



UNIVERSIDAD MICHOACANA DE SAN
NICOLÁS DE HIDALGO

INSTITUTO DE FÍSICA Y MATEMÁTICAS

**Propiedades de transporte en un
medio unidimensional aleatorio activo**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:
MAESTRO EN CIENCIAS EN EL ÁREA DE FÍSICA

PRESENTA:

JOSÉ JUAN RINCÓN PASAYE



DIRECTOR DE TESIS:
DR. LUCA TESSIERI

MORELIA, MICHOACÁN.

MARZO DE 2018

Índice general

| | |
|--|-----------|
| 1. Introducción | 1 |
| 1.1. Descripción de los capítulos de la tesis | 2 |
| 2. Sistemas ordenados y sistemas desordenados | 4 |
| 2.1. Definiciones | 4 |
| 2.2. Clasificación de redes de Bravais | 7 |
| 2.3. La red recíproca. | 9 |
| 2.3.1. Propiedades de la red recíproca | 10 |
| 2.4. El teorema de Bloch | 11 |
| 2.4.1. Consecuencias del teorema de Bloch | 14 |
| 2.4.2. El modelo de Kronig-Penney | 15 |
| 3. Sistemas desordenados hermíticos | 18 |
| 3.1. Tipos de desorden | 18 |
| 3.2. Modelos matemáticos de sistemas desordenados | 19 |
| 3.2.1. Ejemplo de un modelo con desorden estructural. | 19 |
| 3.2.2. Ejemplo de un modelo con desorden compositivo. | 20 |
| 3.3. Efectos del desorden en los estados electrónicos | 21 |
| 3.3.1. Bordas de movilidad | 21 |
| 3.4. Definiciones de localización | 22 |
| 3.4.1. Comportamiento asintótico de la función de onda. | 22 |
| 3.4.2. Coeficiente de transmisión. | 23 |
| 3.4.3. Razón de participación inversa. | 23 |
| 3.4.4. Longitud de localización entrópica | 23 |
| 3.5. La teoría de un sólo parámetro de escalamiento | 24 |
| 3.6. Análisis del modelo de Anderson unidimensional | 26 |
| 3.6.1. Matriz de transferencia del modelo de Anderson 1D | 26 |
| 3.6.2. Modelo de Anderson 1D sin desorden. | 27 |

| | | |
|-----------|---|-----------|
| 3.6.3. | Teorema de Furstenberg | 28 |
| 3.6.4. | Aplicación del teorema de Furstenberg al modelo de Anderson 1D | 29 |
| 3.6.5. | La conjetura de Borland. | 29 |
| 3.6.6. | Estudio numérico del modelo de Anderson 1D | 30 |
| 3.7. | El método del mapa hamiltoniano | 31 |
| 3.7.1. | Variables acción-ángulo | 33 |
| 3.7.2. | Exponente de Lyapunov | 34 |
| 3.7.3. | Transición localización - deslocalización (TLD) | 35 |
| 4. | Transporte en una barrera desordenada activa | 39 |
| 4.1. | Definición del problema estudiado: Transmisión a través de una barrera desordenada activa. | 39 |
| 4.2. | Matrices de transferencia | 41 |
| 4.3. | Barrera activa sin desorden | 43 |
| 4.4. | Cálculo perturbativo del coeficiente de transmisión para desorden débil y barrera delgada | 46 |
| 4.5. | Cálculo perturbativo de $\langle \ln T_N \rangle$ para el caso de barrera larga | 51 |
| 4.5.1. | El exponente de Lyapunov | 54 |
| 4.6. | Barrera con amplificación/atenuación promedio cero | 56 |
| 4.6.1. | Barrera no activa con desorden sin correlaciones espaciales | 57 |
| 4.6.2. | Barrera no activa con desorden correlacionado. | 58 |
| 4.6.3. | Caso con fluctuaciones de amplificación/atenuación sin correlaciones espaciales | 59 |
| 4.6.4. | Caso con fluctuaciones de amplificación/atenuación con correlación | 59 |
| 4.6.5. | Efecto de la intercorrelación. | 61 |
| 5. | Conclusiones | 65 |
| 5.1. | Conclusiones sobre hechos ya reportados | 65 |
| 5.2. | Conclusiones sobre aportaciones de esta tesis | 66 |
| 5.3. | Trabajo futuro | 67 |
| | Bibliografía | 67 |

Resumen

En este trabajo se presenta un estudio de las propiedades de transporte en un medio aleatorio activo unidimensional. Más específicamente, se considera la transmisión de ondas a través de una barrera desordenada. La barrera es activa, esto es, puede absorber o amplificar las ondas incidentes además de producir dispersión de las mismas. Desde un punto de vista matemático, esta propiedad se manifiesta en el carácter no hermítico del modelo. El desorden aparece a través de fluctuaciones de las energías de sitio y del coeficiente de amplificación/absorción; se ha considerado el caso de desorden con correlaciones espaciales. Para determinar las propiedades de transporte del modelo se ha usado la técnica de las matrices de transferencia en el cálculo del coeficiente de transmisión de la barrera. Trabajando con métodos perturbativos se han obtenido expresiones analíticas para el valor promedio del logaritmo del coeficiente de transmisión en los casos límite de barrera delgada y de barrera larga. Estas expresiones han permitido determinar cómo las correlaciones del desorden alteran las propiedades de transporte de la barrera.

Palabras Clave: Medios aleatorios, transmisión de ondas, localización de Anderson, desorden correlacionado, sistemas unidimensionales.

Abstract

In this work, a study of the transport properties in an active unidimensional random medium is presented. More specifically, the wave transmission through a random barrier is considered. The barrier is active, that is, it can absorb or amplify the incident waves besides producing scattering of them. From a mathematical point of view, this property produces the non hermitic character of the model. The disorder appears as fluctuations in the site energies and in the amplification/absorption coefficient; the case with space correlations it has been considered. The transfer matrix approach has been used in the calculus of the transmission coefficient of the barrier to determine the transport properties of the model. Working with perturbative methods, analytical expressions have been obtained for the average value of the logarithm of the transmission coefficient in the limit cases of thin barrier and long barrier. These expressions have allowed to determine how the disorder correlations alter the transport properties of the barrier.

Keywords: Random media, wave transmission, Anderson localization, correlated disorder, unidimensional systems.

Capítulo 1

Introducción

El presente trabajo es un estudio de las propiedades de transporte a través de una barrera de potencial unidimensional con desorden aleatorio. El modelo en el que se centra este estudio es el conocido como modelo de Anderson, el cual fue introducido por Philip W. Anderson en 1958 [1]. Irónicamente, las ideas novedosas introducidas en esta publicación apenas fueron reconocidas al principio y solo se esparcieron lentamente como se puede inferir por el número de citas, las cuales apenas sumaban unas 23 al final de 1963 y se acumularon apenas otras 20 en los siguientes cinco años. Sin embargo, el interés en el tema creció posteriormente y el trabajo de Anderson sobre sistemas desordenados le hizo acreedor del premio nobel de física en 1977 junto con su asesor de tesis John Van Vleck y con Nevill Mott que introdujo la noción de bordes de movilidad [2].

El estudio de Anderson trataba sobre la difusión de electrones considerando un modelo de ligadura fuerte, el cual describía electrones que pueden saltar de un átomo a otro y que están sujetos a un potencial externo aleatorio. Anderson aportó argumentos convincentes para explicar que este tipo de sistema pierde todas sus propiedades de conductividad cuando la intensidad del desorden es muy grande, es decir, en estas condiciones los electrones quedan atrapados y el sistema se comporta como un aislante en un marcado contraste con el comportamiento de un conductor cristalino ideal. Estas ideas sobre el modelo de la difusión de electrones en un medio desordenado han dado lugar a una gran variedad de teorías y experimentos sobre la naturaleza de la transición metal-aislante y sobre el comportamiento de las ondas de distinta naturaleza, desde ondas de probabilidad, ondas electromagnéticas, hasta ondas sísmicas en materiales complejos [3].

Las propiedades de transporte en sólidos desordenados, así como el modelo de Anderson y modelos similares han sido ampliamente estudiados desde la década de 1950, teniendo un gran auge durante la década de 1980, el cual se ha mantenido hasta la actualidad [3, 4, 5], dando lugar a un área de investigación con una gran actividad en donde aún

quedan varias incógnitas por resolver.

En este contexto, esta tesis estudia la transmisión de ondas a través de una barrera desordenada. La barrera es activa, esto es, puede amplificar o absorber las ondas incidentes además de producir dispersión de las mismas. Desde un punto de vista matemático, esta propiedad se manifiesta en el carácter no hermítico del modelo. El desorden aparece a través de las fluctuaciones de la intensidad de las energías de sitio y del coeficiente de amplificación/absorción.

La característica novedosa de este estudio consiste en la consideración de desorden con correlaciones espaciales. La finalidad del trabajo es determinar cómo las correlaciones del desorden alteran las propiedades de transporte, con atención especial a los efectos producidos por específicas correlaciones de largo alcance que, en el caso de desorden débil, pueden producir transiciones efectivas de localización-deslocalización. Para describir las propiedades de transporte se adopta la técnica de las matrices de transferencia y se obtienen, por medio de cálculos perturbativos, expresiones analíticas para el valor medio del logaritmo del coeficiente de transmisión en los casos límites de barrera delgada y de barrera larga. Estas expresiones muestran cómo se pueden moldear las propiedades de transporte de la barrera aleatoria activa por medio de las autocorrelaciones e intercorrelaciones de los tipos de desorden presentes en el modelo (energías de sitio y fluctuaciones del coeficiente de amplificación/absorción).

1.1. Descripción de los capítulos de la tesis

Este trabajo está redactado con la idea de ser un documento conciso, pero que vaya guiando al lector a partir de los aspectos fundamentales del problema estudiado, desde el marco de conceptos básicos (capítulo 2), pasando por las teorías y problemas fundamentales (capítulo 3) hasta el planteamiento preciso del modelo objeto de este trabajo, así como el estudio detallado con herramientas tanto analíticas como numéricas de sus propiedades (Capítulo 4).

En el capítulo 2 se presentan los conceptos y definiciones básicas acerca de en qué consiste un sistema desordenado en contraposición a un sistema ordenado o estructura cristalina perfecta. Se describen también las ondas de Bloch propias de un sistema cristalino y se describe la manera en que en estos sistemas los niveles energéticos se agrupan en bandas. Para este fin se considera el caso especial del modelo de Kronig-Penney unidimensional.

En el capítulo 3 se presenta una revisión de las teorías que se han desarrollado para estudiar el desorden y el efecto que tiene en las propiedades de los sistemas, especialmente se presenta el modelo de Anderson y el fenómeno de localización y las diversas maneras

de cuantificarlo así como el efecto que tiene la dimensión y la escala del modelo en dicho fenómeno y la explicación de dichos efectos a través de la teoría de un sólo parámetro de escalamiento. Se realiza un estudio del modelo de Anderson unidimensional, presentando como herramientas de análisis las matrices de transferencia y el teorema de Furstenberg; como herramienta alternativa para el estudio del modelo de Anderson unidimensional se presenta el método del mapa hamiltoniano. Se describe también en este capítulo la noción de bordes de movilidad y cómo específicas correlaciones de largo alcance del desorden pueden producir bordes de movilidad efectivos aun en modelos unidimensionales.

En el capítulo 4 se introduce el sistema estudiado, que consiste en una barrera aleatoria activa situada entre dos conductores perfectos. El sistema físico se representa por medio de un modelo unidimensional de enlace fuerte con desorden diagonal. El desorden entra en la definición del modelo a través de dos sucesiones de parámetros aleatorios, que representan las energías de sitio por un lado y las fluctuaciones del coeficiente de amplificación/absorción por el otro. El hecho de que la barrera es activa se traduce en el carácter no hermítico del modelo matemático. Esta característica complica considerablemente el estudio analítico de las propiedades de transporte del modelo, ya que impide una aplicación inmediata de técnicas basadas en las funciones de Green o en el método del mapa hamiltoniano. Por esta razón se ha decidido hacer uso de la técnica basada en el uso de las matrices de transferencia que, como se describe en el capítulo 4, nos ha permitido obtener expresiones analíticas perturbativas para el logaritmo del coeficiente de transmisión en los casos límites de barrera delgada y de barrera larga. Estas expresiones nos han permitido analizar el efecto de la correlaciones del desorden sobre las propiedades de transporte de la barrera.

Capítulo 2

Sistemas ordenados y sistemas desordenados

Hablar de sistemas ordenados es hacer referencia a las estructuras de los sólidos cristalinos, las cuales a nivel microscópico constan de iones acomodados en arreglos con una regularidad periódica. Esta regularidad microscópica subyacente en los sólidos cristalinos fue la hipótesis obvia durante mucho tiempo para explicar las regularidades geométricas apreciables a simple vista en cristales de tamaño macroscópico, en los cuales sólo se forman ciertos ángulos definidos entre las caras del cristal. Esta hipótesis recibió una confirmación experimental en 1913, mediante el trabajo de W. L. Bragg y de su padre W. H. Bragg por un lado y de Max Von Laue por el otro, quienes fundaron la cristalografía de rayos X y comenzaron la investigación de cómo están acomodados los átomos en la materia sólida [6]. En este capítulo se presentan definiciones formales para caracterizar los sistemas ordenados y los sistemas desordenados, y se describen las propiedades generales de los sistemas ordenados, tales como el teorema de Bloch y la estructura de bandas de energía en los sólidos cristalinos. Se describen también las diferencias entre algunos tipos de desorden y se presenta la consecuencia principal del desorden en un medio material, la localización de los estados electrónicos

2.1. Definiciones

A continuación se define un sistema desordenado a partir de la definición de un sistema ordenado o estructura cristalina. El estudio de las estructuras cristalinas es muy amplio y es retomado aquí solamente a nivel básico para poder introducir una base de comparación para el comportamiento de los sistemas desordenados. Para un tratamiento más detallado, consultar [6] o [7]

Definición 1. Sistema ordenado. Un sistema ordenado es una estructura cristalina que consiste en sitios definidos por una red de Bravais \mathcal{R} y una base que define la ubicación de los átomos en cada sitio de la red.

Definición 2. Red de Bravais. Es el conjunto de puntos definidos por vectores de la forma $\mathbf{r} = n_1\mathbf{t}_1 + n_2\mathbf{t}_2 + n_3\mathbf{t}_3$ donde $\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \mathbf{t}_3$, llamados vectores primitivos, son vectores no coplanares y $n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}$. Estos vectores primitivos se dice que generan la red.

Una red de Bravais es entonces un arreglo infinito de sitios, con una colocación y orientación tales que tienen exactamente la misma apariencia independientemente desde que sitio se observe el arreglo.

Para definir estructuras cristalinas que tienen un sólo átomo por cada sitio de la red es suficiente con las dos definiciones anteriores, pero si existen varios átomos por sitio de la red, se hace necesario el uso de una base de vectores que ubiquen las posiciones de cada átomo en relación al sitio de la red.

Definición 3. Base. A cada sitio de la red \mathcal{R} se le puede asociar un conjunto de v átomos definidos por la v -upla de vectores $\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, \dots, \mathbf{d}_v$, llamada base.

Para ilustrar las definiciones anteriores, consideremos la figura 2.1. En esta figura se muestra una porción de una red de Bravais de dos dimensiones, con ninguna simetría en particular, en la que se ilustran los sitios de la red marcados por puntos negros y los vectores primitivos $\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2$. Todos los sitios de la red son combinaciones lineales de los vectores primitivos con coeficientes enteros, por ejemplo, los puntos \mathbf{P} y \mathbf{Q} marcados en la figura cumplen: $\mathbf{P} = -\mathbf{t}_1 + 2\mathbf{t}_2$, $\mathbf{Q} = 3\mathbf{t}_1 + \mathbf{t}_2$

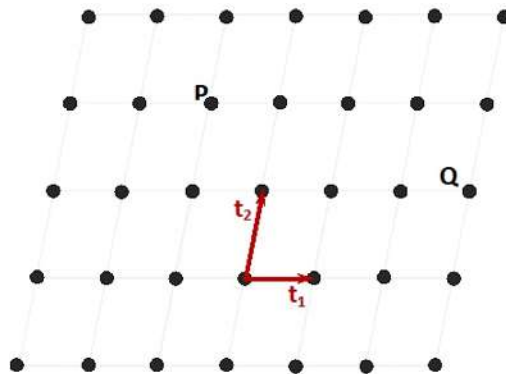


Figura 2.1: Ejemplo de red de Bravais 2D

Definición 4. Celda primitiva. Es una región que contiene un sólo punto de la red y la cual al trasladarse a través de todos los vectores de la red llena exactamente todo el espacio de la misma, sin traslapes ni huecos.

Nótese que no existe una manera única de elegir una celda primitiva en una red de Bravais. En la figura 2.2 se muestran diferentes elecciones de celdas primitivas para una misma red bidimensional.

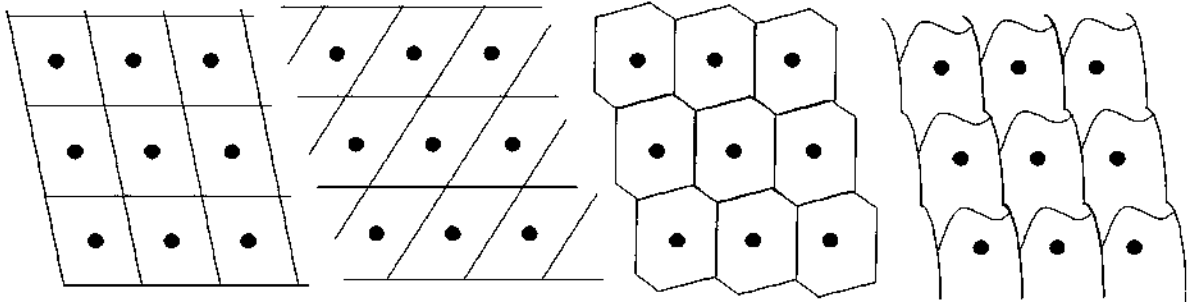


Figura 2.2: Varias elecciones de celda primitiva para una red de Bravais 2D

Se puede asociar una celda primitiva a un conjunto de vectores primitivos $\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \mathbf{t}_3$, ya que estos generan un paralelepípedo que es una celda primitiva, dada por los puntos de la forma $\mathbf{r} = r_1 \mathbf{t}_1 + r_2 \mathbf{t}_2 + r_3 \mathbf{t}_3$, donde r_1, r_2, r_3 son números reales en el intervalo $[0, 1]$, el volumen de esta celda es $\mathbf{V} = \mathbf{t}_1 \cdot (\mathbf{t}_2 \times \mathbf{t}_3)$.

La forma de la celda primitiva depende de la elección de estos vectores, la cual tampoco es única. El volumen \mathbf{V} de una celda primitiva, sin embargo, es siempre el mismo. Por ejemplo, en la figura 2.3 se muestran dos posibles selecciones de vectores primitivos: $\{\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2\}$ o $\{\tilde{\mathbf{t}}_1, \tilde{\mathbf{t}}_2\}$, los cuales dan lugar a las celdas primitivas marcadas con línea punteada.

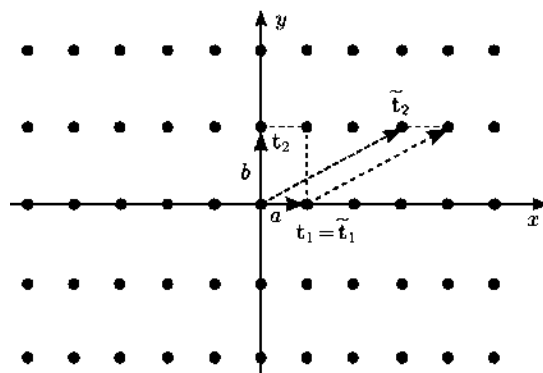


Figura 2.3: [7] Dos celdas primitivas en una red de Bravais

Definición 5. Celda convencional. Es posible definir una celda convencional que contenga varios puntos de la red y por lo tanto varias celdas primitivas

Cada celda primitiva corresponde a un solo punto de la red, en cambio una celda convencional puede cubrir varios puntos de la red y esto le permite adaptarse a otro tipo de simetría que en ocasiones puede ser más simple que el de la celda primitiva, en particular, se puede elegir de manera que tenga la misma simetría de la red. Por ejemplo, en la figura 2.4 se muestra una celda primitiva en forma de rombo, definida por los vectores primitivos $\{\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2\}$, mientras que la celda convencional definida por los vectores convencionales $\{\mathbf{t}_1^{(c)}, \mathbf{t}_2^{(c)}\}$ tiene forma rectangular, posee un punto extra en el centro de la celda y abarca el área de dos celdas primitivas.

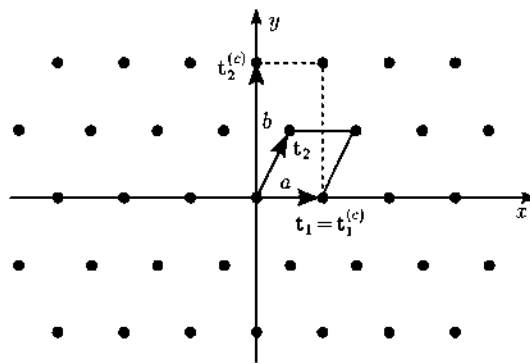


Figura 2.4: [7] Celda primitiva y celda convencional

Definición 6. Celda de Wigner-Seitz. Una celda de Wigner-Seitz es una celda primitiva que tiene la misma simetría de la red.

La celda de Wigner Seitz es la región que se construye alrededor de un punto de la red de manera que los puntos de la celda son más cercanos a dicho punto de la red que a cualquier otro punto de la red. Esta celda se puede construir trazando una línea entre el punto de la red con su vecino más cercano, su segundo vecino más cercano, etc., bisecando dichas líneas con planos perpendiculares a ellas y eligiendo el menor volumen encerrado. En la figura 2.5 se muestran ejemplos de celdas de Wigner Seitz en estructuras cristalinas de dos y de tres dimensiones

2.2. Clasificación de redes de Bravais

El tipo de red de Bravais queda determinado por consideraciones de simetría, en el caso de redes de dos dimensiones se pueden tener cinco tipos: cuadrada, hexagonal, rectangular,

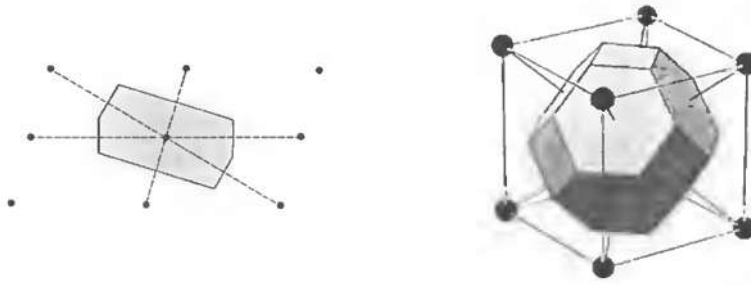


Figura 2.5: [6] Celdas de Wigner Seitz 2D y 3D

rectangular centrada en el cuerpo y oblicua, como se ilustra en la figura 2.6.

| | |
|---|--|
| Oblicua $ t_1 \neq t_2 $ $\varphi \neq \pi/2$ | |
| Cuadrada $ t_1 = t_2 $ $\varphi = \pi/2$ | |
| Hexagonal $ t_1 = t_2 $ $\theta = 2\pi/3$ | |
| Rectangular $ t_1 \neq t_2 $ $\theta = \pi/2$ | |
| Rectangular centrada $ t_1 \neq t_2 $ $\theta = \pi/2$ | |

Figura 2.6: Clasificación de Redes de Bravais 2D

En tres dimensiones las consideraciones de simetría producen catorce tipos diferentes de redes de Bravais. las cuales se pueden agrupar en siete tipos de sistemas cristalinos que se ilustran en la figura 2.7 :

- Triclínico
- Monoclínico: primitivo y centrado en la base.
- Ortorómbico: primitivo, centrado en la base, centrado en el cuerpo y centrado en las caras.
- Trigonal
- Tetragonal: primitivo y centrado en el cuerpo.
- Hexagonal
- Cúbico: Primitivo, centrado en el cuerpo y centrado en las caras.

2.3. La red recíproca.

Para el estudio de redes de Bravais, además de la red de Bravais directa, definida arriba, es importante introducir la red recíproca en el espacio dual (o espacio recíproco). La red recíproca permite definir de manera natural las direcciones perpendiculares los planos cristalinos que son la noción básica para interpretar la difracción de Bragg [7].

Definición 7. Red recíproca. Dada una red de Bravais \mathcal{R} consistente en los puntos $\mathbf{r} = n_1\mathbf{t}_1 + n_2\mathbf{t}_2 + n_3\mathbf{t}_3$, se define la red recíproca \mathcal{R}' como el conjunto de puntos de la forma $\mathbf{g} = m_1\mathbf{g}_1 + m_2\mathbf{g}_2 + m_3\mathbf{g}_3$, con $m_1, m_2, m_3 \in \mathbb{Z}$ y vectores \mathbf{g}_i tales que

$$\mathbf{t}_i \cdot \mathbf{g}_j = 2\pi \delta_{ij} \quad (2.1)$$

La condición (2.1) determina completamente los vectores de la base recíproca $\{\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3\}$, por ejemplo, de acuerdo a (2.1), \mathbf{g}_1 debe ser ortogonal a \mathbf{t}_2 y a \mathbf{t}_3 , por lo tanto paralelo a $\mathbf{t}_2 \times \mathbf{t}_3$, pero además $\mathbf{t}_1 \cdot \mathbf{g}_1 = 2\pi$, por lo tanto $\mathbf{g}_1 = \frac{2\pi\mathbf{t}_2 \times \mathbf{t}_3}{\mathbf{t}_1 \cdot (\mathbf{t}_2 \times \mathbf{t}_3)}$, es decir,

$$\mathbf{g}_1 = \frac{2\pi}{V} \mathbf{t}_2 \times \mathbf{t}_3 \quad (2.2)$$

En forma similar

$$\mathbf{g}_2 = \frac{2\pi}{V} \mathbf{t}_3 \times \mathbf{t}_1 \quad (2.3)$$

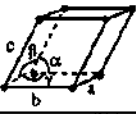
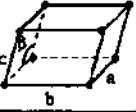
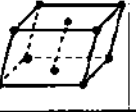
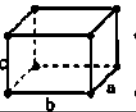
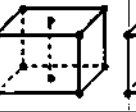
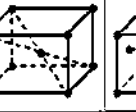
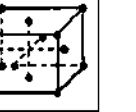
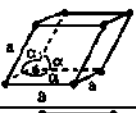
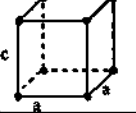

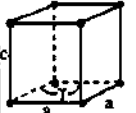
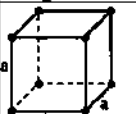
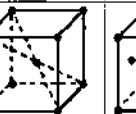
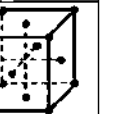
| Sistema cristalino | Red de Bravais | | | |
|---|---|---|--|---|
| | Primitiva | Centrada en la base | Centrada en cuerpo | Centrada en caras |
| Triclínico $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$ |  | | | |
| Monoclínico $a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = \frac{\pi}{2} \neq \beta$ |  |  | | |
| Ortorombico $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$ |  |  |  |  |
| Trigonal $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq \frac{\pi}{2}$ |  | | | |
| Tetragonal $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$ |  | |  | |
| Hexagonal $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \frac{\pi}{2}$ $\gamma = \frac{2\pi}{3}$ |  | | | |
| Cúbico $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$ |  | |  |  |

Figura 2.7: [7] Clasificación de Redes de Bravais 3D

$$\mathbf{g}_3 = \frac{2\pi}{V} \mathbf{t}_1 \times \mathbf{t}_2 \quad (2.4)$$

donde $V = \mathbf{t}_1 \cdot (\mathbf{t}_2 \times \mathbf{t}_3)$ es el volumen de la celda primitiva en \mathcal{R}

2.3.1. Propiedades de la red recíproca

La red recíproca está relacionada con las propiedades traslacionales de la red, no con la base, es decir, cristales con la misma simetría traslacional, pero con bases completamente diferentes pueden tener la misma red recíproca. Es importante mencionar también que el vector de propagación de onda \mathbf{k} de una onda plana general $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ tiene las dimensiones de la “longitud recíproca”, es decir, puede ser representado convenientemente en el espacio

recíproca. A continuación se alistan algunas de las propiedades más relevantes de la red recíproca:

- La red recíproca de la red recíproca \mathcal{R}' es la red original \mathcal{R} , es decir, $(\mathcal{R}')' = \mathcal{R}$. Esto se puede demostrar notando que $\mathbf{t}_1 = \frac{2\pi\mathbf{g}_2 \times \mathbf{g}_3}{\mathbf{g}_1 \cdot (\mathbf{g}_2 \times \mathbf{g}_3)}$ y en forma similar $\mathbf{t}_2 = \frac{2\pi\mathbf{g}_3 \times \mathbf{g}_1}{\mathbf{g}_2 \cdot (\mathbf{g}_3 \times \mathbf{g}_1)}$, $\mathbf{t}_3 = \frac{2\pi\mathbf{g}_1 \times \mathbf{g}_2}{\mathbf{g}_3 \cdot (\mathbf{g}_1 \times \mathbf{g}_2)}$
- El volumen de una celda primitiva de la red recíproca es $\mathbf{g}_1 \cdot (\mathbf{g}_2 \times \mathbf{g}_3) = \frac{(2\pi)^3}{V}$. La demostración es mediante cálculo directo a partir de (2.2), (2.3) y (2.4).
- \mathbf{g} es un vector de la red recíproca \mathcal{R}' si y solo si

$$\mathbf{t}_i \cdot \mathbf{g} = 2\pi n, \text{ con } n \in \mathbb{Z}, i = 1, 2, 3 \quad (2.5)$$

Para demostrar esta afirmación, sea \mathbf{g} un vector que cumple (2.5), siempre se puede expresar \mathbf{g} en términos de la base recíproca como $\mathbf{g} = c_1\mathbf{g}_1 + c_2\mathbf{g}_2 + c_3\mathbf{g}_3$, con c_1, c_2, c_3 números reales, pero para que se cumpla (2.5) es necesario que c_1, c_2, c_3 sean enteros, por lo tanto $\mathbf{g} \in \mathcal{R}'$. Por otro lado, si $\mathbf{g} \in \mathcal{R}'$ entonces $\mathbf{g} = m_1\mathbf{g}_1 + m_2\mathbf{g}_2 + m_3\mathbf{g}_3$, con $m_1, m_2, m_3 \in \mathbb{Z}$, entonces $\mathbf{t}_i \cdot \mathbf{g} = 2\pi m_i$

- Una onda plana $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ tiene la misma periodicidad de la red \mathcal{R} si y solo si \mathbf{k} es un vector de la red recíproca \mathcal{R}' , ya que en este caso $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{t}_n)} = e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + 2\pi n)}$

Definición 8. Zonas de Brillouin. Una zona de Brillouin es una celda de Wigner Seitz en la red recíproca \mathcal{R}' .

2.4. El teorema de Bloch

En esta sección se presenta una introducción al estudio de los estados electrónicos en un sólido cristalino. Este problema requiere considerar en principio el hamiltoniano del sólido, el cual deberá contener el potencial que describe la interacción de un electrón con la red iónica, así como pares de potenciales que describen la interacción entre electrones. Sin embargo, en la aproximación de electrones independientes, las interacciones entre electrones pueden ser representadas por un potencial efectivo de un sólo electrón $U(\mathbf{r})$. La elección adecuada de este potencial efectivo es complicada [6], sin embargo, si el cristal es perfectamente periódico, este potencial deberá reflejar dicha periodicidad, es decir,

$$U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \quad \forall \mathbf{R} \in \mathcal{R} \quad (2.6)$$

donde \mathcal{R} es la red de Bravais subyacente de la estructura cristalina.

Bajo las consideraciones arriba descritas se puede plantear el hamiltoniano de un solo electrón como

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \quad (2.7)$$

y la correspondiente ecuación de Schrödinger para un solo electrón es

$$H\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right] \psi = E\psi \quad (2.8)$$

Los electrones independientes que obedecen a la ecuación de Schrödinger (2.8) con potencial periódico se denominan “electrones de Bloch”, en contraste a los “electrones libres”, a los cuales se reducen los electrones de Bloch en el caso de potencial nulo. Los estados estacionarios de los electrones de Bloch tienen la siguiente propiedad, consecuencia de la periodicidad del potencial:

Teorema. Teorema de Bloch: *Los autoestados ψ del hamiltoniano de un sólo electrón (2.7) con potencial periódico (2.6) del cristal pueden escribirse como el producto de una onda plana multiplicada por una función con la periodicidad de la red de Bravais subyacente. Es decir, los autoestados del Hamiltoniano tienen la forma*

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.9)$$

donde las funciones $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ tienen la misma periodicidad de la red

$$u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \quad \forall \mathbf{R} \in \mathcal{R} \quad (2.10)$$

Nótese que las ecuaciones (2.9) y (2.10) implican que

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.11)$$

El teorema de Bloch a veces es enunciado en esta forma alternativa: Los autoestados ψ de H pueden escogerse de manera que para cada ψ , existe un vector de onda \mathbf{k} (vector de Bloch) tal que para todo \mathbf{R} en la red de Bravais

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi(\mathbf{r}) \quad (2.12)$$

Demostración del teorema de Bloch. Para describir las propiedades de periodicidad del potencial se puede definir el operador de traslación $T_{\mathbf{R}}$ como sigue

$$T_{\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \quad (2.13)$$

Como $T_{\mathbf{R}}T_{\mathbf{R}'} = T_{\mathbf{R}+\mathbf{R}'} = T_{\mathbf{R}'+\mathbf{R}} = T_{\mathbf{R}'}T_{\mathbf{R}}$ es evidente que las traslaciones de vectores de la red forman un grupo abeliano $G = \{T_{\mathbf{R}} : \mathbf{R} \in \mathcal{R}\}$

Como además el potencial es periódico, se tiene que

$$T_{\mathbf{R}}H\psi = H(\mathbf{r} + \mathbf{R})\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = H(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = HT_{\mathbf{R}}\psi$$

es decir, el hamiltoniano es invariante respecto a traslaciones de la red

$$[H, T_{\mathbf{R}}] = 0 \quad \forall T_{\mathbf{R}} \in G \quad (2.14)$$

Debido a que H y $\{T_{\mathbf{R}}\}$ forman un conjunto de operadores que conmutan, es posible construir un conjunto completo de autofunciones comunes al hamiltoniano H y a las traslaciones de la red $\{T_{\mathbf{R}}\}$. Sea $\psi(\mathbf{r})$ una autofunción común al hamiltoniano y a las traslaciones $T_{\mathbf{R}}$, es decir,

$$\begin{aligned} H\psi(\mathbf{r}) &= E\psi(\mathbf{r}) \\ T_{\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}) &= c(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2.15)$$

Como $T_{\mathbf{R}+\mathbf{R}'} = T_{\mathbf{R}}T_{\mathbf{R}'}$ entonces $c(\mathbf{R} + \mathbf{R}') = c(\mathbf{R})c(\mathbf{R}')$. Entonces si se considera un vector de la red

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{t}_1 + n_2\mathbf{t}_2 + n_3\mathbf{t}_3 \quad (2.16)$$

se tiene que

$$c(\mathbf{R}) = [c(\mathbf{t}_1)]^{n_1} [c(\mathbf{t}_2)]^{n_2} [c(\mathbf{t}_3)]^{n_3} \quad (2.17)$$

En este punto es necesario introducir condiciones de frontera, las cuales serán elegidas por conveniencia analítica, asumiendo que las propiedades masivas (bulk properties) de un sólido no dependen de las condiciones de frontera. Se eligen las condiciones de frontera de Born-Von Karman, las cuales consideran periodicidad macroscópica, es decir,

$$\psi(\mathbf{r} + N_i\mathbf{t}_i) = \psi(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.18)$$

donde N_i son enteros del orden $N^{1/3}$, para una muestra de material cristalino con $N = N_1N_2N_3$ número total de celdas primitivas.

Introduciendo las condiciones de frontera (2.18) en el teorema de Bloch (2.12) con $\mathbf{R} = N_i\mathbf{t}_i$ se obtiene

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + N_i\mathbf{t}_i) = e^{iN_i\mathbf{k}\cdot\mathbf{t}_i}\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.19)$$

para lo cual se requiere que se cumpla

$$e^{iN_i\mathbf{k}\cdot\mathbf{t}_i} = 1, \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.20)$$

Si se expresa el vector \mathbf{k} en términos de la base recíproca, $\mathbf{k} = x_1\mathbf{g}_1 + x_2\mathbf{g}_2 + x_3\mathbf{g}_3$, entonces, la condición (2.20) se escribe como sigue

$$e^{i2\pi N_i x_i} = 1, \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.21)$$

donde

$$x_i = \frac{m_i}{N_i}, \quad m_i \text{ entero}$$

lo cual significa que los vectores de onda permitidos son de la forma

$$\mathbf{k} = \frac{m_1}{N_1}\mathbf{g}_1 + \frac{m_2}{N_2}\mathbf{g}_2 + \frac{m_3}{N_3}\mathbf{g}_3, \quad m_i \text{ entero} \quad (2.22)$$

Por otro lado, la ecuación (2.19) también significa que

$$c(N_i\mathbf{t}_i) = e^{i2\pi N_i x_i} = 1$$

de donde

$$c(\mathbf{t}_i) = e^{i2\pi x_i}$$

por lo tanto

$$c(\mathbf{R}) = c(n_1\mathbf{t}_1 + n_2\mathbf{t}_2 + n_3\mathbf{t}_3) = e^{i2\pi(n_1x_1 + n_2x_2 + n_3x_3)}$$

es decir,

$$c(\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \quad (2.23)$$

donde $\mathbf{k} = x_1\mathbf{g}_1 + x_2\mathbf{g}_2 + x_3\mathbf{g}_3$

Tomando en cuenta (2.15), se concluye que

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

lo cual coincide con (2.12).

2.4.1. Consecuencias del teorema de Bloch

Estados extendidos. Una consecuencia directa del teorema de Bloch se puede inferir directamente de la expresión (2.12), la cual significa que $|\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R})| = |\psi(\mathbf{r})|$, es decir, el módulo de los autoestados es igual a lo largo de todos los puntos de la red cristalina, o en otras palabras, los autoestados son estados extendidos.

Estructura de bandas. Una segunda consecuencia del teorema de Bloch es que los estados se agrupan formando una estructura de bandas de energía permitidas y prohibidas. La obtención de esta segunda consecuencia en el caso general es complicado y nos limitaremos a demostrarlo en el caso de un modelo unidimensional específico, introducido originalmente en [8].

2.4.2. El modelo de Kronig-Penney

El modelo de Kronig-Penney unidimensional consiste en una sucesión periódica de pozos y barreras rectangulares de potencial como se representa en la figura (2.8), en donde la celda primitiva está definida para $-w < x < b$. La región $-w < x < 0$ denotada como I, corresponde a un pozo de potencial y la región $0 < x < b$ denotada como II es una barrera de potencial de altura V_0 y anchura b . La constante de la red es $a = w + b$.

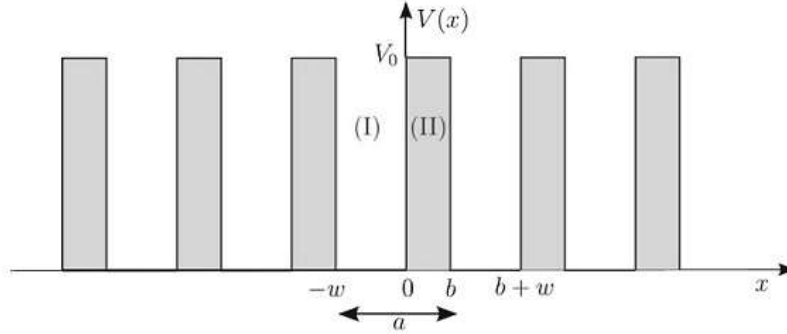


Figura 2.8: [7] Sucesión de barreras de potencial rectangulares

La ecuación de Schrödinger correspondiente es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) \psi(x) = E \psi(x) \quad (2.24)$$

donde $V(x)$ tiene la forma dada en la figura (2.8), es decir,

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{para } -w < x < 0 \\ V_0 & \text{para } 0 < x < b \end{cases}, \quad V(x) = V(x + na) \quad \forall n \text{ entero}$$

La solución de la ecuación de Schrödinger para $E < V_0$ en la celda primitiva es

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x} & \text{para } x \in [-w, 0] \\ \psi_{II}(x) &= Ce^{\beta x} + De^{-\beta x} & \text{para } x \in [0, b] \end{aligned} \quad (2.25)$$

donde

$$\alpha = \sqrt{2mE/\hbar^2}, \quad \beta = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2} \quad (2.26)$$

Se aplican condiciones de continuidad en los bordes de los intervalos I y II:

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0), \quad \psi'_I(0) = \psi'_{II}(0); \quad (2.27)$$

además de acuerdo al teorema de Bloch se pueden imponer las condiciones:

$$\psi_{II}(b) = e^{ika} \psi_I(-w), \quad \psi'_{II}(b) = e^{ika} \psi'_I(-w) \quad (2.28)$$

donde k es el vector de Bloch. De las condiciones anteriores se obtiene el sistema homogéneo

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ i\alpha & -i\alpha & -\beta & \beta \\ e^{i(ka-\alpha w)} & e^{i(ka+\alpha w)} & -e^{\beta b} & -e^{-\beta b} \\ ie^{i(ka-\alpha w)} & -ie^{i(ka+\alpha w)} & -\beta e^{\beta b} & \beta e^{-\beta b} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.29)$$

Para que el sistema (2.29) tenga solución no nula se requiere que el determinante de la matriz asociada sea igual a cero. Esta condición se traduce en la identidad

$$\frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \sinh(\beta b) \sin(\alpha w) + \cos(\beta b) \cos(\alpha w) = \cos(ka) \quad (2.30)$$

Las soluciones de la ecuación (2.30) identifican la estructura de las bandas de energía. Para estudiar más fácilmente el significado de la condición anterior es conveniente hacer una simplificación adicional, esto es, se considera el caso límite en que se tienen N barreras de potencial con forma de deltas de Dirac, es decir, $V_0 \rightarrow \infty$, $b \rightarrow 0$, con $V_0 b$ constante. En este caso la condición de compatibilidad (2.30) se convierte en

$$P \frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a} + \cos(\alpha a) = \cos(ka), \quad \text{con } P = \frac{ma}{\hbar^2} V_0 b \quad (2.31)$$

Obsérvese que el parámetro P es proporcional a la intensidad de las barreras de potencial ($V_0 b$). Para analizar el cumplimiento de la condición anterior se consideran todos los valores permitidos (ver (2.22)) posibles de vectores de Bloch, los cuales son valores discretos, es decir,

$$k = \frac{2\pi n}{Na}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, N-1 \quad (2.32)$$

En la figura (2.9) se grafica el miembro izquierdo de la ecuación (2.31) y se señala el intervalo $[-1, 1]$ de los valores posibles del miembro derecho de la misma ecuación. Cuando el miembro izquierdo asume valores fuera de este intervalo, la ecuación (2.31) no admite soluciones: éste es el origen de las bandas prohibidas de energía. Cuando el miembro derecho de la ecuación (2.31) toma un valor igual a $\cos(ka)$ con k dado por la ecuación (2.32) se tienen infinitud de valores de α (y por lo tanto de E) que corresponden al vector de Bloch considerado. Si se numeran estas soluciones con un índice n se obtienen las funciones $E_n(k)$ que dan la estructura de banda del modelo.

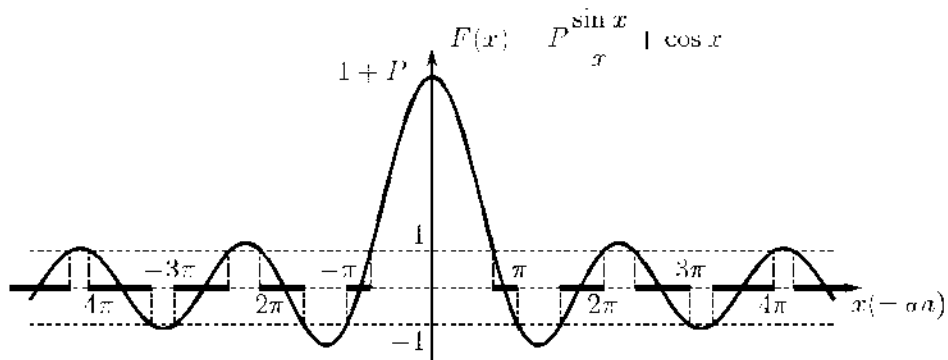


Figura 2.9: [7] Evaluación gráfica de la condición de compatibilidad 2.31

Al graficar los valores de E contra los posibles valores del vector de onda k en la primera celda primitiva se obtienen las bandas de energía permitidas separadas por bandas de energía prohibidas como se muestra en la figura 2.10. En esta figura se consideró $P = \frac{3\pi}{2}$, $a = 10a_B$, donde a_B es el radio de Bohr.

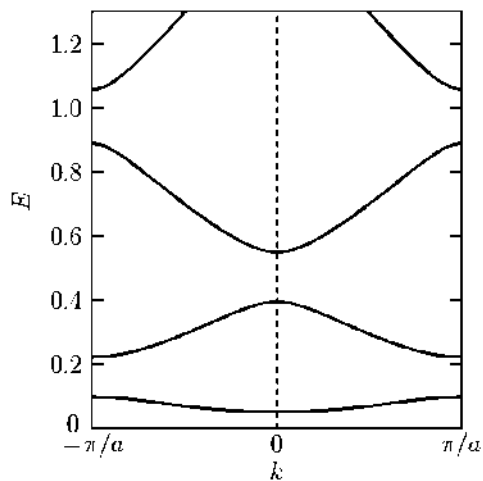


Figura 2.10: [7] Bandas de energía en el modelo de Kronig-Penney

Hasta aquí se ha considerado el caso de sistemas perfectamente ordenados. En materiales reales esta idealización es un caso extremo, difícil de lograr, de manera que resulta necesario considerar cómo se modifican las propiedades expuestas hasta aquí en el caso de que el orden sea roto en alguna de las maneras que se describirán en los siguientes capítulos.

Capítulo 3

Sistemas desordenados hermíticos

En los materiales cristalinos los estados electrónicos son ondas de Bloch y, por lo tanto los electrones no quedan confinados en una región específica del material. Sin embargo, en materiales reales no existe una estructura ordenada perfecta y se tienen siempre perturbaciones respecto al orden ideal debido a la presencia de impurezas, dislocaciones, huecos u otros defectos [5].

En este capítulo se introduce el concepto de desorden y se describen los rasgos sobresalientes de los estados electrónicos en modelos desordenados. Se presentan algunos modelos desordenados y se trata de manera especial el caso de sistemas unidimensionales, que constituye el caso estudiado en esta tesis.

3.1. Tipos de desorden

El desorden en un sistema puede ocurrir en diversos grados, desde la presencia de algunas impurezas o pequeñas dislocaciones que rompen ocasionalmente la simetría traslacional de la red de Bravais hasta la ausencia total de una red de Bravais subyacente en el material (materiales sin estructura o amorfos). En forma genérica se pueden tener dos tipos de desorden:

- **Desorden compositivo.** Materiales cristalinos con una red de Bravais subyacente, pero sin orden compositivo (por ejemplo aleaciones en las que dos tipos de átomos ocupan al azar los sitios de la red, ver figura 3.1(b))
- **Desorden estructural.** Materiales en los que los átomos ocupan posiciones espaciales al azar (p.e. vidrios y sólidos amorfos, ver figura 3.1(c))

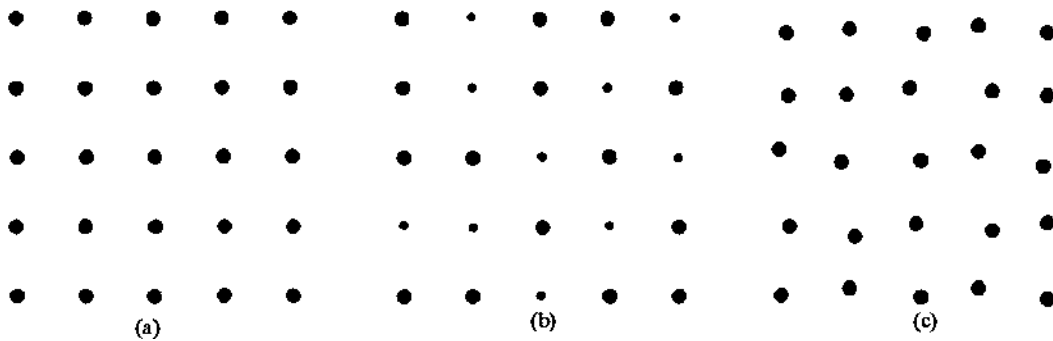


Figura 3.1: Tipos de desorden en 2D: a) Sistema ordenado. b) Desorden compositivo. c) Desorden estructural

3.2. Modelos matemáticos de sistemas desordenados

A diferencia de un sistema ordenado, en el caso de un sistema desordenado, el hamiltoniano del sistema no es suficiente por sí solo para definir el modelo, en este caso se requiere de dos ingredientes:

- El hamiltoniano del sistema conteniendo parámetros aleatorios.
- Las propiedades estadísticas de los parámetros.

Las propiedades estadísticas de los parámetros aleatorios se pueden describir completamente mediante las distribuciones de probabilidad de los mismos, las cuales, además de caracterizar dichos parámetros aleatorios permiten cuantificar la intensidad del desorden. De esta manera se puede hablar de dos tipos de desorden de acuerdo a su intensidad:

- Desorden débil
- Desorden fuerte

Esta distinción en la intensidad del desorden permite caracterizar comportamientos que surgen en los sistemas desordenados a medida que se incrementa o disminuye dicha intensidad.

3.2.1. Ejemplo de un modelo con desorden estructural.

Un modelo que ha sido usado ampliamente en la teoría de localización débil por varios investigadores ([9], [10] y [11]) considera un sólido amorfo modelado mediante el

hamiltoniano de un electrón en una estructura desordenada como sigue

$$H = \frac{p^2}{2m} + \sum_i V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \quad (3.1)$$

donde $V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ representa la interacción del electrón con el i -ésimo átomo situado en la posición \mathbf{R}_i . Estos vectores de posición \mathbf{R}_i son los parámetros aleatorios del modelo.

Ejemplo: sólido amorfo que ocupa un volumen V . En este caso \mathbf{R}_i son variables independientes y su distribución de probabilidad es

$$P(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N) = \prod_i p_i(\mathbf{R}_i) \quad (3.2)$$

$$\text{donde } p_i(\mathbf{R}_i) = \begin{cases} \frac{1}{V} & \text{si } \mathbf{R}_i \in V \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases}$$

3.2.2. Ejemplo de un modelo con desorden compositivo.

El siguiente hamiltoniano se denomina “de enlace fuerte”. Ha sido ampliamente usado para describir las propiedades de los electrones fuertemente amarrados a los iones de la red en sólidos con desorden compositivo tales como las aleaciones [5].

$$H = \sum_{n,\alpha} |n, \alpha\rangle \varepsilon_{n,\alpha} \langle n, \alpha| + \sum_{n,m,\alpha,\beta} |n, \alpha\rangle V_{n\alpha,m\beta} \langle m, \beta| \quad (3.3)$$

En la ecuación (3.3) n es el índice de sitios de la red, mientras que α representa un conjunto completo de números cuánticos de los orbitales electrónicos.

Los parámetros aleatorios en este modelo son:

- Las energías de sitio $\varepsilon_{n,\alpha}$ (elementos aleatorios de la diagonal principal correspondientes a la energía potencial)
- Las amplitudes de transición $V_{n\alpha,m\beta}$ que introducen desorden fuera de la diagonal principal y se asocian a las transiciones entre orbitales y sitios distintos.

Un caso particular importante del modelo de enlace fuerte (3.3) es el modelo de Anderson unidimensional, el cual solamente considera desorden en las energías de sitio ε_n .

$$H = \sum_n |n\rangle \varepsilon_n \langle n| + V \sum_n (|n+1\rangle \langle n| + |n\rangle \langle n+1|) \quad (3.4)$$

3.3. Efectos del desorden en los estados electrónicos

En un sólido cristalino los estados electrónicos son ondas de Bloch, las cuales son estados extendidos, ya que se extienden en todas las direcciones del material. Esto significa que un cristal permite la libre propagación de los electrones y sólo presenta resistencia debido a que los electrones se dispersan gracias a las imperfecciones de la estructura cristalina, reduciendo así el recorrido libre promedio de los electrones. De esta manera, entre más imperfecciones, menor conductividad del material. Philip Anderson descubrió hace más de medio siglo que cuando el desorden en la estructura aumenta más allá de un punto crítico, la movilidad del electrón no solo se reduce, sino que se detiene completamente, esto es, el electrón queda atrapado en una región finita y la conductividad a temperatura cero se anula [3]. A esta localización de los estados electrónicos se le llama localización de Anderson.

La localización es altamente dependiente de las dimensiones del medio de propagación, la siguiente lista presenta de manera resumida los efectos del desorden dependiendo de las dimensiones del medio:

- Sólido cristalino tridimensional. En materiales tridimensionales la presencia de desorden débil produce localización parcial, es decir solamente algunos estados se localizan. Cuando la intensidad del desorden rebasa un umbral crítico (desorden fuerte) se produce un cambio cualitativo: Todos los estados se localizan. En esta situación, a bajas temperaturas los estados no contribuyen al transporte de carga y el cristal se vuelve aislante. Esto representa una transición de fase del material de conductor a aislante.
- Estructura cristalina unidimensional y bidimensional: Si se considera un material de tamaño infinito, todos los estados se localizan independientemente de la intensidad del desorden.

3.3.1. Bordes de movilidad

En la figura 3.2 se muestra una representación cualitativa de la densidad de estados en el modelo de Anderson tridimensional, en esta figura se puede observar que los estados en el interior de la banda son extendidos, mientras que en las colas son localizados.

En un mismo intervalo de energías no pueden mezclarse estados extendidos y localizados, de lo contrario, los estados localizados serían inestables, por lo tanto aparecen fronteras que separan estados localizados de estados extendidos estas fronteras (E_c y E_c' en la figura 3.2) se denominan *bordes de movilidad*. Conforme aumenta la intensidad del

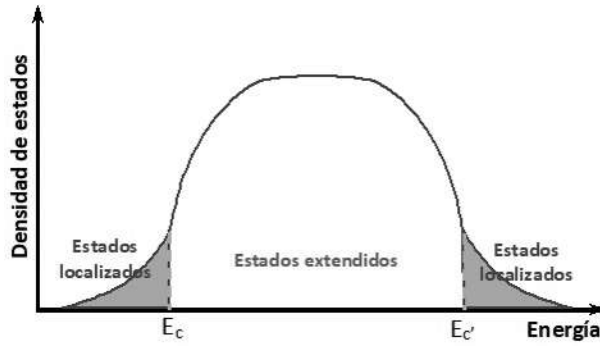


Figura 3.2: [5] Densidad de estados en un sistema desordenado

desorden los bordes de movilidad se acercan hasta llegar al punto en que todos los estados son localizados y el material se vuelve aislante a temperatura cero (transición metal - aislante).

3.4. Definiciones de localización

El fenómeno de la localización presenta algunos aspectos sutiles que es necesario precisar, por esta razón a lo largo de los años se han utilizado diferentes definiciones de localización que enfatizan algunas de sus características. A continuación se mencionan algunas de estas definiciones.

3.4.1. Comportamiento asintótico de la función de onda.

El comportamiento asintótico de un estado localizado se puede describir por el decaimiento exponencial de la envolvente de su función de onda, la cual en este caso toma la forma

$$\psi(\mathbf{r}) \sim f(\mathbf{r})e^{-\lambda|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|} \text{ para } |\mathbf{r}-\mathbf{r}_0| \gg l_{loc} \quad (3.5)$$

donde $f(r)$ es una función aleatoria y $l_{loc} = 1/\lambda$ es la longitud de decaimiento exponencial que se define como la *longitud de localización*.

Para hacer uso de esta definición se requiere conocer la expresión de los autoestados, cálculo que en general es complicado, por esta razón es conveniente definir la longitud de localización en conexión con las propiedades de transporte del sistema.

3.4.2. Coeficiente de transmisión.

Las propiedades de transporte del sistema se pueden expresar mediante la función de *probabilidad de transmisión* de un electrón desde un sitio \mathbf{r} a otro sitio \mathbf{r}' , denotada por $T(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$. Si esta probabilidad decae exponencialmente para distancias grandes los estados son localizados, la tasa de decaimiento de esta probabilidad está relacionada con la longitud de localización l_{loc} como sigue

$$\frac{1}{l_{loc}} = -\frac{1}{2} \lim_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow \infty} \frac{\log T(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \quad (3.6)$$

3.4.3. Razón de participación inversa.

Para decidir si un estado está o no localizado, a veces se considera la magnitud P definida por la siguiente ecuación

$$\frac{1}{P} = \sum_n |\psi_n|^4 \quad \text{con} \quad \sum_n |\psi_n| = 1 \quad (3.7)$$

A la cantidad P se le llama *razón de participación inversa* y es una medida de la porción del espacio donde la amplitud de la función de onda difiere marcadamente de cero. También puede ser considerada como una medida del diámetro promedio R del estado, mediante la relación

$$R = P^{1/d}$$

donde d es la dimensión de la muestra. Para ondas planas se obtiene $P = L^d$ (el volumen total del sistema), pero para estados localizados P es proporcional al volumen en el cual el estado tiene una amplitud claramente distinta de cero.

3.4.4. Longitud de localización entrópica

Una alternativa que proporciona una cantidad proporcional al número de componentes no nulas de un autovector y, por lo tanto, puede ser tomada como una medida de localización [12] es la *longitud de localización entrópica* β , la cual está definida en términos de la *información entrópica* del sistema dada por

$$S = -\sum_n |\psi_n|^2 \log |\psi_n|^2 \quad (3.8)$$

con lo cual

$$\beta = e^S \quad (3.9)$$

3.5. La teoría de un sólo parámetro de escalamiento

La teoría de un sólo parámetro de escalamiento (single parameter scaling) o teoría SPS propone explicar el fenómeno de la localización en sistemas desordenados ante cambios en la dimensión y el tamaño del sistema mediante el uso de un único parámetro de escala, el cual es representado por la *conductancia* g del material.

La idea fundamental atribuida a Thouless [10] en la que se basa esta teoría es que la conductancia de un hipercubo de tamaño L^d solo depende de L como se ilustra en la figura 3.3, es decir $g = g(L)$. Esto significa que la conductancia de una muestra cúbica de volumen $(2L)^d$ solo depende de la conductancia de los subcubos de volumen L^d .

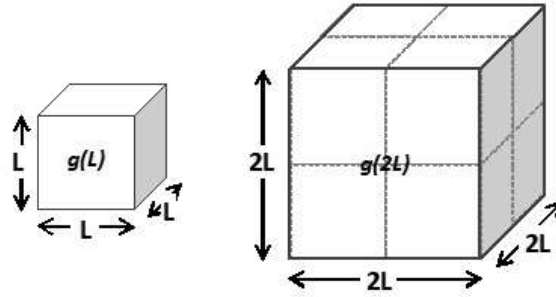


Figura 3.3: Cubos de volumen L^d y $(2L)^d$ con sus respectivas conductancias

La teoría de escalamiento trata de expresar el comportamiento de la conductancia g como una función del tamaño del sistema (L). Esto se puede hacer construyendo la función escalamiento siguiente

$$\beta(g(L)) = \frac{d \ln g}{d \ln L} \quad (3.10)$$

Se puede obtener el comportamiento cualitativo de $\beta(g)$ interpolando los comportamientos asintóticos para g muy grande y para g muy pequeña. En el régimen metálico de alta conductividad $g \gg 1$ los estados son extendidos y se espera que sea válida la ley de Ohm, es decir para una muestra de volumen L^d , la resistencia eléctrica $R = g^{-1}$ de la muestra es

$$R = \rho \frac{L}{A} = \frac{\rho}{L^{d-2}} \quad (3.11)$$

donde ρ es la resistividad del material, es decir, si σ es la conductividad,

$$g = \sigma L^{d-2} \quad (3.12)$$

En el caso $g \ll 1$ se espera que los estados sean localizados, por lo tanto, a medida que aumenta el tamaño (L) de la muestra, la conductancia disminuirá exponencialmente, es decir,

$$g \approx e^{-\alpha L}$$

Por lo tanto, sustituyendo en (3.10) resulta

$$\beta \approx \begin{cases} d-2 & \text{régimen metálico} \\ \ln g & \text{régimen localizado} \end{cases} \quad (3.13)$$

Para interpolar entre las regiones $g \ll 1$ y $g \gg 1$ se supone que β es una función monótona y continua de g . Algunas consideraciones adicionales (ver [10]) permiten predecir el comportamiento para los tres casos ($d = 1, 2, 3$), de esta manera se pueden obtener las gráficas mostradas en la figura 3.4, en dicha figura las flechas indican la dirección en que “fluye” el comportamiento de $\beta(g)$ a medida que crece el tamaño L de la muestra.

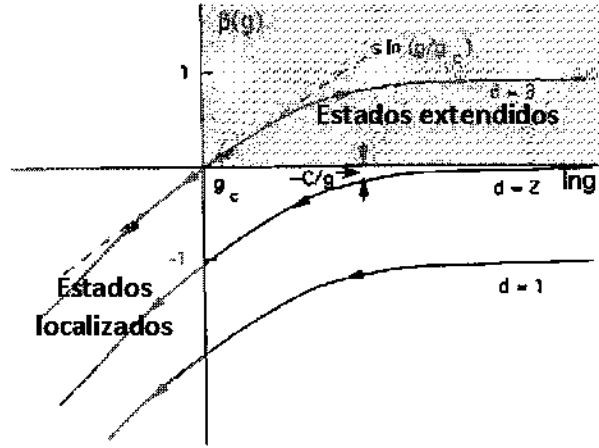


Figura 3.4: [13] Función de escalamiento $\beta(g)$ para los casos $d = 1, 2, 3$

Como puede observarse en la figura 3.4, tanto en el caso $d = 1$ como en el caso $d = 2$ la presencia de desorden provoca siempre la localización de los estados.

En cambio, en el caso $d = 3$, existe un punto crítico a partir del cual, conforme L crece, los estados fluyen hacia el régimen óhmico (extendido) o a hacia el régimen localizado dependiendo del valor de la conductancia a escala microscópica g_0 , es decir:

- Si $g_0 > g_c$ los estados fluyen hacia el régimen extendido conforme L crece.
- Si $g_0 < g_c$ los estados fluyen hacia el régimen localizado conforme L crece

Este cambio cualitativo de comportamiento caracteriza una transición de fase metal-aislante en el material.

3.6. Análisis del modelo de Anderson unidimensional

El estudio analítico de modelos tridimensionales o bidimensionales es de muy alta complejidad, es por eso que una gran cantidad de trabajo de investigación se ha dedicado a los modelos unidimensionales en las últimas décadas [14, 15, 5, 3]. En particular, uno de los modelos de mayor interés es el modelo de Anderson (3.4), La ecuación de Schrödinger que corresponde al hamiltoniano (3.4) tiene la forma

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} + \varepsilon_n \psi_n = E \psi_n \quad (3.14)$$

donde las energías de sitio ε_n son variables aleatorias independientes e idénticamente distribuidas, con distribución uniforme

$$p(\varepsilon_n) = \begin{cases} \frac{1}{W} & \text{si } \varepsilon_n \in \left[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}\right] \\ 0 & \text{si } \varepsilon_n \notin \left[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}\right] \end{cases} \quad (3.15)$$

de manera que la *intensidad del desorden* se puede medir mediante la varianza de ε_n , es decir, mediante $\sigma^2 = \langle \varepsilon_n^2 \rangle$ que en este caso es

$$\sigma^2 = \langle \varepsilon_n^2 \rangle = \frac{W^2}{12} \quad (3.16)$$

El modelo de Anderson se puede interpretar también como la versión discreta de la ecuación de Schrödinger para un electrón en un potencial aleatorio continuo $V(x)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x) \quad (3.17)$$

También se puede relacionar con la ecuación dinámica para una cadena armónica con desorden isotópico

$$m_n \ddot{q}_n(t) = -2kq_n + kq_{n+1} + kq_{n-1} \quad (3.18)$$

la cual asume la forma (3.14) una vez que se haya efectuado una transformada de Fourier respecto al tiempo.

Para el estudio analítico del modelo (3.14) se puede usar el método de las matrices de transferencia, el cual se describe a continuación.

3.6.1. Matriz de transferencia del modelo de Anderson 1D

El modelo de Anderson 3.14 puede escribirse en términos de matrices de transferencia si definimos el vector de estados asociados a los dos sitios consecutivos n y $n-1$ como sigue

$$\mathbf{u}_n = \begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

de donde

$$\mathbf{u}_{n+1} = \begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

A partir de la relación recursiva 3.14 se puede calcular la matriz de transferencia \mathbf{T}_n que relaciona \mathbf{u}_n con \mathbf{u}_{n+1}

$$\mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{T}_n \mathbf{u}_n \quad (3.21)$$

obteniéndose

$$\mathbf{T}_n = \begin{pmatrix} E - \varepsilon_n & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.22)$$

Dados los valores de la función de onda ψ_0 y ψ_1 se puede obtener la solución de la ecuación de Schrödinger iterando en 3.21. Se obtiene la siguiente expresión

$$\mathbf{u}_{N+1} = \mathbf{P}_N \mathbf{u}_1 \quad (3.23)$$

que contiene el producto de N matrices de transferencia

$$\mathbf{P}_N = \mathbf{T}_N \mathbf{T}_{N-1} \dots \mathbf{T}_1 \quad (3.24)$$

La expresión (3.23) permite determinar el comportamiento de ψ_N para $N \gg 1$.

3.6.2. Modelo de Anderson 1D sin desorden.

El caso más sencillo que se puede estudiar en el modelo de Anderson unidimensional es cuando no hay desorden, es decir, el caso en que $\varepsilon_n = 0$ para todo valor entero de n . En ese caso el modelo (3.14) se reduce a

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} = E \psi_n \quad (3.25)$$

y la matriz de transferencia correspondiente es constante

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} E & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.26)$$

Los autovalores de \mathbf{T} son $\frac{E}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{E}{2}\right)^2 - 1}$, los cuales se pueden escribir en términos de un nuevo parámetro k dependiendo del caso como sigue:

- para $|E| \leq 2$ los autovalores de \mathbf{T} son $e^{\pm ik}$, donde $\cos k = \frac{E}{2}$, por lo tanto las autofunciones correspondientes toman la forma $\psi_n \sim C e^{\pm ikn}$ que corresponden a funciones de onda extendidas como era de esperarse en el caso sin desorden.

- para $|E| > 2$ los autovalores de \mathbf{T} son $e^{\pm k}$, donde $\cosh k = \frac{|E|}{2}$, por lo que las autofunciones correspondientes toman la forma $\psi_n \sim Ce^{\pm kn}$

Sólo el caso $|E| \leq 2$ produce soluciones físicamente aceptables, por lo tanto la única banda de energías válida es

$$E \in [-2, 2] \quad (3.27)$$

3.6.3. Teorema de Furstenberg

Cuando se incluye la presencia de desorden en el modelo de Anderson unidimensional (3.14), la matriz de transferencia \mathbf{T}_n ya no es constante y entonces es necesario estudiar el producto de matrices aleatorias dado por (3.24) En el límite $N \rightarrow \infty$ se puede aplicar a este producto de matrices aleatorias el teorema de Furstenberg [16].

El teorema de Furstenberg considera una sucesión $\{\mathbf{X}_n\}$ de transformaciones lineales unimodulares de \mathbb{R}^m en \mathbb{R}^m . Estas transformaciones forman un grupo denotado $SL(m, \mathbb{R})$. Sea μ una medida definida en dicho grupo, sea G el subgrupo cerrado más pequeño que contiene el soporte de μ y sea $\{\mathbf{X}_n\}$ una sucesión de elementos aleatorios de G independientes e idénticamente distribuidos. Si

- G no es compacto
- G no contiene subgrupos de índice finito reducibles,

entonces para cualquier vector $\mathbf{u} \neq 0$, con probabilidad 1

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \|\mathbf{X}_1 \mathbf{X}_2 \dots \mathbf{X}_N \mathbf{u}\| = \gamma > 0 \quad (3.28)$$

Para una interpretación adecuada del teorema de Furstenberg, a continuación se hacen algunas observaciones a tomar en cuenta:

- El límite (3.28) implica el crecimiento exponencial de la cantidad $\|\mathbf{X}_1 \mathbf{X}_2 \dots \mathbf{X}_N \mathbf{u}\|$.
- La tasa de crecimiento exponencial γ , que representa el exponente de Lyapunov, es una cantidad determinista y solo depende de la medida μ , no de la realización específica de la sucesión $\{\mathbf{X}_n\}$.
- El resultado sólo se aplica a productos de matrices aleatorias independientes e idénticamente distribuidas.

3.6.4. Aplicación del teorema de Furstenberg al modelo de Anderson 1D

En el caso del modelo de Anderson unidimensional Ishii mostró que el subgrupo G satisface las condiciones del teorema de Furstenberg si contiene al menos dos elementos del grupo $SL(2, \mathbb{R})$ sin autovectores comunes. El subgrupo G está formado por las matrices $\mathbf{T}_1, \dots, \mathbf{T}_N$ y por sus productos. Si se considera la forma de las matrices \mathbf{T}_n ,

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

se obtiene que hay dos matrices sin autovectores comunes cuando $\varepsilon_n \neq 0$ [17]. El teorema de Furstenberg permite entonces afirmar que, con probabilidad 1, resulta

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \|\mathbf{T}_1 \mathbf{T}_2 \dots \mathbf{T}_N \mathbf{u}_0\| = \gamma(E) > 0$$

o equivalentemente

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \|\mathbf{T}_1 \mathbf{T}_2 \dots \mathbf{T}_N \mathbf{u}_0\|^2 = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \left[|\psi_{N+1}|^2 + |\psi_N|^2 \right] = 2\gamma(E) > 0 \quad (3.29)$$

Nótese que esto predice un crecimiento exponencial de las soluciones de la ecuación de Schrödinger para valores arbitrarios de la energía E .

3.6.5. La conjetura de Borland.

La arbitrariedad de la energía implica que las soluciones construidas con el producto de matrices de transferencia en general no son autofunciones del hamiltoniano, porque no satisfacen las condiciones apropiadas de frontera.

Esta arbitrariedad implica que normalmente no es posible “embonar” soluciones construidas a partir de las extremidades izquierda y derecha de la red.

Borland [18] conjeturó que se podrían “embonar” soluciones sólo para valores especiales de la energía correspondientes a los autovalores del hamiltoniano H .

Esto establece una conexión entre crecimiento exponencial y localización y lleva a identificar la tasa de crecimiento exponencial con el inverso de la longitud de localización (véase (3.5)):

$$\lambda = \frac{1}{l_{loc}}$$

3.6.6. Estudio numérico del modelo de Anderson 1D

Para hacer un cálculo numérico de los autovalores y autovectores del modelo de Anderson unidimensional (3.14), se necesita una representación matricial del operador

$$H = \sum_n |n\rangle \varepsilon_n \langle n| + \sum_n (|n+1\rangle \langle n| + |n\rangle \langle n+1|) \quad (3.30)$$

Si se trunca la red infinita del modelo, reduciéndola a una red de N sitios, se obtiene la matriz tridiagonal

$$[H] = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & \varepsilon_2 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \varepsilon_3 & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & \varepsilon_N \end{pmatrix} \quad (3.31)$$

La matriz $[H]$ es una matriz real y simétrica y, por lo tanto, tiene N autovalores reales con sus N autovectores ortogonales correspondientes. En la figura 3.5 se muestra una gráfica de estos autovalores obtenidos numéricamente para el caso $N = 500$ en dos casos: sin desorden y con desorden débil, independiente, de media cero y varianza $\langle \varepsilon_n^2 \rangle = 0.01$. Se observa que el rango de los autovalores del operador hamiltoniano coincide con el rango esperado para E en (3.27).

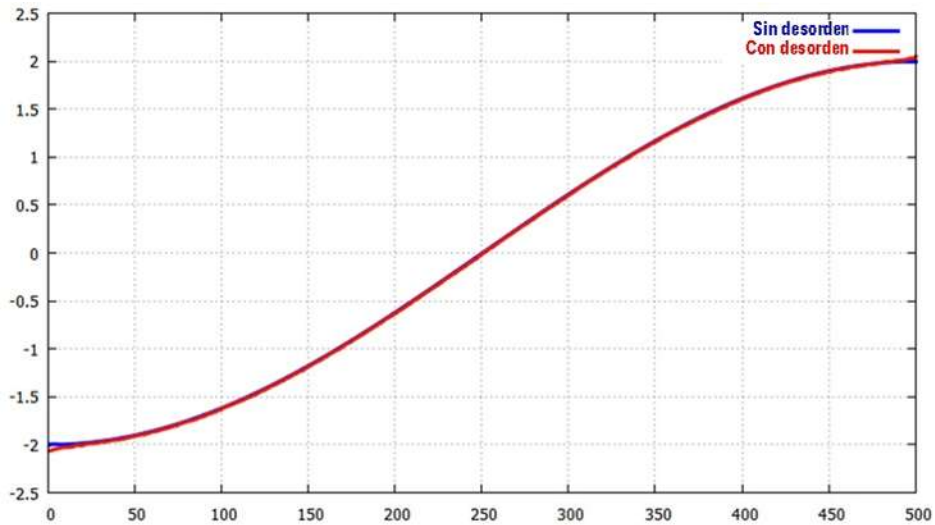


Figura 3.5: autovalores de la matriz $[H]$ con y sin desorden, para $N = 500$

También se observa que la perturbación que se produce en los autovalores al introducir desorden débil es casi imperceptible, esto permite considerar que la banda 3.27 permanece casi inalterada al introducir desorden débil.

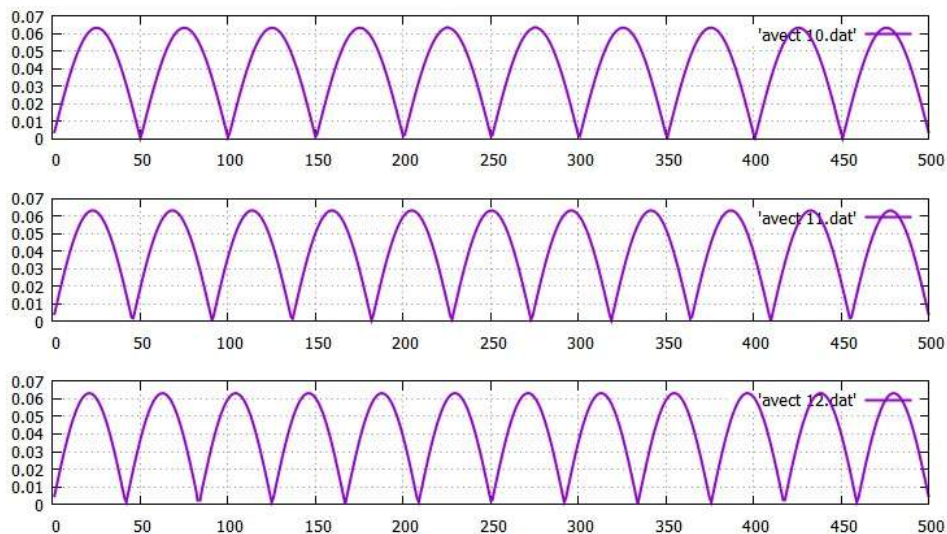


Figura 3.6: Tres autovectores de la matriz $[H]$ en el caso sin desorden, para $N = 500$

A pesar de que los autovalores de la matriz $[H]$ sufren una perturbación casi imperceptible, los autovectores correspondientes son dramáticamente distintos, ya que pasan de ser funciones extendidas a funciones localizadas como se puede apreciar al comparar la figura 3.6 con la figura 3.7. Mientras que en la figura 3.6 se muestran tres de los 500 autovectores en el caso sin desorden, en la figura 3.7 se muestran los autovectores típicos correspondientes obtenidos en el caso de desorden débil.

3.7. El método del mapa hamiltoniano

Un método alternativo para estudiar el modelo de Anderson unidimensional ha sido introducido en [4], en donde se utiliza un modelo clásico de “oscilador pateado” cuya hamiltoniana es

$$H = \frac{p^2}{2} + \frac{\omega^2}{2} [1 + \xi(t)] x^2 \quad (3.32)$$

donde

$$\xi(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \xi_n \delta(t - nT) \quad (3.33)$$

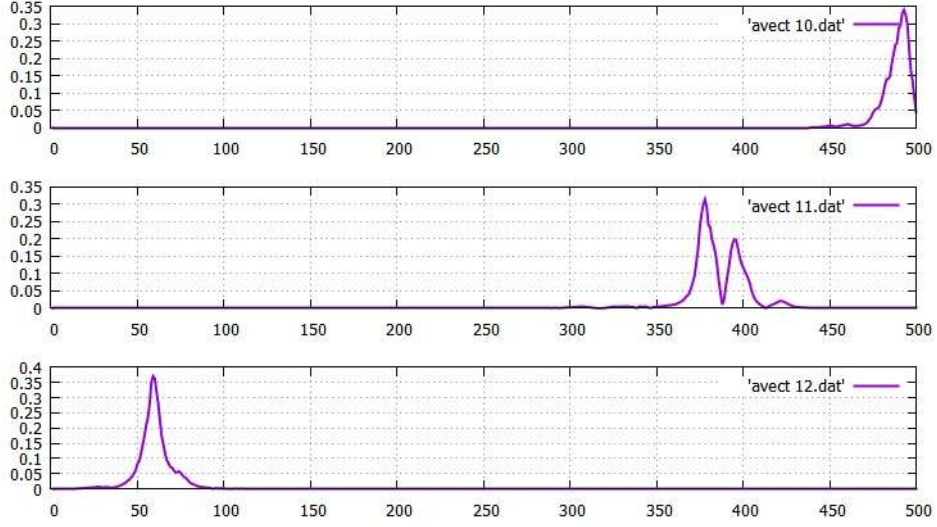


Figura 3.7: Tres autovectores típicos de la matriz $[H]$ en el caso con desorden débil, para $N = 500$

y donde ξ_n es una secuencia de variables aleatorias independientes.

Si se definen los instantes de tiempo

$$t_n = nT, \text{ con } n \in \mathbb{Z} \quad (3.34)$$

las variaciones instantáneas del momento del oscilador (“patadas”) ocurren entre el instante t_n^- y el instante t_n^+ .

Las ecuaciones dinámicas correspondientes son

$$\begin{aligned} \dot{x} &= p \\ \dot{p} &= -\omega^2 [1 + \xi(t)]x \end{aligned} \quad (3.35)$$

Las ecuaciones dinámicas del oscilador pateado corresponden a un oscilador armónico simple en el intervalo de tiempo después de una patada y antes de la siguiente, es decir, entre los instantes t_n^+ y t_{n+1}^- . Por lo tanto para $t \in (t_n^+, t_{n+1}^-)$ resulta

$$\begin{aligned} x(t) &= x(t_n^+) \cos[\omega(t - t_n^+)] + \frac{1}{\omega} p(t_n^+) \sin[\omega(t - t_n^+)] \\ p(t) &= -\omega x(t_n^+) \sin[\omega(t - t_n^+)] + p(t_n^+) \cos[\omega(t - t_n^+)]. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Para $t = t_{n+1}^-$ las ecuaciones anteriores se transforman en

$$\begin{aligned} x(t_{n+1}^-) &= x(t_n^+) \cos(\omega T) + \frac{1}{\omega} p(t_n^+) \sin(\omega T) \\ p(t_{n+1}^-) &= -\omega x(t_n^+) \sin(\omega T) + p(t_n^+) \cos(\omega T) \end{aligned} \quad (3.37)$$

donde

$$T = t_{n+1}^- - t_n^+ = t_{n+1} - t_n \quad (3.38)$$

Integrando la ecuación del momento lineal de (3.35) entre t_n^- y t_n^+

$$\int_{t_n^-}^{t_n^+} \dot{p}(t) dt = -\omega^2 \int_{t_n^-}^{t_n^+} [1 + \xi(t)] x(t) dt \quad (3.39)$$

se obtiene,

$$p(t_n^+) = p(t_n^-) - \omega^2 \xi_n x(t_n) \quad (3.40)$$

Como $x(t)$ es continua se tiene que $x(t_n^-) = x(t_n^+) = x(t_n)$, si además se definen

$$x_n = x(t_n^-), \quad p_n = p(t_n^-) \quad (3.41)$$

entonces las ecuaciones (3.37) se convierten en el mapa

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= [\cos(\omega T) - \omega \xi_n \sin(\omega T)] x_n + \frac{1}{\omega} \sin(\omega T) p_n \\ p_{n+1} &= -[\omega \sin(\omega T) + \omega^2 \xi_n^2 \cos(\omega T)] x_n \cos(\omega T) p_n \end{aligned} \quad (3.42)$$

Eliminando p_n se obtiene la relación

$$x_{n+1} + x_{n-1} + \omega \xi_n \sin(\omega T) x_n = 2 \cos(\omega T) x_n \quad (3.43)$$

que es idéntica a la ecuación de Schrödinger (3.14) para el modelo de Anderson mientras resulten válidas las siguientes correspondencias entre parámetros de los dos modelos:

$$\begin{aligned} \varepsilon_n &= \omega \xi_n \sin(\omega T) \\ E &= 2 \cos(\omega T) \end{aligned} \quad (3.44)$$

Se puede observar que en el caso de desorden débil ambas condiciones se satisfacen.

3.7.1. Variables acción-ángulo

Cambiando las variables cartesianas x_n, p_n por las variables acción-ángulo J_n, θ_n definidas a través de las relaciones:

$$\begin{aligned} x_n &= \sqrt{\frac{2J_n}{\omega}} \sin \theta_n \\ p_n &= \sqrt{2\omega J_n} \cos \theta_n \end{aligned} \quad (3.45)$$

el mapa (3.42) se convierte en

$$\begin{aligned}\sin \theta_{n+1} &= \frac{1}{D_n} [\sin(\theta_n + \omega T) - \omega \xi_n \sin(\omega T) \sin \theta_n] \\ \cos \theta_{n+1} &= \frac{1}{D_n} [\cos(\theta_n + \omega T) - \omega \xi_n \cos(\omega T) \sin \theta_n]\end{aligned}\quad (3.46)$$

donde

$$D_n^2 = \frac{J_{n+1}}{J_n} = 1 - 2\omega \xi_n \sin \theta_n \cos \theta_n + \omega^2 \xi_n^2 \sin^2 \theta_n \quad (3.47)$$

Se observa que la dinámica de θ_n queda desacoplada de J_n ; de hecho, de las ecuaciones (3.46) se obtiene

$$\theta_{n+1} = \tan^{-1} \left[\frac{\sin(\theta_n + \omega T) - \omega \xi_n \sin(\omega T) \sin \theta_n}{\cos(\theta_n + \omega T) - \omega \xi_n \cos(\omega T) \sin \theta_n} \right]. \quad (3.48)$$

En el caso de desorden débil es posible desarrollar el miembro derecho de la ecuación (3.48) y obtener el mapa explícito

$$\theta_{n+1} = \theta_n + \omega T + \omega \xi_n \sin^2 \theta_n + o(\xi_n^2) \quad (3.49)$$

A partir de la forma del mapa angular (3.49) se concluye que:

- Si las variables aleatorias $\{\varepsilon_n\}$ son independientes, entonces también lo son θ_n y ε_n
- Cuando se itera el mapa (3.49), los valores de θ_n van cubriendo uniformemente el intervalo $[0, 2\pi]$ (excepto para energías resonantes: $\omega T = M\pi/N$)

3.7.2. Exponente de Lyapunov

Se puede calcular el exponente de Lyapunov λ del oscilador a partir de la identidad

$$\lambda = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \ln \left| \frac{x_{n+1}}{x_n} \right|, \quad (3.50)$$

que, en términos de las variables acción-ángulo toma la forma

$$\lambda = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \ln D_n + \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \ln \left| \frac{\sin \theta_{n+1}}{\sin \theta_n} \right| \quad (3.51)$$

Excepto en los bordes de la banda, el segundo término de esta expresión se vuelve nulo. Por lo tanto resulta

$$\lambda = \frac{1}{2} \langle \ln D_n^2 \rangle \quad (3.52)$$

A partir de esta expresión y considerando la ecuación (3.47) se obtiene el desarrollo siguiente

$$\lambda = -\frac{1}{2} \langle \xi_n \sin(2\theta_n) \rangle + \frac{\omega}{8} \langle \xi_n^2 \rangle - \frac{\omega^2}{4} \langle \xi_n^2 \cos(2\theta_n) \rangle + \frac{\omega^2}{8} \langle \xi_n^2 \cos(4\theta_n) \rangle + o(\xi_n^2). \quad (3.53)$$

Los valores medios involucrados en la expresión anterior se pueden calcular dependiendo de la correlación del desorden.

En el caso de que las variables ξ_n sean independientes, se tiene que

$$\langle \xi_n \sin(2\theta_n) \rangle = \langle \xi_n \rangle \langle \sin(2\theta_n) \rangle = 0, \quad (3.54)$$

$$\langle \xi_n^2 \cos(2\theta_n) \rangle = \langle \xi_n^2 \rangle \langle \cos(2\theta_n) \rangle = 0, \quad (3.55)$$

y

$$\langle \xi_n^2 \cos(4\theta_n) \rangle = \langle \xi_n^2 \rangle \langle \cos(2\theta_n) \rangle = 0. \quad (3.56)$$

Entonces resulta

$$\lambda = \frac{\omega}{8} \langle \xi_n^2 \rangle + o(\xi_n^2) \quad (3.57)$$

Tomando en cuenta las identidades (3.44), la expresión anterior da lugar a la fórmula de Thouless

$$\lambda = \frac{\langle \epsilon_n^2 \rangle}{8(1 - E^2/4)} + o(\epsilon_n^2) \quad (3.58)$$

Si las variables $\{\xi_n\}$ no son independientes, los términos (3.54), (3.55) y (3.56) ya no son nulos y al desarrollarlos en potencias de ξ_n resulta que sólo el término $\langle \xi_n \sin(2\theta_n) \rangle$ contribuye con magnitudes de orden (ξ_n^2) . Se obtiene así la fórmula derivada originalmente por Izrailev y Krokhin en [19].

$$\lambda = \frac{\langle \epsilon_n^2 \rangle}{8(1 - E^2/4)} W(\mu) + o(\epsilon_n^2) \quad (3.59)$$

donde $\mu = \omega T$ y donde

$$W(\mu) = 1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\langle \epsilon_n \epsilon_{n+k} \rangle}{\langle \epsilon_n^2 \rangle} \cos(2\mu k). \quad (3.60)$$

3.7.3. Transición localización - deslocalización (TLD)

La fórmula de Izrailev-Krokhin (3.59) implica que, en aproximación del segundo orden, la longitud de localización $l_{loc} = 1/\lambda$ diverge en un intervalo continuo de energías si

$W(\mu) = 0$ para el intervalo correspondiente de valores de μ provocando una transición de localización-deslocalización (TLD) efectiva en las fronteras de este intervalo.

La función $W(\mu)$ dada por (3.60) corresponde a la densidad espectral de la sucesión $\{\varepsilon_n\}$, con media nula $\langle \varepsilon_n \rangle = 0$ y función de correlación

$$\chi(k) = \frac{\langle \varepsilon_n \varepsilon_{n+k} \rangle}{\langle \varepsilon_n^2 \rangle} \quad (3.61)$$

es decir,

$$W(\mu) = 1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \chi(k) \cos(2\mu k). \quad (3.62)$$

Invirtiendo la relación anterior se obtiene

$$\chi(k) = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} W(\mu) \cos(2\mu k) d\mu. \quad (3.63)$$

Nótese que, como $\chi(0) = 1$, $W(\mu)$ debe cumplir la condición de normalización

$$\int_{-\pi/2}^{\pi/2} W(\mu) d\mu = \pi. \quad (3.64)$$

Los bordes de localización-deslocalización pueden establecerse por diseño seleccionando la función de correlación adecuada. Por ejemplo, considérese la densidad espectral

$$W(\mu) = \begin{cases} 0 & \text{si } \mu \in [-\pi/2, -\pi/3] \cup [\pi/3, \pi/2] \\ W_0 & \text{si } \mu \in [-\pi/3, -\pi/3] \end{cases}$$

lo cual implica que

$$\lambda = \begin{cases} 0 & \text{si } E \in [-1, 1] \\ l_{loc}^{-1}(E) & \text{si } E \in [-2, -1] \cup [1, 2] \end{cases}.$$

En la figura (3.8) se muestra la gráfica de la densidad espectral $W(\mu)$ para el ejemplo. La función de correlación necesaria para lograr estos bordes de localización-deslocalización se obtiene de (3.63)

$$\chi(k) = \frac{\sin(2\pi k/3)}{2\pi k/3};$$

nótese que $\chi(k) \sim k^{-1}$.

En la figura 3.9 se ilustra el comportamiento del exponente de Lyapunov $\lambda(E)$ calculado mediante la expresión analítica de Izrailev-Krokhin (3.59) junto con una aproximación para valores grandes de N , obtenida numéricamente. Para obtener una aproximación

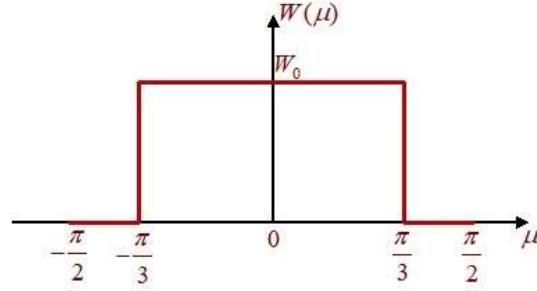


Figura 3.8: Ejemplo de densidad espectral para el diseño de bordes de localización-deslocalización

numérica para valores finitos grandes de N se debe tomar en cuenta que el crecimiento exponencial de ψ_n en (3.14) produce inestabilidad numérica conforme crece N ; por esta razón, en lugar de iterar directamente en (3.14), es conveniente iterar sobre el cociente

$$r_n = \frac{\Psi_{n+1}}{\Psi_n} \quad (3.65)$$

mediante el mapa equivalente

$$r_{n+1} + \frac{1}{r_n} = E - \varepsilon_n. \quad (3.66)$$

Tanto el cálculo numérico como el analítico mostrados en la figura 3.9 del exponente de Lyapunov λ en el intervalo $0 \leq E < 2$ corresponden a la densidad espectral de la figura 3.8. Para la obtención de esta gráfica se iteró sobre el mapa (3.66) con una sola realización del desorden y se consideraron los siguientes valores de los parámetros: $\langle \varepsilon_n^2 \rangle = 0.01$, $N = 500,000$.

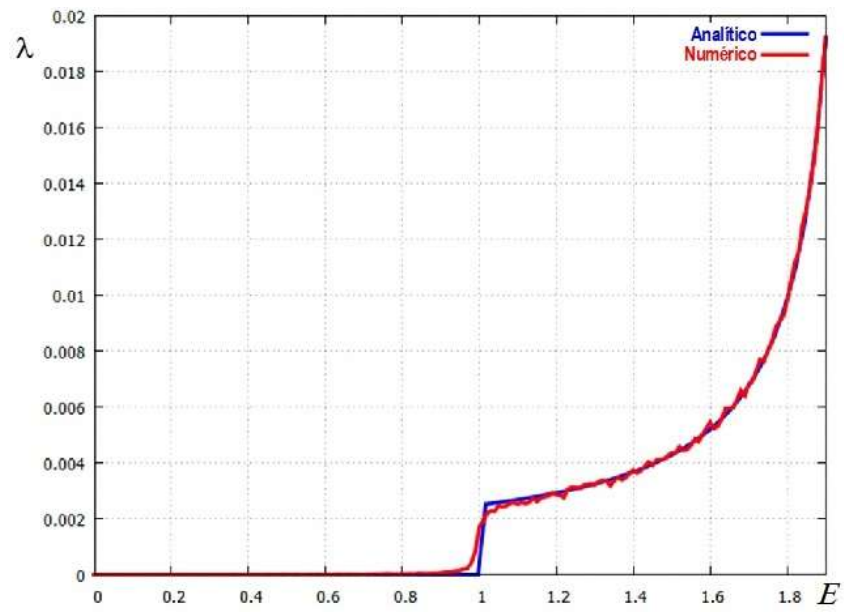


Figura 3.9: Exponente de Lyapunov $\lambda(E)$ para el ejemplo, con $\langle \varepsilon_n^2 \rangle = 0.01$, $N = 500,000$

Capítulo 4

Transporte en una barrera desordenada activa

En los capítulos anteriores se han tratado sistemas desordenados que no tienen propiedades de amplificación o de absorción de las ondas (de probabilidad, electromagnéticas o de otro tipo) que se propagan en ellos. Los hamiltonianos de este tipo de sistemas son hermíticos y tienen la característica de poseer autovalores reales y las correspondientes autofunciones son de cuadrado integrable.

Las propiedades de amplificación o absorción de energía corresponden a sistemas abiertos, en los cuales no se conserva la energía. Los modelos matemáticos en estos casos son no hermíticos y es necesario considerar la posibilidad de obtener autovalores complejos y autofunciones no normalizables, el estudio de sistemas de esta clase puede ser arduo, ya que la no-hermiticidad impide la aplicación de algunas de las herramientas utilizadas en el caso de modelos hermíticos, como el método del mapa hamiltoniano. Aún con estas complicaciones, el estudio de las propiedades de transporte en sistemas desordenados no hermíticos ha comenzado a cobrar interés en los últimos años [20, 21, 22].

En este capítulo se presenta un estudio de las propiedades de transmisión a través de una barrera aleatoria activa. La técnica que se usa es la de las matrices de transferencia, que se puede aplicar sin modificaciones al caso de modelos unidimensionales no hermíticos.

4.1. Definición del problema estudiado: Transmisión a través de una barrera desordenada activa.

El sistema estudiado es una barrera unidimensional finita de potencial aleatorio de N sitios, con propiedades de amplificación/disipación y que está colocada entre dos conduc-

tores perfectos semi-infinitos. La ecuación de Schrödinger de esta barrera de potencial es la siguiente

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} + (i\gamma + \eta_n)\psi_n = E\psi_n \quad (4.1)$$

donde $n = 1, \dots, N$ y donde los parámetros del modelo son los siguientes:

N es el número total de sitios de la barrera

γ es el coeficiente promedio de ganancia/pérdida ($\gamma < 0$: amplificación, $\gamma > 0$: disipación)

Los términos $\eta_n = \varepsilon_n + i\gamma_n$ son variables aleatorias, cuya parte real está dada por las energías de sitio (ε_n) y cuya parte imaginaria representa las fluctuaciones en la amplificación/disipación (γ_n). Ambos parámetros aleatorios se suponen de media nula, es decir,

$$\langle \varepsilon_n \rangle = 0, \quad \langle \gamma_n \rangle = 0 \quad (4.2)$$

La ecuación de Schrödinger para los conductores perfectos es

$$\Psi_{n+1} + \Psi_{n-1} = E\Psi_n \quad (4.3)$$

donde $n \leq 0$ y $n \geq N + 1$.

La ecuación (4.3) es idéntica a la que se resolvió en la sección 3.6.3, para la cual se demostró que las soluciones tienen la forma de ondas planas: $\psi_n \sim Ce^{\pm ikn}$, donde

$$E = 2\cos(k) \quad (4.4)$$

La intensidad del desorden en (4.1) está dada por las varianzas $\langle \varepsilon_n^2 \rangle$ y $\langle \gamma_n^2 \rangle$ y la dependencia estadística entre los valores de las secuencias está dada por las funciones de autocorrelación:

$$\chi_1(k) = \frac{\langle \varepsilon_n \varepsilon_{n+k} \rangle}{\langle \varepsilon_n^2 \rangle}, \quad (4.5)$$

$$\chi_2(k) = \frac{\langle \gamma_n \gamma_{n+k} \rangle}{\langle \gamma_n^2 \rangle} \quad (4.6)$$

y la función de correlación cruzada

$$\chi_3(k) = \frac{\langle \varepsilon_n \gamma_{n+k} \rangle + \langle \gamma_n \varepsilon_{n+k} \rangle}{2\langle \varepsilon_n \gamma_n \rangle}. \quad (4.7)$$

Se considera solamente el caso de *desorden débil*, el cual supone que la varianza del desorden es pequeña, es decir,

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon_n^2 \rangle &\ll 1, \\ \langle \gamma_n^2 \rangle &\ll 1. \end{aligned} \quad (4.8)$$

La barrera activa se supone colocada entre dos conductores perfectos de manera que las ondas planas viajan libremente del lado izquierdo y derecho de la barrera. Ante una onda incidente e^{ikn} del lado izquierdo, la onda transmitida al lado derecho es $t_N e^{ikn}$ y la onda reflejada $r_N e^{-ikn}$, donde t_N y r_N son las amplitudes de transmisión y de reflexión respectivamente como se ilustra en la figura 4.1. Estas amplitudes caracterizan las propiedades de transporte de la barrera,

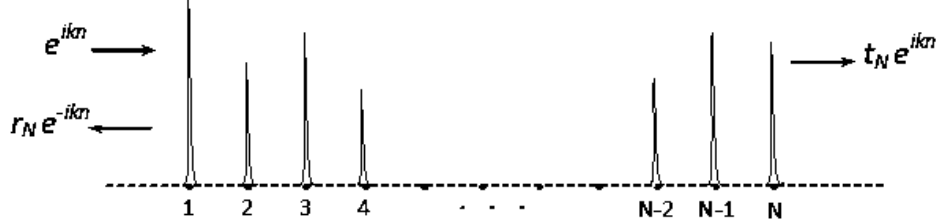


Figura 4.1: Barrera de potencial de N sitios entre dos conductores perfectos

Las amplitudes de transmisión y reflexión t_N , r_N son cantidades complejas en general. Es conveniente definir una cantidad real denominada coeficiente de transmisión, como sigue

$$T_N = |t_N|^2 \quad (4.9)$$

El coeficiente de transmisión está relacionado con el coeficiente de Lyapunov λ a través de la identidad

$$\lambda = - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2N} \langle \log T_N \rangle \quad (4.10)$$

En lo que se sigue se lleva a cabo un cálculo analítico perturbativo del valor medio del logaritmo del coeficiente de transmisión mediante el uso de la técnica de las matrices de transferencia.

4.2. Matrices de transferencia

La ecuación de Schrödinger (4.1) en términos de matrices de transferencia puede escribirse en la forma

$$\begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix} = T_n \begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

donde la matriz de transferencia asume la forma

$$T_n = \begin{pmatrix} E - i\gamma - \eta_n & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.12)$$

La ecuación (4.12) define la matriz de transferencia en la representación de los sitios. Para calcular el coeficiente de transmisión, sin embargo, es conveniente servirse de las matrices de transferencia en representación de las ondas planas. Para pasar de una representación a otra, se introducen las magnitudes A_n y B_n por medio de las identidades:

$$\psi_n = A_n e^{ikn} + B_n e^{-ikn} \quad (4.13)$$

$$\psi_{n-1} = A_n e^{ik(n-1)} + B_n e^{-ik(n-1)}. \quad (4.14)$$

Estas dos relaciones pueden expresarse mediante la identidad matricial

$$\begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A_n e^{ik(n-1)} \\ B_n e^{-ik(n-1)} \end{pmatrix} \quad (4.15)$$

donde

$$S = \begin{pmatrix} e^{ik} & e^{-ik} \\ 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.16)$$

Aumentando en una unidad el valor del índice n en la ecuación (4.15) se obtiene

$$\begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A_{n+1} e^{ikn} \\ B_{n+1} e^{-ikn} \end{pmatrix}. \quad (4.17)$$

Combinando las ecuaciones (4.11), (4.15) y (4.17) se obtiene

$$\begin{pmatrix} A_{n+1} e^{ikn} \\ B_{n+1} e^{-ikn} \end{pmatrix} = Q_n \begin{pmatrix} A_n e^{ik(n-1)} \\ B_n e^{-ik(n-1)} \end{pmatrix} \quad (4.18)$$

en donde

$$Q_n = S^{-1} T_n S = Q^{(0)} + Q_n^{(1)} \quad (4.19)$$

$Q^{(0)}$ es la matriz de transferencia de la barrera sin desorden y tiene la forma

$$Q^{(0)} = \begin{pmatrix} \left(1 - \frac{\gamma}{2 \sin k}\right) e^{ik} & -\frac{\gamma}{2 \sin k} e^{-ik} \\ \frac{\gamma}{2 \sin k} e^{ik} & \left(1 + \frac{\gamma}{2 \sin k}\right) e^{-ik} \end{pmatrix} \quad (4.20)$$

y $Q_n^{(1)}$ es un término adicional que contiene los valores del desorden como un factor escalar

$$Q_n^{(1)} = \frac{i\eta_n}{2 \sin k} \begin{pmatrix} e^{ik} & e^{-ik} \\ -e^{ik} & -e^{-ik} \end{pmatrix}. \quad (4.21)$$

Nótese que en la derivación de las ecuaciones (4.20) y (4.21) se ha tomado en cuenta que la barrera está colocada entre dos conductores perfectos, en los que la relación entre la energía de las ondas y los números de onda es $E = 2 \cos(k) = e^{ik} + e^{-ik}$.

La relación entre la onda en el primer y en el último sitio de la barrera es

$$\begin{pmatrix} t_N e^{ikN} \\ 0 \end{pmatrix} = \mathcal{Q}(N) \begin{pmatrix} e^{-ik} \\ r_N e^{ik} \end{pmatrix} \quad (4.22)$$

donde

$$\mathcal{Q}(N) = [\mathcal{Q}^{(0)} + \mathcal{Q}_N^{(1)}] [\mathcal{Q}^{(0)} + \mathcal{Q}_{N-1}^{(1)}] \dots [\mathcal{Q}^{(0)} + \mathcal{Q}_1^{(1)}] \quad (4.23)$$

es la matriz de transferencia total en la representación de las ondas planas. La matriz $\mathcal{Q}(N)$ es unimodular, es decir,

$$\det \mathcal{Q}(N) = 1 \quad (4.24)$$

lo cual se puede verificar haciendo el cálculo directo de su determinante.

Usando la propiedad (4.24) y despejando de (4.22) se obtiene la relación entre la amplitud de transmisión y el elemento $\mathcal{Q}_{22}(N)$ de la matriz $\mathcal{Q}(N)$

$$t_N = \frac{1}{\mathcal{Q}_{22}(N)} e^{-ik(N+1)} \quad (4.25)$$

4.3. Barrera activa sin desorden

Antes de abordar el cálculo del coeficiente de transmisión para el modelo de la barrera dada por la ecuación de Schrödinger (4.1), es útil analizar el caso de una barrera activa sin desorden. El modelo correspondiente se obtiene al eliminar el desorden en (4.1), es decir, al considerar $\varepsilon_n = 0$, $\gamma_n = 0$, o bien, $\eta_n = 0$. En este caso se obtiene el modelo no hermítico determinístico siguiente

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} + i\gamma\psi_n = E\psi_n \quad (4.26)$$

En este caso el desarrollo (4.32) para la matriz $\mathcal{Q}(N)$ se reduce solamente al término de orden cero, es decir, en este caso

$$\mathcal{Q}(N) = \mathcal{Q}^{(0)}(N) = [\mathcal{Q}^{(0)}]^N \quad (4.27)$$

Este caso nos permite estudiar el efecto del coeficiente de amplificación/atenuación γ en ausencia de desorden. En este caso la expresión para la amplitud de transmisión (4.34) se reduce a la forma

$$t_N = \frac{1}{\mathcal{Q}_{22}^{(0)}(N)} e^{-ik(N+1)} \quad (4.28)$$

por lo que el coeficiente de transmisión resulta ser

$$T_N = \frac{1}{\left| \mathcal{Q}_{22}^{(0)}(N) \right|^2}. \quad (4.29)$$

Después de sustituir la expresión explícita (4.36) para $\mathcal{Q}_{22}^{(0)}(N)$ en la ecuación (4.29) se obtiene

$$T_N = \frac{|\sin(q)|^2}{\left| \left(1 - \frac{\gamma}{2 \sin k} \right) e^{ik} \sin(qN) - \sin[q(N+1)] \right|^2} \quad (4.30)$$

considerando (4.37), la ecuación anterior también se puede escribir como

$$T_N = \frac{|\sin(q)|^2}{\left| \left(i \sin k - \frac{\gamma \cos k}{2 \sin k} \right) \sin(qN) - \sin q \cos(qN) \right|^2} \quad (4.31)$$

El comportamiento de T_N en función de la longitud de la barrera activa se muestra en la Figura 4.2. Las curvas mostradas corresponden a los valores $\gamma = -0.05$ (amplificación) y $\gamma = 0.05$ (atenuación) y se ha considerado una onda incidente con energía $E = 0$. Las líneas continuas corresponden a las predicciones de la fórmula teórica (4.31), mientras que los puntos representan los valores de $\ln(T_N)$ obtenidos numéricamente por medio del cálculo directo de la matriz de transferencia (4.27). Se puede observar el excelente acuerdo entre resultados analíticos y numéricos.

En la figura 4.2 se observa que el comportamiento de $\ln(T_N)$ para el caso de atenuación $\gamma = 0.05$ es el que se espera intuitivamente, ya que la atenuación se va acumulando conforme aumenta el número de sitios de la barrera, produciéndose una atenuación que aumenta exponencialmente al crecer N . En cambio, en el caso de amplificación $\gamma = -0.05$ se obtiene un comportamiento antintuitivo, ya que al aumentar el número de sitios de la barrera la amplificación se va acumulando sólo hasta llegar a un punto máximo, a partir del cual comienza a producirse una atenuación con la misma tasa de incremento que en el caso de γ positivo. Es decir, para N grande en ambos casos se produce una atenuación de manera que la gráfica de $\ln(T_N)$ es una recta con pendiente $-|\gamma|$. Este comportamiento antintuitivo coincide con el reportado en [23].

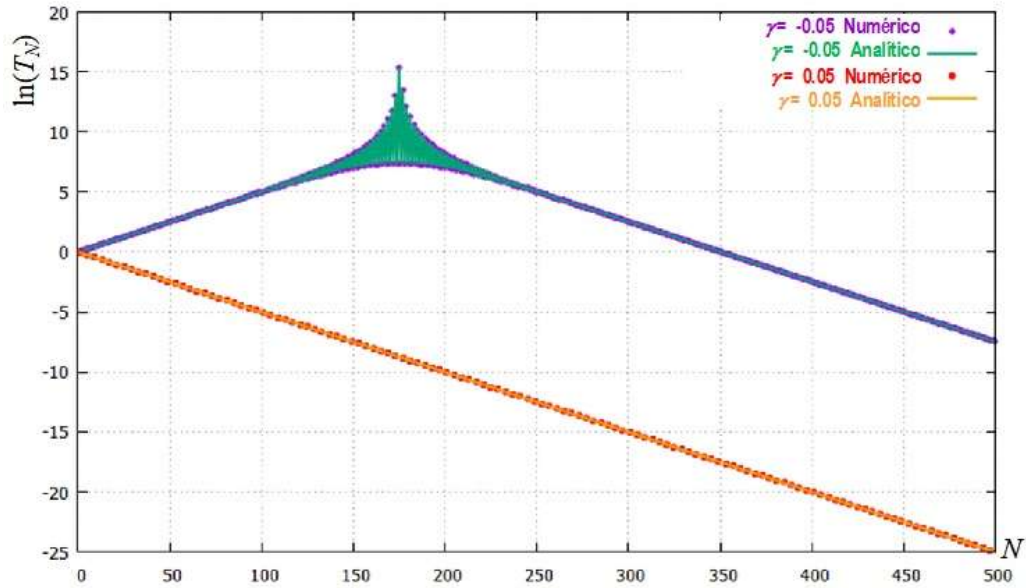


Figura 4.2: Gráfica de $\ln(T_N)$ en función de N para el caso no hermítico sin desorden, con $\gamma = -0.05$ y $\gamma = 0.05$, $E = 0$

En la figura 4.3 se muestra el comportamiento de $\ln(T_N)$ en función de la energía E de la onda incidente para los casos de atenuación con $\gamma = 0.05$ y de amplificación con $\gamma = -0.05$, para la obtención de esta figura se considero una barrera con longitud fija $N = 175$ para observar lo que ocurre en el punto de amplificación máxima mostrada en el experimento anterior (figura 4.2). Como se observa en la figura 4.3 el efecto amplificador (para γ negativo) se pierde cerca de los bordes de la banda.

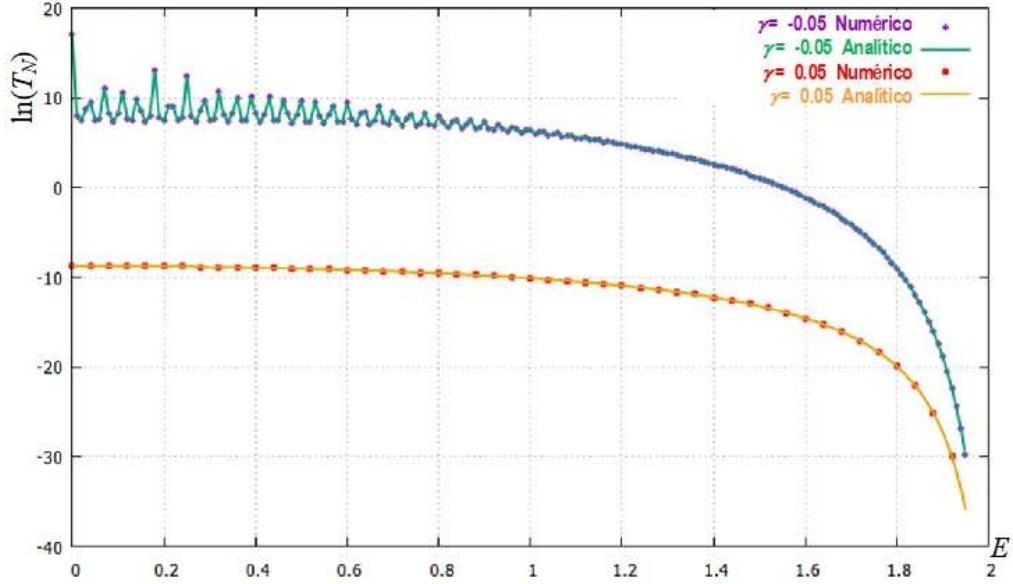


Figura 4.3: Gráfica de $\ln(T_N)$ en función de E para el caso no hermítico sin desorden, con $\gamma = -0.05$ y $\gamma = 0.05$, $N = 175$.

También en la figura 4.3 es claro el acuerdo entre los resultados analíticos y los numéricos.

4.4. Cálculo perturbativo del coeficiente de transmisión para desorden débil y barrera delgada

En esta sección consideramos la transmisión a través de una barrera aleatoria activa con desorden débil, definido por las condiciones (4.8). Supondremos además que la barrera es delgada, esto es, que su espesor N es mucho menor de la longitud de atenuación/amplificación $l_a = 1/|\gamma|$, es decir, $|\gamma|N \ll 1$ y de la longitud de localización l_{loc} , es decir, $\langle \epsilon_n^2 \rangle N \ll 1$

En este caso se puede hacer el desarrollo del producto matricial (4.23) en potencias de η_n

$$\mathcal{Q}(N) = \mathcal{Q}^{(0)}(N) + \mathcal{Q}^{(1)}(N) + \mathcal{Q}^{(2)}(N) + o(\eta^2) \quad (4.32)$$

donde

$$\begin{aligned}
\mathcal{Q}^{(0)}(N) &= \left[\mathcal{Q}^{(0)} \right]^N \\
\mathcal{Q}^{(1)}(N) &= \sum_{k_1=1}^N \left[\mathcal{Q}^{(0)} \right]^{N-k_1} \mathcal{Q}_{k_1}^{(1)} \left[\mathcal{Q}^{(0)} \right]^{k_1-1} \\
\mathcal{Q}^{(2)}(N) &= \sum_{k_1=1}^{N-1} \sum_{k_2=k_1+1}^N \left[\mathcal{Q}^{(0)} \right]^{N-k_2} \mathcal{Q}_{k_2}^{(1)} \left[\mathcal{Q}^{(0)} \right]^{k_2-k_1-1} \mathcal{Q}_{k_1}^{(1)} \left[\mathcal{Q}^{(0)} \right]^{k_1-1}
\end{aligned} \tag{4.33}$$

Obsérvese que la contribución promedio de $\mathcal{Q}^{(2)}(N)$ es cero si el desorden no tiene correlaciones, ya que todos sus términos contienen un producto de la forma $\eta_{k_2} \eta_{k_1}$ con $k_1 \neq k_2$.

A partir de (4.25) y usando el desarrollo (4.32) para $\mathcal{Q}(N)$, se puede obtener el siguiente desarrollo para la amplitud de transmisión

$$t_N = \frac{1}{\mathcal{Q}_{22}^{(0)}(N)} e^{-ik(N+1)} \left\{ 1 - \frac{\mathcal{Q}_{22}^{(1)}(N)}{\mathcal{Q}_{22}^{(0)}(N)} - \frac{\mathcal{Q}_{22}^{(2)}(N)}{\mathcal{Q}_{22}^{(0)}(N)} + \left[\frac{\mathcal{Q}_{22}^{(1)}(N)}{\mathcal{Q}_{22}^{(0)}(N)} \right]^2 + o(\eta^2) \right\} \tag{4.34}$$

de donde

$$\ln t_N = -ik(N+1) - \ln \mathcal{Q}_{22}^{(0)}(N) - \frac{\mathcal{Q}_{22}^{(1)}(N)}{\mathcal{Q}_{22}^{(0)}(N)} - \frac{\mathcal{Q}_{22}^{(2)}(N)}{\mathcal{Q}_{22}^{(0)}(N)} + \frac{1}{2} \left[\frac{\mathcal{Q}_{22}^{(1)}(N)}{\mathcal{Q}_{22}^{(0)}(N)} \right]^2 + o(\eta^2) \tag{4.35}$$

Por otro lado, a partir de la diagonalización de $Q^{(0)}$ se pueden desarrollar las expresiones (4.33) para obtener las siguientes expresiones analíticas del elemento $\mathcal{Q}_{22}(N)$:

$$\begin{aligned}
\mathcal{Q}_{22}^{(0)}(N) &= -\frac{1}{\sin(q)} \left\{ \left(1 - \frac{\gamma}{2 \sin k} \right) e^{ik} \sin(qN) - \sin[q(N+1)] \right\} \\
\mathcal{Q}_{22}^{(1)}(N) &= -\frac{i}{2 \sin(k) \sin^2(q)} \sum_{l=1}^N \eta_l \left\{ \sin[q(N-l+1)] - e^{ik} \sin[q(N-l)] \right\} \\
&\quad \cdot \left\{ e^{-ik} \sin(ql) - \sin[q(l-1)] \right\} \\
\mathcal{Q}_{22}^{(2)}(N) &= -\frac{i}{2 \sin(k) \sin^3(q)} \sum_{l_1=1}^{N-1} \sum_{l_2=l_1+1}^N \eta_{l_1} \eta_{l_2} \left\{ e^{-ik} \sin(ql_1) - \sin[q(l_1-1)] \right\} \\
&\quad \cdot \sin[q(l_2-l_1)] \cdot \left\{ e^{ik} \sin[q(N-l_2)] - \sin[q(N-l_2+1)] \right\}
\end{aligned} \tag{4.36}$$

donde q está dado de manera implícita por la relación

$$\cos(q) = \cos(k) - \frac{i\gamma}{2} \tag{4.37}$$

El hecho de que el parámetro complejo q sea una función implícita del número de onda k de la onda incidente y del coeficiente γ de amplificación/absorción reduce la utilidad de las expresiones (4.36). Una manera de lograr una expresión explícita para el parámetro q en términos de k es hacer un desarrollo de q en potencias de γ , en el caso que estamos considerando de barrera delgada, $|\gamma|N \ll 1$, resulta

$$q = k + \frac{i\gamma}{2 \sin k} + \frac{\gamma^2 \cos k}{8 \sin^3 k} + o(\gamma^2) \quad (4.38)$$

y en forma similar,

$$\sin(Nq) = \sin(Nk) + \frac{i\gamma N \cos(Nk)}{2 \sin k} + \frac{(\gamma N)^2 \sin(Nk)}{8 \sin^2 k} + o((\gamma N)^2) \quad (4.39)$$

Considerando los desarrollos (4.38) y (4.39) se puede eliminar la dependencia de q en (4.36).

Una vez eliminada la dependencia de q , se sustituye en (4.35) para obtener el siguiente desarrollo

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2N} \langle \ln T_N \rangle &= \frac{\gamma}{2 \sin(k)} + \frac{\langle \varepsilon_n^2 \rangle}{8 \sin^2(k)} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^N \chi_1(n) \left(1 - \frac{n}{N} \right) \cos(2kn) \right] \\ &\quad - \frac{\langle \gamma_n^2 \rangle}{8 \sin^2(k)} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^N \chi_2(n) \left(1 - \frac{n}{N} \right) \cos(2kn) \right] \\ &\quad - \frac{\langle \varepsilon_n \gamma_n \rangle}{2 \sin^2(k)} \left[\sum_{n=1}^N \chi_3(n) \left(1 - \frac{n}{N} \right) \sin(2kn) \right] + \dots \end{aligned} \quad (4.40)$$

En el caso particular de desorden sin correlaciones, la expresión (4.40) se reduce a la siguiente

$$-\frac{1}{2N} \langle \ln T_N \rangle = \frac{\gamma}{2 \sin(k)} + \frac{\langle \varepsilon_n^2 \rangle - \langle \gamma_n^2 \rangle}{8 \sin^2(k)} + \dots \quad (4.41)$$

A continuación se presentan algunos resultados que muestran la predicción del valor medio del logaritmo del coeficiente de transmisión $\langle \ln T_N \rangle$ obtenida mediante la expresión analítica (4.40) y su comparación con los resultados numéricos.

El cálculo numérico de $\langle \ln T_N \rangle$ se ha llevado a cabo evaluando los elementos de la matriz $\mathcal{Q}(N)$ a partir de la definición (4.23) y promediando los resultados sobre un número N_r suficientemente grande de realizaciones del desorden.

En la figura 4.4 se muestran las gráficas de $\langle \ln T_N \rangle$ para dos casos de la barrera activa delgada: el caso de atenuación con $\gamma = 0.01$ y el caso de amplificación con $\gamma = -0.01$, para $N = 10$, $N_r = 100$, $\langle \varepsilon_n^2 \rangle = 0.05$, $\langle \gamma_n^2 \rangle = 0.00001$ (desorden sin correlaciones espaciales). En ambos casos se presenta tanto la predicción analítica (con línea continua) basada en la ecuación para barrera delgada (4.40) como el cálculo numérico (con línea punteada). Los valores de los parámetros utilizados satisfacen la hipótesis de barrera delgada, ya que $\langle \varepsilon_n^2 \rangle N = 0.5 < 1$, $|\gamma|N = 0.1 \ll 1$, desorden débil $\langle \varepsilon_n^2 \rangle = 0.05 \ll 1$, $\langle \gamma_n^2 \rangle = 0.00001 \ll \gamma^2 = 0.0001$ y amplificación/atenuación débil $|\gamma| = 0.01$. Como puede observarse en este caso la aproximación es buena.

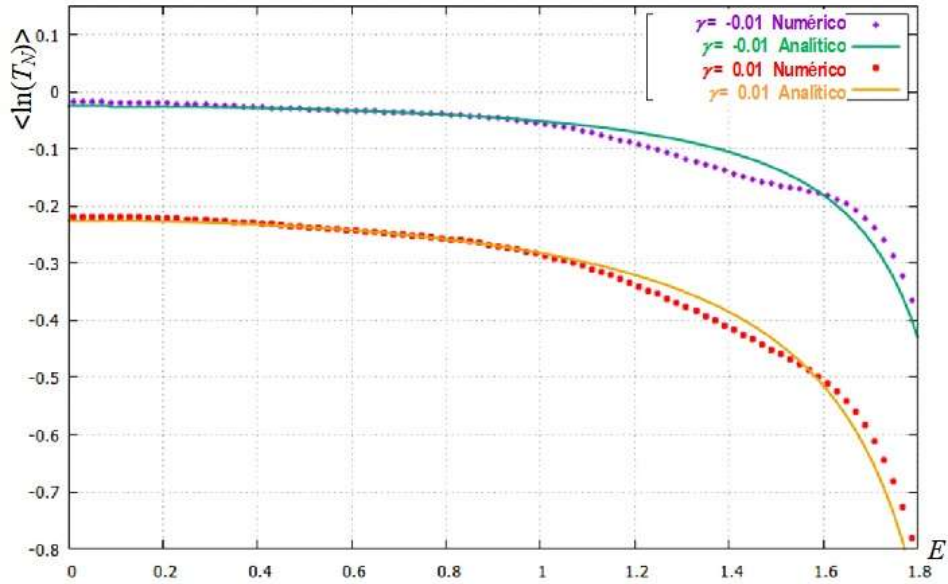


Figura 4.4: Gráfica de $\langle \ln T_N \rangle$ en función de E para barrera activa, para $\gamma = -0.01$ y $\gamma = 0.01$, con $\langle \gamma_n^2 \rangle = 0.00001$, $\langle \varepsilon_n^2 \rangle = 0.05$. $N = 10$, desorden sin correlaciones. El cálculo analítico considera barrera delgada.

Para estudiar el efecto de las correlaciones en el desorden en una barrera delgada se introdujo desorden correlacionado en las energías de sitio, con la densidad espectral de energía dada por

$$W(E) = \begin{cases} 0 & \text{si } E \in [-2, -1.5] \cup [-1, 1] \cup [1.5, 2] \\ 4.84 & \text{si } E \in [-1.5, -1] \cup [1, 1.5] \end{cases} \quad (4.42)$$

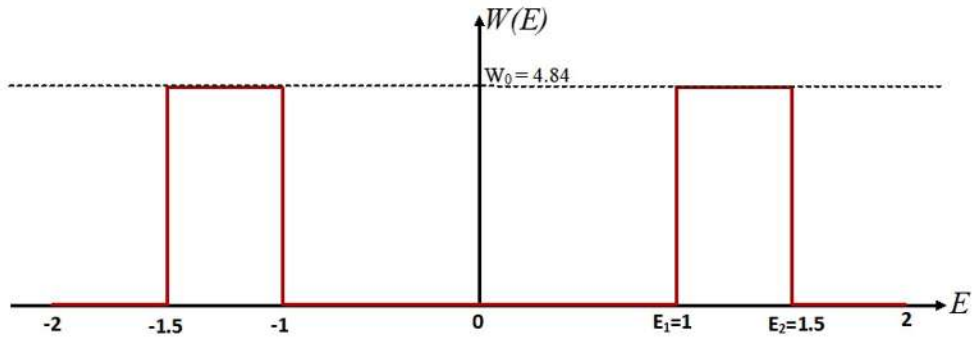


Figura 4.5: Función de densidad espectral utilizada para el desorden correlacionado.

La gráfica de la función de densidad espectral $W(E)$ utilizada se muestra en la figura 4.5. Con esta densidad espectral se definen las energías $E_1 = 1$, $E_2 = 1.5$.

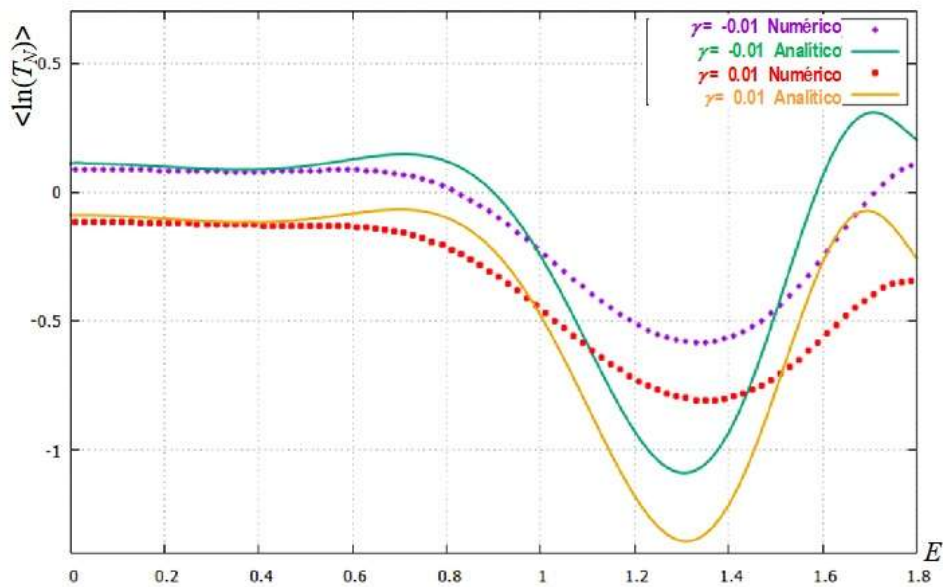


Figura 4.6: Gráfica de $\langle \ln T_N \rangle$ en función de E para barrera activa, para $\gamma = -0.01$ y $\gamma = 0.01$, con $\langle \gamma_n^2 \rangle = 0.00001$, $\langle \epsilon_n^2 \rangle = 0.05$. $N = 10$, con desorden autocorrelacionado. El cálculo analítico considera barrera delgada.

En la figura 4.6 se ha mantenido el mismo valor de los parámetros que en la figura 4.4 y sólo se introdujo desorden con autocorrelación, pero sin intercorrelaciones. Como se observa en la figura en ambos casos (tanto para γ positivo como negativo), en el rango

de energías $[E_1, E_2]$ sólo se observa una suave disminución en el valor de $\langle \ln T_N \rangle$ y no una disminución abrupta como cabría esperar si se generaran bordes de movilidad efectivos. Esto era de esperarse, ya que en una barrera delgada la longitud de localización supera la de la barrera y no se pueden apreciar los efectos de la localización.

4.5. Cálculo perturbativo de $\langle \ln T_N \rangle$ para el caso de barrera larga

Después de estudiar el caso de una barrera delgada se deriva una expresión para $\langle \ln T_N \rangle$ en el caso de barrera larga, es decir, para $|\gamma|N \gg 1$. En este caso ya no se puede utilizar el desarrollo (4.39) en potencias de (γN) , sin embargo, en su lugar se puede considerar el desarrollo para $\sin(q)$ en potencias de γ , es decir,

$$\sin(q) = \sin(k) + \frac{i\gamma \cos(k)}{2 \sin k} + \frac{\gamma^2}{8 \sin k} + o(\gamma^2) \quad (4.43)$$

cuya convergencia sólo requiere la hipótesis de amplificación/absorción débil $|\gamma| \ll 1$. En este caso, si queremos sustituir (4.43) en (4.35) debemos advertir que esta última expresión se ha obtenido de (4.34), la cual solamente converge bajo la hipótesis de barrera delgada, sin embargo, al calcular el logaritmo para obtener (4.35) la hipótesis se puede relajar para considerar solamente la hipótesis de desorden débil de acuerdo con [24], teniendo cuidado solamente de que los autovalores de la matriz $Q^{(0)}$ sean de módulo distinto, lo cual en este caso requiere que $\gamma \neq 0$. Así, al hacer la sustitución y después de un considerable trabajo de álgebra,

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2N} \langle \ln T_N \rangle &= \frac{|\gamma|}{2 \sin(k)} + \frac{\gamma - |\gamma|}{2N\gamma} \ln \left(\frac{\gamma^2}{16 \sin^4(k)} \right) + \\ &+ \frac{\langle \varepsilon_n^2 \rangle}{8 \sin^2(k)} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^N \chi_1(n) \left(1 - \frac{n}{N} \right) e^{-\frac{n|\gamma|}{\sin(k)}} \cos(2kn) \right] \\ &- \frac{\langle \gamma_n^2 \rangle}{8 \sin^2(k)} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^N \chi_2(n) \left(1 - \frac{n}{N} \right) e^{-\frac{n|\gamma|}{\sin(k)}} \cos(2kn) \right] \\ &- \frac{\langle \varepsilon_n \gamma_n \rangle}{2 \sin^2(k)} \left[\sum_{n=1}^N \chi_3(n) \left(1 - \frac{n}{N} \right) e^{-\frac{n|\gamma|}{\sin(k)}} \sin(2kn) \right] + \dots \end{aligned} \quad (4.44)$$

En el caso particular de desorden sin correlaciones, la expresión (4.44) se convierte en la siguiente

$$-\frac{1}{2N} \langle \ln T_N \rangle = \frac{|\gamma|}{2\sin(k)} + \frac{\gamma - |\gamma|}{2N\gamma} \ln \left(\frac{\gamma^2}{16\sin^4(k)} \right) + \frac{\langle \varepsilon_n^2 \rangle - \langle \gamma_n^2 \rangle}{8\sin^2(k)} + \dots \quad (4.45)$$

En lo que sigue se discute la aplicación de la ecuación (4.44) a algunos casos caracterizados por distintos valores del coeficiente de amplificación/atenuación y por específicas correlaciones del desorden. Las predicciones de la fórmula 4.44 se comparan con los valores del promedio del logaritmo del coeficiente de transmisión obtenidos numéricamente.

En la figura 4.7 se muestran las gráficas de $\langle \ln T_N \rangle$ para dos casos de la barrera activa larga: el caso de atenuación con $\gamma = 0.01$ y el caso de amplificación con $\gamma = -0.01$, para $N = 10,000$, $N_r = 100$, $\langle \varepsilon_n^2 \rangle = 0.01$, $\langle \gamma_n^2 \rangle = 0.00001$ (desorden independiente en el coeficiente de amplificación/atenuación). En ambos casos se presenta tanto la predicción analítica (con línea continua) basada en la ecuación para barrera larga (4.44) como el cálculo numérico (con línea punteada). Como puede observarse en este caso la concordancia entre los resultados analíticos y los numéricos no es tan buena para el caso de γ negativo, sin embargo, ésta mejora al crecer N .

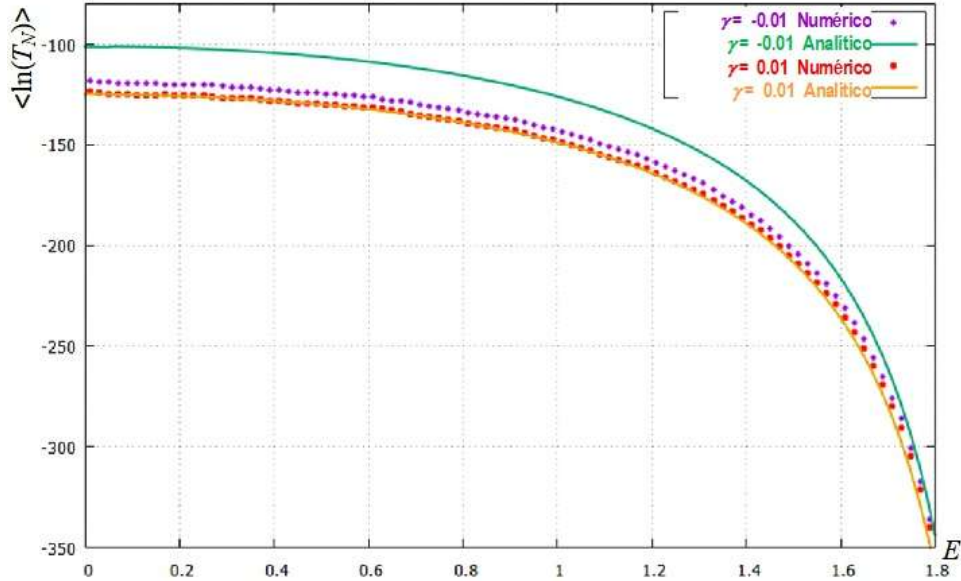


Figura 4.7: Gráfica de $\langle \ln T_N \rangle$ en función de E para barrera activa, para $\gamma = -0.01$ y $\gamma = 0.01$, con $\langle \gamma_n^2 \rangle = 0.00001$, $\langle \varepsilon_n^2 \rangle = 0.01$, $N = 10,000$ con desorden sin correlaciones. El cálculo analítico considera barrera larga.

Para estudiar el efecto de las correlaciones en el desorden se introdujo desorden correlacionado en las energías de sitio, con la densidad de energía considerada en el ejemplo de la sección 3.7.3, es decir,

$$W(E) = \begin{cases} 0 & \text{si } E \in [-2, -1.5] \cup [-1, 1] \cup [1.5, 2] \\ 4.84 & \text{si } E \in [-1.5, -1] \cup [1, 1.5] \end{cases} \quad (4.46)$$

Con esta densidad espectral se definen las energías $E_1 = 1$, $E_2 = 1.5$. En la figura 4.8 se muestra otra variante del experimento anterior, en donde se mantiene el mismo valor de los parámetros y sólo se cambia el tipo de desorden por desorden correlacionado en las energías de sitio, con $\langle \varepsilon_n^2 \rangle = 0.01$, $\langle \gamma_n^2 \rangle = 0$, en este caso se usó $N = 10,000$ y $N_r = 100$. Como se observa en la figura en ambos casos (tanto para γ positivo como negativo), se producen los dos bordes de movilidad en los valores de energía esperados E_1 y E_2 manifestándose un claro descenso en el coeficiente de transmisión entre estos dos valores de energía, fenómeno que solo puede deberse a la localización de los estados en ese rango de energías.

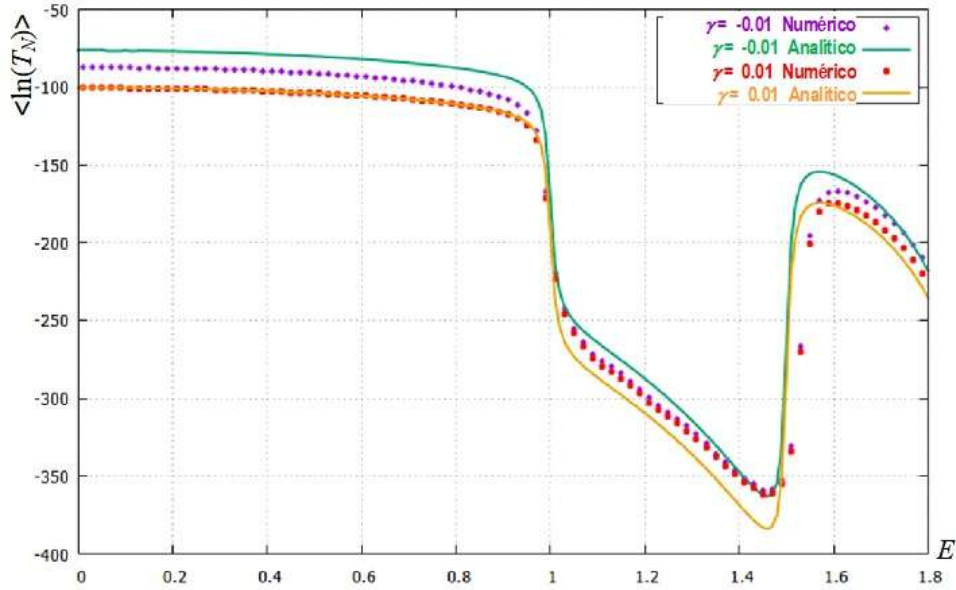


Figura 4.8: Gráfica de $\langle \ln T_N \rangle$ en función de E para $\gamma = -0.01$ y $\gamma = 0.01$, con $\langle \varepsilon_n^2 \rangle = 0.01$, $\langle \gamma_n^2 \rangle = 0$, $N = 10,000$ con desorden correlacionado. El cálculo analítico considera barrera larga.

4.5.1. El exponente de Lyapunov

De acuerdo a la ecuación (4.10), al tomar el límite cuando N tiende a infinito en la expresión (4.44) se obtiene la siguiente expresión para el exponente de Lyapunov

$$\lambda = \frac{|\gamma|}{2 \sin(k)} + \frac{\langle \varepsilon_n^2 \rangle}{8 \sin^2(k)} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \chi_1(n) e^{-\frac{n|\gamma|}{\sin(k)}} \cos(2kn) \right] - \frac{\langle \gamma_n^2 \rangle}{8 \sin^2(k)} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \chi_2(n) e^{-\frac{n|\gamma|}{\sin(k)}} \cos(2kn) \right] - \frac{\langle \varepsilon_n \gamma_n \rangle}{2 \sin^2(k)} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \chi_3(n) e^{-\frac{n|\gamma|}{\sin(k)}} \sin(2kn) \right] + \dots \quad (4.47)$$

En el caso de desorden sin correlaciones, la expresión anterior se reduce a

$$\lambda = \frac{|\gamma|}{2 \sin(k)} + \frac{\langle \varepsilon_n^2 \rangle - \langle \gamma_n^2 \rangle}{8 \sin^2(k)} + \dots \quad (4.48)$$

Las ecuaciones (4.47) y (4.48) muestran que el carácter aleatorio de las energías de sitio produce un efecto de localización que se suma a la atenuación producida por la naturaleza activa de la barrera, en acuerdo con los resultados obtenidos en [25, 26, 22]. Las mismas ecuaciones muestran también que las fluctuaciones del coeficiente de amplificación/atenuación, en cambio, reducen la localización de las ondas que se propagan a través de la barrera. Para ilustrar el significado de las fórmulas (4.47) y (4.48), en el resto de esta sección se presenta la aplicación de estas ecuaciones a casos específicos de barrera activa desordenada, comparando las predicciones teóricas con los resultados numéricos.

En la figura 4.9 se muestra la gráfica (con línea continua) del exponente de Lyapunov predicha por la fórmula (4.48), comparada con el cálculo numérico (con línea punteada). Para este experimento se consideró una atenuación promedio $\gamma = 0.01$, con desorden sin correlaciones consistente en fluctuaciones en la amplificación con $\langle \gamma_n^2 \rangle = 0.00001$, no se consideró desorden en las energías de sitio, es decir, $\langle \varepsilon_n^2 \rangle = 0$ y sólo se consideró una realización del desorden en el cálculo numérico, pues para una barrera larga los efectos de autopromedio del coeficiente de Lyapunov son evidentes.

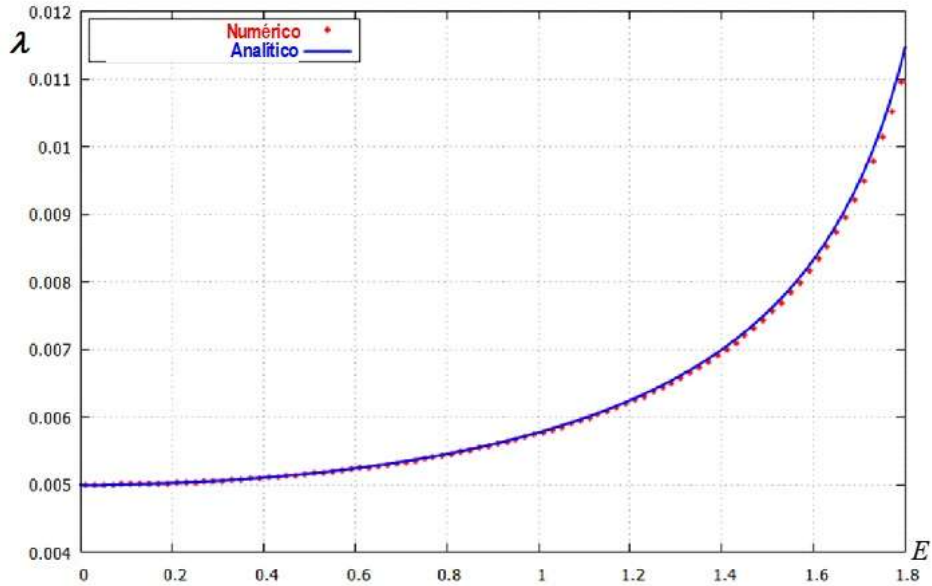


Figura 4.9: Exponente de Lyapunov con desorden sin correlaciones, para $\gamma = 0.01$, $\langle \varepsilon_n^2 \rangle = 0$, $\langle \gamma_n^2 \rangle = 0.00001$

Se estudió también el mismo caso, pero cambiando el signo de γ , es decir, para una amplificación promedio con $\gamma = -0.01$. No se presenta la gráfica obtenida debido a que es prácticamente idéntica a la figura 4.9, es decir, para una barrera muy larga no hay diferencia apreciable entre un coeficiente de amplificación o uno de atenuación.

Para probar el efecto de las correlaciones en el exponente de Lyapunov se introdujo desorden correlacionado, con la función de densidad espectral (4.51), primeramente sólo en el desorden de sitio. En la figura 4.10 se muestra el resultado para $\gamma = 0.001$, $\langle \varepsilon_n^2 \rangle = 0.01$, $\langle \gamma_n^2 \rangle = 0$.

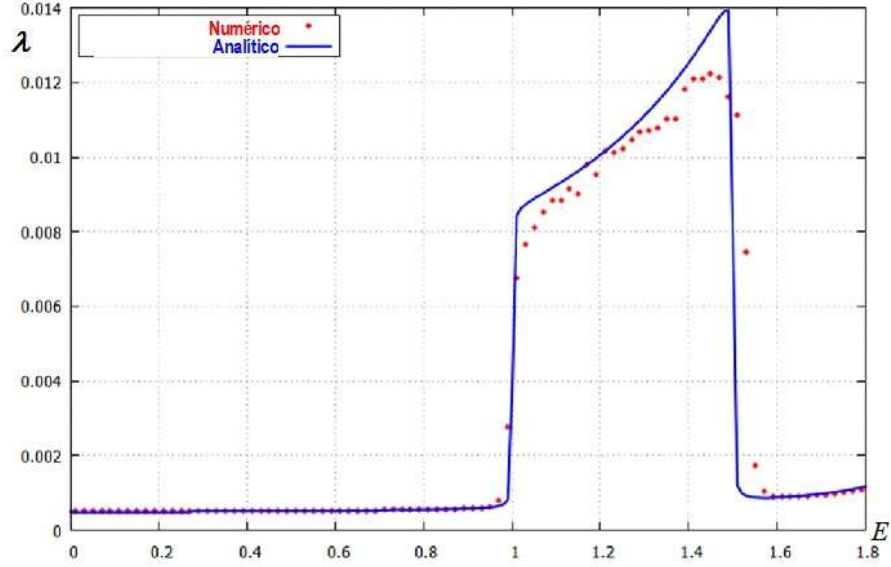


Figura 4.10: Exponente de Lyapunov con desorden correlacionado en las energías de sitio con $\gamma = 0.001$, $\langle \varepsilon_n^2 \rangle = 0.01$, $\langle \gamma_n^2 \rangle = 0$.

4.6. Barrera con amplificación/atenuación promedio cero

En esta sección se explora numéricamente la validez de la fórmula de barrera larga (4.44) para el cálculo de $\langle \ln(T_N) \rangle$ más allá de la hipótesis de desorden débil $\langle \gamma_n^2 \rangle \ll \gamma^2$, es decir, se presentan comparaciones de los cálculos numéricos con los valores que predice la fórmula en una región que no cumple la condición $\langle \gamma_n^2 \rangle \ll \gamma^2$. Cabe aclarar que la validez de la fórmula (4.44) sólo se puede sostener si se cumple la hipótesis, sin embargo, la concordancia de los resultados analíticos con los cálculos numéricos aún en el caso de violar la hipótesis en los casos que se presentan a continuación es muy buena.

Especialmente se presenta el caso $\gamma \rightarrow 0^+$, ya que en este caso el efecto de la amplificación/atenuación debido a los valores de γ no ahoga los efectos de las fluctuaciones γ_n . Es importante hacer notar que en el caso $\gamma \rightarrow 0^+$ las fórmulas para $\langle \ln(T_N) \rangle$ para barrera delgada (4.40) y barrera larga (4.44) se convierten en la misma fórmula.

$$\begin{aligned}
-\frac{1}{2N} \langle \ln T_N \rangle &= \frac{\langle \varepsilon_n^2 \rangle - \langle \gamma_n^2 \rangle}{8 \sin^2(k)} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^N \chi_1(n) \left(1 - \frac{n}{N} \right) \cos(2kn) \right] \\
&\quad - \frac{\langle \varepsilon_n \gamma_n \rangle}{2 \sin^2(k)} \left[\sum_{n=1}^N \chi_3(n) \left(1 - \frac{n}{N} \right) \sin(2kn) \right] + \dots
\end{aligned} \tag{4.49}$$

Hay que tener presente que al hacer la consideración $\gamma \rightarrow 0^+$ nos acercamos a un punto en donde se viola otra de las hipótesis utilizadas en la deducción de la fórmula para barrera larga (4.44), como se explicó en su obtención y la cual requiere que los autovalores de la matriz $Q^{(0)}$ definida por (4.20) tengan módulo distinto entre sí, de acuerdo al resultado presentado en [24] para el caso de una matriz $Q^{(0)}$ de tamaño $n \times n$.

Sin embargo es interesante hacer notar que el caso de una barrera desordenada pero no activa se puede considerar como el caso límite de una barrera activa en que el coeficiente de amplificación/atenuación tiende a cero. Matemáticamente, la ecuación de Schrödinger que describe la barrera tiende a reducirse la ecuación (3.14) que define el modelo de Anderson para $\gamma \rightarrow 0$. Al calcular el límite cuando $\gamma \rightarrow 0$ en la expresión para el exponente de Lyapunov (4.47) se obtiene

$$\lambda \rightarrow \frac{\langle \varepsilon_n^2 \rangle}{8 \sin^2(k)} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \chi_1(n) \cos(2kn) \right] + \dots \tag{4.50}$$

Esta expresión coincide con el resultado obtenido para el exponente de Lyapunov dado por la fórmula de Izrailev-Krokhin (3.59) que se describió en el caso hermítico.

4.6.1. Barrera no activa con desorden sin correlaciones espaciales

En la figura 4.11 Se muestra la gráfica de $\langle \ln(T_N) \rangle$ al variar la energía E de la onda incidente en el rango $[0, 2)$ para la barrera no activa ($\gamma = 0^+$, $\langle \gamma_n^2 \rangle = 0$) con desorden sin correlaciones, considerando $\langle \varepsilon_n^2 \rangle = 0.01$ para una barrera de $N = 1000$ sitios, para el cálculo del promedio numérico se consideraron $N_r = 1000$ realizaciones del desorden. Como puede apreciarse en la figura, se tiene una muy buena correspondencia entre los resultados numéricos (línea punteada) y las predicciones analíticas (línea continua) obtenidos mediante las fórmulas para barrera delgada y para barrera larga que en este caso producen los mismos resultados.

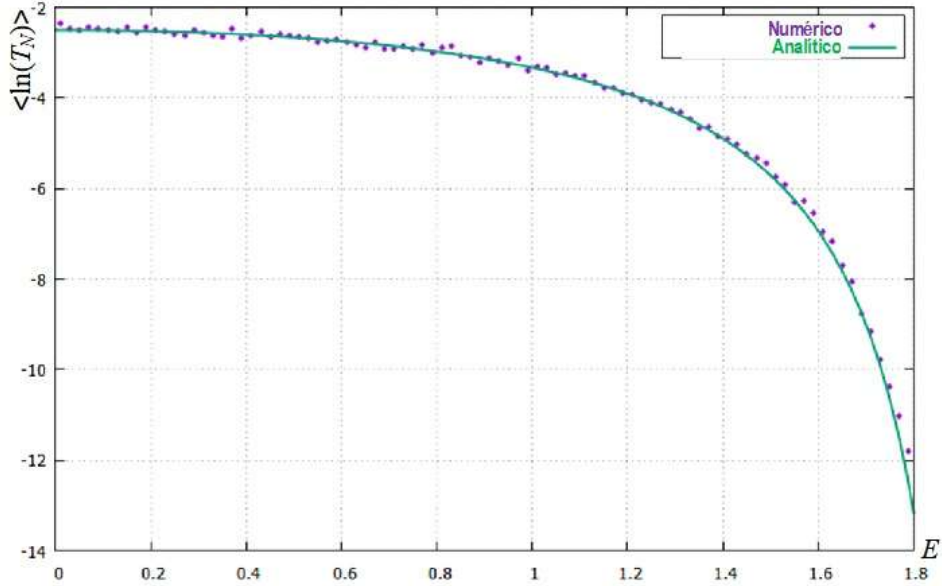


Figura 4.11: $\langle \ln(T_N) \rangle$ para el caso hermítico ($\gamma = 0^+$, $\langle \gamma_n^2 \rangle = 0$) con desorden independiente, con $\langle \varepsilon_n^2 \rangle = 0.001$, $N = 1000$

4.6.2. Barrera no activa con desorden correlacionado.

En este caso, también con $\gamma \rightarrow 0^+$, $\langle \gamma_n^2 \rangle = 0$, se probó un ejemplo similar al presentado en la subsección 3.7.3 para producir bordes de transición localización-deslocalización efectivos mediante desorden correlacionado. En esta ocasión se eligieron los bordes en $E_1 = 1$ y $E_2 = 1.5$, es decir, se eligió una densidad espectral dada por

$$W(E) = \begin{cases} 0 & \text{si } E \in [-2, -1.5] \cup [-1, 1] \cup [1.5, 2] \\ 4.84 & \text{si } E \in [-1.5, -1] \cup [1, 1.5] \end{cases} \quad (4.51)$$

y se consideró la misma varianza del desorden $\langle \varepsilon_n^2 \rangle = 0.01$ que en el experimento anterior, la misma longitud de la barrera, es decir, $N = 1000$ y el mismo número de realizaciones $N_r = 1000$. Como se puede apreciar en la figura 4.12 el coeficiente de transmisión T_N a través de la barrera es prácticamente unitario en toda la banda de energía (lo cual significa que los estados son ondas extendidas), excepto en el rango $[1, 1.5]$ correspondiente a los bordes TLD diseñados. En este rango $[1, 1.5]$ el coeficiente T_N se vuelve menor a la unidad, lo cual, en una barrera hermítica en donde no hay atenuación sólo puede ser debido al fenómeno de localización.

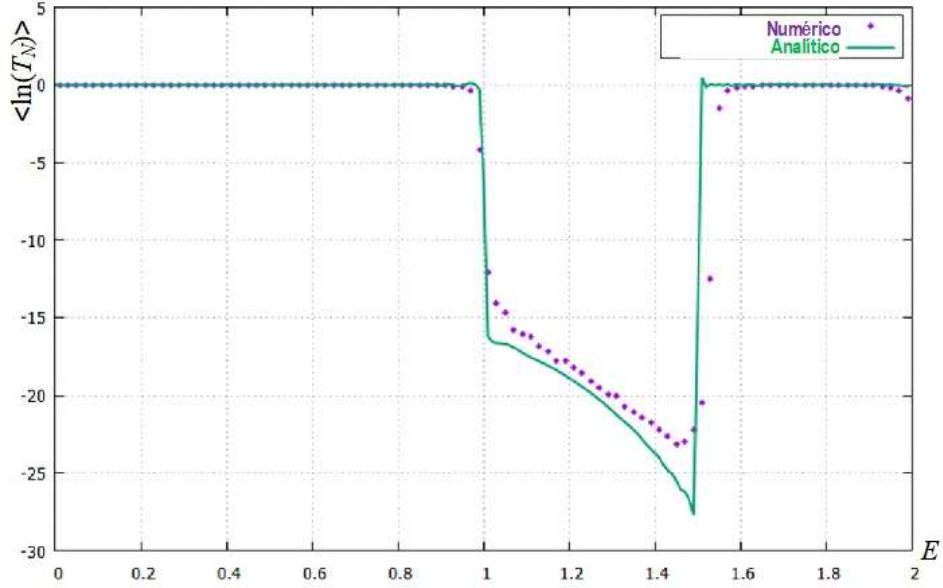


Figura 4.12: $\langle \ln(T_N) \rangle$ para el caso hermítico ($\gamma = 0^+$, $\gamma_n = 0$) con desorden correlacionado, con $\langle \varepsilon_n^2 \rangle = 0.01$, $N = 1000$

4.6.3. Caso con fluctuaciones de amplificación/atenuación sin correlaciones espaciales

Para observar el efecto que producen las fluctuaciones en la amplificación se consideró un coeficiente de amplificación/atenuación promedio $\gamma \rightarrow 0^+$ y sin desorden en las energías de sitio, es decir, $\langle \varepsilon_n^2 \rangle = 0$, se consideró una varianza en las fluctuaciones $\langle \gamma_n^2 \rangle = 0.0001$, una barrera de $N = 1000$ sitios, con $N_r = 1000$ realizaciones de las fluctuaciones aleatorias independientes. El resultado se muestra en la figura 4.13.

En la figura en la figura 4.13 se observa que las fluctuaciones en el coeficiente de amplificación/atenuación producen un efecto neto de amplificación para todos los valores de energía de la onda incidente, ya que en la gráfica se observa que $\langle \ln(T_N) \rangle > 0$ en todo el rango de energías.

4.6.4. Caso con fluctuaciones de amplificación/atenuación con correlación

Para la barrera activa con $\gamma \rightarrow 0^+$ y sin desorden en las energías de sitio, es decir, $\langle \varepsilon_n^2 \rangle = 0$ a continuación se introdujo desorden correlacionado en el coeficiente de ampli-

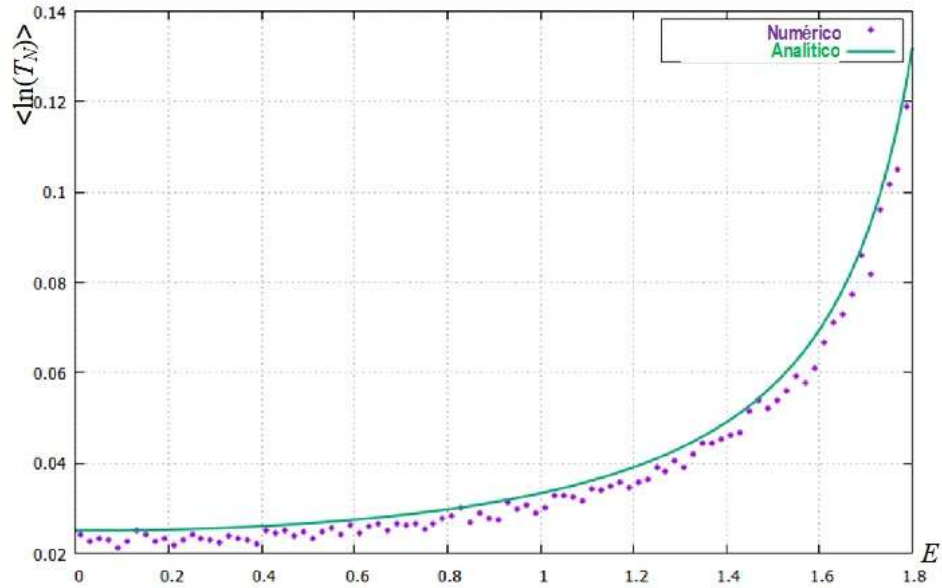


Figura 4.13: $\langle \ln(T_N) \rangle$ para el caso no hermítico con $\gamma \rightarrow 0^+$, $\langle \gamma_n^2 \rangle = 0.0001$, $\langle \varepsilon_n^2 \rangle = 0$, con desorden sin correlaciones en el coeficiente de amplificación/atenuación, con $N = 1000$.

ficación/atenuación con varianza $\langle \gamma_n^2 \rangle = 0.0001$ y la misma densidad espectral dada por (4.51) con $N = 1000$ y con $N_r = 1000$. El resultado se muestra en la figura 4.14.

Como se observa en la figura 4.14, el efecto de la correlación en γ_n es el de concentrar el efecto amplificador en el intervalo de energías entre los límites $E_1 = 1.0$ y $E_2 = 1.5$ seleccionados mediante la función de densidad espectral del desorden (4.51) eliminando la amplificación fuera de este intervalo y enfatizándola dentro de él.

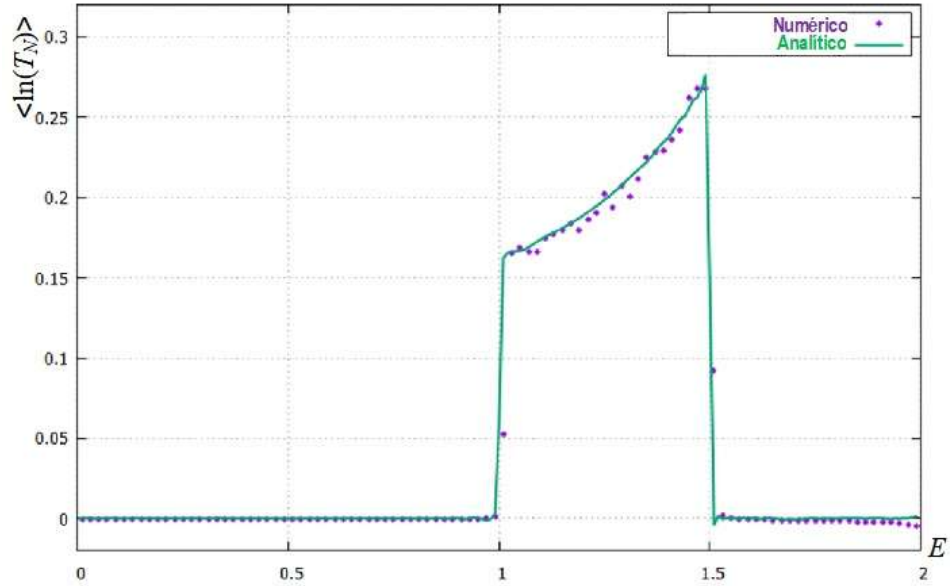


Figura 4.14: $\langle \ln(T_N) \rangle$ para el caso no hermítico con $\gamma \rightarrow 0^+$, $\langle \gamma_n^2 \rangle = 0.0001$, $\langle \varepsilon_n^2 \rangle = 0$, con desorden correlacionado en el coeficiente de amplificación/atenuación, con $N = 1000$.

4.6.5. Efecto de la intercorrelación.

En las subsecciones anteriores se probó el efecto de la autocorrelación en el desorden de cada uno de los dos tipos: desorden de sitio y fluctuaciones en la amplificación/atenuación. En esta subsección se probará el efecto de la intercorrelación entre los dos tipos de desorden en el caso $\gamma \rightarrow 0^+$ e introduciendo desorden de sitio con $\langle \varepsilon_n^2 \rangle = 0.0001$ y fluctuaciones en la amplificación/atenuación con $\langle \gamma_n^2 \rangle = 0.0001$ ambos tipos de desorden tienen una autocorrelación con función de densidad espectral dada por (4.51) y se introduce una intercorrelación del mismo tipo, pero con covarianza $\langle \varepsilon_n \gamma_n \rangle = 0.001$ para una barrera de 1000 sitios y con 1000 realizaciones del desorden. El resultado para $\langle \ln(T_N) \rangle$ se muestra en la figura 4.15.

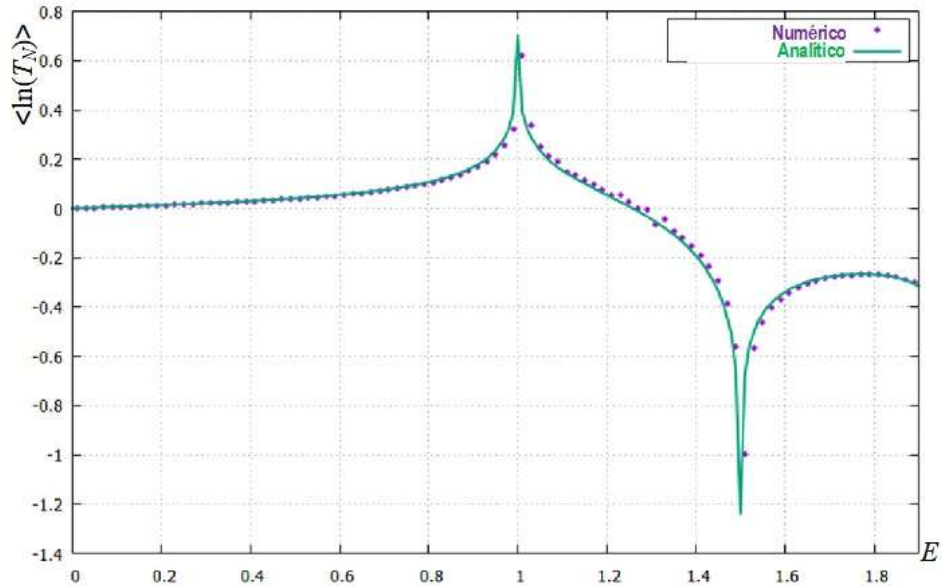


Figura 4.15: $\langle \ln(T_N) \rangle$ para el caso no hermítico con $\gamma = 0^+$ con los dos tipos de desorden con $\langle \varepsilon_n^2 \rangle = \langle \gamma_n^2 \rangle = \langle \varepsilon_n \gamma_n \rangle = 0.0001$, con intercorrelación positiva.

Como puede observarse en la figura 4.15 el efecto de la intercorrelación positiva es el de enfatizar el efecto de la amplificación provocada por las fluctuaciones γ_n cerca del borde de menor energía $E_1 = 1.0$, por un lado, y por otro lado enfatizar el efecto de la localización debida al desorden ε_n cerca del borde de mayor energía $E_2 = 1.5$.

A continuación se repitió el experimento descrito arriba, pero introduciendo una intercorrelación negativa, es decir, con $\langle \varepsilon_n \gamma_n \rangle = -0.0001$. El resultado para $\langle \ln(T_N) \rangle$ se muestra en la figura 4.16. Como puede observarse en la figura 4.15 el efecto de la intercorrelación negativa intercambia el énfasis entre el efecto de la amplificación provocada por las fluctuaciones γ_n y el de la localización debida al desorden ε_n . Ahora se tiene localización cerca del borde de menor energía $E_1 = 1.0$, y amplificación cerca del borde de mayor energía $E_2 = 1.5$.

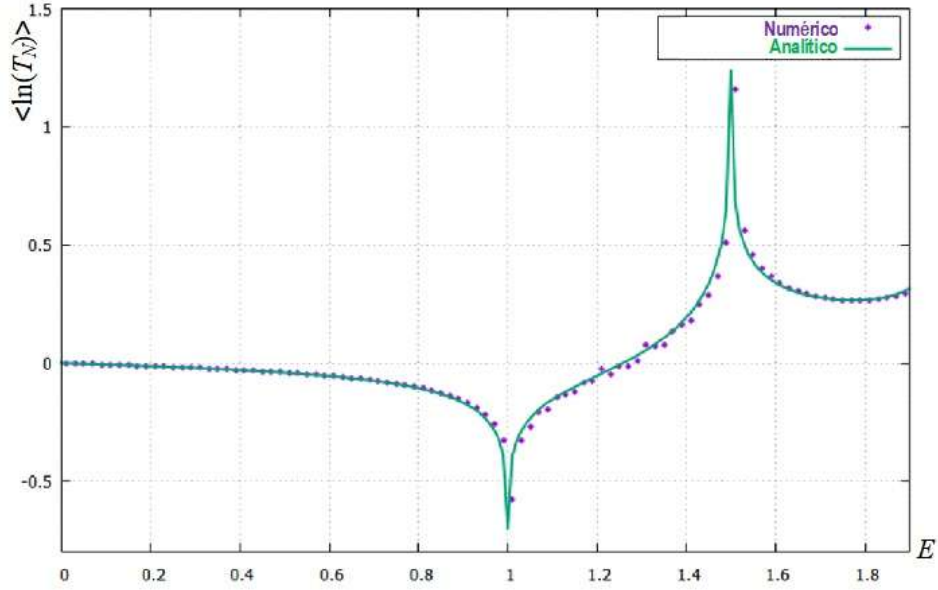


Figura 4.16: $\langle \ln(T_N) \rangle$ para el caso no hermítico con $\gamma = 0^+$ con los dos tipos de desorden, con $\langle \varepsilon_n^2 \rangle = \langle \gamma_n^2 \rangle = 0.0001$, $\langle \varepsilon_n \gamma_n \rangle = -0.0001$, con intercorrelación negativa.

También se probó el efecto de una intercorrelación cero, aunque en este caso el resultado es inmediato de las fórmulas tanto de barrera delgada (4.40) como de barrera larga (4.44), las cuales producen un valor de cero para $\langle \ln(T_N) \rangle$ cuando $\langle \varepsilon_n^2 \rangle = \langle \gamma_n^2 \rangle$ lo cual es de esperarse, ya que el efecto de la autocorrelación de ε_n y el de la autocorrelación de γ_n son contrarios y tienden a anularse, se pueden favorecer los efectos de la localización o los de amplificación aumentando respectivamente la intensidad del desorden en las energías de sitio o de las fluctuaciones de amplificación/atenuación como se muestra en la figura 4.17 la cual se obtuvo con desorden de los dos tipos sin intercorrelación, pero con autocorrelación. En color rojo se muestra el caso en que la intensidad de los dos tipos de desorden es igual $\langle \varepsilon_n^2 \rangle = \langle \gamma_n^2 \rangle = 0.0001$, en color azul se muestra el caso en que es más intenso el desorden en las energías de sitio $\langle \varepsilon_n^2 \rangle = 0.0001 > \langle \gamma_n^2 \rangle = 0.00001$ y en color verde se muestra el caso en que es más intenso el desorden en las fluctuaciones de amplificación/atenuación $\langle \varepsilon_n^2 \rangle = 0.00001 < \langle \gamma_n^2 \rangle = 0.0001$. Se consideró $N = 1000$, $N_r = 1000$.

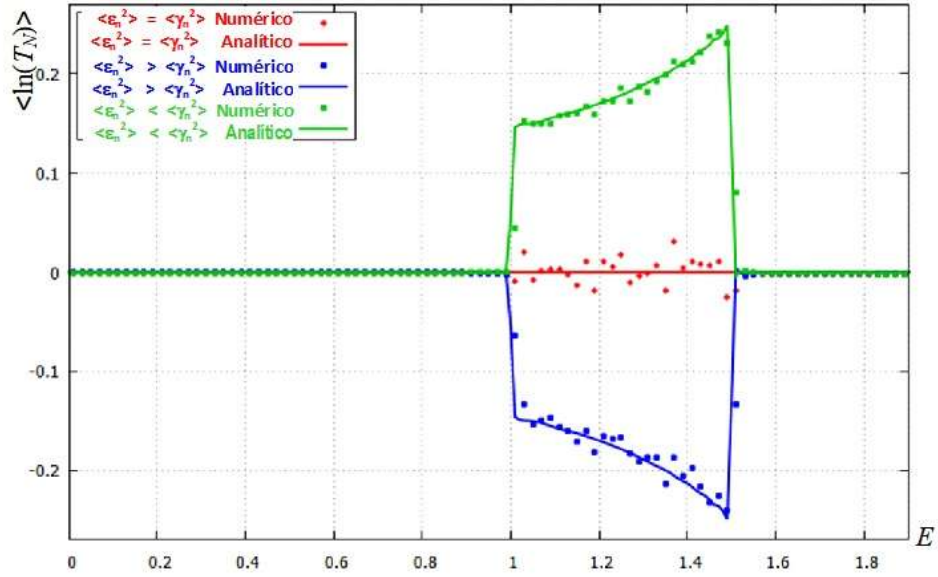


Figura 4.17: $\langle \ln(T_N) \rangle$ para el caso no hermítico con $\gamma = 0^+$ con los dos tipos de desorden, con intercorrelación cero. Se muestran tres casos: en color rojo $\langle \epsilon_n^2 \rangle = \langle \gamma_n^2 \rangle = 0.0001$, en color azul $\langle \epsilon_n^2 \rangle = 0.0001 > \langle \gamma_n^2 \rangle = 0.00001$ y en color verde $\langle \epsilon_n^2 \rangle = 0.00001 < \langle \gamma_n^2 \rangle = 0.0001$.

Capítulo 5

Conclusiones

El desarrollo de este trabajo ha sido una oportunidad para asomarme en un área muy grande de la física, la cual lo mismo tiene intersecciones con la vasta teoría del estado sólido, como con los fenómenos de propagación de ondas de diversa naturaleza, que van desde ondas de probabilidad en física cuántica, como ondas electromagnéticas y su propagación en medios desordenados. Para mí ha sido una sorpresa el encontrarme con un fenómeno tan poco intuitivo como la localización de Anderson y su relación con el desorden en una estructura cristalina. Otra sorpresa para mí ha sido el conocer el poder de una teoría simplificadora como la teoría SPS y el fenómeno de los bordes de movilidad producidos por la correlación estadística del desorden. A continuación presento una lista de las conclusiones más relevantes que se desprenden de este trabajo.

5.1. Conclusiones sobre hechos ya reportados

- Se corroboró en simulación la forma que toman las autofunciones en el modelo de Anderson en ausencia de desorden (Ondas de Bloch) y la manera en que la presencia de desorden débil cambia dramáticamente la forma de estas autofunciones produciendo ondas localizadas.
- Se verificó también en simulación como la introducción de desorden con autocorrelación estadística produce bordes de movilidad efectivos en modelos 1D y se comprobó como estos bordes pueden ser prediseñados mediante la especificación de una densidad espectral seleccionada.
- Se observó en simulación el efecto del coeficiente de amplificación/atenuación en las propiedades de transmisión de la barrera de potencial en el caso sin desorden.

Especialmente se verificó el hecho de que el efecto atenuador de un coeficiente γ positivo se va acumulando conforme se aumenta el número de sitios de la barrera, mientras que en contraste y sorprendentemente, el efecto amplificador de un coeficiente γ negativo sólo se va acumulando al aumentar el número de sitios de la barrera hasta llegar a un punto máximo a partir del cual la amplificación se desploma gradualmente hasta convertirse en un efecto de atenuación.

5.2. Conclusiones sobre aportaciones de esta tesis

- Se obtuvo la expresión analítica (4.40) para $\langle \ln T_n \rangle$ para el modelo no hermítico (con propiedades de amplificación/atenuación y desorden tanto en las energías de sitio como en el coeficiente de amplificación/atenuación). Dicha expresión analítica es válida hasta términos de segundo orden del desorden considerado en el caso de *desorden débil y barrera delgada* en el sentido de que $|\gamma N| < 1$.
- Se obtuvo la expresión analítica (4.44) para $\langle \ln T_n \rangle$ para el modelo no hermítico (con propiedades de amplificación/atenuación y desorden tanto en las energías de sitio como en el coeficiente de amplificación/atenuación). La expresión es válida hasta términos de segundo orden del desorden considerado en el caso de *desorden débil y barrera larga* en el sentido de que $|\gamma N| \gg 1$.
- A partir de la expresión analítica para $\langle \ln T_n \rangle$ en el caso de barrera larga y *desorden débil* se obtuvo una expresión analítica para el exponente de Lyapunov (4.47), la cual generaliza la fórmula de Izrailev-Krokhin para el caso no hermítico objeto de este trabajo.
- Se observó en simulación numérica el efecto de las fluctuaciones aleatorias independientes en el coeficiente de amplificación/atenuación, las cuales en el caso de fluctuaciones débiles tienen sorprendentemente un efecto amplificador en toda la banda de energías.
- Se observó en simulación numérica el efecto de la autocorrelación estadística en las fluctuaciones del coeficiente de amplificación/atenuación, encontrándose que tiene el efecto de concentrar la amplificación en un intervalo de energía seleccionado por la función de densidad espectral del desorden, produciendo con esto el equivalente a los bordes de movilidad, que en este caso bien podrían llamarse *bordes de amplificación/atenuación*. Cabe aclarar que estos bordes funcionan de manera drásticamente más selectiva que las llamadas frecuencias de corte en la teoría de filtrado.

- Se observó en simulación numérica el efecto de la intercorrelación estadística entre el desorden de sitio y las fluctuaciones del coeficiente de amplificación/atenuación, encontrándose que tiene el efecto de enfatizar la amplificación cerca de uno de los bordes de amplificación/atenuación, mientras que en el otro borde tiene el efecto de enfatizar la localización y por tanto la atenuación.

5.3. Trabajo futuro

La observación de la buena concordancia entre los resultados numéricos y las predicciones obtenidas de las fórmulas para $\langle \ln T_n \rangle$ aún fuera del rango de valores de los parámetros que cumplen la hipótesis de desorden débil, y especialmente el caso $\gamma \rightarrow 0^+$ indica que es necesario estudiar analíticamente la razón precisa de estas observaciones.

La no hermiticidad del modelo es un obstáculo para validar algunos de los resultados obtenidos, mientras que en el caso hermítico se tiene por ejemplo un modelo hamiltoniano equivalente, consistente en el “oscilador pateado”, en el caso no hermítico no existe un equivalente, una posible línea de análisis futuro sería la obtención de un sistema equivalente que nos permitiera caminos alternativos de validación y de análisis.

Otra alternativa a explorar es la adaptación de herramientas pensadas para sistemas hermíticos, tales como las funciones de Green, las cuales también han sido una herramienta de análisis para el modelo de Anderson en el caso hermítico.

Bibliografía

- [1] P. W. Anderson. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys. Rev.*, 109:1492–1505, Mar 1958.
- [2] Sir Nevill Mott. Metal-insulator transitions. *Physics Today*, 31(11):42–47, 1978.
- [3] Ad Lagendijk, Bart van Tiggelen, and Diederik S. Wiersma. Fifty years of anderson localization. *Physics Today*, 62(8):24–29, 2009.
- [4] Felix M. Izrailev, Tsampikos Kottos, and G. P. Tsironis. Hamiltonian map approach to resonant states in paired correlated binary alloys. *Phys. Rev. B*, 52:3274–3279, Aug 1995.
- [5] B Kramer and A MacKinnon. Localization: theory and experiment. *Reports on Progress in Physics*, 56(12):1469, 1993.
- [6] N.W. Ashcroft and N.D. Mermin. *Solid state physics*. Science: Physics. Saunders College, 1976.
- [7] G. Grosso and G.P. Parravicini. *Solid State Physics*. Elsevier Science, 2000.
- [8] R. de L. Kronig and W. G. Penney. Quantum mechanics of electrons in crystal lattices. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 130(814):499–513, 1931.
- [9] Gerd Bergmann. Weak localization in thin films: a time-of-flight experiment with conduction electrons. *Physics Reports*, 107(1):1 – 58, 1984.
- [10] Patrick A. Lee and T. V. Ramakrishnan. Disordered electronic systems. *Rev. Mod. Phys.*, 57:287–337, Apr 1985.

- [11] DIETER VOLLHARDT and PETER WÄLFLE. {CHAPTER} 1 - self-consistent theory of anderson localization. In W. HANKE and Yu.V. KOPAEV, editors, *Electronic Phase Transitions*, volume 32 of *Modern Problems in Condensed Matter Sciences*, pages 1 – 78. Elsevier, 1992.
- [12] F. M. Izrailev. Simple models of quantum chaos: Spectrum and eigenfunctions. *phys-rep*, 196:299–392, November 1990.
- [13] Y. Imry. *Introduction to Mesoscopic Physics*. Mesoscopic physics and nanotechnology. Oxford University Press, 2002.
- [14] G Casati, I Guarneri, F Izrailev, S Fishman, and L Molinari. Scaling of the information length in 1d tight-binding models. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 4(1):149, 1992.
- [15] Kazushige Ishii. Localization of eigenstates and transport phenomena in the one-dimensional disordered system. *Progress of Theoretical Physics Supplement*, 53:77–138, 1973.
- [16] H. Furstenberg and H. Kesten. Products of random matrices. *Ann. Math. Statist.*, 31(2):457–469, 06 1960.
- [17] Hirotsugu Matsuda and Kazushige Ishii. Localization of normal modes and energy transport in the disordered harmonic chain. *Progress of Theoretical Physics Supplement*, 45:56–86, 1970.
- [18] R. E. Borland. The nature of the electronic states in disordered one-dimensional systems. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 274(1359):529–545, 1963.
- [19] F.M. Izrailev, A.A. Krokhin, and N.M. Makarov. Anomalous localization in low-dimensional systems with correlated disorder. *Physics Reports*, 512(3):125 – 254, 2012. Anomalous localization in low-dimensional systems with correlated disorder.
- [20] Bernard Derrida, Jesper Lykke Jacobsen, and Reuven Zeitak. Lyapunov exponent and density of states of a one-dimensional non-hermitian schrödinger equation. *Journal of Statistical Physics*, 98(1):31–55, Jan 2000.
- [21] Ilya Ya. Goldsheid and Boris A. Khoruzhenko. The thouless formula for random non-hermitian jacobi matrices. *Israel Journal of Mathematics*, 148(1):331–346, Dec 2005.

- [22] Jean Heinrichs. Transmission, reflection and localization in a random medium with absorption or gain. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 18(20):4781, 2006.
- [23] P. K. Datta. Transmission and reflection in a perfectly amplifying and absorbing medium. *Phys. Rev. B*, 59:10980–10984, Apr 1999.
- [24] B Derrida, K Mecheri, and Jean-Louis Pichard. Lyapounov exponents of products of random matrices : weak disorder expansion. - application to localisation. 48, 05 1987.
- [25] Zhao-Qing Zhang. Light amplification and localization in randomly layered media with gain. *Phys. Rev. B*, 52:7960–7964, Sep 1995.
- [26] J. C. J. Paasschens, T. Sh. Misirpashaev, and C. W. J. Beenakker. Localization of light: Dual symmetry between absorption and amplification. *Phys. Rev. B*, 54:11887–11890, Nov 1996.