencia del modelo cuántico (1.3) con el oscilador clásico (2.2) integrando las ecuaciones dinámicas de este sobre el período entre dos patadas consecutivas. De este modo se obtiene el mapa hamiltoniano

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n \cos(\omega T) + (p_n/\omega - \omega \xi_n x_n) \sin(\omega T) \\ p_{n+1} &= -\omega x_n \sin(\omega T) + (p_n - \omega^2 \xi_n x_n) \cos(\omega T) \end{aligned} \quad (2.4)$$

donde los símbolos  $x_n$  y  $p_n$  representan la posición y el momento del oscilador en el instante inmediatamente precedente la  $n$ -ésima patada. Es posible convencerse que el mapa (2.4) es equivalente a la ecuación de Schrödinger (1.3) eliminando los momentos del sistema de ecuaciones (2.4) para así obtener la relación

$$x_{n+1} + x_{n-1} + x_n \omega \xi_n \sin(\omega T) = 2x_n \cos(\omega T) \quad (2.5)$$

que coincide con la ecuación (1.3) si se identifica la posición  $x_n$  del oscilador al tiempo  $t = nT$  con la amplitud de la función de onda electrónica  $\psi_n$  en el sitio  $n$ -ésimo de la red y si los parámetros del oscilador pateado se relacionan con los del modelo de Anderson a través de las igualdades

$$\epsilon_n = \omega \xi_n \sin(\omega T) \quad (2.6)$$

$$E = 2 \cos(\omega T). \quad (2.7)$$

La ecuación (2.6) muestra la conexión entre la energía potencial en el sitio  $n$ -ésimo de la red (1.3) y la intensidad de la  $n$ -ésima patada; la relación (2.7) vincula la energía  $E$  del electrón con el ángulo  $\omega T$  de la rotación que el oscilador efectúa en el espacio de las fases entre dos patadas sucesivas. De paso, es oportuno observar que la relación (2.7) es físicamente correcta porque

la condición de débil desorden (2.1) garantiza que, en primera aproximación, la energía electrónica asuma valores en el intervalo  $[-2 : 2]$ .

La identidad formal de las ecuaciones (1.3) y (2.5) constituye la base de la equivalencia entre el modelo desordenado (1.3) por una parte y el oscilador pateado (2.2) por la otra. Por medio de esta equivalencia se vuelve posible analizar la estructura espacial de los estados electrónicos de la cadena desordenada (1.3) estudiando la evolución temporal de las trayectorias del oscilador pateado en el espacio de las fases  $(p, x)$ . Específicamente, los estados electrónicos localizados corresponden a órbitas no acotadas y, al revés, los estados extendidos tienen su homólogo en trayectorias acotadas.

Más en general, la correspondencia entre la ecuación de Schrödinger (1.3) y el oscilador pateado (2.2) abre la posibilidad de describir las propiedades de transporte electrónico del primer modelo en términos de la dinámica del segundo. Aunque omitiremos la discusión de este problema para enfocar la atención en el estudio de la estructura de los estados electrónicos, es oportuno mencionar la conexión entre transmitividad (o conductancia) de cadenas desordenadas y la dinámica del oscilador pateado (se puede encontrar un análisis más detallado del tema en [22, 23, 24]).

## 2.3. Análisis del modelo de Anderson

La longitud de localización  $l_{\text{loc}}$  constituye un parámetro esencial de la estructura de los estados electrónicos porque da una medida cuantitativa de la extensión espacial de la región donde queda confinado un electrón localizado y porque permite que se distingan los estados exponencialmente localizados (para los que  $l_{\text{loc}}$  es finita) de los estados extendidos (para los que  $l_{\text{loc}}$  diverge). En esta sección se muestra como se puede usar el método del mapa hamiltoniano discutido en la sección precedente para determinar la longitud de localización en el modelo de Anderson.

La longitud de localización para un modelo discreto 1D se define mediante la expresión

$$\frac{1}{l_{\text{loc}}} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \log \left| \frac{\psi_{n+1}}{\psi_n} \right| = \langle \log \left| \frac{\psi_{n+1}}{\psi_n} \right| \rangle \quad (2.8)$$

que equivale a la definición (1.4) introducida en el capítulo 1 para modelos continuos. Como se ha mencionado en la sección 2.2, en esta tesis usamos el símbolo  $\langle \dots \rangle$  para indicar el promedio sobre las realizaciones del desorden; en la identidad (2.8) hemos implícitamente supuesto que el modelo goce de

propiedades “ergódicas”, esto es, que sea posible intercambiar un promedio “temporal” del tipo  $\bar{x} = \lim_{N \rightarrow \infty} (1/N) \sum_{n=1}^N x_n$  con un promedio del segundo tipo,  $\langle x \rangle$ , lo que resulta generalmente correcto para la longitud de localización en sistemas desordenados [25].

Para calcular la longitud de localización inversa (2.8) usando el método del mapa hamiltoniano es conveniente pasar de las coordenadas cartesianas  $(x_n, p_n)$  del oscilador a las coordenadas acción-ángulo  $(J_n, \theta_n)$  mediante las relaciones estandares  $x_n = \sqrt{2J_n/\omega} \sin \theta_n$  y  $p_n = \sqrt{2J_n\omega} \cos \theta_n$ . Físicamente, esto equivale a describir la dinámica del oscilador pateado (2.2) en variables acción-ángulo. En función de las variables acción-ángulo el mapa (2.4) puede escribirse en la forma

$$\begin{aligned} \cos \theta_{n+1} &= D_n^{-1} [\cos(\theta_n + \omega T) - \omega \xi_n \sin \theta_n \cos \omega T] \\ \sin \theta_{n+1} &= D_n^{-1} [\sin(\theta_n + \omega T) - \omega \xi_n \sin \theta_n \sin \omega T] \end{aligned} \quad (2.9)$$

con

$$D_n = \sqrt{\frac{J_{n+1}}{J_n}} = 1 - \omega \xi_n \sin(2\theta_n) + \omega^2 \xi_n^2 \sin^2 \theta_n. \quad (2.10)$$

Es importante observar que, si se dividen miembro por miembro las ecuaciones del sistema (2.9), se obtiene el mapa

$$\tan \theta_{n+1} = \frac{\tan(\theta_n) + \tan(\omega T) - \omega \xi_n \tan(\theta_n) \tan(\omega T)}{1 - \tan(\theta_n) \tan(\omega T) - \omega \xi_n \tan(\theta_n)} \quad (2.11)$$

que da la evolución de la sola variable angular y *no* depende de la variable de acción.

La substitución  $\psi_n \rightarrow \sqrt{2J_n/\omega} \sin \theta_n$  en la ecuación (2.8) conduce al resultado

$$l_{\text{loc}}^{-1} = \left\langle \frac{1}{2} \log \left| \frac{J_{n+1}}{J_n} \right| \right\rangle + \left\langle \log \left| \frac{\sin \theta_{n+1}}{\sin \theta_n} \right| \right\rangle. \quad (2.12)$$

En el miembro derecho de la expresión precedente, el segundo término es generalmente insignificante respecto al primero, ya que la variable de acción  $J_n$  del oscilador crece exponencialmente para  $n \rightarrow \infty$  a diferencia del cociente de los senos. El término radial deja de ser preponderante respecto al término angular solo cuando la energía asume valores en un entorno del borde de la banda  $[-2 : 2]$ , es decir, en el límite  $|E| \rightarrow 2^-$ . Físicamente, esta diferencia se debe a que la longitud de localización manifiesta un comportamiento anómalo en la región del borde de la banda; por simplicidad no consideraremos aquí este caso, aunque sea posible analizarlo usando el método del mapa

hamiltoniano [13]. Prescindiendo del caso excepcional  $|E| \rightarrow 2^-$ , se puede reducir legítimamente la expresión (2.12) de la longitud de localización a la forma

$$l_{\text{loc}}^{-1} = \langle \log D_n(\epsilon_n, \theta_n) \rangle. \quad (2.13)$$

La expresión (2.13) ilustra las ventajas del método del mapa hamiltoniano para el cálculo de la longitud de localización. Para entender los beneficios del método es importante observar que en la ecuación (2.13) el argumento del logaritmo es la razón  $D_n^2 = J_{n+1}/J_n$  que no depende de la variable de acción  $J_n$  sino de la sola variable angular  $\theta_n$ , como resulta de la ecuación (2.10). Desde un punto de vista numérico, esto implica que es posible evaluar directamente la razón (2.10) usando solo el mapa (2.11) de la variable  $\theta_n$ : se evitan así los problemas de divergencia que pueden presentarse si se usa la definición (2.8) para computar  $l_{\text{loc}}$  y, en vez de determinar directamente la razón  $\psi_{n+1}/\psi_n$ , se evalúan por separado las amplitudes  $\psi_n$  y  $\psi_{n+1}$  solucionando la ecuación de Schrödinger (1.3) con el método de las matrices de transferencia.

La fórmula (2.13) es también útil desde un punto de vista analítico, porque el hecho que  $D_n$  sea una función de la sola variable angular  $\theta_n$  permite el cálculo de la longitud de localización una vez que se conozca la medida invariante  $\rho(\theta)$  asociada al mapa (2.11) (la medida invariante es la distribución de los valores  $\{\theta_n\}$  que se obtienen mediante la iteración sucesiva del mapa (2.11)). Para evaluar analíticamente la longitud de localización se puede entonces escribir la expresión (2.13) en la forma

$$l_{\text{loc}}^{-1} = \int P(\epsilon) \int_0^{2\pi} \ln [D(\epsilon, \theta)] \rho(\theta) d\theta d\epsilon \quad (2.14)$$

donde  $P(\epsilon)$  representa la distribución de probabilidad de las energías de sitio  $\epsilon_n$ .

En el caso de desorden débil (2.1) es posible desarrollar el logaritmo en la ecuación (2.14) en serie de potencias de la variable  $\xi_n = \epsilon_n/\omega \sin(\omega T)$ . En la aproximación de segundo orden se obtiene la expresión

$$l_{\text{loc}}^{-1} = \frac{1}{8 \sin^2(\omega T)} \int d\epsilon \epsilon^2 P(\epsilon) \int_0^{2\pi} d\theta \rho(\theta) [1 - 2 \cos(2\theta) + \cos(4\theta)] \quad (2.15)$$

que es válida para todo valor de la energía dentro de la banda  $] -2 : 2[$ .

Para determinar la medida invariante  $\rho(\theta)$  que aparece en la ecuación (2.15) es útil considerar la forma del mapa (2.11) en el caso de desorden débil. Guardando los términos de orden  $O(\xi_n^2)$  el mapa (2.11) asume la forma simplificada

$$\theta_{n+1} = \theta_n + \omega T + \omega \xi_n \sin^2 \theta_n + \omega^2 \xi_n^2 \sin^3 \theta_n \cos \theta_n \quad (\text{mód } 2\pi) \quad (2.16)$$

que muestra como la variable angular  $\theta$  es sometida a un proceso de deriva debido al término constante  $\omega T$ , al que se suma un proceso de difusión causado por los términos aleatorios. Consecuentemente, para valores irracionales de  $\omega T/(2\pi)$  los puntos de la sucesión  $\{\theta_n\}$  se distribuyen de manera uniforme en el intervalo  $[0 : 2\pi]$  y la medida invariante resulta ser aproximadamente constante,  $\rho(\theta) \simeq 1/(2\pi)$ . Sustituyendo esta expresión en la ecuación (2.15) se obtiene en fin el resultado

$$l_{\text{loc}}^{-1} = \frac{\sigma^2}{8 \sin^2(\omega T)} = \frac{\sigma^2}{8(1 - E^2/4)} \quad (2.17)$$

que corresponde a la expresión (1.11).

En el modelo de Anderson estándar la distribución de las energías de sitio es una constante  $P(\epsilon) = 1/W$  dentro del intervalo  $[-W/2 : W/2]$  y es igual a cero fuera de ello, por lo que resulta  $\sigma^2 = W/12$  y la longitud de localización (2.17) asume la forma

$$l_{\text{loc}}^{-1} = \frac{W^2}{96} \frac{1}{1 - E^2/4} \quad (2.18)$$

que representa la conocida expresión de Thouless [27].

La fórmula de Thouless describe correctamente el comportamiento de la longitud de localización para todos los valores de la energía dentro del intervalo  $] - 2 : 2[$ , con la excepción del caso  $E = 0$  (centro de la banda), donde la longitud de localización resulta más grande de casi el 10% respecto al valor previsto por la ecuación (2.18) [28]. La desviación se debe a un efecto de resonancia que produce una pequeña modulación de la medida invariante  $\rho(\theta)$ ; por razones de brevedad se omite la discusión de este caso particular, que es analizado al detalle en [13].

## 2.4. Desorden correlacionado

Se habla de desorden correlacionado cuando las energías de sitio  $\epsilon_n$  no son variables aleatorias *independientes*: en otras palabras, en este caso el valor de la energía potencial en un sitio tiene una correlación estadística con los valores de la energía potencial en los demás sitios. Matemáticamente las relaciones entre las energías en sitios distintos de la red se caracterizan por medio de la función de correlación binaria:

$$\chi(k) = \frac{\langle \epsilon_n \epsilon_{n+k} \rangle}{\langle \epsilon_n^2 \rangle} = \frac{\langle \epsilon_n \epsilon_{n+k} \rangle}{\sigma^2}. \quad (2.19)$$

Una descripción completa de las propiedades estadísticas del desorden requeriría también el conocimiento de las funciones de correlación ternarias, cuaternarias y así siguiendo, pero en el caso de desorden débil que consideramos aquí los correladores binarios (2.19) resultan suficientes para describir las propiedades de localización en aproximación de segundo orden. Supondremos por lo tanto que los correladores  $\langle \epsilon_n \epsilon_{n+k} \rangle / \sigma^2$  sean una función  $\chi(k)$  conocida de la distancia  $k$  entre sitios.

Las correlaciones espaciales entre las energías de sitio  $\epsilon_n$  implican que las intensidades  $\xi_n$  de las patadas en el oscilador estocástico (2.2) no sean totalmente independientes, sino correlacionadas temporalmente. Por consecuencia, los valores del ruido (2.3) en dos instantes distintos  $\xi(t)$  y  $\xi(t')$  deben presentar algún grado de correlación: técnicamente esto se expresa diciendo que el ruido es *coloreado*. (El caso límite de desorden sin correlaciones corresponde a un ruido de tipo “blanco” cuya función de autocorrelación es proporcional a una delta de Dirac,  $\langle \xi(t)\xi(t') \rangle \propto \delta(t - t')$ .)

Para derivar la expresión de longitud de localización en el caso de desorden débil (2.1), se puede proceder como en el caso precedente, desarrollando en serie de potencias el logaritmo en las ecuaciones (2.13) o (2.14). Sin embargo en este caso, a diferencia del anterior, hay que tomar en cuenta también las correlaciones entre la energía potencial  $\epsilon_n$  y la variable angular  $\theta_n$ . Esto implica que en el desarrollo de la expresión (2.13) aparezca un término adicional y que resulte

$$l_{\text{loc}}^{-1} = \frac{\sigma^2}{8 \sin^2(\omega T)} - \frac{\langle \epsilon_n \sin(2\theta_n) \rangle}{2 \sin(\omega T)} \quad (2.20)$$

Para evaluar la longitud de correlación (2.20) necesitamos determinar el correlador ruido-ángulo  $\langle \epsilon_n \sin(2\theta_n) \rangle$  o, equivalentemente, el correlador  $\langle \xi_n \sin(2\theta_n) \rangle$ . Este correlador puede determinarse usando un método introducido en [4]. El primer paso consiste en definir el correlador ruido-ángulo

$$q_k = \langle \xi_n \exp(2i\theta_{n-k}) \rangle,$$

cuyo cálculo puede llevarse a cabo por medio de una relación recursiva. Si se sustituye en la definición del correlador  $q_{k-1}$  la expresión para el ángulo  $\theta_{n-k+1}$  en función del ángulo  $\theta_{n-k}$  dada por el mapa angular (2.16) se obtiene

$$q_{k-1} = \langle \xi_n \exp(2i\theta_{n+1-k}) \rangle = \langle \xi_n \exp \left\{ 2i \left[ \theta_{n-k} + \omega T + \omega \xi_{n-k} \sin^2(\theta_{n-k}) \right] \right\} \rangle.$$

Desarrollando la exponencial y despreciando los términos de orden superior al segundo se deriva la identidad

$$q_{k-1} = \exp(2i\omega T) q_k + 2i\omega \exp(2i\omega T) \langle \xi_n \xi_{n-k} \rangle \langle \exp(2i\theta_{n-k}) \sin^2(\theta_{n-k}) \rangle. \quad (2.21)$$

El promedio sobre la variable angular con una distribución uniforme da

$$\langle \exp(2i\theta_{n-k}) \sin^2(\theta_{n-k}) \rangle = -1/4;$$

sustituyendo este resultado en la ec. (2.21) se obtiene la relacion de recurrencia

$$q_{k-1} = \exp(2i\omega T) q_k + 2i\omega \exp(2i\omega T) \langle \xi_n \xi_{n-k} \rangle \left(-\frac{1}{4}\right).$$

Multiplicando ambos lados de la ecuación por  $\exp[2i\omega T(k-1)]$  y sumando desde  $k=1$  hasta  $\infty$  tenemos que

$$\sum_{k=1}^{\infty} q_{k-1} \exp[2i\omega T(k-1)] = \sum_{k=1}^{\infty} q_k \exp(2i\omega T k) - \frac{i\omega}{2} \sum_{k=1}^{\infty} \langle \xi_n \xi_{n-k} \rangle \exp(2i\omega T k).$$

Haciendo el cambio de variable  $l = k-1$  en el miembro izquierdo y escribiendo el primer término del miembro derecho como  $\sum_{k=0}^{\infty} q_k \exp(2i\omega T k) - q_0$ , se obtiene la siguiente expresión

$$q_0 = \langle \xi_n \exp(2i\theta_n) \rangle = -i\frac{\omega}{2} \sum_{k=1}^{\infty} \langle \xi_n \xi_{n-k} \rangle \exp(2i\omega T k). \quad (2.22)$$

Tomando la parte imaginaria de (2.22) y sustituyendo en la fórmula (2.20) de la longitud de localización se obtiene

$$l_{\text{loc}}^{-1} = \frac{\sigma^2}{8 \sin^2(\omega T)} \varphi(\omega T) \quad (2.23)$$

con

$$\varphi(\omega T) = 1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \chi(k) \cos(2k\omega T). \quad (2.24)$$

Este resultado, derivado originalmente en [4], define la longitud de localización para el modelo (1.3) con desorden correlacionado. Comparando las expresiones para el caso con correlación y para el caso sin correlacion, se deduce que las correlaciones del desorden cambian la longitud de localización inversa por medio del factor (2.24). Este último depende exclusivamente de

los correladores binarios  $\chi(k)$  (y no de los correladores ternarios, etc.) debido a que se ha derivado la longitud de localización (2.23) en la aproximación de segundo orden. La expresión (2.23) es correcta (en la aproximación de segundo orden) para todos los valores de la energía excepto que al centro de la banda  $E = 0$  y al borde de la banda  $E \rightarrow 2^-$ , donde el modelo de Anderson presenta anomalías aun en el caso de desorden sin correlaciones.

## 2.5. Correlaciones espaciales de largo alcance y efectos de deslocalización

Una consecuencia muy importante de la expresión (2.23) es la posibilidad de demostrar la existencia de estados deslocalizados en intervalos continuos de energías en redes desordenadas 1D [4]. En efecto, la ecuación (2.24) implica que, si el desorden tiene correlaciones específicas de largo alcance, puede existir un valor crítico de la energía que divide una región de estados localizados de una de estados extendidos (el llamado “borde de movilidad”, cuya existencia se pensaba imposible en modelos 1D). Como ejemplo se puede considerar el caso en el que la función de correlación (2.19) tome la forma

$$\chi(k) = \frac{3}{2\pi k} \sin\left(\frac{2\pi k}{3}\right) \quad (2.25)$$

que corresponde efectivamente a un desorden con correlaciones de largo alcance, ya que la función de correlación tiende a cero en el límite  $k \rightarrow \infty$  con ley de potencia  $\chi(k) \propto 1/k$ . Sustituyendo la expresión (2.25) en la ecuación (2.24) se obtiene el resultado [4]

$$\varphi(E) = \begin{cases} 3/2 & \text{si } 1 < |E| < 2 \\ 0 & \text{si } |E| < 1 \end{cases}$$

que implica que los estados electrónicos sean extendidos en el intervalo  $|E| < 1$  (ya que la longitud de localización diverge en esta región) y localizados fuera de él. Este resultado prueba que pueden aparecer bordes de movilidad en modelos 1D, lo que constituye un hallazgo teórico de importancia fundamental porque implica que las redes 1D pueden tener propiedades de transporte mucho más complejas de lo que se sospechaba anteriormente.

Sin embargo, hay que subrayar que la prueba de la existencia de una fase de estados extendidos se apoya en resultados analíticos obtenidos con

método perturbativo en la aproximación de segundo orden; por lo tanto las conclusiones relativas al borde de movilidad pueden considerarse válidas sólo en esta aproximación. Los estados “extendidos” en otras palabras, podrían en principio ser localizados sobre una región espacial muy amplia (de hecho, este parece ser el caso en modelos desordenados 1D continuos [29]). Al otro lado es importante observar que los sistemas físicos reales son necesariamente de tamaño finito por lo que en la práctica deben considerarse como extendidos todos los estados cuya longitud de localización, aunque no infinita, sea comparable a la dimensión de la muestra desordenada.

Las expresiones (2.23) y (2.24) para la longitud de localización no son importantes solo porque de ellas se deduce que la existencia de un continuo de estados deslocalizados en modelos 1D es teóricamente posible; al contrario estas fórmulas revisten también un considerable interés práctico porque proporcionan la solución del llamado “problema inverso”, es decir, el problema de determinar un potencial  $\epsilon_n$  que dé origen a una longitud de localización  $l_{\text{loc}}(E)$  con dependencia de la energía predeterminada.

Para definir el problema, supongamos que nos interese producir una red desordenada en la que los electrones con energía  $E$  se hallan en estados con una longitud de localización específica  $l_{\text{loc}}(E)$ . Si se conoce la longitud de localización (2.23) queda inmediatamente definido el factor (2.24) y esto implica que se puedan determinar también los correladores binarios (2.19). En efecto, es posible interpretar matemáticamente la ecuación (2.24) como un desarrollo en serie de Fourier de la función  $\varphi(\omega T)$  en el que los correladores binarios  $\chi(k)$  desempeñan el papel de coeficientes de Fourier; una operación de transformada inversa permite por lo tanto derivar los correladores en función del factor (2.24)

$$\chi(k) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} \varphi(x) \cos(2kx) dx. \quad (2.26)$$

Una vez que se conozcan los correladores (2.19) hay que determinar las energías aleatorias  $\epsilon_n$  cuya función de correlación tenga la forma (2.26); este problema se puede solucionar mediante el algoritmo [9]

$$\epsilon_n = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \beta(k) Z_{n+k}$$

en el que los símbolos  $Z_k$  representan números aleatorios con media igual a

cero y varianza igual a  $\sigma^2 = \langle \epsilon_n^2 \rangle$  y

$$\beta(k) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} \sqrt{\varphi(x)} \cos(2kx) dx.$$

De esta manera se vuelve posible construir potenciales aleatorios que engendren una longitud de localización  $l_{\text{loc}}(E)$  con arbitraria dependencia de la energía. El resultado abre el camino para aplicaciones tecnológicas de gran importancia práctica, como la construcción de filtros pasa-banda en dispositivos electrónicos 1D [9], que se obtienen exigiendo que la longitud de localización  $l_{\text{loc}}(E)$  diverja en un intervalo de energías determinado. Se trata de una posibilidad que no es solo teórica: en efecto, las técnicas existentes ya permiten la construcción de ciertos sistemas específicos, como superredes de semiconductores [5] y guías de onda [6], con el grado y el tipo de desorden deseado.

# Capítulo 3

## Modelo de Kronig-Penney con desorden compositivo y estructural

### 3.1. Introducción

En este capítulo se expone la parte novedosa de esta tesis, esto es, el análisis con el método del mapa hamiltoniano del modelo de Kronig-Penney con desorden débil de tipo tanto estructural cuanto compositivo. El antecedente de esta tesis es representado por el estudio del modelo de Kronig-Penney con desorden puramente estructural publicado en [9]; el progreso obtenido en este trabajo de tesis consiste en la extensión del análisis del caso de desorden meramente estructural al caso en que los dos tipos de desorden son contemporaneamente presentes.

La investigación de este problema se ha llevado a cabo aplicando el método del mapa hamiltoniano descrito en el capítulo precedente. La transposición del método requiere un ajuste, porque en el caso discutido en este capítulo el valor medio del potencial aleatorio no es nulo como en el caso anterior; en la terminología del oscilador pateado esto significa que el movimiento imper turbado no es una rotación sencilla en el espacio de las fases. Sin embargo es posible reconducir el problema al caso ya analizado por medio de una apropiada transformación canónica que reduce a una rotación el movimiento en ausencia de la parte aleatoria del potencial.

El resultado final que se obtiene para la longitud de localización es una

suma de tres términos, que representan respectivamente el efecto del desorden de tipo estructural, el efecto del desorden de tipo compositivo y el efecto de la presencia simultánea de ambos. La fórmula obtenida se reduce al resultado derivado en [9] cuando el único tipo de desorden presente es el estructural.

El modelo que se ha analizado en este trabajo representa una variante del modelo estándar de Kronig-Penney. Para definir completamente el problema, resulta entonces apropiado empezar con un resumen de los rasgos salientes del modelo de Kronig-Penney sin desorden. Esto requiere una rápida mención del teorema de Bloch, que se discute en la sección 3.2 de este capítulo. El modelo de Kronig-Penney estándar se analiza en la sección 3.3, mientras que el modelo que se ha estudiado en esta tesis se define en la sección 3.4. El resto del capítulo es dedicado al estudio de este modelo.

## 3.2. Teorema de Bloch

Consideremos un electrón en un potencial  $V(x)$  de una dimensión, cuya ecuación de Schrödinger es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (3.1)$$

Las soluciones de esta ecuación son bien conocidas para situaciones físicas sencillas como el caso del electrón libre con  $V(x) = 0$ , o los casos de un electrón sujeto a un campo eléctrico uniforme (que corresponde a un potencial lineal  $V(x) = eEx$ ) o a una fuerza elástica (a la que se asocia un potencial armónico del tipo  $V(x) = (1/2)Kx^2$ ).

El caso que nos interesa discutir aquí es el de un electrón en un cristal 1D. Despreciando las interacciones entre electrones, cada electrón se mueve en un potencial periódico que satisface la siguiente relación

$$V(x) = V(x + ma)$$

donde  $a$  es el período de la red y  $m$  es un entero arbitrario. Ahora bien, la transformada de Fourier de un potencial periódico  $V(x)$  incluye únicamente ondas planas cuyo número de onda  $h_n = 2\pi n/a$ , por lo que se puede desarrollar  $V(x)$  por medio de la serie

$$V(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} V_n e^{ih_n x}.$$

Ahora analicemos las implicaciones que puede tener un potencial periódico sobre los valores propios y los vectores propios de la ecuación de Schrödinger. Primero consideremos el caso del electrón libre: en este caso el potencial es nulo y las soluciones de la ecuación de Schrödinger (3.1) son simplemente ondas planas de la forma

$$W_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}.$$

Estas ondas planas forman un conjunto completo de funciones ortonormales. La constante de normalización es elegida de tal forma que  $W_k(x)$  está normalizada en el intervalo  $0 \leq x \leq L$ , donde  $L$  es la longitud del cristal. Los valores propios de la energía son  $E(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$ . Consideremos ahora el caso de un genérico potencial periódico. Si aplicamos el operador  $H = (p^2/2m) + V(x)$  a las ondas planas  $W_k(x)$ , vemos que la función  $HW_k(x)$  pertenece al subespacio

$$S_k = \{W_k(x), W_{k+h_1}(x), W_{k-h_1}(x), W_{k+h_2}(x), W_{k-h_2}(x), \dots\}$$

formado por las ondas planas que tienen un número de onda  $k + h_n$ .

También podemos notar que el subespacio  $S_k$  es cerrado respecto a la aplicación del operador  $H$  a cualquiera de sus elementos y que dos subespacios  $S_k$  y  $S_{k'}$  son diferentes si  $k$  y  $k'$  no están relacionados por múltiplos enteros de  $2\pi/a$ , mientras que si  $k' = k + n2\pi/a$  los subespacios  $S_k$  y  $S_{k'}$  coinciden. Esto nos permite definir en el espacio de los vectores de onda (espacio recíproco) una región fundamental con los límites  $-\pi/a \geq k \geq \pi/a$ : este intervalo incluye todos los diferentes números de onda  $k$  que individualizan los subespacios independientes  $S_k$ . Esta región del espacio es conocida como la primera zona de Brillouin.

Usando todo lo anterior, podemos expresar cada función de onda como

$$\psi_k(x) = \sum_n c_n(k) \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i(k+h_n x)}.$$

Resulta conveniente introducir las funciones  $u_k(x)$  con el mismo período que el potencial  $V(x)$  definidas por las relaciones

$$u_k(x) = \sum_n c_n(k) \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ih_n x} = \sum_n c_n(k) \frac{1}{\sqrt{L}} e^{in(2\pi/a)x}.$$

Entonces se puede escribir

$$\psi_k(x) = e^{ikx}u_k(x), \quad (3.2)$$

y esta ecuación expresa el teorema de Bloch, cuya formulación es

*Cualquier solución físicamente aceptable de la ecuación de Schrödinger en un potencial periódico toma la forma de ondas planas moduladas, por una función apropiada, con la periodicidad de la red.*

Una forma equivalente de escribir la ecuación (3.2) es

$$\psi_k(x + t_n) = e^{ikt_n}\psi_k(x)$$

donde  $t_n = na$ , es una traslación en la red.

El teorema de Bloch desempeña un papel central en la física de los sistemas periódicos, no solo porque caracteriza la forma itinerante de las funciones de onda sino porque conlleva el hecho de que en general el espectro de energía se divide en regiones de energía permitida separadas por regiones de energía no permitida (véase por ejemplo [30]).

### 3.3. El modelo de Kronig-Penney

Así como uno de los problemas más elementales de la mecánica cuántica es el estudio de los niveles de energía de una partícula en un pozo cuántico, una de las aplicaciones más elementales del teorema de Bloch es el estudio de las bandas de energía de una partícula que se mueve en un arreglo periódico de pozos cuánticos. Este modelo fue introducido por Kronig y Penney en 1931 para reemplazar el potencial de un cristal por el de una función que es constante a trozos y por lo tanto más manejable.

Debido a que el potencial es constante en cada pozo y barrera, en cada una de estas regiones la solución de la ecuación de Schrödinger es dada simplemente por funciones trigonométricas o exponenciales. El uso de apropiadas condiciones de frontera, combinadas con la condición de Bloch (3.2) permite derivar una ecuación analítica para los valores propios del hamiltoniano del cristal.

Consideremos primero una sucesión infinita y periódica de pozos cuánticos, de tal forma cada pozo tiene anchura  $w$  y potencial nulo, mientras que cada barrera tiene anchura  $b$  y valor del potencial igual a  $V_0$ . La constante de la red es entonces igual a  $a = w + b$ . Si tomamos como celda elemental de

la red el intervalo  $-w < x < b$ , podemos partir esta celda en dos regiones: la región I correspondiente al intervalo  $-w < x < 0$  es el pozo y la región II, en el intervalo  $0 < x < b$  es la barrera.

La solución de la ecuación de Schrödinger para energías  $0 < E < V_0$  tiene la forma

$$\begin{cases} \psi_I(x) = Ae^{iqx} + Be^{-iqx} & \text{si } -w \leq x \leq 0 \\ \psi_{II}(x) = Ce^{\beta x} + De^{-\beta x} & \text{si } 0 \leq x \leq b \end{cases} \quad (3.3)$$

donde hemos introducido los símbolos

$$q(E) = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

y

$$\beta(E) = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

para representar respectivamente el número de onda en el pozo y en la barrera. Los coeficientes  $A, B, C, D$  son constantes que deben ser elegidas de tal manera que resulten satisfechas las siguientes condiciones

$$\begin{aligned} \psi_I(0) &= \psi_{II}(0), & \left(\frac{d\psi_I}{dx}\right)_{x=0} &= \left(\frac{d\psi_{II}}{dx}\right)_{x=0}, \\ \psi_{II}(b) &= e^{ika}\psi_I(-w), & \left(\frac{d\psi_{II}}{dx}\right)_{x=b} &= e^{ika}\left(\frac{d\psi_I}{dx}\right)_{x=-w}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Las primeras dos ecuaciones expresan las condiciones de continuidad de la función de onda y de su derivada a la frontera de las regiones I y II, esto es, en  $x = 0$ ; las últimas dos ecuaciones se obtienen debido al teorema de Bloch que relaciona la función de onda y su derivada en las posiciones  $x = -w$  y  $x = b$ .

Sustituyendo en la ecuación (3.4) la forma (3.3) de la función de onda, se obtiene un sistema de ecuaciones lineales homogéneas para las constantes  $A, B, C, D$

$$\begin{aligned} A + B &= C + D \\ Aiq - Biq &= C\beta - D\beta \\ Ce^{\beta b} + De^{-\beta b} &= e^{ika} [Ae^{-iqw} + Be^{iqw}] \\ C\beta e^{\beta b} - D\beta e^{-\beta b} &= e^{ika} [Aiqe^{-iqw} - Biqe^{iqw}] \end{aligned} \quad (3.5)$$

El sistema (3.5) tiene solución solo si el determinante de la matriz asociada es nulo

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

Para evaluar el determinante de la ecuación precedente, resulta conveniente desarrollarlo en menores de  $3 \times 3$  con respecto a la primera fila. Se obtiene así la condición

$$\frac{\beta^2 - q^2}{2q\beta} \sinh \beta b \sin qw + \cosh \beta b \cos qw = \cos ka. \quad (3.6)$$

Para simplificar el análisis del problema es útil considerar el caso específico en el que la anchura  $b$  de cada barrera tiende a cero mientras la altura  $V_0$  tiende a infinito, de tal forma que el producto  $bV_0$  permanezca constante. Matemáticamente esto nos lleva a considerar un potencial que consiste en una sucesión periódica de barreras de potencial del tipo delta de Dirac. En el límite  $b \rightarrow 0$  y  $V_0 \rightarrow \infty$  con  $bV_0 = \text{constante}$ , la ecuación (3.6) se simplifica y toma la forma

$$P \frac{\sin(qa)}{qa} + \cos(qa) = \cos(ka) \quad (3.7)$$

donde  $P = mV_0ba/\hbar^2$  es un parámetro adimensional proporcional al “área” de la barrera  $bV_0$ .

Una solución cualitativa de la ecuación (3.7) se puede obtener gráficamente representando en función del parámetro sin dimensiones  $qa$  el miembro izquierdo de la ecuación (3.7). Debido a que el miembro derecho no puede tomar valores fuera del intervalo  $[-1 : 1]$ , la ecuación (3.7) admite soluciones reales solo para valores de  $qa$  tales que la función  $F(qa) = P \sin(qa)/qa + \cos(qa)$  resulte no superior a uno en valor absoluto. La condición  $|F(qa)| \leq 1$  define los niveles de energía  $E = \hbar^2 q^2 / 2m$  que son permitidos y que se agrupan en bandas de energías separadas por intervalos prohibidos de energía.

Es fácil ver de la ec. (3.7) que, si el parámetro  $P$  es muy pequeño, se recupera el caso del electrón libre; por otro lado si  $P \rightarrow \infty$  las bandas de energía se vuelven muy estrechas y el espectro de energía tiende a reducirse a líneas con energías tales que  $q(E)a = n\pi$   $n = 1, 2, \dots$ . En este último caso los valores de la de energía son

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{a^2} n^2$$

con  $n = 1, 2, \dots$  y coinciden con los niveles de energía de un electrón en un pozo cuántico de anchura  $a$  y barreras de potencial de altura infinita. Estos niveles también pueden escribirse como

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2ma_B^2} \frac{\pi^2}{(a/a_B)^2} n^2,$$

o equivalentemente, si se miden las energías en Rydberg,

$$E_n = \frac{9,87}{(a/a_B)^2} n^2$$

donde  $a_B = 0,529 \text{ \AA}$  es el radio de Bohr y  $\hbar^2/2ma_B^2 = 1 \text{ Ryd} = 13,606 \text{ eV}$ .

### 3.4. Modelo de Kronig-Penney con desorden

Ahora consideramos el modelo de Kronig-Penney con desorden tanto composicional cuanto estructural, definido por la ecuación de Schrödinger estacionaria

$$\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + U(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (3.8)$$

donde el potencial está definido como

$$U(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (U + U_n) \delta(x - x_n). \quad (3.9)$$

Aquí  $x_n = na + a_n$  donde  $a$  es la constante de la red y las  $a_n$  son corrimientos aleatorios de la posición de las barreras deltiformes; el hecho de que las barreras no están regularmente espaciadas significa que el modelo exhibe un desorden estructural (o posicional). El desorden composicional es introducido en el modelo mediante las variables aleatorias  $U_n$ , que corresponden a las fluctuaciones de la intensidad de la barrera.

Las propiedades estadísticas del modelo son definidas asumiendo que las variables aleatorias  $U_n$  y  $a_n$  tienen un promedio igual a cero

$$\langle U_n \rangle = 0 \quad \text{y} \quad \langle a_n \rangle = 0 \quad (3.10)$$

y que sus momentos segundos son pequeños

$$\begin{aligned} \langle a_n^2 \rangle &\sim \sigma^2 \ll a^2 \\ \langle U_n^2 \rangle &\sim E^2 \sigma^2 \ll (Ea)^2. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Para la descripción de las propiedades del modelo, el desplazamiento relativo de las barreras, definido como

$$\Delta_n = a_{n+1} - a_n,$$

resulta ser un parámetro físicamente más relevante del desplazamiento absoluto  $a_n$  de las barreras mismas. Obviamente, las propiedades estadísticas de las variables  $a_n$  también implican que resulte

$$\langle \Delta_n \rangle = 0 \quad \text{y} \quad \langle \Delta_n^2 \rangle \sim \sigma^2 \ll a^2.$$

Para la definición del modelo consideraremos también los correladores binarios

$$\begin{aligned} \langle \Delta_n \Delta_k \rangle &= \chi_1(|n - k|) \\ \langle U_n U_k \rangle &= \chi_2(|n - k|) \\ \langle U_n \Delta_k \rangle &= \chi_3(|n - k|) \end{aligned}$$

como funciones conocidas  $\chi_i(n)$ .

Hay que notar que, para el caso de desorden débil que se discute aquí, no es necesario especificar ulteriormente las propiedades estadísticas de las variables aleatorias  $\{a_n\}$  y  $\{U_n\}$ . Es apropiado subrayar que los promedios y los correladores binarios de las variables aleatorias resultan suficientes para definir las propiedades estadísticas del modelo no porque el desorden sea de tipo gaussiano, sino porque es débil.

Para estudiar los estados electrónicos del modelo de Kronig-Penney (3.8), es conveniente analizar este sistema en términos de un oscilador estocástico. La analogía entre los dos modelos descansa en el hecho que la ecuación de Schrödinger (3.8) puede escribirse en la forma

$$\psi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \left[ 1 - \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{U + U_n}{E} \delta(x - x_n) \right] \psi(x) = 0,$$

que tiene la misma estructura de la ecuación dinámica

$$\ddot{x} + \omega^2 x \left[ 1 + \sum_{n=-\infty}^{\infty} (\xi + \xi_n) \delta(t - t_n) \right] = 0 \quad (3.12)$$

de un oscilador pateado clásico con hamiltoniana

$$H = \frac{p^2}{2} + \frac{1}{2} \omega^2 x^2 [1 + \xi(t)] \quad (3.13)$$

donde la frecuencia con ruido tiene la forma

$$\xi(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (\xi + \xi_n) \delta(t - t_n) \quad (3.14)$$

con  $t_n = n\tau + \tau_n$ . El carácter estocástico del proceso (3.14) deriva de la presencia de las variables aleatorias  $\xi_n$  y  $\tau_n$ , que representan respectivamente las fluctuaciones en la intensidad y en la distancia temporal de las patadas. Las propiedades estadísticas (3.10) and (3.11) del desorden en el modelo de Kronig-Penney se traducen en las siguientes condiciones sobre el ruido

$$\langle \xi_n \rangle = \langle \tau_n \rangle = 0 \quad (3.15)$$

y

$$\langle \xi_n^2 \rangle \sim \langle \tau_n^2 \rangle \sim \sigma^2 \ll \tau^2. \quad (3.16)$$

La analogía matemática entre la ecuación de Schrödinger (3.8) y la ecuación dinámica (3.12) vuelve posible analizar el comportamiento espacial de los estados electrónicos del modelo de Kronig-Penney en términos de la evolución temporal del oscilador pateado. Como ya se mencionó en el capítulo precedente, en este enfoque los estados electrónicos extendidos corresponden a órbitas acotadas del oscilador, mientras que los estados electrónicos localizados tienen su contraparte en órbitas no acotadas. Esta interpretación dinámica implica que se considere la ecuación de Schrödinger como un problema de valores iniciales; por lo tanto, para el estudio del modelo de Kronig-Penney, el método dinámico resulta equivalente a el de las matrices de transferencia.

Para establecer una correspondencia entre el modelo de Kronig-Penney y el oscilador estocástico, se necesita identificar la función de onda  $\psi$  con la posición espacial  $x$  del oscilador y el espacio en el primer sistema con el tiempo en el segundo. En cuanto al potencial electrónico aleatorio (3.9), éste se convierte en el ruido sobre la frecuencia (3.14). Una lista de las transposiciones

necesarias es la siguiente

función de onda	$\psi$	$\longleftrightarrow$	posición	$x$
espacio	$x$	$\longleftrightarrow$	tiempo	$t$
número de onda dentro de los pozos	$q = \sqrt{2mE/\hbar^2}$	$\longleftrightarrow$	frecuencia	$\omega$
valor medio del potencial	$U/E$	$\longleftrightarrow$	valor medio de las patadas	$-\xi$
fluctuaciones de la intensidad de la barrera	$U_n/E$	$\longleftrightarrow$	fluctuaciones de la intensidad de de las patadas	$-\xi_n$
constante de la red	$a$	$\longleftrightarrow$	intervalo promedio entre dos patadas	$\tau$
fluctuaciones de la posición relativa de la barrera	$\Delta_n = a_{n+1} - a_n$	$\longleftrightarrow$	fluctuaciones de la distancia temporal relativa entre dos patadas	$\delta_n = \tau_{n+1} - \tau_n$

### 3.5. El mapa hamiltoniano

Dada la función hamiltoniana (3.13), las ecuaciones dinámicas correspondientes son

$$\begin{aligned} \dot{x} &= p \\ \dot{p} &= -\omega^2 x [1 + \xi(t)]. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Sea  $t_n = n\tau + \tau_n$  el tiempo de la  $n$ -ésima patada y  $\Delta t_n = t_{n+1} - t_n = \tau + \delta_n$  el intervalo entre dos patadas sucesivas. Hemos introducido el símbolo  $\delta_n = \tau_{n+1} - \tau_n$  para indicar la parte fluctuante de la distancia temporal entre dos patadas. Debido a las condiciones (3.15) y (3.16), las variables aleatorias  $\delta_n$  tienen un promedio nulo y una varianza pequeña

$$\langle \delta_n \rangle = 0 \quad \text{and} \quad \langle \delta_n^2 \rangle \sim \sigma^2 \ll \tau^2. \quad (3.18)$$

Se puede integrar las ecuaciones dinámicas (3.17) sobre el intervalo  $[t_n^-, t_{n+1}^-]$  entre el instante anterior a la  $n$ -ésima patada y el instante anterior a la  $(n+1)$ -ésima patada; en esta forma se obtiene el mapa hamiltoniano

$$\begin{pmatrix} x_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} = \mathbf{T}_n \begin{pmatrix} x_n \\ p_n \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

con

$$\mathbf{T}_n = \begin{pmatrix} \cos \omega (\tau + \delta_n) - \omega (\xi + \xi_n) \sin \omega (\tau + \delta_n) & \frac{1}{\omega} \sin \omega (\tau + \delta_n) \\ -\omega \sin \omega (\tau + \delta_n) - \omega^2 (\xi + \xi_n) \cos \omega (\tau + \delta_n) & \cos \omega (\tau + \delta_n) \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

Como estamos interesados únicamente en el caso de desorden débil, podemos desarrollar la matriz de transferencia (3.20) y quedarnos solo con los términos hasta el segundo orden en  $\sigma$ . Esto hace que el mapa (3.19) tome la forma

$$\begin{pmatrix} x_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} = [\mathbf{T}_n^{(0)} + \mathbf{T}_n^{(1)} + \mathbf{T}_n^{(2)} + o(\sigma^2)] \begin{pmatrix} x_n \\ p_n \end{pmatrix}, \quad (3.21)$$

donde el término de orden cero es

$$\mathbf{T}_n^{(0)} = \begin{pmatrix} \cos (\omega \tau) - \omega \xi \sin (\omega \tau) & \frac{1}{\omega} \sin (\omega \tau) \\ -\omega [\sin (\omega \tau) + \omega \xi \cos (\omega \tau)] & \cos (\omega \tau) \end{pmatrix} \quad (3.22)$$

mientras que la corrección a primer orden es

$$\mathbf{T}_n^{(1)} = \begin{pmatrix} -[\sin (\omega \tau) + \omega \xi \cos (\omega \tau)] \omega \delta_n - \sin (\omega \tau) \omega \xi_n & \cos (\omega \tau) \delta_n \\ [-\cos (\omega \tau) + \omega \xi \sin (\omega \tau)] \omega^2 \delta_n - \cos (\omega \tau) \omega^2 \xi_n & -\sin (\omega \tau) \omega \delta_n \end{pmatrix}$$

y el término de segundo orden es

$$\mathbf{T}_n^{(2)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} [-\cos (\omega \tau) + \omega \xi \sin (\omega \tau)] (\omega \delta_n)^2 - \cos (\omega \tau) \omega^2 \xi_n \delta_n & -\frac{1}{2} \sin (\omega \tau) \omega \delta_n^2 \\ \frac{1}{2} [\sin (\omega \tau) + \omega \xi \cos (\omega \tau)] \omega^3 \delta_n^2 + \sin (\omega \tau) \omega^3 \xi_n \delta_n & -\frac{1}{2} \cos (\omega \tau) (\omega \delta_n)^2 \end{pmatrix}.$$

Para analizar el comportamiento de las soluciones del mapa hamiltoniano (3.21), es conveniente efectuar una transformación canónica  $(x_n, p_n) \rightarrow (X_n, P_n)$  tal que, en las nuevas variables, el movimiento imperturbado del oscilador en el espacio de las fases se reduzca a una rotación. En otras palabras, queremos eliminar el efecto del valor medio de las patadas. En ausencia de ruido, el mapa hamiltoniano (3.21) se reduce a

$$\begin{pmatrix} x_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} = \mathbf{T}_n^{(0)} \begin{pmatrix} x_n \\ p_n \end{pmatrix} \quad (3.23)$$

con  $\mathbf{T}_n^{(0)}$  dado por la ecuación (3.22). Vamos a considerar una transformación canónica de la forma

$$\begin{pmatrix} x_n \\ p_n \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} X_n \\ P_n \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

con

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \alpha \cos \frac{\omega\tau}{2} & \frac{1}{\alpha} \sin \frac{\omega\tau}{2} \\ -\omega\alpha \sin \frac{\omega\tau}{2} & \frac{1}{\alpha} \cos \frac{\omega\tau}{2} \end{pmatrix}$$

donde el parámetro  $\alpha$  es definido por la relación

$$\alpha^4 = \frac{1}{\omega^2} \left[ 1 - \frac{\omega\xi}{\sin(\omega\tau) + \frac{\omega\xi}{2} [\cos(\omega\tau) + 1]} \right].$$

Se puede mostrar (véase los detalles en [9]) que, en términos de las nuevas variables  $(X_n, P_n)$ , el mapa sin perturbación (3.23) se reduce a una rotación

$$\begin{pmatrix} X_{n+1} \\ P_{n+1} \end{pmatrix} = \tilde{\mathbf{T}}_n^{(0)} \begin{pmatrix} X_n \\ P_n \end{pmatrix}$$

con

$$\tilde{\mathbf{T}}_n^{(0)} = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{T}_n^{(0)} \mathbf{M} = \begin{pmatrix} \cos(\kappa\tau) & \sin(\kappa\tau) \\ -\sin(\kappa\tau) & \cos(\kappa\tau) \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

donde el ángulo de rotación  $\kappa\tau$  es definido mediante la ecuación

$$\cos(\kappa\tau) = \cos(\omega\tau) - \frac{\omega\xi}{2} \sin(\omega\tau). \quad (3.26)$$

Se observe que, al efectuar la transformación canónica (3.24), hemos reescalado el tiempo por lo que la nueva coordenada  $X_n$  y el correspondiente momento conjugado  $P_n$  tienen las mismas dimensiones.

En términos de las nuevas variables y del ángulo de rotación  $\kappa\tau$ , el mapa hamiltoniano (3.21) toma la forma

$$\begin{pmatrix} X_{n+1} \\ P_{n+1} \end{pmatrix} = [\tilde{\mathbf{T}}_n^{(0)} + \tilde{\mathbf{T}}_n^{(1)} + \tilde{\mathbf{T}}_n^{(2)}] \begin{pmatrix} X_{n+1} \\ P_{n+1} \end{pmatrix}, \quad (3.27)$$

donde la matriz imperturbada  $\tilde{\mathbf{T}}_n^{(0)}$  está definida por la ecuación (3.25) mientras que las correcciones a primer y segundo orden son

$$\tilde{\mathbf{T}}_n^{(1)} = \begin{pmatrix} \left[ \omega\xi_n \Phi(\kappa\tau) - \frac{1}{\alpha^2} \delta_n \right] \sin(\kappa\tau) & \frac{1}{\alpha^2} [\xi_n \Lambda(\kappa\tau) + \delta_n \cos(\kappa\tau)] \\ -\omega^2 \alpha^2 [\xi_n \Lambda(\kappa\tau) + \delta_n \cos(\kappa\tau)] & \left[ \omega\xi_n \Phi(\kappa\tau) - \omega^2 \alpha^2 \delta_n \right] \sin(\kappa\tau) \end{pmatrix}$$

y

$$\tilde{\mathbf{T}}_n^{(2)} = \begin{pmatrix} -\omega^2 \left[ \xi_n \delta_n \Lambda (\kappa \tau) + \frac{1}{2} \delta_n^2 \cos (\kappa \tau) \right] & \left[ \frac{\omega}{\alpha^2} \xi_n \delta_n \Phi (\kappa \tau) - \frac{\omega^2}{2} \delta_n^2 \right] \sin (\kappa \tau) \\ \left[ -\omega^3 \alpha^2 \xi_n \delta_n \Phi (\kappa \tau) + \frac{\omega^2}{2} \delta_n^2 \right] \sin (\kappa \tau) & -\omega^2 \left[ \xi_n \delta_n \Phi (\kappa \tau) + \frac{1}{2} \delta_n^2 \cos (\kappa \tau) \right] \end{pmatrix}.$$

En las ecuaciones anteriores hemos introducido las notaciones

$$\Phi (\kappa \tau) = \frac{\omega \xi \cot (\kappa \tau) - \left( \frac{1}{\omega \alpha^2} + \omega \alpha^2 \right)}{4 + (\omega \xi)^2} \quad (3.28)$$

y

$$\Lambda (\kappa \tau) = \frac{\cos (\kappa \tau) + \frac{\omega \xi}{4} \sin (\kappa \tau) \left( \frac{1}{\omega \alpha^2} + \omega \alpha^2 \right)}{2 \left[ 1 + \left( \frac{\omega \xi}{2} \right)^2 \right]}.$$

Para analizar la evolución del sistema dinámico (3.27) es conveniente pasar de las coordenadas cartesianas a las variables acción-ángulo, definidas mediante las ecuaciones

$$\begin{aligned} X_n &= \sqrt{2J_n} \sin \theta_n \\ P_n &= \sqrt{2J_n} \cos \theta_n \end{aligned}.$$

En términos de las nuevas variables, el mapa hamiltoniano (3.27) toma la

forma

$$\begin{aligned}
\sin \theta_{n+1} &= \sqrt{\frac{J_n}{J_{n+1}}} \left\{ \left[ 1 - \frac{\omega^2 \delta_n^2}{2} + \frac{\frac{\xi_n}{2\alpha^2}}{1 + \left(\frac{\omega\xi}{2}\right)^2} \left[ \omega^2 \alpha^2 \left( \frac{\xi}{2} - \delta_n \right) (1 + \cos(\kappa\tau)) \right. \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \left. - \left( 1 + \frac{\omega^2 \xi \delta_n}{2} \right) \sin(\kappa\tau) \right] \right] \sin(\theta_n + \kappa\tau) \right. \\
&\quad \left. + \left[ \frac{\delta_n}{\alpha^2} + \frac{\frac{\xi_n}{2\alpha^2}}{1 + \left(\frac{\omega\xi}{2}\right)^2} \left[ \left( 1 + \frac{\omega^2 \xi \delta_n}{2} \right) (1 - \cos(\kappa\tau)) \right. \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \left. - \omega^2 \alpha^2 \left( \frac{\xi}{2} - \delta_n \right) \sin(\kappa\tau) \right] \right] \cos(\theta_n + \kappa\tau) \right\} \\
\cos \theta_{n+1} &= \sqrt{\frac{J_n}{J_{n+1}}} \left\{ \left[ 1 - \frac{\omega^2 \delta_n^2}{2} + \frac{\frac{\xi_n}{2\alpha^2}}{1 + \left(\frac{\omega\xi}{2}\right)^2} \left[ \omega^2 \alpha^2 \left( \frac{\xi}{2} - \delta_n \right) (1 - \cos(\kappa\tau)) \right. \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \left. + \omega^2 \alpha^4 \left( 1 + \frac{\omega^2 \xi \delta_n}{2} \right) \sin(\kappa\tau) \right] \right] \cos(\theta_n + \kappa\tau) \right. \\
&\quad \left. - \omega^2 \alpha^4 \left[ \frac{\delta_n}{\alpha^2} + \frac{\frac{\xi_n}{2\alpha^2}}{1 + \left(\frac{\omega\xi}{2}\right)^2} \left[ \left( 1 + \frac{\omega^2 \xi \delta_n}{2} \right) (1 + \cos(\kappa\tau)) \right. \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \left. + \frac{1}{\alpha^2} \left( \frac{\xi}{2} - \delta_n \right) \sin(\kappa\tau) \right] \right] \sin(\theta_n + \kappa\tau) \right\}.
\end{aligned} \tag{3.29}$$

Se observe que, así como en el caso del modelo de Anderson analizado en el capítulo 2, también en este caso la variable angular evoluciona en forma independiente de la variable de acción. Esto se puede hacer aun más evidente si se escribe el mapa hamiltoniano (3.29) en forma explícita. En el marco de

la aproximación a segundo orden se obtiene

$$\begin{aligned}
J_{n+1} &= D_n^2 J_n \\
\theta_{n+1} &= \theta_n + \kappa\tau + \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{1}{\omega\alpha^2} + \omega\alpha^2 \right) + \frac{\omega\xi}{\sin(\kappa\tau)} \cos(2\theta_n + 2\kappa\tau) \right] \omega\delta_n \\
&- \Phi(\kappa\tau) [1 - \cos(2\theta_n + \kappa\tau)] \omega\xi_n \\
&- \frac{1}{4} \frac{\omega\xi}{\sin(\kappa\tau)} \left[ \left( \frac{1}{\omega\alpha^2} + \omega\alpha^2 \right) \sin(2\theta_n + 2\kappa\tau) + \frac{1}{2} \frac{\omega\xi}{\sin(\kappa\tau)} \sin(4\theta_n + 4\kappa\tau) \right] \omega^2 \delta_n^2 \\
&+ \Phi^2(\kappa\tau) \left[ \sin(2\theta_n + \kappa\tau) - \frac{1}{2} \sin(4\theta_n + 2\kappa\tau) \right] \omega^2 \xi_n^2 \\
&+ \frac{\omega\xi}{\sin(\kappa\tau)} \Phi(\kappa\tau) \left[ -\frac{1}{2} \sin(\kappa\tau) + \sin(2\theta_n + 2\kappa\tau) - \frac{1}{2} \sin(4\theta_n + 3\kappa\tau) \right] \omega^2 \xi_n \delta_n
\end{aligned} \tag{3.30}$$

donde hemos introducido la notación

$$\begin{aligned}
D_n^2 &= 1 + \frac{\omega\xi}{\sin(\kappa\tau)} \sin(2\theta_n + 2\kappa\tau) \omega\delta_n + 2\Phi(\kappa\tau) \sin(2\theta_n + \kappa\tau) \omega\xi_n \\
&+ \frac{\omega\xi}{2\sin(\kappa\tau)} \left[ \frac{\omega\xi}{\sin(\kappa\tau)} + \left( \frac{1}{\omega\alpha^2} + \omega\alpha^2 \right) \cos(2\theta_n + 2\kappa\tau) \right] \omega^2 \delta_n^2 \\
&+ 2\Phi^2(\kappa\tau) [1 - \cos(2\theta_n + \kappa\tau)] \omega^2 \xi_n^2 \\
&+ 2 \frac{\omega\xi}{\sin(\kappa\tau)} \Phi(\kappa\tau) [\cos(\kappa\tau) - \cos(2\theta_n + 2\kappa\tau)] \omega^2 \xi_n \delta_n.
\end{aligned} \tag{3.31}$$

Es fácil derivar del mapa hamiltoniano (3.30) el correspondiente mapa en el espacio tangente; en el marco de la aproximación a segundo orden se obtiene

$$\begin{pmatrix} \delta J_{n+1} \\ \delta \theta_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D_n^2 & 0 \\ 0 & 1/D_n^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta J_n \\ \delta \theta_n \end{pmatrix}. \tag{3.32}$$

Esta ecuación muestra claramente que el mapa (3.30) preserva el volumen del espacio fase, como debe ser para el caso de cualquier sistema dinámico hamiltoniano. El mapa tangente (3.32) muestra también que, si la variable de acción crece exponencialmente, entonces la variable angular disminuye correspondientemente.

### 3.6. El exponente de Lyapunov

La longitud inversa de localización para el modelo de Kronig-Penney (3.8) puede calcularse por medio de la fórmula

$$l_{\text{loc}}^{-1} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{Na} \sum_{n=1}^N \log \left| \frac{\psi_{n+1}}{\psi_n} \right|$$

que difiere de la expresión (2.8) por el factor  $a$  en el denominador; esto se debe a que no estamos asumiendo (como implícitamente hecho en el capítulo 2) que la constante de la red sea unitaria. La longitud de localización inversa, en términos dinámicos, es equivalente al exponente de Lyapunov del mapa hamiltoniano (3.19), i.e.,

$$\lambda = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N\tau} \sum_{n=1}^N \log \left| \frac{X_{n+1}}{X_n} \right| = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N\tau} \sum_{n=1}^N \log \left( \sqrt{\frac{J_{n+1}}{J_n}} \left| \frac{\sin \theta_{n+1}}{\sin \theta_n} \right| \right).$$

Como discutido en el análisis del modelo de Anderson, excepto que en casos muy especiales se puede despreciar la contribución que deriva de la razón de los senos en la expresión precedente, por lo que se puede escribir el exponente de Lyapunov en la forma

$$\lambda = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2N\tau} \sum_{n=1}^N \log \left( \frac{J_{n+1}}{J_n} \right) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2N\tau} \sum_{n=1}^N \log D_n^2 = \frac{1}{2\tau} \langle \log D_n^2 \rangle. \quad (3.33)$$

Ahora podemos sustituir la expresión (3.31) para  $D_n^2$  en la ecuación (3.33) y desarrollar el logaritmo despreciando los términos de orden  $o(\sigma^2)$ . Se obtiene así

$$\begin{aligned} \lambda = & \frac{1}{\tau} \left[ \frac{\omega^2 \xi}{2 \sin(\kappa\tau)} \langle \delta_n \sin(2\theta_n + 2\kappa\tau) \rangle + \omega \Phi(\kappa\tau) \langle \xi_n \sin(2\theta_n + \kappa\tau) \rangle \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \left( \frac{\omega^2 \xi}{2 \sin(\kappa\tau)} \right)^2 \langle \delta_n^2 \rangle + \frac{1}{2} \omega^2 \Phi^2(\kappa\tau) \langle \xi_n^2 \rangle + \frac{1}{2} \omega^3 \xi \cot(\kappa\tau) \Phi(\kappa\tau) \langle \xi_n \delta_n \rangle \right]. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Para continuar, debemos calcular los correladores ruido-ángulo que aparecen en la fórmula (3.34). Se puede seguir el método descrito en [4] e introducir el correlador entre el ángulo y la intensidad de la patada

$$q_k = \langle \xi_n \exp(i2\theta_{n-k}) \rangle$$

así como el correlador entre el ángulo y la distancia temporal de dos patadas sucesivas

$$p_k = \langle \delta_n \exp(i2\theta_{n-k}) \rangle.$$

El cálculo de ambos correladores se puede llevar a cabo siguiendo un procedimiento análogo al que se describe en la sección (2.4). Ambos correladores, en efecto, satisfacen una relación de recursividad que puede obtenerse sustituyendo en las definiciones de  $q_{k-1}$  y  $p_{k-1}$  la expresión para  $\theta_{n-k+1}$  en función de  $\theta_{n-k}$  que se deriva de la segunda ecuación del mapa (3.30). Guardando únicamente los términos hasta el segundo orden en la intensidad del desorden  $\sigma^2$ , se llega a la ecuación para el correlador  $q_k$

$$q_{k-1} = \left\langle \xi_n \exp(i2\theta_{n-k+1}) \right\rangle = \left\langle \xi_n \exp(i2\theta_{n-k}) \exp(i2\kappa\tau) \left\{ 1 + i \left[ \left( \frac{1}{\omega\alpha^2} + \omega\alpha^2 \right) + \frac{\omega\xi}{\sin(\kappa\tau)} \cos(2\theta_{n-k} + 2\kappa\tau) \right] \omega\delta_{n-k} - 2i\omega\Phi(\kappa\tau) [1 - \cos(2\theta_{n-k} + \kappa\tau)] \xi_{n-k} \right\} \right\rangle.$$

En el caso de desorden débil los correladores ruido-ángulo triples y cuádruples se pueden factorizar, por lo que resulta

$$\begin{aligned} q_{k-1} &= q_k \exp(i2\kappa\tau) \\ &+ i\omega \exp(i2\kappa\tau) \langle \exp(i2\theta_{n-k}) \rangle \left[ \left( \frac{1}{\omega\alpha^2} + \omega\alpha^2 \right) \langle \xi_n \delta_{n-k} \rangle - 2\Phi(\kappa\tau) \langle \xi_n \xi_{n-k} \rangle \right] \\ &+ i \exp(i2\kappa\tau) \frac{\omega^2 \xi}{\sin(\kappa\tau)} \langle \exp(i2\theta_{n-k}) \cos(2\theta_{n-k} + 2\gamma) \rangle \langle \xi_n \delta_{n-k} \rangle \\ &+ 2i\omega \exp(i2\kappa\tau) \Phi(\kappa\tau) \langle \exp(i2\theta_{n-k}) \cos(2\theta_{n-k} + \gamma) \rangle \langle \xi_n \xi_{n-k} \rangle. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Si consideramos el mapa hamiltoniano (3.30), es fácil ver que en ausencia de desorden la evolución del oscilador es dada por las ecuaciones

$$\begin{aligned} J_{n+1} &= J_n \\ \theta_{n+1} &= \theta_n + \kappa\tau. \end{aligned}$$

Así pues, excepto en el límite  $\kappa\tau \rightarrow 0$ , la variable angular tiene una dinámica “rápida” comparada con la variable de acción. Por lo tanto podemos esperar que, en el caso de desorden débil, la variable angular asuma rápidamente una distribución uniforme en el intervalo  $[0 : 2\pi]$ . En el límite de desorden débil podemos entonces calcular los promedios sobre la variable angular en la ecuación (3.35) usando una distribución uniforme. De esta forma se obtiene la relación recursiva

$$q_{k-1} = q_k \exp(i2\kappa\tau) + i\omega \exp(i\kappa\tau) \Phi(\kappa\tau) \langle \xi_n \xi_{n-k} \rangle + \frac{i}{2} \frac{\omega^2 \xi}{\sin(\kappa\tau)} \langle \xi_n \delta_{n-k} \rangle.$$

Multiplicando ambos miembros de la ecuación por  $\exp [i2\kappa\tau (k - 1)]$  y sumando sobre  $k$  desde cero hasta infinito, se obtiene

$$\begin{aligned} q_0 &= i\omega\Phi(\kappa\tau) \exp(-i\kappa\tau) \sum_{k=1}^{\infty} \langle \xi_n \xi_{n-k} \rangle \exp(i2\kappa\tau k) \\ &+ \frac{i}{2} \frac{\omega^2 \xi}{\sin(\kappa\tau)} \exp(-i2\kappa\tau) \sum_{k=1}^{\infty} \langle \xi_n \delta_{n-k} \rangle \exp(i2\kappa\tau k). \end{aligned}$$

La parte imaginaria de esta expresión, multiplicada por un factor  $\exp(i\kappa\tau)$ , representa el correlador entre el ángulo y la intensidad de la patada que aparece en la expresión (3.34), esto es,

$$\begin{aligned} \langle \xi_n \sin(2\theta_n + \kappa\tau) \rangle &= \text{Im} [q_0 \exp(i\kappa\tau)] = \omega\Phi(\kappa\tau) \sum_{l=1}^{\infty} \langle \xi_n \xi_{n-l} \rangle \cos(2\kappa\tau l) \\ &+ \frac{\omega^2 \xi}{2 \sin(\kappa\tau)} \sum_{l=1}^{\infty} \langle \xi_n \delta_{n-l} \rangle \cos[\kappa\tau (2l - 1)]. \end{aligned} \tag{3.36}$$

El correlador entre el ángulo y el instante de la patada en la ecuación (3.34) puede derivarse en modo análogo. Una vez obtenida la relación recursiva para  $p_k$ ,

$$p_{k-1} = p_k \exp(i2\kappa\tau) + i\omega \exp(i\kappa\tau) \Phi(\kappa\tau) \langle \delta_n \xi_{n-k} \rangle + \frac{i}{2} \frac{\omega^2 \xi}{\sin(\kappa\tau)} \langle \delta_n \delta_{n-k} \rangle$$

se puede derivar de ella la identidad

$$\begin{aligned} p_0 &= i\omega\Phi(\kappa\tau) \exp(-i\kappa\tau) \sum_{k=1}^{\infty} \langle \delta_n \xi_{n-k} \rangle \exp(i2\kappa\tau k) \\ &+ \frac{i}{2} \frac{\omega^2 \xi}{\sin(\kappa\tau)} \exp(-i2\kappa\tau) \sum_{k=1}^{\infty} \langle \delta_n \delta_{n-k} \rangle \exp(i2\kappa\tau k). \end{aligned}$$

Este resultado implica que el correlador que deseamos puede escribirse en la forma

$$\begin{aligned} \langle \delta_n \sin(2\theta_n + 2\kappa\tau) \rangle &= \text{Im} [p_0 \exp(i2\kappa\tau)] = \omega\Phi(\kappa\tau) \sum_{l=1}^{\infty} \langle \xi_n \delta_{n-l} \rangle \cos[\kappa\tau (2l + 1)] \\ &+ \frac{\omega^2 \xi}{2 \sin(\kappa\tau)} \sum_{l=1}^{\infty} \langle \delta_n \delta_{n-l} \rangle \cos(2\kappa\tau l) \end{aligned} \tag{3.37}$$

Sustituyendo los correladores ruido ángulo (3.36) y (3.37) en la ecuación (3.34), se obtiene en fin el exponente de Lyapunov

$$\begin{aligned}
\lambda &= \frac{1}{2\tau} \omega^2 \Phi^2(\kappa\tau) \langle \xi_n^2 \rangle \left[ 1 + 2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\langle \xi_n \xi_{n-l} \rangle}{\langle \xi_n^2 \rangle} \cos(2\kappa\tau l) \right] \\
&+ \frac{1}{8\tau} \left( \frac{\omega^2 \xi}{\sin(\kappa\tau)} \right)^2 \langle \delta_n^2 \rangle \left[ 1 + 2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\langle \delta_n \delta_{n-l} \rangle}{\langle \delta_n^2 \rangle} \cos(2\kappa\tau l) \right] \\
&+ \frac{1}{2\tau} \omega^3 \xi \cot(\kappa\tau) \Phi(\kappa\tau) \langle \delta_n \xi_n \rangle \left[ 1 + 2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\langle \xi_n \delta_{n-l} \rangle}{\langle \xi_n \delta_n \rangle} \cos(2\kappa\tau l) \right]
\end{aligned} \quad . \quad (3.38)$$

Esta ecuación representa el resultado central del trabajo de investigación llevado a cabo. Para discutirlo más convenientemente, es oportuno traducir el resultado en el lenguaje propio del objeto de nuestro estudio, esto es, el modelo de Kronig-Penney con desorden. Esto se hace en la sección siguiente.

### 3.7. Resultados para el modelo de Kronig-Penney con desorden

Haciendo uso de las correspondencias enunciadas al final de la sección 3.4, es fácil transponer los resultados obtenidos para el oscilador aleatorio (3.13) al caso del modelo de Kronig-Penney con desorden.

Observamos en primer lugar que la ecuación (3.26), que define el ángulo de rotación entre dos patadas en ausencia de desorden, en el nuevo contexto se identifica naturalmente con la ecuación que define la estructura de banda del modelo de Kronig-Penney, esto es,

$$\cos(ka) = \cos(qa) + \frac{mUa \sin(qa)}{\hbar^2 qa} \quad (3.39)$$

donde  $k$  es el número de onda de Bloch y

$$q = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

es el número de onda de propagación dentro de los pozos de potencial. En efecto, es fácil constatar que la ecuación (3.39) coincide con la ecuación (3.7) una vez que se identifique el parámetro  $U$  con el “área” de la barrera  $V_0 b$ .

En segundo lugar, el exponente de Lyapunov (3.38) corresponde a la longitud de localización inversa para el modelo de Kronig-Penney y resulta igual a

$$\begin{aligned}
\lambda &= \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{2aE} \Phi^2(ka) \langle U_n^2 \rangle \left[ 1 + 2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\langle U_n U_{n+l} \rangle}{\langle U_n^2 \rangle} \cos(2kal) \right] \\
&+ \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^2 \frac{U^2}{8a \sin^2(ka)} \langle \Delta_n^2 \rangle \left[ 1 + 2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\langle \Delta_n \Delta_{n+l} \rangle}{\langle \Delta_n^2 \rangle} \cos(2kal) \right] \\
&+ \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{U}{2a\sqrt{E}} \Phi(ka) \cot(ka) \langle U_n \Delta_n \rangle \left[ 1 + 2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\langle U_n \Delta_{n+l} \rangle}{\langle U_n \Delta_n \rangle} \cos(2kal) \right]
\end{aligned} \tag{3.40}$$

donde la función  $\Phi(ka)$ , definida por la ecuación (3.28), puede ser expresada como

$$\Phi(ka) = \frac{E \sin(ka)}{qU \cos(ka) - \sqrt{(qU)^2 + [2E \sin(ka)]^2}}.$$

Hay que notar que la longitud de localización inversa (3.40) se reduce a la forma obtenida en [9] para el caso en el que solo sea presente desorden del tipo estructural, esto es, cuando  $U_n = 0$  para todo entero  $n$ .

La expresión (3.40) para el exponente de Lyapunov puede ser puesta en forma diferente si se nota que la función  $\Phi(ka)$  puede escribirse también como

$$\Phi(ka) = -\frac{1 \sin(qa)}{2 \sin(ka)}.$$

Usando esta identidad el exponente de Lyapunov puede expresarse en la forma

$$\begin{aligned}
\lambda &= \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{8a \sin^2(ka)} \left\{ \sin^2(qa) \frac{1}{E} \langle U_n^2 \rangle \left[ 1 + 2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\langle U_n U_{n-l} \rangle}{\langle U_n^2 \rangle} \cos(2kal) \right] \right. \\
&+ \frac{2m}{\hbar^2} U^2 \langle \Delta_n^2 \rangle \left[ 1 + 2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\langle \Delta_n \Delta_{n+l} \rangle}{\langle \Delta_n^2 \rangle} \cos(2kal) \right] \\
&\left. - \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{U}{\sqrt{E}} 2 \sin(qa) \cos(ka) \langle U_n \Delta_n \rangle \left[ 1 + 2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\langle U_n \Delta_{n+l} \rangle}{\langle U_n \Delta_n \rangle} \cos(2kal) \right] \right\}
\end{aligned} \tag{3.41}$$

Las expresiones (3.40) y (3.41) representan el punto de partida para el desarrollo futuro de este trabajo de investigación. Análogamente a cuanto se ha hecho en el caso del modelo de Anderson, se trata de identificar casos específicos a los que resulte físicamente interesante aplicar las fórmulas generales (3.40) y (3.41). En ese contexto es natural dedicar una atención especial

a los efectos de deslocalización que puedan producir correlaciones espaciales de largo alcance del desorden. En [9], Izrailev y colaboradores discutieron las posibilidades de construir filtros pasa-banda explotando correlaciones de largo alcance del desorden de tipo estructural. El modelo estudiado en esta tesis tiene un desorden más estructurado y por lo tanto es de esperar que se puedan producir efectos de deslocalización más sofisticados. En particular, hay que analizar los posibles efectos de interferencia que puedan derivar de la presencia simultánea de desorden compositivo y estructural (matemáticamente, se trata de explorar las manifestaciones del tercer sumando en el miembro derecho de las identidades (3.40) y (3.41). Este trabajo conclusivo, que no se ha llevado a cabo por falta de tiempo, representa la extensión natural e inmediata del presente trabajo de tesis.

# Conclusiones

En esta tesis hemos estudiado el modelo de Kronig-Penney con desorden débil de tipo compositivo y estructural, generalizando los resultados obtenidos para casos más específicos que ya se habían publicado en la literatura. Hemos llevado a cabo un análisis de tipo perturbativo, utilizando el método dinámico que se basa en la equivalencia entre el modelo de Kronig-Penney con desorden débil y un oscilador con frecuencia perturbada por un ruido. La analogía hace que la localización de los estados electrónicos en el modelo de Kronig-Penney se manifieste como inestabilidad de las trayectorias del oscilador estocástico. Matemáticamente, esto implica que la longitud de localización para el primer sistema coincide con el exponente de Lyapunov para el segundo.

El método dinámico nos ha permitido derivar expresiones de gran generalidad para la longitud de localización en el caso de desorden débil con correlaciones espaciales *arbitrarias*. La longitud de localización inversa resulta ser la suma de tres términos, que describen respectivamente los efectos del desorden compositivo, del desorden estructural y de la presencia simultánea de los dos.

Los resultados obtenidos abren la posibilidad de estudiar las manifestaciones específicas de particulares tipos de correlaciones espaciales de largo alcance del desorden. La posibilidad de realizar experimentalmente sistemas físicos descritos por el modelo analizado hace concreta la perspectiva de verificar en laboratorio nuestras previsiones teóricas. Con esto se realizaría un progreso importante hacia la construcción de dispositivos 1D con propiedades de transporte hechas a medida de las necesidades industriales.

Un ulterior desarrollo de este trabajo de investigación es representado por la aplicación del método dinámico al estudio no solo de la estructura de los estados electrónicos, sino también de las propiedades de transporte del modelo de Kronig-Penney con desorden.

# Bibliografía

- [1] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958)
- [2] K. Ishii, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **53**, 77 (1973)
- [3] F. A. B. F. de Moura, M. L. Lyra, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3375 (1998); *Physica A* **266**, 465 (1999)
- [4] F. M. Izrailev, A. A. Krokhin, *Phys. Rev. Lett.* **82** 4062 (1999)
- [5] V. Bellani, E. Diez, R. Hey, L. Toni, L. Tarricone, G. B. Parravicini, F. Domínguez-Adame, R. Gómez-Alcalá, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 2159 (1999)
- [6] U. Kuhl, F. M. Izrailev, A. A. Krokhin, H.-J. Stöckmann, *Appl. Phys. Lett.* **77**, 633 (2000); A. Krokhin, F. Izrailev, U. Kuhl, H.-J. Stöckmann, S. E. Ulloa, *Physica E* **13**, 695 (2002)
- [7] F. M. Izrailev, N. M. Makarov, *Opt. Lett.* **26**, 1604 (2001); F. M. Izrailev, N. M. Makarov, *Phys. Stat. Sol. (c)* **0**, 3037 (2003); F. M. Izrailev, N. M. Makarov, *Journ. Phys. A: Math. Gen.* **38**, 10613 (2005)
- [8] L. Tessieri, F. M. Izrailev, *Journ. Phys. A: Math. Gen.* **39**, 11717 (2006)
- [9] F. M. Izrailev, A. A. Krokhin, S. E. Ulloa, *Phys. Rev. B* **63** 041102(R) (2001)
- [10] H. Cheraghchi, S. M. Fazeli, K. Esfarjani, *Phys. Rev. B* **72** 174207 (2005); H. Cheraghchi, S. M. Fazeli, *Jour. Stat. Mech.: Theory and Experiment*, P11004 (2006)

- [11] G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*, Halsted, New York, (1988)
- [12] F. M. Izrailev, T. Kottos, G. P. Tsironis, *Phys. Rev. B* **52**, 3274 (1995)
- [13] F. M. Izrailev, S. Ruffo, L. Tessieri, *J. Phys. A: Math. Gen.* **31** 5263 (1998)
- [14] L. Tessieri, F. M. Izrailev, *Physica E* **9** 405 (2001)
- [15] A. Crisanti, G. Paladin, A. Vulpiani, *Products of Random Matrices in Statistical Physics*, Springer Verlag, Berlín (1993)
- [16] A. MacKinnon, “Transfer Matrices and Disordered Systems”, p. 21-30, in *Anderson Localization and Its Ramifications*, T. Brandes and S. Kettmann eds., Springer Verlag, Berlín, (2003)
- [17] H. Furstenberg, *Trans. Amer. Math. Soc.* **108**, 377 (1963)
- [18] R. E. Borland, *Proc. R. Soc. A* **274**, 529 (1963)
- [19] D. C. Herbert, R. Jones, *J. Phys. C: Solid St. Phys.* **4**, 1145 (1971)
- [20] D. J. Thouless, *J. Phys. C: Solid St. Phys.* **5**, 77 (1972)
- [21] D. J. Thouless, *Physics Reports* **13**, 93 (1974)
- [22] T. Kottos, G. P. Tsironis, F. M. Izrailev, *J. Phys.; Condens. Matter* **9**, 1777 (1997)
- [23] L. Tessieri, F. M. Izrailev, *Phys. Rev. E* **64**, 66120 (2001)
- [24] V. Dossetti-Romero, F. M. Izrailev, A. A. Krokhin, *Physica E* **25**, 13 (2004)
- [25] I. M. Lifshits, S. A. Gredeskul, L. A. Pastur, *Introduction to the Theory of Disordered Systems*, Wiley, Nueva York, (1988)
- [26] F. M. Izrailev, V. Dossetti-Romero, A. A. Krokhin, L. Tessieri, “Parametric instability of linear oscillators with colored time-dependent noise”, “*Noise in Complex Systems and Stochastic Dynamics II*”,

compilación de Zoltán Gingl, José M. Sancho, Lutz Schimansky-Geier, Janos Kertesz, Proceedings of SPIE, **5471** (SPIE, Bellingham, WA, 2004), p. 125-134

- [27] D. J. Thouless, en *Ill-condensed Matter*, compilación de R. Balian, R. Maynard y G. Toulouse, North Holland, Amsterdam (1979), p. 1
- [28] G. Czycholl, B. Kramer, A. MacKinnon, *Z. Phys. B* **43**, 5 (1981); M. Kappus, F. Wegner, *Z. Phys. B* **45**, 15 (1981); B. Derrida, E. Gardner, *J. Physique* **45**, 1283 (1984)
- [29] L. Tessieri, *J. Phys. A: Math. Gen.* **35**, 9585 (2002)
- [30] G. Grosso, G. Pastori Parravicini, *Solid State Physics*, Academic Press, Amsterdam (2000)