



**UNIVERSIDAD MICHOACANA DE SAN NICOLÁS  
DE HIDALGO**

**INSTITUTO DE FÍSICA Y MATEMÁTICAS**

Tesis para obtener el grado de Doctor en Física:

**“PROCESOS DE LOCALIZACIÓN Y TRANSPORTE  
ANÓMALOS EN EL MODELO DE KRONIG-PENNEY”**

Presenta:

**Julio César Hernández Herrejón**

Asesor:

**Dr. Luca Tessieri**

Morelia, Michoacán, México diciembre 2011



# Índice general

<b>1. Modelos de enlace fuerte</b>	<b>7</b>
1.1. Sistemas ordenados . . . . .	8
1.2. Teorema de Bloch . . . . .	9
1.3. Transmisión en un arreglo periódico de pozos cuánticos . . . . .	12
1.4. Matriz de transferencia . . . . .	15
1.4.1. Transmisión a través de varias regiones de potencial . . . . .	17
1.5. Modelo de Kronig-Penney . . . . .	20
<b>2. Localización en el modelo de Anderson</b>	<b>23</b>
2.1. Sistemas desordenados . . . . .	23
2.2. Modelo de Anderson unidimensional . . . . .	26
2.3. Longitud de localización . . . . .	28
2.4. Método del mapa hamiltoniano . . . . .	31
<b>3. Longitud de localización en el modelo de Kronig-Penney aperiódico</b>	<b>35</b>
3.1. Método del mapa hamiltoniano . . . . .	37
3.2. Longitud de localización . . . . .	44
3.3. Generación de desorden con correlaciones . . . . .	51
3.3.1. Desorden con intercorrelaciones . . . . .	51
3.3.2. Desorden con autocorrelaciones . . . . .	53
3.3.3. Desorden con autocorrelaciones e intercorrelaciones . . . . .	55
3.3.4. Gráficas . . . . .	56
<b>4. Transmisión en modelos de enlace fuerte</b>	<b>61</b>
4.1. Transmisión en el modelo de Kronig-Penney aperiódico . . . . .	66
4.2. Comprobación experimental del efecto de las intercorrelaciones en el coeficiente de transmisión . . . . .	73

<b>5. Anomalías de la longitud de localización</b>	<b>80</b>
5.1. Anomalía cerca del centro de la banda . . . . .	81
5.2. Anomalía en el borde de la banda . . . . .	87
<b>6. Estados electrónicos anómalamente localizados</b>	<b>95</b>
6.1. Resultados numéricos . . . . .	100

# Introducción

En 1928 Felix Bloch publicó un teorema muy importante sobre la función de onda de una partícula cuántica en un potencial periódico [1]. Este teorema dice que la solución de la ecuación de Schrödinger con un potencial periódico toma la forma de ondas planas moduladas con la periodicidad de la red; por lo que los estados electrónicos de todo sistema cristalino (sistema ordenado) son estados extendidos. Tiempo después surgió la interrogante de cómo serían los estados electrónicos en un sistema desordenado; la respuesta la dió P. W. Anderson en 1958 mostrando que los electrones en muestras desordenadas pueden quedar confinados en regiones limitadas del espacio [2]. A este fenómeno se le llamó localización de Anderson.

En los años sesenta el estudio de la localización de Anderson se enfocó en muestras totalmente aleatorias, o sea muestras carentes de cualquier tipo de correlación. Un resultado muy importante que se obtuvo de estos trabajos fue haber demostrado que para los sistemas unidimensionales totalmente desordenados los electrones se localizan exponencialmente sin importar que tan débil sea el desorden [3], a diferencia de lo que pasa en los modelos desordenados tridimensionales donde los electrones están localizados sí la intensidad del desorden es suficientemente fuerte, si no los estados electrónicos son extendidos.

Estos resultados engendraron el convencimiento generalizado que en las cadenas unidimensionales no existen estados extendidos y, consecuentemente, que no puede producirse una transición metal-aislante análoga a la que ocurre en muestras 3D cuando la intensidad del desorden rebasa un umbral crítico.

En los últimos años el estudio de los sistemas unidimensionales con desorden correlacionado se ha desarrollado rápidamente. La investigación se ha dirigido hacia estos sistemas debido al descubrimiento del papel principal que juegan las correlaciones del desorden en la estructura de los estados electrónicos. Las correlaciones en el desorden pueden alterar significativamente los

estados electrónicos de muestras unidimensionales y producir estados extendidos como lo hicieron ver F. de Moura y M. Lyra [4], que mostraron de forma numérica que específicas correlaciones de largo alcance en las energías de sitio pueden generar un conjunto continuo de estados extendidos. En 1999 F. Izrailev y A. Krokhnin [6] publicaron un artículo donde derivaron una relación analítica entre la longitud de localización y los correladores binarios de las energías de sitio y usaron este resultado para demostrar la existencia de bordes de movilidad en sistemas unidimensionales. El estudio de los sistemas desordenados unidimensionales no se ha quedado únicamente en el ámbito teórico sino que sus predicciones se han comprobado experimentalmente usando superredes y guías de ondas [7]. Se espera que en un futuro estos resultados se puedan aplicar en la creación de filtros de tal manera que dejen pasar electrones con energía en cierto rango pero impidan pasar a electrones con energías en otro rango.

Cabe mencionar que el fenómeno de la localización se puede analizar de varias formas, por ejemplo se puede estudiar el comportamiento asintótico de la función de onda que usualmente es un decrecimiento exponencial dado por  $\psi \sim \exp(-|x|/l)$  donde  $l$  es la longitud de localización. Otra manera de estudiar los estados electrónicos en sistemas desordenados consiste en calcular el número de participación inversa. A fin de decidir si un estado está localizado o no es suficiente con considerar el segundo momento de la densidad de probabilidad  $\sum_r |\psi(r)|^4$ . Esto mide la porción de espacio donde la amplitud de la función de onda es marcadamente distinta de cero. Otras formas consisten en calcular la conductividad y la transmisión. Esta tesis se enfoca en estudiar el comportamiento asintótico de la envolvente de la función de onda, esto se debe a que podemos aplicar el método del mapa hamiltoniano y calcular la longitud de localización analíticamente.

El modelo de Kronig-Penney fue introducido en 1931 por R. Kronig y W. Penney para estudiar los estados electrónicos en un potencial periódico como el de un cristal. Como es de esperarse por el teorema de Bloch, los estados electrónicos de este modelo son ondas planas moduladas con la periodicidad que tiene el potencial, además de generarse bandas de energía permitidas y prohibidas [8]. Resulta natural introducir desorden en el modelo de Kronig-Penney y estudiar como se modifican sus estados electrónicos. Se introducen dos tipos de desorden, desorden compositivo y estructural. El desorden compositivo se introduce sustituyendo al azar algunos átomos con impurezas, esto es modificando aleatoriamente la intensidad del potencial. El desorden estructural se introduce colocando en posiciones aleatorias las barreras de

potencial.

Los objetivos de esta tesis son tres. El primero es analizar los estados electrónicos del modelo de Kronig-Penney con desorden débil correlacionado utilizando el método del mapa hamiltoniano [9]. Este método se basa en la equivalencia matemática que hay entre la ecuación de Schrödinger del modelo de Kronig-Penney y la ecuación de un oscilador estocástico. Con este método se deriva una expresión para la longitud de localización. Este resultado fue publicado en [23].

El segundo objetivo es analizar las propiedades de transporte en muestras de talla finita. Se calcula numéricamente el coeficiente de transmisión y se analiza el efecto que tienen las autocorrelaciones e intercorrelaciones sobre este. Se muestra que específicas correlaciones de largo alcance vuelven nulas las densidades espectrales del desorden en regiones continuas de energía produciendo transiciones localización-deslocalización. También se muestra que las intercorrelaciones aumentan o disminuyen la longitud de localización. Este resultado fue publicado en [24] y poco tiempo después fue comprobado experimentalmente por O. Dietz y U. Kuhl en 2011 (aun no se ha publicado).

El tercer objetivo es analizar las anomalías de la localización en el modelo de Kronig-Penney. Se analizan las anomalías de la longitud de localización que están en el borde y en un entorno del centro de la banda de energía. Por último se estudian los estados anómalamente localizados, estos estados se producen cuando el desorden compositivo y el desorden estructural están intercorrelacionados de una manera específica, entonces los estados electrónicos que se generan son estados localizados pero no decrecen exponencialmente sino que lo hacen más lentamente como una exponencial estirada. Este resultado fue publicado en [25].

Esta tesis está formada por 6 capítulos. El capítulo 1 está dedicado a los sistemas ordenados, se demuestra el teorema de Bloch que es de principal importancia en el área del estado sólido. Se introduce el método de las matrices de transferencia, este método permite calcular los coeficientes de transmisión y de reflexión que son muy importantes debido a que pueden ser medidos experimentalmente. Se introduce el modelo de Kronig-Penney que se define como una sucesión periódica de barreras de potencial deltiformes. En el capítulo 2 se introducen los sistemas desordenados y se dan algunos ejemplos de estos sistemas. Se introduce el fenómeno de la localización, este fenómeno consiste a grandes rasgos en que la envolvente de la función de onda decrece exponencialmente a partir de un centro de localización. Se analizan los

estados electrónicos del modelo de Anderson y se calcula la longitud de localización con el método del mapa hamiltoniano. En el capítulo 3 se estudian los estados electrónicos del modelo de Kronig-Penney aperiódico con desorden compositivo y estructural correlacionado. Se calcula la longitud de localización, este resultado es válido para la primera banda de energía excepto en el borde y cerca del centro de la banda. Se muestra un algoritmo para generar desorden con autocorrelaciones e intercorrelaciones. En el capítulo 4 se calcula numéricamente la transmisión en el modelo de Kronig-Penney aperiódico finito con desorden correlacionado y se muestra como estos resultados fueron comprobados experimentalmente por O. Dietz y U. Kuhl. En el capítulo 5 se analizan las anomalías en el borde y cerca del centro de la banda de energía y se calcula el valor correcto para la longitud de localización. En el capítulo 6 se muestra que si el desorden compositivo y el estructural tienen una específica intercorrelación entonces se generan estados electrónicos anómalamente localizados, esto es estados electrónicos tales que su envolvente decrece como una exponencial estirada en vez de un decrecimiento exponencial.

# Capítulo 1

## Modelos de enlace fuerte

En este capítulo se introducen los modelos de enlace fuerte y se demuestra el teorema de Bloch, este teorema tiene un papel muy importante en los sistemas cristalinos. Se pone especial énfasis en el modelo de Kronig-Penney que será el modelo que trataremos a lo largo de esta tesis. Se analiza el modelo de Kronig-Penney desde dos puntos de vista, primero aplicando el teorema de Bloch a un sistema periódico de pozos cuánticos; la segunda forma consiste en usar el método de las matrices de transferencia, un método muy útil como se muestra en el capítulo 4 donde se analiza la transmisión en el modelo de Kronig-Penney aperiódico.

Los modelos de enlace fuerte son modelos para la propagación de los electrones en los sólidos en una dimensión. El modelo de enlace fuerte mas general consiste en un electrón que está en el átomo  $n$ -ésimo y que puede saltar al átomo  $(n\pm 1)$ -ésimo o  $(n\pm 2)$ -ésimo o puede saltar como maximo hasta el  $(n\pm m)$ -ésimo átomo. El hamiltoniano para este modelo de enlace fuerte está dado por una matriz con estructura de banda con un tamaño de banda  $b$  que nos dice que tan grande es el salto mas largo que puede dar el electrón. En esta tesis no se considera el caso mas general, nos enfocamos en el modelo de Kronig-Penney con desorden compositivo y estructural correlacionado. Este modelo se puede escribir como un modelo de enlace fuerte con saltos a los primeros vecinos. El hamiltoniano para este modelo esta dado por una matriz tridiagonal.

En un modelo de enlace fuerte a primeros vecinos se considera que los electrones están localizados cerca de los átomos, o sea que tienen una función de onda cuya amplitud es mucho mayor que cero en un entorno de los átomo y casi cero fuera de esta región. Para el átomo  $n$ -ésimo se considera el orbital

$|n\rangle$  que se asume es no degenerado. También se supone que los electrones sólo pueden saltar de un átomo a su primer vecino pero no a un vecino más lejano, esto implica que

$$\langle n|H|m\rangle = \begin{cases} \gamma_n & , \quad m = n \pm 1 \\ 0 & , \quad |m - n| \geq 2 \\ \epsilon_n & , \quad n = m \end{cases}$$

donde  $\epsilon_n$  son las energías de sitio y  $\gamma_n$  es la energía de interacción. El hamiltoniano para este modelo de enlace fuerte está dado por

$$H = \sum_n \epsilon_n |n\rangle\langle n| + \sum_n \gamma_{n+1} (|n+1\rangle\langle n| + |n\rangle\langle n+1|). \quad (1.1)$$

Estamos interesados en escribir la ecuación de Schrödinger

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad (1.2)$$

en representación de los sitios. Sustituyendo el hamiltoniano (1.1) en la ecuación de Schrödinger (1.2) y multiplicando ambos lados de esta ecuación por  $\langle n|$  se obtiene la ecuación de Schrödinger para los modelos de enlace fuerte

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

donde  $\psi_n = \langle n|\Psi\rangle$  es la función de onda en el sitio  $n$ -ésimo y está en representación de los sitios. La ecuación (1.3) describe la propagación de un electrón en una red donde la función de onda está definida únicamente en un conjunto discreto de sitios  $x_n = na$ . El electrón se propaga brincando de un sitio a su vecino más cercano.

## 1.1. Sistemas ordenados

Cuando se analiza un sistema físico se habla de sus átomos, moléculas, etc, los que a su vez tienen ciertas propiedades físicas. Entonces se puede definir un sistema ordenado de la siguiente forma, sea  $\{O_n\}$  el conjunto de los elementos del sistema y  $p_k$  las propiedades físicas de los elementos del conjunto  $\{O_n\}$ , se dice que el sistema está ordenado si

- 1- Es conocido el valor de la propiedad  $p_k$  para un elemento de  $\{O_n\}$ .

- 2- Es conocida la regla para darle a todos los elementos de  $\{O_n\}$  un valor de la propiedad  $p_k$ .

Por ejemplo, con esta definición se puede ver que un cristal que tiene una estructura periódica formado por una sucesión de  $N$  átomos idénticos donde cada átomo está centrado en los puntos de una red  $x_n = na$ , donde  $n$  es un número entero y  $a$  es la constante de la red, es un sistema ordenado. Sea  $\{O_n\}$  un conjunto de átomos y  $p_k$  la posición de los átomos

- 1- Primero se da el valor de la propiedad de uno de los elementos de  $\{O_n\}$ . Sea  $x_0 = a$  la posición de un átomo.
- 2- Después se da una regla. La regla que se asigna a las posiciones de los átomos es  $x_{n+1} = x_n + a$

con esta regla cada átomo ocupa el sitio de una red con constante  $a$  y como se han cumplido los puntos 1 y 2 por lo tanto este sistema está ordenado.

## 1.2. Teorema de Bloch

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

$$-\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (1.4)$$

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

El caso que nos interesa discutir aquí es el de un electrón en un cristal unidimensional de longitud  $L$  y con condiciones a la frontera periódicas. Despreciando las interacciones entre electrones; cada electrón se mueve en un potencial periódico que satisface la siguiente relación

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

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

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

Ahora se analizan las implicaciones que puede tener un potencial periódico sobre los valores propios y las funciones propias de la ecuación de Schrödinger. Primero se considera el caso del electrón libre; en este caso el potencial es nulo y las soluciones de la ecuación de Schrödinger (1.4) son simplemente ondas planas de la forma

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

donde la constante de normalización se elige de tal forma que  $W_k(x)$  está normalizada en el intervalo  $0 \leq x \leq L$  con  $k = 2\pi n/L$ ,  $L = Na$  y  $n$  entero. Estas ondas planas forman un conjunto completo de funciones ortonormales en este intervalo. Los valores propios (las energías) son  $E(k) = k^2$ . Se considera ahora el caso general de un potencial periódico. Si se aplica el operador  $H = (p^2/2m) + V(x)$  a las ondas planas  $W_k(x)$ , se ve que la función  $HW_k(x)$  pertenece al subespacio

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

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

Usando todo lo anterior, se puede expresar cada función de onda como superposición de ondas de

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

con  $-\pi/a < k \leq \pi/a$  donde resulta conveniente introducir las funciones  $u_k(x)$  con el mismo período que el potencial  $V(x)$  definidas por las relaciones

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

Entonces se puede escribir la función de onda como

$$\psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x), \quad (1.5)$$

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

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

Una forma equivalente de escribir la ecuación (1.5) es

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

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

Dado que se consideran condiciones a la frontera periódicas la función de onda cumple con

$$\psi(x + Na) = \psi(x) \quad (1.6)$$

esto es, los puntos en  $x$  y en  $x + Na$  se consideran físicamente equivalentes. La condición a la frontera (1.6) restringe los valores del vector de Bloch a aquellos que satisfacen

$$\exp(ikNa) = 1$$

por lo que los valores permitidos de  $k$  están dados por

$$k = \frac{2\pi}{Na} n$$

con  $n = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$

Cuando se tiene un sistema macroscópico de longitud  $L = Na$  el vector de Bloch  $k$  debe ser entendido como una variable que llena el espacio de forma densa aunque discreta. Hay que notar que la primera zona de Brillouin contiene un número de puntos uniformemente distribuidos que es igual al número  $N$  de celdas de la red.

El teorema de Bloch desempeña un papel central en la física de los sistemas periódicos no sólo porque caracteriza la forma de las funciones de onda sino porque conlleva el hecho de que en general el espectro de energía se divide en regiones de energía permitida separadas por regiones de energía prohibida [1] como se muestra en la siguiente sección.

### 1.3. Transmisión en un arreglo periódico de pozos cuánticos

Así como uno de los problemas más elementales de la mecánica cuántica es el estudio de los niveles de energía de una partícula en un pozo cuántico, una de las aplicaciones más elementales del teorema de Bloch es el estudio de las bandas de energía de una partícula que se mueve en un arreglo periódico de pozos cuánticos como el mostrado en la Figura 1.1. Este modelo fue introducido por Kronig y Penney en 1931 para modelar el potencial de un cristal por el de una función que es constante a trozos y por lo tanto más manejable. Debido a que el potencial es constante en cada pozo y barrera entonces en cada una de estas regiones la solución de la ecuación de Schrödinger está dada simplemente por funciones trigonométricas o exponenciales. El uso de apropiadas condiciones de frontera combinadas con la condición de Bloch (1.5) permite derivar una ecuación analítica para los valores propios del hamiltoniano.

La ecuación de Schrödinger para el arreglo periódico de pozos cuánticos está dada por (1.4) donde  $V(x)$  es el potencial periódico que se muestra en la Figura 1.1. Para el potencial  $V(x)$  se considera una sucesión infinita y periódica de pozos cuánticos de tal forma que cada pozo de potencial tiene anchura  $w$  y potencial nulo mientras que cada barrera de potencial tiene anchura  $b$  y una intensidad igual a  $U$ . La constante de la red es entonces igual a  $a = w + b$ . Si tomamos como celda elemental de la red el intervalo  $-w < x < b$  podemos partir esta celda en dos regiones: la región I correspondiente al intervalo  $-w < x < 0$  es el pozo de potencial y la región II en el intervalo  $0 < x < b$  es la barrera de potencial.

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

$$\begin{cases} \psi_I(x) = Ae^{iqx} + Be^{-iqx} & \text{si } -w \leq x \leq 0 \\ \psi_{II}(x) = Ce^{\beta x} + De^{-\beta x} & \text{si } 0 \leq x \leq b \end{cases} \quad (1.7)$$

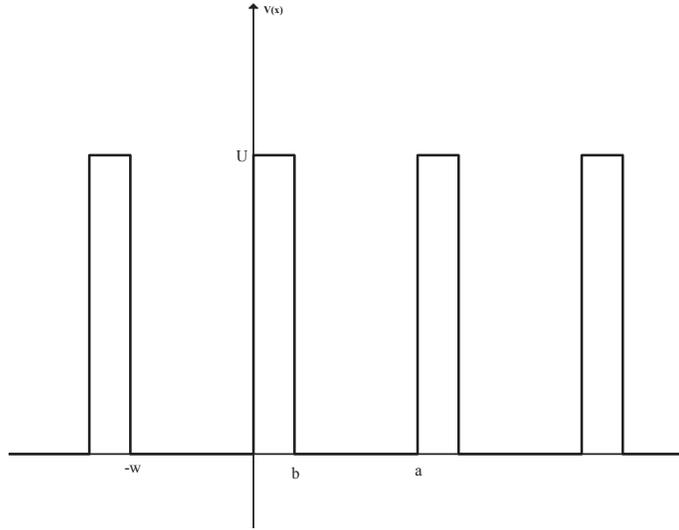


Figura 1.1: Se muestra una región de potencial formada por varios pozos. Cada barrera de potencial es de anchura  $b$  e intensidad  $U$ . Los pozos tienen una anchura  $w$ .

donde se han introducido los símbolos

$$q = q(E) = \sqrt{E}$$

y

$$\beta = \beta(E) = \sqrt{U - E}$$

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

$$\begin{aligned} \psi_I(0) &= \psi_{II}(0), & \left(\frac{d\psi_I}{dx}\right)_{x=0} &= \left(\frac{d\psi_{II}}{dx}\right)_{x=0}, \\ \psi_{II}(b) &= e^{ika}\psi_I(-w), & \left(\frac{d\psi_{II}}{dx}\right)_{x=b} &= e^{ika}\left(\frac{d\psi_I}{dx}\right)_{x=-w}. \end{aligned} \quad (1.8)$$

Las primeras dos ecuaciones expresan las condiciones de continuidad de la función de onda y de su derivada en la frontera de las regiones I y II, esto es en  $x = 0$ , las últimas dos ecuaciones se obtienen debido al teorema de Bloch

que relaciona la función de onda y su derivada en las posiciones  $x = -w$  y  $x = b$ .

Sustituyendo en las ecuación (1.8) las ecuaciones (1.7) se obtiene un sistema de ecuaciones lineales homogéneas para las constantes  $A, B, C, D$

$$\begin{aligned} A + B &= C + D \\ Aiq - Biq &= C\beta - D\beta \\ Ce^{\beta b} + De^{-\beta b} &= e^{ika} [Ae^{-iqw} + Be^{+iqw}] \\ C\beta e^{\beta b} - D\beta e^{-\beta b} &= e^{ika} [Aiqe^{-iqw} - Biqe^{+iqw}] \end{aligned} \quad (1.9)$$

El sistema (1.9) tiene solución únicamente si el determinante de la matriz asociada es nulo

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

Evaluando el determinante se obtiene así la siguiente condición

$$\frac{\beta^2 - q^2}{2q\beta} \sinh \beta b \sin qw + \cosh \beta b \cos qw = \cos ka. \quad (1.10)$$

Para simplificar el análisis del problema es útil considerar el caso específico en el que la anchura  $b$  de cada barrera tiende a cero mientras la intensidad del potencial  $U$  tiende a infinito, de tal forma que el producto  $bU$  permanezca constante. Matemáticamente esto lleva a considerar un potencial que consiste en una sucesión periódica de barreras de potencial del tipo delta de Dirac, a este sistema de aquí en adelante se le va a llamar modelo de Kronig-Penney. En el límite  $b \rightarrow 0$  y  $U \rightarrow \infty$  con  $bU = \text{constante}$  la ecuación (1.10) se simplifica y toma la forma

$$P \frac{\sin(qa)}{qa} + \cos(qa) = \cos(ka) \quad (1.11)$$

donde  $P = Uba/2$  es un parámetro adimensional proporcional al “área” de la barrera  $bU$ .

Una solución cualitativa de la ecuación (1.11) se puede obtener gráficamente representando en función del parámetro adimensional  $qa$  el miembro izquierdo de la ecuación (1.11); vease la Figura 1.5. Debido a que el

miembro derecho no puede tomar valores fuera del intervalo  $[-1 : 1]$  la ecuación (1.11) admite soluciones reales sólo para valores de  $qa$  tales que la función  $F(qa) = P \sin(qa)/qa + \cos(qa)$  resulta menor al valor absoluto de uno. La condición  $|F(qa)| \leq 1$  define los niveles de energía  $E = q^2$  que son permitidos y que se agrupan en bandas de energías separadas por intervalos prohibidos de energía.

Es fácil ver de la ecuación (1.11) que si el parámetro  $P$  es muy pequeño se recupera el caso del electrón libre, por otro lado si  $P \rightarrow \infty$  las bandas de energía se vuelven muy estrechas y el espectro de energía tiende a reducirse a líneas con energías tales que  $qa = n\pi$ . En este último caso los valores de la energía son

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

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

$$E_n = \frac{1}{a_B^2} \frac{\pi^2}{(a/a_B)^2} n^2,$$

o equivalentemente, si se miden las energías en Rydbergs

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

donde  $a_B = 0.529 \text{ \AA}$  es el radio de Bohr y  $\hbar^2/2ma_B^2 = 1 \text{ Ryd} = 13.606 \text{ eV}$ .

## 1.4. Matriz de transferencia

En esta sección se analiza el modelo de Kronig-Penney usando el método de las matrices de transferencia. Al aplicar este método se obtienen los mismos resultados de la sección anterior. La importancia de este método radica en el hecho que al aplicarlo se obtienen los coeficientes de transmisión y reflexión de una onda incidente en una región de potencial, estos coeficientes tienen una gran importancia debido a que se pueden medir experimentalmente.

Para introducir las matrices de transferencia se considera el movimiento de un electrón de masa  $m$  en la presencia de un potencial  $V(x)$  en una dimensión, el movimiento de esta partícula se rige por la ecuación de Schrödinger con un potencial  $V(x)$  definido de la siguiente manera

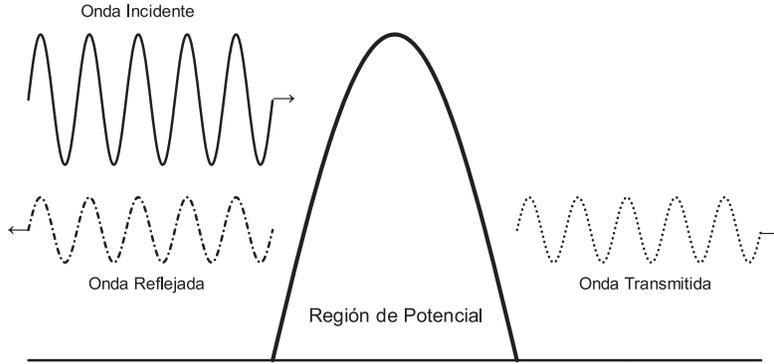


Figura 1.2: Aquí se muestra como una onda incidente (representada por la línea continua) es reflejada y transmitida parcialmente (línea punteada).

$$V(x) = \begin{cases} V(x) & , \quad 0 \leq x \leq l \\ 0 & , \quad x < 0 \text{ y } x > l. \end{cases}$$

En la región de potencial nulo el electrón se comporta como una onda que viaja a lo largo en una dirección particular como se muestra en la figura (1.2). En la presencia de un potencial nos gustaría saber como cambia la función de onda del electrón al propagarse a través de este. Se considera un electrón que se acerca a la región de potencial desde el lado izquierdo o derecho y que es parcialmente transmitido y reflejado por el potencial. La solución de la ecuación de Schrödinger en la región donde no hay potencial se puede escribir como superposición de ondas planas

$$\begin{aligned} \psi_L(x) &= \psi_L^+(x) + \psi_L^-(x), \quad x \leq 0 \\ \psi_R(x) &= \psi_R^+(x) + \psi_R^-(x), \quad x \geq l \end{aligned}$$

donde los subíndices ( $L$ ,  $R$ ) significan que la onda se encuentra del lado izquierdo o derecho de la región de potencial respectivamente, los superíndices (+, -) significan la dirección de la onda, si se propaga del lado izquierdo al lado derecho se usa el superíndice (+) en caso contrario se usa el superíndice (-). A las ondas  $\psi_L^+$  y  $\psi_R^-$  se les llama ondas incidentes ya que estas se dirigen hacia la región de potencial mientras que las ondas  $\psi_L^-$  y  $\psi_R^+$  se llaman ondas salientes. Se puede escribir de forma explícita la solución para la región donde el potencial es nulo

$$\begin{aligned}\psi_L(x) &= A \exp(+iqx) + B \exp(-iqx), \quad x \leq 0 \\ \psi_R(x) &= C \exp(+iqx) + D \exp(-iqx), \quad x \geq l\end{aligned}\tag{1.12}$$

en donde  $q$  se relaciona con la energía de la siguiente forma  $q^2 = E$ .

En principio se puede resolver la ecuación de Schrödinger y encontrar expresiones explícitas para la función de onda, sin embargo sólo se puede resolver en muy pocos casos ya que la ecuación no se puede resolver analíticamente para cualquier forma del potencial  $V(x)$ , pero en muchos casos es suficiente con conocer la forma de la solución fuera de la región de potencial, en este caso el problema se facilita bastante debido a que la función de onda consiste en la superposición de ondas planas, sin embargo es necesario encontrar los coeficientes  $A, B, C$  y  $D$  definidos en la ecuación (1.12). Por lo tanto la función de onda fuera de la región de potencial está determinada por 4 constantes que describen las propiedades de la dispersión del potencial. El problema se puede tratar mediante el método de la matriz de transferencia, la idea es escribir una relación lineal entre las ondas del lado derecho del potencial y las ondas del lado izquierdo

$$\begin{pmatrix} \psi_R^+(x=l) \\ \psi_R^-(x=l) \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} \psi_L^+(x=0) \\ \psi_L^-(x=0) \end{pmatrix}\tag{1.13}$$

donde  $\mathbf{M}$  es la matriz de transferencia. Debido a que se conserva la densidad de corriente de probabilidad y además hay simetría temporal entonces la matriz  $\mathbf{M}$  toma la forma

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & -r^* \\ t^* & 1 \\ r & t \\ -t & t \end{pmatrix}$$

donde  $t$  es la amplitud de transmisión y  $r$  es la amplitud de reflexión.

Se define el coeficiente de transmisión  $T$  como  $T = |t|^2$  y es la probabilidad de que la partícula sea transmitida a través de la barrera de potencial, por otro lado el coeficiente de reflexión  $R$  se define como  $R = |r|^2$  y es la probabilidad de que la partícula sea reflejada por la barrera de potencial.

### 1.4.1. Transmisión a través de varias regiones de potencial

Ahora se considera un sistema un poco mas complicado, en vez de tener una sola región de potencial se considera una partícula que es dispersada

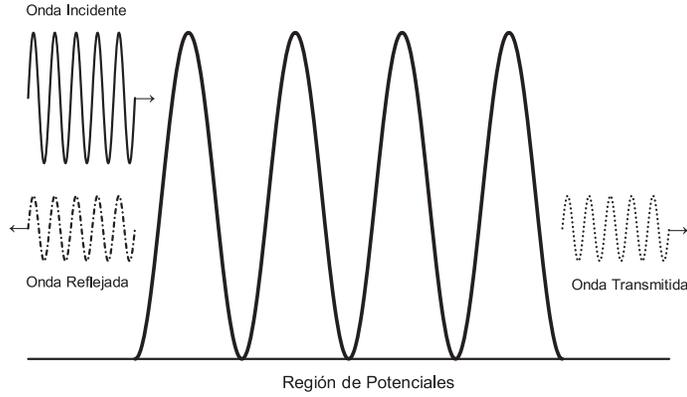


Figura 1.3: Se muestra una onda que incide sobre una región de varios potenciales, la cual es reflejada y transmitida parcialmente.

por varias regiones de potencial como en la figura (1.3). Comenzando por el caso más sencillo, el de dos regiones de potencial, se supone que el primer potencial  $V_1(x)$  está localizado en  $a < x \leq b$  y que el segundo potencial  $V_2(x)$  está localizado en  $b \leq x < c$ . Se calcula la matriz de transferencia para la barrera de potencial formada por  $V_1$  y  $V_2$ . Separando la función de onda en tres regiones se obtiene

$$\begin{aligned} \psi_L &= \psi_L^+(x) + \psi_L^-(x), & x \leq a \\ \psi(x=b) &= \psi^+(b) + \psi^-(b), & x = b \\ \psi_R(x) &= \psi_R^+(x) + \psi_R^-(x), & x \geq c. \end{aligned}$$

Recordando que la matriz de transferencia relaciona las ondas que están a la derecha de la región de potencial con las ondas que están a la izquierda de la región de potencial, se tiene que

$$\begin{pmatrix} \psi^+(b) \\ \psi^-(b) \end{pmatrix} = \mathbf{M}_1 \begin{pmatrix} \psi_L^+(a) \\ \psi_L^-(a) \end{pmatrix}$$

y

$$\begin{pmatrix} \psi_R^+(c) \\ \psi_R^-(c) \end{pmatrix} = \mathbf{M}_2 \begin{pmatrix} \psi^+(b) \\ \psi^-(b) \end{pmatrix}.$$

Combinando estas últimas dos ecuaciones

$$\begin{pmatrix} \psi_R^+(c) \\ \psi_R^-(c) \end{pmatrix} = \mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1 \begin{pmatrix} \psi_L^+(a) \\ \psi_L^-(a) \end{pmatrix}.$$

También se puede considerar el sistema completo representado por la matriz de transferencia  $\mathbf{M}_{12}$

$$\begin{pmatrix} \psi_R^+(c) \\ \psi_R^-(c) \end{pmatrix} = \mathbf{M}_{12} \begin{pmatrix} \psi_L^+(a) \\ \psi_L^-(a) \end{pmatrix},$$

esto implica que  $\mathbf{M}_{12} = \mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1$ . Lo que esto dice es que la matriz de transferencia del potencial total se puede escribir como el producto de las matrices de transferencia de los potenciales individuales.

Como caso especial se analiza el caso en el que uno de los dos potenciales es cero. Supóngase que  $V_2(x) = 0$  entonces lo que se tiene es el caso de un electrón libre que se propaga por una región de longitud  $l$ . Entonces  $\mathbf{M}_{12}$  se puede escribir como

$$\mathbf{M}_{12} = \begin{pmatrix} e^{iq l} & 0 \\ 0 & e^{-iq l} \end{pmatrix} \mathbf{M}_1 \quad (1.14)$$

donde  $l = c - b$ .

El resultado para dos barreras se puede generalizar fácilmente para el caso en el que se tienen  $N$  barreras en donde la matriz de transferencia resultante  $\mathbf{M}$  está dada por  $\mathbf{M} = \mathbf{M}_N \mathbf{M}_{N-1} \cdots \mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1$ .

Como ejemplo, tómesese una barrera deltiforme junto a una región de potencial nulo. La matriz de transferencia del sistema consiste en la matriz de transferencia de la barrera deltiforme  $\mathbf{M}_\delta$  y la matriz para la región de potencial nulo que llamaremos  $\mathbf{M}_0$ . La matriz de transferencia para una barrera de potencial deltiforme se obtiene a partir de la matriz de transferencia para una barrera de potencial rectangular en el límite en el que la anchura tiende a cero y la intensidad del potencial tiende a infinito pero el producto es constante. La matriz de transferencia para una barrera deltiforme está dada por

$$\mathbf{M}_\delta = \begin{pmatrix} 1 + \frac{U}{2iq} & \frac{U}{2iq} \\ -\frac{U}{2iq} & 1 - \frac{U}{2iq} \end{pmatrix}.$$

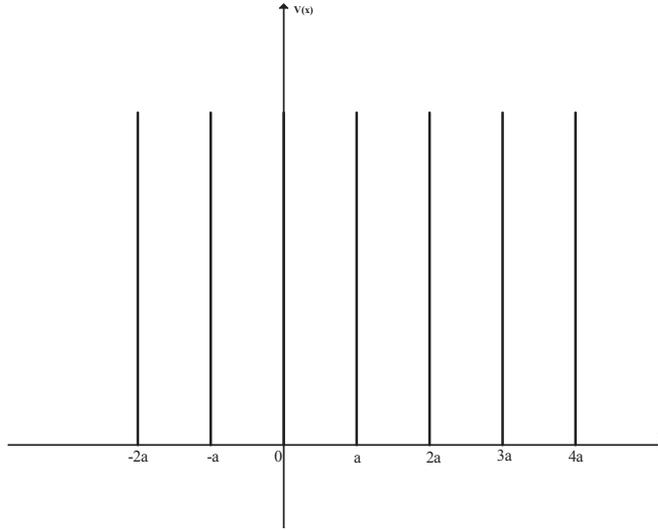


Figura 1.4: Se muestra una región de potencial formada por varias barreras deltiformes.

Entonces la matriz de transferencia para una barrera deltiforme unida a una región de potencial nulo queda como el producto de las matrices  $\mathbf{M}_0\mathbf{M}_\delta$

$$\mathbf{M}_0\mathbf{M}_\delta = \begin{pmatrix} e^{iqa}\left[1 + \frac{U}{2iqa}\right] & \frac{U}{2iqa}e^{iqa} \\ -\frac{U}{2iqa}e^{-iqa} & e^{-iqa}\left[1 - \frac{U}{2iqa}\right] \end{pmatrix}. \quad (1.15)$$

## 1.5. Modelo de Kronig-Penney

Ahora se analiza la transmisión en el modelo de Kronig-Penney usando las matrices de transferencia. Este modelo se muestra en la figura (1.4). Como ya se mencionó, el modelo de Kronig-Penney es un sistema periódico formado por una sucesión de barreras de potencial deltiformes separadas por una distancia constante  $a$ . Este modelo es el más simple que se puede estudiar de los modelos periódicos, el análisis de la transmisión nos permite entender las propiedades principales del transporte electrónico en los sólidos.

Debido a que no hay potencial entre dos barreras adyacentes,  $na < x < (n+1)a$ , la función de onda del electrón en esta región se puede escribir como

la superposición de ondas planas. Es conveniente definir la función de onda en un conjunto discreto de puntos  $x_n = na$

$$\psi_n(x) = A_n e^{iqx} + B_n e^{-iqx}$$

donde  $\psi_n = \psi(x = na)$ . Expresando la función de onda  $\psi_{n+1}$  en términos de la función de onda  $\psi_n$  se tiene que

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

donde  $\psi_n^+$  y  $\psi_n^-$  son las ondas que se dirijen a la derecha y a la izquierda respectivamente, la matriz de transferencia es idéntica a la matriz dada en (1.15). Esta matriz tiene determinante igual a 1 y traza real por lo que sus valores propios son de la forma  $\lambda_1 = e^{ika}$  y  $\lambda_2 = e^{-ika}$ , por lo tanto

$$\text{Tr } \mathbf{M} = \lambda_1 + \lambda_2 = 2 \cos(ka)$$

y esto implica  $2 \cos(ka) = 2 \cos(qa) + U \sin(qa)/qa$ , o sea

$$\cos(ka) = \cos(qa) + \frac{U}{2qa} \sin(qa), \quad (1.16)$$

esta ecuación lo que dice es que únicamente se transmiten las partículas cuyo valor de la energía  $E = q^2$  satisface la ecuación (1.16). Además se tiene toda una serie de bandas permitidas dadas por (ver Figura (1.5))

$$-1 < \cos(qa) + \frac{U}{2qa} \sin(qa) < 1.$$

Podría parecer que el modelo de Kronig-Penney es igual al sistema de las  $N$  barreras deltiformes idénticas cuando  $N \rightarrow \infty$ , pero no es así. No es posible afirmar que el modelo de Kronig-Penney se puede obtener a partir de un sistema de  $N$  barreras deltiformes en el límite  $N \rightarrow \infty$ , porque no sólo es necesario tener un número infinito de barreras sino que también se deben remover los dos conductores semi-infinitos que hay a los lados de la región de potencial los cuales siempre son considerados en el modelo de las  $N$  barreras deltiformes, además estos conductores semi infinitos provocan que se rompa la periodicidad y esta siempre está presente en el modelo de Kronig-Penney.

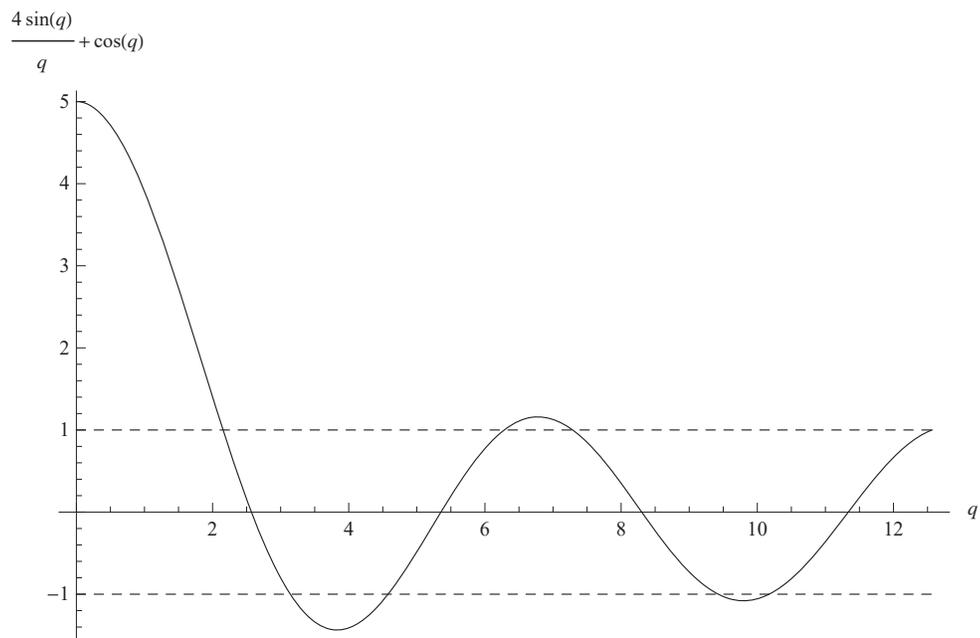


Figura 1.5: Esta es la gráfica del lado derecho de la ecuación (1.16), donde se ha usado  $U=8$ ,  $a=1$ . Las bandas permitidas se encuentran en las regiones para las que  $q$  cumple con  $-1 < \cos(qa) + \frac{U}{2q} \sin(qa) < 1$

## Capítulo 2

# Localización en el modelo de Anderson

En el capítulo 1 se vieron los sistemas ordenados, se puso especial énfasis en el modelo de Kronig-Penney y se mostró que, con ayuda del teorema de Bloch, se generan bandas de energías permitidas y prohibidas. En las bandas de energías permitidas la partícula se mueve libremente por la muestra mientras que en las bandas de energías prohibidas no hay transmisión alguna.

En este capítulo se presentan los sistemas desordenados y algunos ejemplos, se introduce el concepto de localización de los estados electrónicos y se explica cual es el mecanismo físico que hay detrás de la localización. Se analiza el modelo de Anderson usando las matrices de transferencia presentadas en el capítulo anterior para demostrar que los estados electrónicos del modelo de Anderson unidimensional con desorden sin correlaciones están localizados sin importar que tan débil sea el desorden. Finalmente se calcula la longitud de localización del modelo de Anderson usando el método del mapa hamiltoniano.

### 2.1. Sistemas desordenados

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

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

- Apesar de que los modelos estrictamente 1D pueden parecer abstractos y sin gran interés físico, en la práctica estos modelos han encontrado concretas aplicaciones experimentales, sobre todo en el estudio de superredes y guías de onda.
- Se ha descubierto que las correlaciones espaciales de largo alcance pueden producir transiciones del tipo metal-aislante.

Los sistemas ordenados se pueden desordenar de varias maneras para generar sistemas desordenados, una forma por ejemplo es quitando uno o varios átomos de la muestra y reemplazándolos por otros átomos distintos al azar. Otras formas de generar desorden en muestras ordenadas son poner los átomos en posiciones aleatorias o hacer que sus espines tomen orientaciones aleatorias. Para poder analizar estos sistemas desordenados es necesario conocer la distribución de probabilidad de las variables aleatorias, por ejemplo si los espines de la muestra son los que están desordenados la variable aleatoria es la orientación del spin de la partícula y por lo tanto se debe dar la distribución de probabilidad para la orientación de los espines. En esta tesis nos concentramos únicamente en el desorden compositivo y el desorden estructural.

Como primer ejemplo de modelos desordenados se muestra el que introdujo Anderson en 1958 [2]. Anderson se vió en la necesidad de definir un modelo que fuera sencillo para que se pudiera estudiar con relativa facilidad pero que al mismo tiempo conservara las características esenciales de los sistemas desordenados reales. El modelo que propuso para estudiar las redes desordenadas unidimensionales está definido por la siguiente ecuación de Schrödinger estacionaria

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} + \epsilon_n \psi_n = E \psi_n. \quad (2.1)$$

El desorden aparece porque las energías de sitio  $\epsilon_n$  son variables aleatorias. El índice  $n$  toma valores enteros con  $n \in \mathbf{Z}$  donde  $\mathbf{Z}$  es el conjunto de todos los números enteros. Se considera a las energías de sitio  $\epsilon_n$  como variables independientes que están uniformemente distribuidas en un intervalo de anchura dada. En este modelo los coeficientes de salto son iguales a 1 con lo que se fija la escala de energía para medir las energías de sitio  $\epsilon_n$ .

El modelo de Anderson además de describir el comportamiento de un electrón en una red con potencial aleatorio puede servir para analizar otros

sistemas físicos. Por ejemplo, si se considera una cadena de partículas de masas aleatorias atadas elásticamente a sus posiciones de equilibrio, la dinámica de la cadena está definida por un sistema de ecuaciones de la forma

$$m_n \frac{d^2 u'_n}{dt^2} = u'_{n+1} - 2u'_n + u'_{n-1},$$

donde  $u'_n$  y  $m_n$  son respectivamente el desplazamiento respecto a la posición de equilibrio y la masa de la  $n$ -ésima partícula, se consideran constantes elásticas unitarias. Asumiendo que las soluciones estacionarias tengan una dependencia temporal del tipo  $u'_n \propto u_n \exp(-i\omega t)$ , las ecuaciones dinámicas de la cadena toman la forma

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

que es matemáticamente equivalente a la ecuación de Schrödinger estacionaria (2.1) del modelo de Anderson.

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

Modelo de una aleación aleatoria. Este modelo queda definido por medio de la ecuación de Schrödinger

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

donde  $\psi(x)$  es la función de onda del electrón,  $V_n$  es la intensidad del  $n$ -ésimo potencial deltiforme y  $l$  es la distancia entre dos barreras de potencial consecutivas que se supone es constante. Las  $V_n$  son variables aleatorias independientes con la misma distribución. Los  $V_n$  toman un número finito de valores  $\{V(q), q = 0, 1, 2, \dots, r-1\}$  con probabilidades  $\{P_q, q = 0, 1, 2, \dots, r-1\}$  respectivamente. Se asume que los valores de  $V_n$  cumplen con  $-V \leq V_n \leq V < \infty$ . Además se imponen como condiciones a la frontera  $\psi(0) = \psi(NL) = 0$ . Esta ecuación describe el comportamiento de un electrón en un potencial formado por una sucesión de barreras deltiformes posicionadas a distancia constante pero con intensidades  $V_n$  aleatorias.

Una variante de este modelo consiste en usar como distribución de probabilidad para los  $V_n$  la distribución de Cauchy

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

Por último se presenta el llamado “modelo de líquido 1D”, este modelo se representa por la siguiente ecuación de Schrödinger

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

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

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

En la ecuación precedente  $v(x)$  es el potencial atómico común; las longitudes  $l_n = x_n - x_{n-1} - d$  de los intervalos de potencial nulo son variables aleatorias independientes y con la misma distribución de probabilidad, sus valores están distribuidos en el intervalo  $a - b/2 < l_n < a + b/2$  con una densidad de probabilidad  $P(l_n)$ . Este modelo tiene dos variantes, la primera consiste en suponer que los potenciales atómicos son de la forma

$$v(x) = -U\delta(x).$$

En la segunda variante también se supone que el potencial atómico tiene una forma tipo delta de Dirac pero que los valores que pueden tomar las  $l_n$  son  $0 \leq l_n < \infty$  con una distribución de probabilidad dada por

$$p(l_n) = \frac{1}{l} e^{-l_n/l}$$

donde  $l$  es el espacio promedio entre potenciales.

## 2.2. Modelo de Anderson unidimensional

En un trabajo pionero de los años '50 del siglo pasado [2], P. W. Anderson mostró que en muestras desordenadas tridimensionales se produce localización de *todos* los estados electrónicos cuando la intensidad del desorden rebasa

un cierto umbral crítico: este fenómeno es hoy conocido como “localización de Anderson”. En muestras unidimensionales la presencia de desorden altera aun más fuertemente la estructura de los estados electrónicos respecto al caso cristalino ya que el desorden, sin importar lo débil que sea, induce la completa localización de *todos* los estados electrónicos (lo mismo ocurre en muestras desordenadas bidimensionales). La localización de los electrones repercute en las propiedades de transporte del material, que a temperatura del cero absoluto pasa de conductor a aislante.

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

Es importante subrayar que el mecanismo físico que causa la localización es la interferencia destructiva entre las ondas de probabilidad creadas por los procesos de dispersión que sufre el electrón al desplazarse en un potencial aleatorio. Los procesos de tunelaje y de interferencia destructiva compiten; la localización de Anderson se da cuando la segunda domina respecto a los primeros, mientras que el tunelaje desempeña un papel esencial en la construcción de ondas de Bloch para los electrones en un sistema cristalino.

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

$$l_{loc}^{-1} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \ln \left| \frac{\psi_{n+1}}{\psi_n} \right|. \quad (2.2)$$

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

## 2.3. Longitud de localización

Un instrumento matemático muy importante en el estudio de los sistemas desordenados 1D es representado por las matrices de transferencia [10]. Estas matrices inscriben el análisis de los estados electrónicos en el marco conceptual de la teoría de las matrices aleatorias y permiten dar una demostración de la propiedad específica de los sistemas desordenados 1D, esto es, el hecho que cualquier desorden, independientemente de su intensidad, causa la localización de *todos* los estados electrónicos.

Se muestra cómo funciona la técnica de las matrices de transferencia para el modelo de Anderson 1D definido por la ecuación de Schrödinger (2.1). Esta ecuación puede escribirse en forma matricial

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

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

$$\tilde{\mathbf{T}}_n = \begin{pmatrix} E - \epsilon_n & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

Aquí se está utilizando una definición un poco diferente de matriz de transferencia a la que se dio en el capítulo anterior, ahora la matriz de transferencia relaciona la función de onda en los sitios  $n$  y  $n - 1$  con la función de onda en los sitios  $n$  y  $n + 1$ .

Dadas las condiciones iniciales  $\psi_0$  y  $\psi_1$ , la solución de la ecuación (2.1) puede construirse por medio de un producto de matrices de transferencia

$$\begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix} = \tilde{\mathbf{T}}_n \tilde{\mathbf{T}}_{n-1} \cdots \tilde{\mathbf{T}}_1 \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_0 \end{pmatrix}. \quad (2.4)$$

En ausencia de un potencial aleatorio, esto es, si  $\epsilon_n = 0$ , la ecuación de Schrödinger (2.1) describe una partícula libre y las soluciones estacionarias que no divergen para  $n \rightarrow \pm\infty$  son superposiciones de ondas planas de la forma

$$\psi_n = Ae^{ikn} + A^*e^{-ikn}. \quad (2.5)$$

Los autovalores correspondientes de la energía son  $E = 2 \cos k$  con  $k$  real; en ausencia de potencial entonces los autovalores de la energía forman una banda de amplitud  $|E| \leq 2$ . Las soluciones (2.5) son ondas planas, esto es,

estados extendidos y, de hecho, es fácil verificar que el inverso de la longitud de localización es cero

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

En el modelo de Anderson el electrón no es libre, sino que se mueve en un potencial totalmente aleatorio. En el modelo de Anderson las energías de sitio  $\epsilon_n$  son variables aleatorias independientes con una distribución común esto implica que las matrices de transferencia (2.3) son matrices aleatorias. Debido a la relación (2.4), el análisis del comportamiento asintótico de los estados electrónicos pasa por el estudio de las propiedades de la matriz producto

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

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

Estas propiedades pueden analizarse por medio del teorema de Furstenberg [12] que, *grosso modo*, representa una generalización de la ley de los grandes números al caso de variables aleatorias que no conmuten entre si.

Sin profundizar demasiado, nos limitamos a enunciar el teorema de Furstenberg. Supongamos que  $\mu$  sea una distribución de probabilidad,  $\mathbf{X}_n$  matrices con entradas aleatorias y  $x$  un vector, entonces el teorema de Furstenberg afirma que

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

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

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

Consecuentemente, debido a la positividad del parámetro  $\gamma$ , resulta demostrado que las soluciones  $\psi_n$  de la ecuación de Schrödinger (2.1) crecen exponencialmente para casi cualquier condición inicial  $(\psi_0, \psi_1)$ .

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

El teorema de Furstenberg permite entonces demostrar que las soluciones de la ecuación de Schrödinger (2.1) crecen exponencialmente; sin embargo esto no es suficiente para concluir que todos los estados del sistema desordenado (2.1) sean exponencialmente localizados, esto es, que la envolvente de la función de onda decrezca exponencialmente tanto a la derecha cuanto a la izquierda de algún sitio central de la red. Un autoestado del hamiltoniano, en efecto, además de ser una solución de la ecuación (2.1) debe satisfacer algunas condiciones de frontera que producen generalmente la cuantización de los valores de la energía.

En el razonamiento precedente, sin embargo, hemos considerado la energía como un parámetro libre, aunque en realidad depende, a través de las condiciones de frontera, de la realización específica del potencial aleatorio. Por esta razón, si se construyen con las matrices de transferencia dos soluciones  $\psi^{(1)}$  e  $\psi^{(2)}$  de la ecuación (2.1) que corresponden al mismo valor de la energía pero satisfacen condiciones de frontera especulares definidas respectivamente a las extremidades izquierda y derecha de la red, resulta que cuando  $n$  aumenta  $\psi^{(1)}$  crece exponencialmente mientras  $\psi^{(2)}$  decrece exponencialmente, sin que sea posible embonar las dos soluciones.

Sin embargo, es razonable pensar que para ciertos valores particulares de la energía, que corresponden a los autoestados del sistema, sea posible conectar la solución derecha con la izquierda. Esta suposición representa la *CONJETURA de Borland* [13]: Esta conjetura establece una conexión entre crecimiento exponencial de las soluciones y la localización de las mismas y vuelve posible identificar el inverso de la tasa de crecimiento  $\gamma$  con la longitud de localización. Borland llegó a esta conjetura analizando las fases  $\epsilon_i$  de la solución de la ecuación de Schrödinger de la siguiente forma: Si se define la fase reducida de una solución real de la ecuación de Schrödinger como el valor principal del  $\arctan(\psi'/k\psi)$  y  $\epsilon_i$  como la fase reducida en el punto  $x_i$  inmediatamente antes del  $i$ -ésimo potencial, entonces en la región de potencial nulo la solución de la ecuación de Schrödinger toma la forma

$$\psi = A_i \cos(k(x - x_i) + \epsilon_i) \quad (2.6)$$

donde  $x_i$  es un punto justo antes de la posición de la barrera de potencial deltiforme y  $A_i$  es la amplitud de la onda en la región de potencial nulo que está entre la  $(i-1)$ -ésima barrera y la  $i$ -ésima barrera. Esta es una solución general que además incluye las eigenfunciones.

Derivando la fase reducida Borland llegó a la siguiente relación

$$\ln \frac{A_{i+N}^2}{A_i^2} = \sum_{j=0}^{N-1} \ln f(\epsilon_{i+j}) \quad (2.7)$$

donde

$$f(\epsilon_i) = 1 - \frac{\mu}{k} \sin(2\epsilon_i 2kg) + \frac{\mu^2}{k^2} \cos^2(\epsilon_i + kg),$$

$\mu$  es la intensidad del potencial deltiforme,  $k$  y  $g$  son las longitudes de las regiones de potencial nulos a la izquierda y derecha de la barrera deltiforme respectivamente. La relación 2.7 es válida para todas las soluciones incluyendo las funciones propias. En el caso del electrón libre la función  $\ln f(\epsilon_{i+j})$  debería fluctuar alrededor de cero pero si se tienen eigenestados localizados estos números deberían tener una tendencia hacia los valores positivos en una porción de la cadena y tener una tendencia hacia los valores negativos en la restante porción de la cadena. Analizando la fase reducida Borland concluyó que hay una tendencia hacia los números positivos por lo que la solución tiene un crecimiento exponencial ya sea una eigenfunción o no.

## 2.4. Método del mapa hamiltoniano

En la sección anterior se vio que todos los estados electrónicos del modelo de Anderson están localizados pero no se calculó la longitud de localización. Con el fin de calcular la longitud de localización se introduce el método del mapa hamiltoniano [5], con este método es posible calcular  $l^{-1}$  tanto de forma analítica como numérica cuando el desorden es débil, esto es cuando  $\sqrt{\langle \epsilon_n^2 \rangle} \ll 1$ . Este método no es útil para calcular las funciones propias ni los valores propios de la ecuación de Schrödinger; cabe mencionar que en esta tesis no estamos interesados en hacer esto, lo que nos interesa es estudiar el crecimiento exponencial de los estados electrónicos y para esto funciona muy bien el método del mapa hamiltoniano. El método del mapa hamiltoniano se basa en la equivalencia que hay entre el modelo de Anderson (2.1) y un oscilador estocástico clásico que consiste en un oscilador que es golpeado a intervalos de tiempo constante  $T$  con una fuerza que tiene una intensidad aleatoria  $u_n$  (no se considera ningún tipo de correlación, las correlaciones se consideran en el siguiente capítulo). El hamiltoniano de este oscilador está dado por

$$H = w \left( \frac{p^2}{2} + \frac{x^2}{2} \right) + \frac{x^2}{2} U(t) \quad (2.8)$$

donde

$$U(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} u_n \delta(t - nT).$$

Para mostrar la equivalencia que hay entre el modelo de Anderson (2.1) y un oscilador estocástico dado por (2.8) se integran las ecuaciones de Hamilton (que se obtienen del hamiltoniano (2.8)) justo antes del n-esimo golpe hasta justo antes del (n+1)-esimo golpe. El mapa hamiltoniano que se obtiene es

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n \cos(wT) + (p_n - u_n x_n) \sin(wT) \\ p_{n+1} &= -x_n \sin(wT) + (p_n - u_n x_n) \cos(wT) \end{aligned} \quad (2.9)$$

donde  $x_n$  y  $p_n$  es la posición y el momento justamente antes el n-esimo golpe. Eliminando los momentos de la ecuación anterior se tiene que

$$x_{n+1} + x_{n-1} + x_n u_n \sin(wT) = 2x_n \cos(wT).$$

Esta ecuación tiene la misma forma que la ecuación (2.1) en donde se identifica la función de onda  $\psi_n$  del modelo de Anderson con la posición del oscilador  $x_n$ , además los parámetros del modelo de Anderson que son la energía del electrón  $E$  y las energías de sitio  $\epsilon_n$  se relacionan con los parámetros del oscilador de la siguiente forma

$$E = 2 \cos(wT), \quad (2.10)$$

$$\epsilon_n = u_n \sin(wT). \quad (2.11)$$

La ecuación (2.10) nos dice que la energía del electrón  $E$  está relacionada con el ángulo de rotación  $wT$  que el oscilador realiza en el espacio fase entre dos golpes consecutivos. Mientras que la ecuación (2.11) vincula las energías de sitios  $\epsilon_n$  con la aleatoriedad en la intensidad de la fuerza de los golpes  $u_n$ .

A continuación se pasa de las coordenadas cartesianas  $(x_n, p_n)$  a las coordenadas acción-ángulo  $(J_n, \theta_n)$  definidas por la siguiente transformación

$$\begin{aligned} x_n &= \sqrt{2J_n} \sin(\theta_n) \\ p_n &= \sqrt{2J_n} \cos(\theta_n). \end{aligned}$$

En función de estas variables el mapa (2.9) se puede escribir como

$$\begin{aligned}\cos(\theta_{n+1}) &= D_n^{-1}(\cos(\theta_n - wt) + u_n \sin(\theta_n) \cos(wT)) \\ \sin(\theta_{n+1}) &= D_n^{-1}(\sin(\theta_n - wt) - u_n \sin(\theta_n) \sin(wT))\end{aligned}\quad (2.12)$$

donde  $D_n^2 = J_{n+1}/J_n$ .

A continuación se calcula el exponente de Lyapunov, esto es porque calcular el exponente de Lyapunov del oscilador estocástico es equivalente a calcular el crecimiento exponencial de la solución (2.6) que a su vez es el mismo crecimiento que tienen las eigenfunciones del modelo de Anderson. En términos de las variables acción-ángulo la longitud de localización (2.2) toma la forma

$$l^{-1} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \ln \sqrt{\frac{J_{n+1}}{J_n}} + \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \ln \left| \frac{\sin(\theta_{n+1})}{\sin(\theta_n)} \right|.$$

En general el segundo término del miembro derecho es despreciable respecto al primer término, esto se debe a que la variable de acción  $J_n$  crece exponencialmente mientras que el cociente de los senos no lo hace y como es una cantidad acotada entonces al dividirla por  $N$  y hacer el límite  $N \rightarrow \infty$  se hace cero. Sólo es necesario considerar el segundo término en un entorno del borde de la banda de energía, esto se debe a que la localización exhibe un comportamiento anómalo en el borde. En este capítulo no se van a considerar los casos anómalos eso se hace en el capítulo 5 y es para el modelo de Kronig-Penney aperiódico; por lo tanto la longitud de localización se expresa simplemente como

$$l^{-1} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \ln D_n = \langle \ln D_n \rangle. \quad (2.13)$$

Despejando  $D_n$  de (2.12), sustituyendolo en (2.13) y desarrollando el logaritmo al segundo orden en  $u_n$  se tiene que

$$l^{-1} = \frac{w^2 \langle u_n^2 \rangle}{8} - \frac{w}{2} \langle u_n \sin(2\theta_n) \rangle - \frac{w^2}{4} \langle u_n^2 \cos(2\theta_n) \rangle + \frac{w^2}{8} \langle u_n^2 \cos(4\theta_n) \rangle. \quad (2.14)$$

Debido a que se considera desorden débil, entonces en la aproximación a segundo orden en  $u_n$ , los últimos dos términos de (2.14) se pueden escribir como

$$\frac{w^2}{4} \langle u_n^2 \cos(2\theta_n) \rangle = \frac{w^2}{4} \langle u_n^2 \rangle \langle \cos(2\theta_n) \rangle$$

y

$$\frac{w^2}{8} \langle u_n^2 \cos(4\theta_n) \rangle = \frac{w^2}{8} \langle u_n^2 \rangle \langle \cos(4\theta_n) \rangle.$$

Para hacer el promedio de estas funciones trigonométricas es necesario encontrar la distribución invariante de la variable angular. Para esto despejamos  $\theta_n$  de (2.12) obteniendose

$$\theta_{n+1} = \theta_n + wT + wu_n \sin^2(\theta_n) + u_n^2 \sin^3(\theta_n) \cos(\theta_n).$$

Al evolucionar este mapa,  $\theta_n$  toma uniformemente valores en el intervalo  $(0, 2\pi)$  por lo que la variable angular tiene una medida invariante uniforme (esto se explica con detalle en el capítulo 3 sección 3.2 )

$$\rho(\theta) = \begin{cases} \frac{1}{2\pi} & \text{Si } \theta \in (0, 2\pi) \\ 0 & \text{Otro caso .} \end{cases} \quad (2.15)$$

Por lo tanto al calcular los promedios  $\langle \cos(2\theta_n) \rangle$  y  $\langle \cos(4\theta_n) \rangle$  con la medida invariante (2.15) se anulan. Finalmente el correlador ruido-ángulo  $\langle u_n \sin(2\theta_n) \rangle$  también se anula debido a que no hay correlación en el desorden, esto se ve con mas detalle en el siguiente capítulo.

Entonces la longitud de localización de los estados electrónicos para el modelo de Anderson es

$$l^{-1} = \frac{\langle \epsilon_n^2 \rangle}{8 \left[ 1 - \left( \frac{E}{2} \right)^2 \right]}. \quad (2.16)$$

Esta ecuación describe correctamente la longitud de localización para todos los valores de la energía que están en el intervalo abierto  $(-2, 2)$ , excepto en  $E = 0$  donde el valor de la longitud de localización es mayor que el predicho por (2.16). Esta desviación se debe a un efecto de resonancia que produce una ligera modulación en la medida invariante. Este caso se analizará con mas detalle en el capítulo 5 para el modelo de Kronig-Penney aperiódico.

## Capítulo 3

# Longitud de localización en el modelo de Kronig-Penney aperiódico

Consideramos el modelo de Kronig-Penney con desorden compositivo y estructural correlacionado. El desorden compositivo se introduce asumiendo que la intensidad de las barreras presentan fluctuaciones  $u_n$  alrededor del campo medio  $U$ . El desorden estructural está presente debido a que las posiciones de las barreras están desplazadas por una cantidad aleatoria  $a_n$  respecto a los sitios de la red  $na$ , donde  $n$  es un número entero y  $a$  es la constante de la red. Estamos únicamente interesados en el caso de desorden débil ya que en el caso general no se puede encontrar una expresión analítica para la longitud de localización de los estados electrónicos.

El modelo de Kronig-Penney con desorden está definido por la siguiente ecuación de Schrödinger

$$-\psi''(x) + \sum_{n=-\infty}^{\infty} (U + u_n) \delta(x - na - a_n) \psi(x) = q^2 \psi(x) \quad (3.1)$$

que describe el movimiento de un electrón con energía  $q^2$  en un potencial formado por una sucesión de barreras deltiformes con intensidades y posiciones aleatorias donde  $\psi$  es la función de onda del electrón y se han usado unidades en las cuales  $\hbar^2/2m = 1$ , donde  $m$  es la masa del electrón y  $\hbar$  es la constante de Planck dividida por  $2\pi$ .

Para un sistema estocástico no es suficiente con conocer las ecuaciones

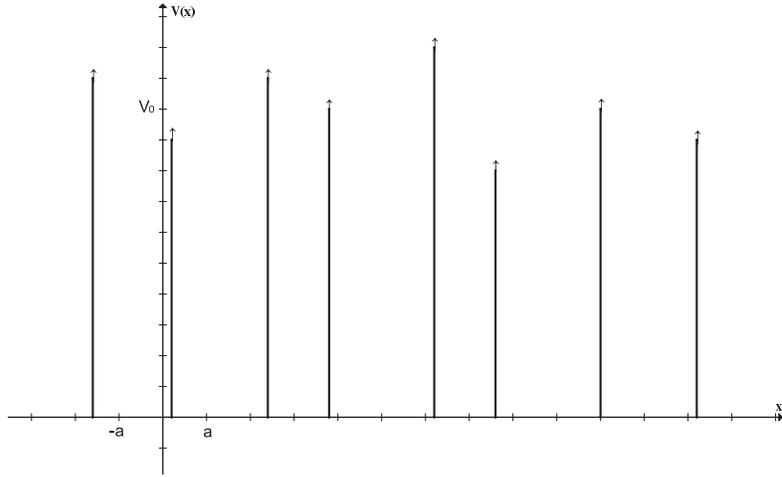


Figura 3.1: El modelo de Kronig-Penney desordenado está formado por una sucesión infinita de barreras deltiformes las cuales están en posiciones aleatorias y sus intensidades también son aleatorias.

diferenciales del modelo o el hamiltoniano del sistema, también es necesario conocer las propiedades estadísticas del desorden, esto significa que se debe dar la distribución de probabilidad de las variables aleatorias o, lo que es equivalente, dar todos los momentos de la distribución. Debido a que estamos considerando el caso de desorden débil (esto es que los momentos segundos de las variables aleatorias  $u_n$  y  $\Delta_n$  sean mucho menores que 1) es suficiente considerar los primeros dos momentos de la distribución. Antes de continuar es útil definir el desplazamiento relativo de las barreras  $\Delta_n = a_{n+1} - a_n$ , este desplazamiento relativo  $\Delta_n$  es más conveniente para los cálculos que el desplazamiento absoluto  $a_n$  de las barreras mismas. Las propiedades estadísticas del desorden para el modelo de Kronig-Penney desordenado (3.1) son

$$\langle u_n \rangle = 0, \quad \langle a_n \rangle = 0 \quad (3.2)$$

$$\sqrt{\langle u_n^2 \rangle} \ll U, \quad \sqrt{\langle a_n^2 \rangle} \ll a \quad (3.3)$$

$$\sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle} q \ll 1, \quad \sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle} U \ll 1 \quad (3.4)$$

donde  $\langle X \rangle$  significa el promedio de la variable aleatoria  $X$ . Las ecuacio-

nes (3.2) nos dicen que las fluctuaciones en la intensidad del potencial y las fluctuaciones en la posición de las barreras deltiformes tienen promedio nulo; las ecuaciones (3.3) son la condición de desorden débil y lo que nos dicen es que el desorden compositivo se considera débil si su intensidad es mucho menor que el valor del campo medio  $U$ , por otro lado el desorden estructural se le considera débil si la intensidad de este desorden es mucho menor que la constante de red  $a$ , o sea que las barreras de potencial sólo se desplazan un poco de las posiciones de una red periódica. Dado que  $q = \sqrt{E}$  estos desarrollos únicamente son válidos para bajas energías.

Finalmente, se suponen conocidos los correladores binarios  $\chi_i(k)$  a los cuales no se les atribuye una forma específica; sólo se supone que los correladores son funciones decrecientes de la diferencia de los índices y que  $\chi_1$  y  $\chi_2$  son funciones pares.

$$\begin{aligned}\chi_1(k) &= \frac{\langle u_n u_{n+k} \rangle}{\langle u_n^2 \rangle} \\ \chi_2(k) &= \frac{\langle \Delta_n \Delta_{n+k} \rangle}{\langle \Delta_n^2 \rangle} \\ \chi_3(k) &= \frac{\langle u_n \Delta_{n+k} \rangle}{\langle u_n \Delta_n \rangle}.\end{aligned}$$

Como ya se mencionó, para el caso de desorden débil que aquí se discute no es necesario especificar ulteriormente las propiedades para  $u_n$  y  $\Delta_n$  debido a que los promedios y los correladores binarios de las variables aleatorias resultan suficientes para definir las propiedades estadísticas del modelo; esto no se debe a que se esté asumiendo que el desorden sea de tipo gaussiano, sino porque el desorden es débil. Por último, para estudiar los estados electrónicos del modelo de Kronig-Penney, resulta conveniente analizar este sistema en términos de un oscilador estocástico como se ve en la siguiente sección; esto permite obtener una expresión analítica para la longitud de localización de los estados electrónicos.

### 3.1. Método del mapa hamiltoniano

El Método del mapa hamiltoniano es un método que sirve para calcular analíticamente el crecimiento exponencial de los estados electrónicos. Es-

te método se basa en la correspondencia que existe entre la ecuación de Schrödinger (3.1) y la ecuación de un oscilador estocástico clásico. En este enfoque los estados electrónicos del modelo de Kronig-Penney con desorden tienen su homólogo en las trayectorias del espacio fase de un oscilador clásico con frecuencia aleatoria. Esto permite estudiar la naturaleza de las funciones de onda electrónicas y las propiedades de transporte en redes desordenadas analizando la dinámica de un oscilador estocástico. La correspondencia que se establece entre modelos desordenados 1D y osciladores estocásticos abre la posibilidad de interpretar los fenómenos de localización electrónica desde un punto de vista dinámico, estableciendo un paralelo entre la localización de Anderson y la inestabilidad energética de un oscilador estocástico.

El oscilador estocástico clásico es un oscilador que es golpeado con una fuerza aleatoria  $U(t)$  a intervalos de tiempo aleatorios, el hamiltoniano para este oscilador está dado por

$$H = \frac{p^2}{2} + \frac{1}{2}[q^2 - U(t)]x^2 \quad (3.5)$$

donde

$$U(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (U + u_n)\delta(t - t_n),$$

$U$  es la fuerza promedio,  $u_n$  son las fluctuaciones en la fuerza respecto a  $U$ ,  $t$  es el tiempo,  $t_n$  es el tiempo en que el oscilador es golpeado,  $p$  es el momentum,  $x$  es la posición y  $q$  es la frecuencia. Usando el hamiltoniano (3.5) podemos encontrar las ecuaciones de Hamilton para el oscilador estocástico que están dadas por

$$\begin{aligned} \dot{x} &= p \\ \dot{p} &= -[q^2 - U(t)]x. \end{aligned}$$

Eliminando el momento de estas ecuaciones nos queda una ecuación en términos únicamente de la posición

$$\ddot{x} + \left[ q^2 - \sum_{n=-\infty}^{\infty} (U + u_n)\delta(t - t_n) \right] x = 0.$$

Esta es la ecuación dinámica de un oscilador estocástico clásico la cual tiene la misma forma que la ecuación de Schrödinger (3.1). La analogía matemática

entre la ecuación de Schrödinger para los estados electrónicos y la ecuación dinámica para el oscilador estocástico se aprovecha para analizar el comportamiento espacial de los estados electrónicos del modelo de Kronig-Penney en términos de la evolución temporal del oscilador pateado. En este enfoque los estados electrónicos extendidos corresponden a órbitas acotadas del oscilador, mientras que los estados electrónicos localizados corresponden a órbitas no acotadas y el exponente de Lyapunov  $\lambda$  de las trayectorias del oscilador corresponde a la longitud de localización inversa  $l^{-1}$  de los estados electrónicos.

Con el fin de obtener una ecuación para la longitud de localización se integran las ecuaciones de Hamilton en el intervalo  $(t_n^-, t_{n+1}^-)$ , donde  $t_n^-$  es el instante de tiempo justamente antes del n-esimo golpe, obteniendose así el siguiente mapa hamiltoniano

$$\begin{pmatrix} x_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} = \mathbf{T}_n \begin{pmatrix} x_n \\ p_n \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

donde  $x_n$  y  $p_n$  son la posición y el momento respectivamente justo antes del n-esimo golpe.  $\mathbf{T}_n$  es la matriz de tranferencia y está dada por:

$$\mathbf{T}_n = \begin{pmatrix} \cos [q(a + \Delta_n)] + (U + u_n) \frac{1}{q} \sin [q(a + \Delta_n)] & \frac{1}{q} \sin [q(a + \Delta_n)] \\ -q \sin [q(a + \Delta_n)] + (U + u_n) \cos [q(a + \Delta_n)] & \cos [q(a + \Delta_n)] \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

Debido a la correspondencia que hay entre la posición  $x_n$  en el modelo del oscilador estocástico con la amplitud de probabilidad  $\psi_n$  en el modelo de Kronig-Penney desordenado (además está la correspondencia entre  $p_n$  y  $\psi'_n$ ), el mapa hamiltoniano (3.6) en términos de la función de onda se puede escribir como

$$\begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi'_{n+1} \end{pmatrix} = \mathbf{T}_n \begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi'_n \end{pmatrix}$$

eliminando las  $\psi'_m$  se obtiene una ecuación equivalente en la que únicamente aparece la variable  $\psi_n$

$$\frac{1}{\sin[q(a + \Delta_n)]} \psi_{n+1} + \frac{1}{\sin[q(a + \Delta_{n-1})]} \psi_{n-1} = \left[ \cot[q(a + \Delta_n)] + \cot[q(a + \Delta_{n-1})] + \frac{U + u_n}{q} \right] \psi_n \quad (3.8)$$

esta ecuación muestra que se puede poner en correspondencia el oscilador estocástico clásico con un modelo de enlace fuerte con desorden tanto en la diagonal principal como fuera de ella. La intensidad aleatoria del potencial se traduce en desorden diagonal mientras que las posiciones aleatorias de las barreras deltiformes generan el desorden fuera de la diagonal principal.

Como se dijo anteriormente, sólo estamos interesados en el caso de desorden débil, haciendo uso de la condición  $\sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle} q \ll 1$  se desarrolla la matriz de transferencia (3.7) a segundo orden en  $u_n$  y  $\Delta_n$

$$\begin{pmatrix} x_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} = [\mathbf{T}_n^{(0)} + \mathbf{T}_n^{(1)} + \mathbf{T}_n^{(2)} + o(\langle u_n^2 \rangle, \langle \Delta_n^2 \rangle)] \begin{pmatrix} x_n \\ p_n \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

donde el término a orden cero es

$$\mathbf{T}_n^{(0)} = \begin{pmatrix} \cos(qa) + U \frac{\sin(qa)}{q} & \frac{\sin(qa)}{q} \\ -q \sin(qa) + U \cos(qa) & \cos(qa) \end{pmatrix},$$

el término a primer orden es

$$\mathbf{T}_n^{(1)} = \begin{pmatrix} [-q \sin(qa) + U \cos(qa)] \Delta_n + \frac{\sin(qa)}{q} u_n & \cos(qa) \Delta_n \\ -[q \cos(qa) + U \sin(qa) q \Delta_n + \cos(qa) u_n] & -\sin(qa) q \Delta_n \end{pmatrix},$$

y el término a segundo orden es

$$\mathbf{T}_n^{(2)} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} q [q \cos(qa) + U \sin(qa)] \Delta_n^2 + \cos(qa) u_n \Delta_n & -\frac{1}{2} q \sin(qa) \Delta_n^2 \\ \frac{1}{2} q^2 [q \sin(qa) - U \cos(qa)] \Delta_n^2 - q \sin(qa) u_n \Delta_n & -\frac{1}{2} q^2 \cos(qa) \Delta_n^2 \end{pmatrix}.$$

Para analizar el comportamiento de las soluciones del mapa hamiltoniano (3.9) es conveniente efectuar una transformación canónica  $(x_n, p_n) \rightarrow (X_n, P_n)$  tal que en las nuevas variables el movimiento sin perturbaciones del oscilador en el espacio fase se reduzca a una rotación. La transformación canónica que cumple con lo anterior es la siguiente:

$$\begin{pmatrix} x_n \\ p_n \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} X_n \\ P_n \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

donde

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \alpha \cos\left(\frac{qa}{2}\right) & \frac{1}{q\alpha} \sin\left(\frac{qa}{2}\right) \\ -q\alpha \sin\left(\frac{qa}{2}\right) & \frac{1}{\alpha} \cos\left(\frac{qa}{2}\right) \end{pmatrix}$$

donde el parámetro  $\alpha$  se define como

$$q^2\alpha^4 = \frac{\sin(qa) - \frac{U}{2q} [\cos(qa) - 1]}{\sin(qa) - \frac{U}{2q} [\cos(qa) + 1]}.$$

En las nuevas variables  $(X_n, P_n)$  el mapa hamiltoniano (3.9) ahora se puede escribir como:

$$\begin{pmatrix} X_{n+1} \\ P_{n+1} \end{pmatrix} = \mathbf{M}^{-1} [\mathbf{T}_n^{(0)} + \mathbf{T}_n^{(1)} + \mathbf{T}_n^{(2)} + o(\sigma^2)] \mathbf{M} \begin{pmatrix} X_n \\ P_n \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

en donde el término a orden cero es una rotación

$$\mathbf{M}^{-1} \mathbf{T}_n^{(0)} \mathbf{M} = \begin{pmatrix} \cos(ka) & \sin(ka) \\ -\sin(ka) & \cos(ka) \end{pmatrix}$$

y el ángulo de rotación  $ka$  está definido como

$$\cos(ka) = \cos(qa) + \frac{U}{2q} \sin(qa) \quad (3.12)$$

$$\sin(ka) = \pm \sqrt{\left( \sin(qa) - \frac{U}{2q} [\cos(qa) + 1] \right) \left( \sin(qa) - \frac{U}{2q} [\cos(qa) - 1] \right)}$$

La ecuación (3.12) permite indentificar  $k$  con el vector de Bloch.

Para analizar la evolución del sistema dinámico (3.11) se pasa de las coordenadas  $(X_n, P_n)$  a las coordenadas acción-ángulo  $(J_n, \theta_n)$  definidas por la transformación

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

En términos de las variables acción-ángulo el mapa hamiltoniano (3.11) toma la forma

$$\begin{aligned}
\sin(\theta_{n+1}) &= \frac{1}{D_n} \left[ \left[ 1 + \frac{U [1 + \cos(ka)] + 2\alpha^{-2} \sin(ka)}{4q^2 + U^2} u_n - \frac{1}{2} q^2 \Delta_n^2 \right. \right. \\
&+ \left. \frac{2q^2 [1 + \cos(ka)] - \alpha^{-2} U \sin(ka)}{4q^2 + U^2} u_n \Delta_n \right] \sin(\theta_n + ka) \\
&+ \left[ \frac{\Delta_n}{\alpha^2} - \frac{2\alpha^{-2} [1 - \cos(ka)] + U \sin(ka)}{4q^2 + U^2} u_n \right. \\
&+ \left. \frac{\alpha^{-2} U [1 - \cos(ka)] - 2q^2 \sin(ka)}{4q^2 + U^2} u_n \Delta_n \right] \cos(\theta_n + ka) \Big] \\
\cos(\theta_{n+1}) &= \frac{1}{D_n} \left[ \left[ 1 + \frac{U [1 - \cos(ka)] - 2\alpha^2 q^2 \sin(ka)}{4q^2 + U^2} u_n - \frac{1}{2} q^2 \Delta_n^2 \right. \right. \\
&+ \left. \frac{2q^2 [1 - \cos(ka)] + \alpha^2 q^2 U \sin(ka)}{4q^2 + U^2} u_n \Delta_n \right] \cos(\theta_n + ka) \\
&- \left[ \Delta_n q^2 \alpha^2 + \frac{-2\alpha^2 q^2 [1 + \cos(ka)] + U \sin(ka)}{4q^2 + U^2} u_n \right. \\
&+ \left. \frac{\alpha^2 U [1 + \cos(ka)] + 2 \sin(ka)}{4q^2 + U^2} q^2 u_n \Delta_n \right] \sin(\theta_n + ka) \Big] \tag{3.13}
\end{aligned}$$

en donde se ha definido  $D_n^2 = J_{n+1}/J_n$  como la razón de la variable de acción en el paso  $n+1$  y el paso  $n$ . Usando las ecuaciones para  $\sin(\theta_{n+1})$  y  $\cos(\theta_{n+1})$  se escribe  $D_n^2$  en aproximación al segundo orden. Haciendo uso de la condición  $\sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle} U \ll 1$  se puede cortar el desarrollo de  $D_n^2$  al segundo orden y obtener

$$\begin{aligned}
D_n^2 &= 1 - \frac{U}{\sin(ka)} \sin(2\theta_n + 2ka) \Delta_n + \frac{\sin(qa)}{q \sin(ka)} \sin(2\theta_n + ka) u_n \\
&+ \frac{U}{2 \sin(ka)} \left[ \frac{U}{\sin(ka)} - q \left( \frac{1}{q\alpha^2} + q\alpha^2 \right) \cos(2\theta_n + 2ka) \right] \Delta_n^2 \\
&+ 2 \left( \frac{\sin(qa)}{2q \sin(ka)} \right)^2 [1 - \cos(2\theta_n + ka)] u_n^2 \\
&- \frac{U \sin(qa)}{q \sin^2(ka)} [\cos(ka) - \cos(2\theta_n + 2ka)] u_n \Delta_n. \tag{3.14}
\end{aligned}$$

Es importante notar que la variable angular evoluciona independientemente de la variable de acción; esto es de mucha ayuda como se ve más adelante

en este capítulo ya que solo es necesario conocer la distribución de probabilidad para la variable angular y no se necesita la distribución de la variable de acción. Para ver más fácilmente que la variable angular evoluciona independientemente de la variable de acción se despeja  $\theta_{n+1}$  de las ecuaciones (3.13)

$$\begin{aligned}
\theta_{n+1} &= \theta_n + ka + \frac{1}{2} \left[ q \left( \frac{1}{q\alpha^2} + q\alpha^2 \right) - \frac{U}{\sin(ka)} \cos(2\theta_n + 2ka) \right] \Delta_n \\
&- \frac{\sin(qa)}{2q \sin(ka)} [1 - \cos(2\theta_n + ka)] u_n \\
&+ \frac{U}{4 \sin(ka)} \left[ q \left( \frac{1}{q\alpha^2} + q\alpha^2 \right) \sin(2\theta_n + ka) - \frac{U}{2 \sin(ka)} \sin(4\theta_n + 4ka) \right] \Delta_n^2 \\
&+ \left( \frac{\sin(qa)}{2q \sin(ka)} \right)^2 \left[ \sin(2\theta_n + ka) - \frac{1}{2} \sin(4\theta_n + 2ka) \right] u_n^2 \\
&+ \frac{U \sin(qa)}{2q \sin^2(ka)} \left[ \frac{\sin(ka)}{2} - \sin(2\theta_n + 2ka) + \frac{\sin(4\theta_n + 3ka)}{2} \right] u_n \Delta_n
\end{aligned} \tag{3.15}$$

esta ecuación tiene la forma  $\theta_{n+1} = \theta_n + ka + G(q, k, u_n, \Delta_n)$  donde la función  $G$  no contiene en lo absoluto la variable de acción  $J_n$ , esto dice que la variable angular  $\theta_n$  evoluciona independientemente de la variable de acción  $J_n$ . La importancia de esto radica en que, como se ve en la siguiente sección, el cociente  $J_{n+1}/J_n$  únicamente depende de la variable angular y dado que se necesita obtener el promedio de  $\ln(J_{n+1}/J_n)$  sólo es necesario conocer la distribución de la variable angular.

Sea  $\vec{x}$  coordenadas tales que  $\{x_1, x_2, \dots, x_N\}$  representan la posición y  $\{x_{N+1}, x_{N+2}, \dots, x_{2N}\}$  representan los momentos. En los sistemas dinámicos si se toman dos trayectorias cercanas  $\vec{x}$  y  $\vec{y} = \vec{x} + \delta\vec{x}$  tales que evolucionan como

$$\dot{\vec{x}} = \vec{F}(\vec{x}),$$

entonces la evolución de  $\delta\vec{x}$  está dada por

$$\delta\dot{\vec{x}} = \mathbf{M}(\vec{x})\delta\vec{x} \tag{3.16}$$

donde  $\mathbf{M}$  es la matriz

$$\mathbf{M} = \frac{\partial \vec{F}}{\partial \vec{x}}$$

ó

$$(\mathbf{M})_{i,j} = \frac{\partial F_i}{\partial x_j}$$

De las ecuaciones (3.14), (3.15) y (3.16) se deriva el mapa para el espacio tangente en la aproximación a segundo orden

$$\begin{pmatrix} \delta J_{n+1} \\ \delta \theta_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D_n^2 & 0 \\ 0 & 1/D_n^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta J_n \\ \delta \theta_n \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

esta ecuación muestra que el mapa hamiltoniano en coordenadas acción-ángulo conserva el volumen del espacio fase como debe ser en el caso de un sistema hamiltoniano; además el mapa (3.17) muestra que la variable de acción crece exponencialmente mientras que la variable angular decrece exponencialmente.

## 3.2. Longitud de localización

En esta sección se calcula la longitud de localización inversa de los estados electrónicos para el modelo de Kronig-Penney desordenado. La longitud de localización  $l$  es un parámetro que da una medida de qué tan grande es la región en donde el electrón queda confinado y al mismo tiempo permite distinguir entre un estado electrónico exponencialmente localizado y uno extendido, para un estado localizado la longitud  $l$  es finita mientras que para un estado extendido la longitud de localización es infinita. Se verá que cuando el desorden no está correlacionado  $l$  siempre toma un valor mayor a cero o sea que todos los estados electrónicos están localizados mientras que al tomar en cuenta correlaciones de largo alcance se generan bordes de movilidad además de que se puede aumentar o disminuir la longitud de localización si se manipula la correlación entre el desorden compositivo y el estructural.

La longitud de localización inversa se calcula de la siguiente manera

$$l^{-1} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{Na} \sum_{n=1}^N \ln \left| \frac{\psi_{n+1}}{\psi_n} \right|$$

la cual en términos del oscilador estocástico es equivalente al exponente de Lyapunov  $\lambda$

$$\lambda = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{Na} \sum_{n=1}^{\infty} \ln \left| \frac{x_{n+1}}{x_n} \right| = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{Na} \sum_{n=1}^{\infty} \ln(D_n) + \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{Na} \sum_{n=1}^{\infty} \ln(R_n) \quad (3.18)$$

donde

$$R_n = \left| \frac{\sqrt{\xi + 1}[1 + \cos(qa)] \sin(\theta_{n+1}) + \sqrt{\xi - 1} \sin(qa) \cos(\theta_{n+1})}{\sqrt{\xi + 1}[1 + \cos(qa)] \sin(\theta_n) + \sqrt{\xi - 1} \sin(qa) \cos(\theta_n)} \right|.$$

Como se discute en seguida, en el caso de desorden débil, la distribución de probabilidad para la variable angular es plana excepto para valores que son múltiplos racionales de  $k = \pi/a$  para los cuales la distribución es ligeramente modulada. La situación es diferente en el borde de la banda donde la distribución de probabilidad tiene una modulación muy fuerte. Es de esperarse que  $R_n$  oscile alrededor de 1 a diferencia de  $D_n$  que es mucho mayor que 1 debido al crecimiento exponencial de la variable de acción. Por lo tanto, lejos de los bordes de la banda el segundo término del lado derecho de (3.18) se puede despreciar por lo que la longitud de localización inversa se puede calcular de la siguiente forma

$$l^{-1} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{2Na} \sum_{n=1}^{\infty} \ln \left( \frac{J_{n+1}}{J_n} \right) = \frac{1}{2a} \langle \ln(D_n^2) \rangle. \quad (3.19)$$

Aquí se ha asumido que el sistema tiene la propiedad de ergodicidad, osea que se puede intercambiar el promedio en el tiempo

$$\bar{x}_n = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N x_n$$

por el promedio en el colectivo

$$\langle x_n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x_n) x_n dx_n$$

donde  $\rho(x)$  es la densidad de probabilidad de la variable aleatoria  $x$ .

Para calcular la longitud de localización inversa se obtiene el logaritmo natural de la ecuación (3.14) y se desarrolla a segundo orden en  $u_n$  y  $\Delta_n$

$$\begin{aligned}
\ln(D_n^2) &= -\frac{U}{\sin(ka)} \sin(2\theta_n + 2ka) \Delta_n + \frac{\sin(qa)}{q \sin(ka)} \sin(2\theta_n + ka) u_n \\
&+ \frac{U}{2 \sin(ka)} \left[ \frac{U}{2 \sin(ka)} - q \left( \frac{1}{q\alpha^2 + q\alpha^2} \right) \cos(2\theta_n + 2ka) \right. \\
&+ \left. \frac{U}{2 \sin(ka)} \cos(4\theta_n + 4ka) \right] \Delta_n^2 \\
&+ \left( \frac{\sin(qa)}{2q \sin(ka)} \right)^2 [1 - 2 \cos(2\theta_n + ka) + \cos(4\theta_n + 2ka)] u_n^2 \\
&- \frac{U \sin(qa)}{2q \sin^2(ka)} [\cos(ka) - 2 \cos(2\theta_n + 2ka) + \cos(4\theta_n + 3ka)] u_n \Delta_n.
\end{aligned} \tag{3.20}$$

Enseguida es necesario calcular el promedio de esta ecuación y para ello se debe calcular la distribución de la variable angular. Como se vió en la ecuación (3.14) el cociente  $J_{n+1}/J_n$  sólo depende de la variable angular  $\theta_n$  por lo que sólo es necesario conocer la distribución de  $\theta_n$  para realizar el promedio de la ecuación (3.20). La distribución de la variable angular es una distribución uniforme, esto se puede ver si se elimina el desorden del mapa hamiltoniano en variables acción-ángulo

$$\begin{aligned}
J_{n+1} &= J_n \\
\theta_{n+1} &= \theta_n + ka.
\end{aligned} \tag{3.21}$$

La variable angular llena de forma densa el intervalo  $(0, 2\pi)$  mientras la variable de acción permanece constante, esto dice que la variable angular tiene una dinámica rápida (excepto cuando  $ka \rightarrow 0$ ) comparada con la variable de acción, por lo que en el caso de desorden débil es de esperarse que la variable angular tienda rápidamente a una distribución uniforme  $\rho(\theta) = 1/2\pi$ . Este razonamiento falla cuando el vector de Bloch toma los siguientes valores

$$ka = \frac{m}{n} \pi \tag{3.22}$$

donde  $m$  y  $n$  son números primos. En este caso el mapa de la variable angular sin desorden (3.21) tiene órbitas de periodo  $2n$ . Cuando se enciende el desorden, que es débil, las órbitas resultantes permanecerán alrededor de

las órbitas periódicas, por lo tanto es de esperarse que la distribución de la variable angular sea modulada para los valores del vector de Bloch dados por (3.22).

Debido a que se está considerando una aproximación a segundo orden en  $u_n$  y  $\Delta_n$  sólo es necesario considerar los casos  $ka = 0$ ,  $ka = \pi$  y  $ka = \pi/2$ . Esto se puede ver de la siguiente manera: dado que la distribución de la variable angular para los casos  $ka = m\pi/n$  es proporcional a  $\cos(2n\theta + \phi)$  y  $\sin(2n\theta + \phi)$  (donde  $\phi$  es una fase apropiada), entonces al promediar la ecuación (3.20) con la correspondiente distribución para  $ka = m\pi/n$  el promedio será nulo si  $n \geq 3$  porque la ecuación (3.20) sólo depende de funciones seno y coseno de argumento  $2\theta$  y  $4\theta$ . Para concluir, en la aproximación a segundo orden en  $u_n$  y  $\Delta_n$  la distribución de probabilidad para la variable angular es uniforme para cualquier valor del vector de Bloch  $k$  excepto para  $ka = 0$ ,  $ka = \pi/2$  y  $ka = \pi$ , en estos tres puntos la distribución es modulada; en el capítulo 5 se obtienen las distribuciones para estos puntos. A lo largo de este capítulo se supone que la distribución de la variable angular es plana. La Figura 3.2 muestra la distribución de la variable angular obtenida numéricamente que confirma las predicciones teóricas.

Promediando (3.20) la longitud de localización se escribe como

$$l^{-1} = -\frac{U}{2a \sin(ka)} \langle \Delta_n \sin(2\theta_n + 2ka) \rangle + \frac{\sin(qa)}{2qa \sin(ka)} \langle u_n \sin(2\theta_n + ka) \rangle \\ + \frac{U^2}{8a \sin^2(ka)} \langle \Delta_n^2 \rangle + \frac{\sin^2(qa)}{8aq^2 \sin^2(ka)} \langle u_n^2 \rangle - \frac{U \sin(qa) \cos(ka)}{4aq \sin^2(ka)} \langle u_n \Delta_n \rangle.$$

Por último se calculan los correladores ruido-ángulo

$$\langle \Delta_n \sin(2\theta_n + 2ka) \rangle,$$

$$\langle u_n \sin(2\theta_n + ka) \rangle.$$

Para calcular estos correladores, primero se definen los correladores  $r_k$  y  $s_k$

$$r_k = \langle u_n \exp(i2\theta_{n-k}) \rangle$$

$$s_k = \langle \Delta_n \exp(i2\theta_{n-k}) \rangle,$$

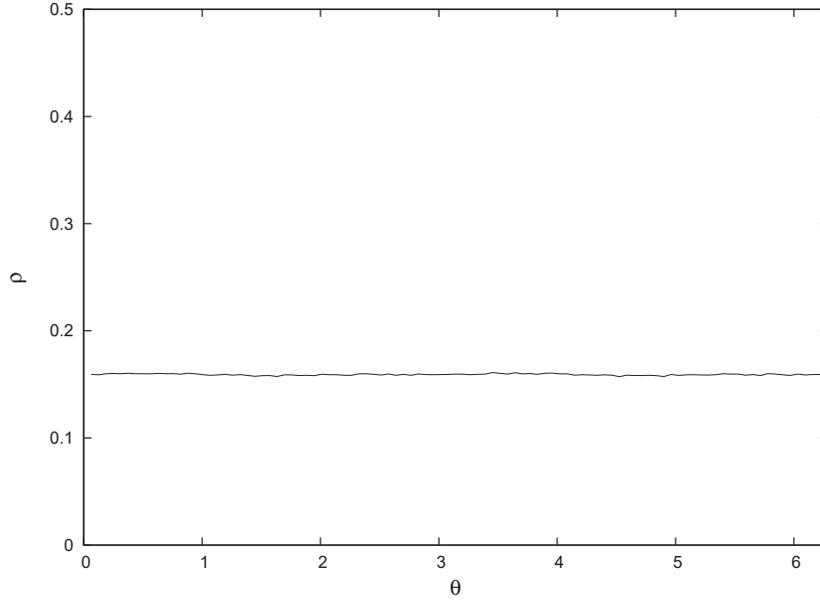


Figura 3.2: Distribución para la variable angular obtenida numéricamente.

en términos de los cuales puede escribirse

$$\langle u_n \sin(2\theta_n + ka) \rangle = \text{Im}[r_0 \exp(ika)]$$

$$\langle \Delta_n \sin(2\theta_n + 2ka) \rangle = \text{Im}[s_0 \exp(i2ka)].$$

Los correladores  $s_k$  y  $r_k$  satisfacen una relación de recurrencia que se puede encontrar sustituyendo el mapa angular (3.15) en las definiciones de  $r_k$  y  $s_k$ . Para el correlador  $r_k$  se tiene que

$$r_{k-1} = \langle u_n \exp(i2\theta_{n-k}) \exp(i2ka) \left[ 1 + i \left[ q \left( \frac{1}{q\alpha^2} + q\alpha^2 \right) - \frac{U}{\sin(ka)} \cos(2\theta_{n-k} + 2ka) \right] \Delta_{n-k} - i \frac{\sin(qa)}{q \sin(ka)} [1 - \cos(2\theta_{n-k} + ka)] u_{n-k} \right] \rangle.$$

Desarrollando a segundo orden y promediando se encuentra la relación de recurrencia de  $r_k$

$$r_{k-1} = r_k + i \frac{\sin(qa)}{2q \sin(ka)} \exp(ika) \langle u_n u_{n-k} \rangle - i \frac{U}{2 \sin(ka)} \langle u_n \Delta_{n-k} \rangle.$$

Multiplicando ambos lados de la ecuación por  $\exp(2ika(k-1))$  y sumando sobre  $k$  desde cero hasta  $\infty$ , se obtiene  $r_0$  y con esto el correlador ruido ángulo buscado

$$\begin{aligned} \langle u_n \sin(2\theta_n + ka) \rangle = \\ \frac{\sin(qa)}{2q \sin(ka)} \sum_{l=1}^{\infty} \langle u_n u_{n-l} \rangle \cos(2kal) - \frac{U}{2 \sin(ka)} \sum_{l=1}^{\infty} \langle u_n \Delta_{n-l} \rangle \cos(ka(2l-1)). \end{aligned}$$

Haciendo el mismo procedimiento para el correlador  $s_k$  obtenemos el otro correlador ruido-ángulo

$$\begin{aligned} \langle \Delta_n \sin(2\theta_n + 2ka) \rangle = \\ \frac{\sin(qa)}{2q \sin(ka)} \sum_{l=1}^{\infty} \langle u_n \Delta_{n-l} \rangle \cos(ka(2l+1)) - \frac{U}{2 \sin(ka)} \sum_{l=1}^{\infty} \langle \Delta_n \Delta_{n-l} \rangle \cos(2kal). \end{aligned}$$

Una vez calculados los correladores ruido-ángulo se obtiene la siguiente expresión para la longitud de localización inversa de los estados electrónicos

$$\begin{aligned} 8al^{-1} = & \langle u_n^2 \rangle + \langle \Delta_n^2 \rangle - 2 \langle u_n \Delta_n \rangle \cos(ka) \\ & + 2 \sum_{l=1}^{\infty} \langle u_n u_{n-l} \rangle \cos(2kal) - 2 \sum_{l=1}^{\infty} \langle u_n \Delta_{n-l} \rangle \cos[ka(2l-1)] \\ & + 2 \sum_{l=1}^{\infty} \langle \Delta_n \Delta_{n-l} \rangle \cos(2kal) - 2 \sum_{l=1}^{\infty} \langle u_{n-l} \Delta_n \rangle \cos[ka(2l+1)]. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Se obtiene finalmente la expresión para la longitud de localización de los estados electrónicos del modelo de Kronig-Penney

$$\begin{aligned} l^{-1} = & \frac{1}{8a \sin^2(ka)} \left[ \frac{\sin^2(qa)}{q^2} \langle u_n^2 \rangle W_1(k) + U^2 \langle \Delta_n^2 \rangle W_2(k) \right. \\ & \left. - 2U \frac{\sin(qa)}{q} \cos(ka) \langle u_n \Delta_n \rangle W_3(k) \right] \end{aligned} \quad (3.24)$$

donde

$$\begin{aligned}
W_1(k) &= \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{\langle u_n u_{n+l} \rangle}{\langle u_n^2 \rangle} \cos(2kal) \\
W_2(k) &= \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{\langle \Delta_n \Delta_{n+l} \rangle}{\langle \Delta_n^2 \rangle} \cos(2kal) \\
W_3(k) &= \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{\langle u_n \Delta_{n+l} \rangle}{\langle u_n \Delta_n \rangle} \cos[ka(2l + 1)].
\end{aligned}$$

La expresión (3.24) es la suma de tres términos; el primero describe el efecto del desorden puramente compositivo, el segundo muestra el efecto del desorden puramente estructural y el último representa la interacción entre los dos tipos de desorden. Además cada término es el producto de dos factores; el primer factor representa la longitud de localización cuando las variables aleatorias son independientes mientras que el segundo factor toma en cuenta la correlación del desorden. Este resultado está publicado en [25] y es una generalización del resultado publicado en [23] en donde se supone que los tres correladores binarios  $\chi_i(k)$  con  $i = 1, 2, 3$  tienen la propiedad de homogeneidad e isotropía. La ecuación (3.24) es correcta para casi todos los valores de la energía, falla únicamente cerca del centro de la banda de energía y en los bordes donde surgen efectos anómalos los cuales se discutirán en el capítulo 5.

Una forma más compacta de escribir la ecuación (3.24) es la siguiente

$$l^{-1} = \frac{1}{8a} \left[ \langle \tilde{u}_n^2 \rangle W_1(k) + U^2 \langle \tilde{\Delta}_n^2 \rangle W_2(k) - 2 \langle \tilde{u}_n \tilde{\Delta}_n \rangle W_3(k) \right]$$

donde se han introducido las variables reescaladas

$$\tilde{u}_n = \frac{\sin(qa)}{q \sin(ka)} u_n,$$

$$\tilde{\Delta}_n = \frac{U}{\sin(ka)} \Delta_n.$$

Cuando no se tienen correlaciones los correladores binarios se anulan, la densidad espectral  $W_1(k) = W_2(k) = 1$  y la ecuación (3.24) toma una forma mucho más simple

$$l^{-1} = \frac{1}{8a \sin^2(ka)} \left[ \frac{\sin^2(qa)}{q^2} \langle u_n^2 \rangle + U^2 \langle \Delta_n^2 \rangle \right]. \quad (3.25)$$

El miembro derecho de la ecuación (3.25) siempre es positivo, lo que implica es que todos los estados electrónicos están localizados.

La figura 3.3 muestra la gráfica de la ecuación (3.25), también se muestra la longitud de localización inversa obtenida numéricamente. El resultado numérico se obtiene usando dos series de números aleatorios que representan al desorden compositivo y estructural, después evolucionando el mapa para las variables acción-ángulo (3.13) junto con la definición (3.19) se encuentra la longitud de localización inversa.

### 3.3. Generación de desorden con correlaciones

En la sección anterior se obtuvo una expresión para la longitud de localización de los estados electrónicos cuando se tiene tanto desorden compositivo como estructural y se vió que, si no hay correlaciones, todos los estados electrónicos quedan localizados. En esta sección se muestra cómo generar desorden con intercorrelaciones y autocorrelaciones y se analizan los efectos que las correlaciones en el desorden tienen sobre la longitud de localización. Los resultados que se presentan en esta sección están publicados en [24].

#### 3.3.1. Desorden con intercorrelaciones

Primeramente se muestra cómo generar dos ruidos blancos intercorrelacionados. Primero se generan dos ruidos blancos independientes  $\{Y_n^{(I)}\}$  y  $\{Y_m^{(II)}\}$  con las propiedades

$$\langle Y_n^{(i)} \rangle = 0, \quad \langle (Y_n^{(i)})^2 \rangle = 1 \quad \text{y} \quad \langle Y_n^{(i)} Y_m^{(j)} \rangle = 0 \quad \forall n \neq m, i \neq j.$$

A estos ruidos blancos se les aplica una transformación lineal para generar otros dos ruidos blancos  $\{Z_n^{(I)}\}$  y  $\{Z_m^{(II)}\}$  pero intercorrelacionados

$$\begin{aligned} Z_n^{(I)} &= \cos(\eta) Y_n^{(I)} + \sin(\eta) Y_n^{(II)} \\ Z_n^{(II)} &= \sin(\eta) Y_n^{(I)} + \cos(\eta) Y_n^{(II)} \end{aligned} \quad (3.26)$$

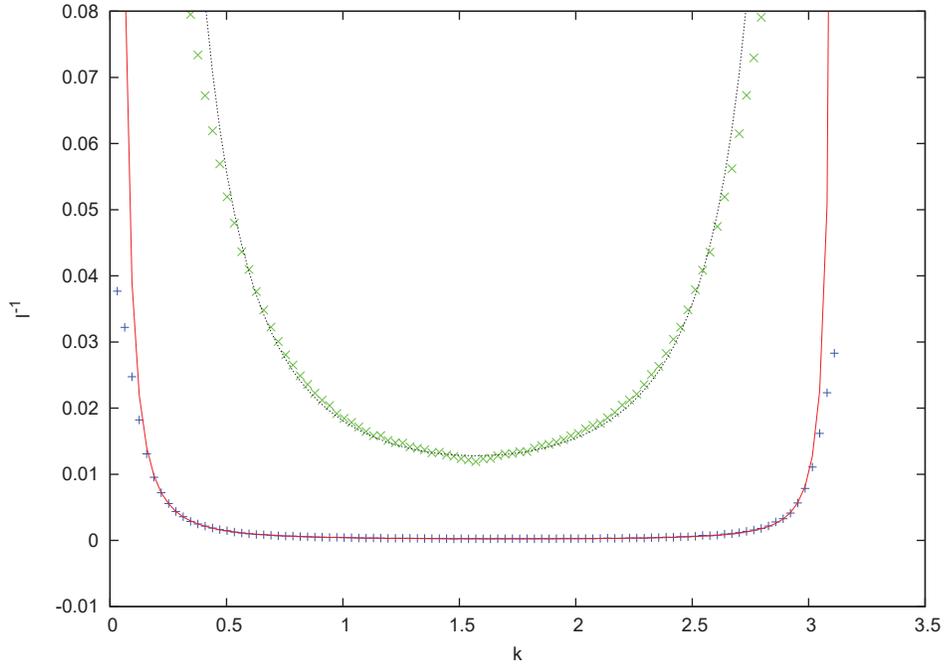


Figura 3.3: Longitud de localización inversa  $l^{-1}$  en función vector de Bloch  $k$ . La línea continua de color rojo es la gráfica que se obtuvo con la ecuación (3.25) con  $U = 1$ ,  $\sqrt{\langle u_n^2 \rangle} = 0.4$ ,  $\sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle} = 0.4$ , el resultado numérico se muestra con los símbolos (+) de color azul. La línea punteada de color negro es el resultado analítico para  $U = 8$ ,  $\sqrt{\langle u_n^2 \rangle} = 0.4$ ,  $\sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle} = 0.4$  y el resultado numérico correspondiente se muestra con ( $\times$ ). Se usaron 1000000 de números aleatorios para cada tipo de desorden.

donde el parámetro  $\eta$  toma valores en el intervalo  $[-\pi/4, \pi/4]$ .

Estos dos nuevos ruidos blancos tienen las propiedades

$$\langle Z_n^{(i)} \rangle = 0, \quad \langle (Z_n^{(i)})^2 \rangle = 1 \quad \text{y} \quad \langle Z_n^{(I)} Z_m^{(II)} \rangle = \sin(2\eta) \delta_{n,m}.$$

El parámetro  $\eta$  es una medida de la intercorrelación que hay entre los dos ruidos. En lo que sigue sólo se considerarán tres valores de  $\eta$ ,  $\eta = -\pi/4, 0, \pi/4$  y se le llamará “total intercorrelación” cuando  $\eta = \pi/4$ , “Ausencia de intercorrelación” para  $\eta = 0$  y “total anti-intercorrelación” si  $\eta = -\pi/4$ .

Finalmente los desordenes compositivo y estructural intercorrelacionados pueden ser generados multiplicando los ruidos blancos  $Z_n^{(i)}$  por las intensidades de cada desorden

$$u_n = \sqrt{\langle u_n^2 \rangle} Z_n^{(I)}$$

$$\Delta_n = \sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle} Z_n^{(II)}$$

### 3.3.2. Desorden con autocorrelaciones

En la expresión (3.24) se ve que si se conocen los correladores binarios del desorden se puede calcular  $l^{-1}(E)$ ; sin embargo, desde un punto de vista experimental esto no es lo adecuado. En un experimento o en una simulación numérica se necesitan conocer los desplazamientos  $\Delta_n$  y las fluctuaciones del potencial  $u_n$  que darán la forma funcional  $l(E)$  esperada. Esto lleva a considerar el problema inverso en la teoría de la localización que consiste en determinar el potencial aleatorio  $U + u_n$  y las posiciones  $na + a_n$  a partir de la expresión de  $l(E)$ . Osea que primero se da la forma funcional de  $l(E)$  que se quiere obtener experimentalmente para después encontrar los correladores binarios y los números aleatorios  $u_n$  y  $\Delta_n$  que producen  $l(E)$ .

Suponiendo que no hay intercorrelaciones entonces el tercer término de la ecuación (3.24) es nulo, entonces la ecuación (3.24) se reduce a

$$l^{-1}(ka) = \frac{1}{8a \sin^2(ka)} \frac{\sin^2(qa)}{q^2} [\langle u_n^2 \rangle W_1(k) + U^2 \langle \Delta_n^2 \rangle W_2(k)],$$

esto es, la suma de dos longitudes de localización inversas (suma de dos exponentes de Lyapunov) que corresponden al desorden compositivo ( $l_c$ ) y estructural ( $l_s$ ) respectivamente

$$l^{-1}(ka) = l_c^{-1}(ka) + l_s^{-1}(ka)$$

con

$$l_c^{-1}(ka) = \frac{1}{8a \sin^2(ka)} \frac{\sin^2(qa)}{q^2} \langle u_n^2 \rangle W_1(ka)$$

$$l_s^{-1}(ka) = \frac{1}{8a \sin^2(ka)} \frac{\sin^2(qa)}{q^2} U^2 \langle \Delta_n^2 \rangle W_2(ka).$$

De aquí se ve que proponer la forma de cada longitud de localización es equivalente a proponer la forma de la densidad espectral correspondiente. Despejando el correlador binario de  $W_1(k)$  se tiene que

$$\frac{\langle u_n u_{n+l} \rangle}{\langle u_n^2 \rangle} = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} W_1(k) \cos(2kal) dk.$$

$W_1(k)$  es una función conocida porque  $l(E)$  es una función dada

$$W_1(ka) = l_c^{-1}(ka) / \left( \frac{1}{8a \sin^2(ka)} \frac{\sin^2(qa)}{q^2} \langle u_n^2 \rangle \right).$$

Para generar desorden con autocorrelaciones (ruido de color), primero se generan dos ruidos blancos independientes  $\{Y_n^{(I)}\}$  y  $\{Y_n^{(II)}\}$  los cuales tienen las propiedades

$$\langle Y_n^{(i)} \rangle = 0 \quad \langle (Y_n^{(i)})^2 \rangle = 1 \quad \langle Y_n^i Y_m^j \rangle = 0.$$

Después, con un producto de convolución se genera ruido coloreado que se asocia al desorden compositivo

$$\frac{u_n}{\sqrt{\langle u_n^2 \rangle}} = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \beta_1(n) Y_{i+n}^{(I)}$$

donde

$$\beta_1(n) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} \sqrt{W_1(k)} \cos(2kan) dk. \quad (3.27)$$

Los correladores binarios del desorden estructural  $\Delta_n$  se obtienen de la misma manera

$$\frac{\langle \Delta_n \Delta_{n+l} \rangle}{\langle \Delta_n^2 \rangle} = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} W_2(k) \cos(2kal) dk.$$

Con otro producto de convolución se genera ruido coloreado que se asocia al desorden estructural

$$\frac{\Delta_n}{\sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle}} = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \beta_2(n) Y_{i+n}^{(II)}$$

donde

$$\beta_2(n) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} \sqrt{W_2(k)} \cos(2kan) dk. \quad (3.28)$$

### 3.3.3. Desorden con autocorrelaciones e intercorrelaciones

Para generar desorden con autocorrelaciones e intercorrelaciones, primero se generan dos ruidos blancos  $Z_n^{(I)}$  y  $Z_n^{(II)}$  con intercorrelaciones y después con un producto de convolución se generan dos ruidos de color

$$\frac{u_n}{\sqrt{\langle u_n^2 \rangle}} = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \beta_1(n) Z_{i+n}^{(I)}$$

$$\frac{\Delta_n}{\sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle}} = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \beta_2(n) Z_{i+n}^{(II)}$$

donde los coeficientes  $\beta_1(n)$  y  $\beta_2(n)$  quedan definidos por las ecuaciones (3.27) y (3.28). El término de intercorrelación de la longitud de localización (3.24) se puede escribir como

$$\langle u_n \Delta_n \rangle W_3(k) = \sqrt{\langle u_n^2 \rangle \langle \Delta_n^2 \rangle} W_1(k) W_2(k) \sin(2\eta)$$

por lo que la expresión (3.24) toma la forma

$$l^{-1} = \frac{1}{8a \sin^2(ka)} \left[ \frac{\sin^2(qa)}{q^2} \langle u_n^2 \rangle W_1(k) + U^2 \langle \Delta_n^2 \rangle W_2(k) - 2U \frac{\sin(qa)}{q} \cos(ka) \sqrt{\langle u_n^2 \rangle \langle \Delta_n^2 \rangle} W_1(k) W_2(k) \sin(2\eta) \right] \quad (3.29)$$

### 3.3.4. Gráficas

Para ver el efecto puramente debido a las intercorrelaciones se consideran variables  $u_n$  y  $\Delta_n$  sin autocorrelaciones, entonces la longitud de localización se reduce a la siguiente forma

$$l^{-1} = \frac{1}{8a \sin^2(ka)} \left[ \frac{\sin^2(qa)}{q^2} \langle u_n^2 \rangle + U^2 \langle \Delta_n^2 \rangle - 2U \frac{\sin(qa)}{q} \cos(ka) \sqrt{\langle u_n^2 \rangle \langle \Delta_n^2 \rangle} \sin(2\eta) \right]. \quad (3.30)$$

La Figura 3.4 muestra la gráfica de la ecuación (3.30), se aprecia que el efecto que tienen las intercorrelaciones del desorden es el de aumentar o disminuir la longitud de localización. Para el caso  $\eta = -\pi/4$  (total anti-intercorrelación),  $l^{-1}$  aumenta (respecto al caso de ausencia de intercorrelación  $\eta = 0$ ) para un electrón con un vector de Bloch en el rango  $0 < k < \pi/2$ . Esto significa que disminuye la longitud de localización por lo que el electrón queda confinado a un espacio menor del que tendría si no hubiera intercorrelación. Para  $\pi/2 < k < \pi$ ,  $l^{-1}$  disminuye por lo tanto la longitud de localización aumenta y el electrón queda confinado en un espacio mayor. Para el caso  $\eta = \pi/4$ ,  $l^{-1}$  disminuye en  $0 < k < \pi/2$  y aumenta en  $\pi/2 < k < \pi$ .

El efecto que producen únicamente las autocorrelaciones se puede observar si de la ecuación (3.29) el parámetro  $\eta$  toma el valor cero. La forma a la que se reduce la ecuación (3.29) es

$$l^{-1} = \frac{1}{8a \sin^2(ka)} \left[ \frac{\sin^2(qa)}{q^2} \langle u_n^2 \rangle W_1(k) + U^2 \langle \Delta_n^2 \rangle W_2(k) \right]. \quad (3.31)$$

La Figura 3.5 muestra la longitud de localización inversa  $l^{-1}$  en función del vector de Bloch  $k$ . Se usan densidades espectrales iguales  $W_1(k) = W_2(k) = W(k)$  y tales que

$$W(k) = \begin{cases} 0 & \text{si } k \in (0, \pi/5) \cup (2\pi/5, 3\pi/5) \cup (4\pi/5, \pi) \\ 5/2 & \text{otro caso.} \end{cases} \quad (3.32)$$

Los correladores binarios toman la forma

$$\frac{\langle \Delta_n \Delta_{n+l} \rangle}{\langle \Delta_n^2 \rangle} = \frac{\langle u_n u_{n+l} \rangle}{\langle u_n^2 \rangle} = \frac{5}{2\pi l} \left[ \sin\left(\frac{4\pi l}{5}\right) - \sin\left(\frac{2\pi l}{5}\right) \right], \quad (3.33)$$

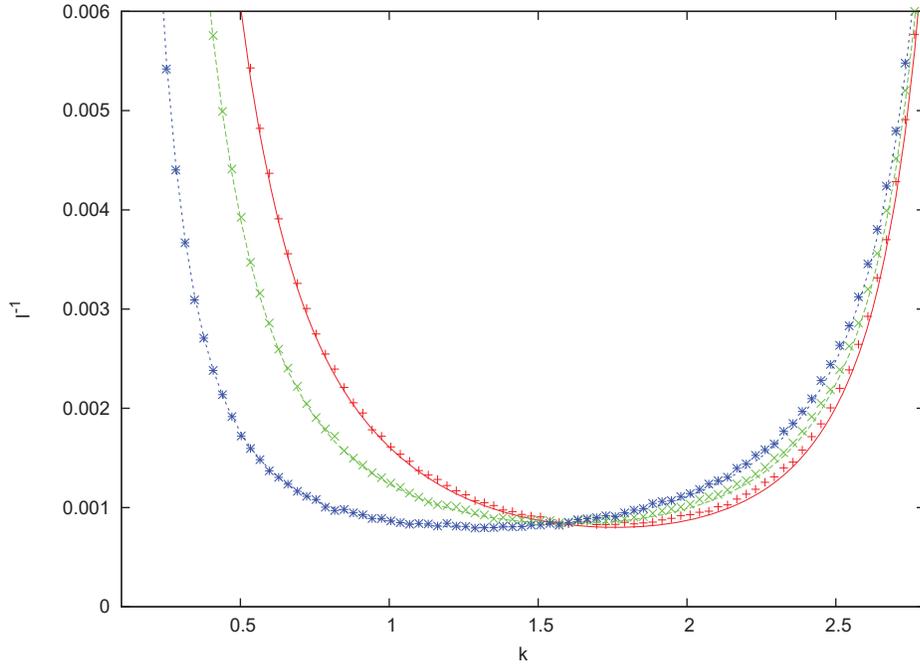


Figura 3.4: Longitud de localización inversa  $l^{-1}$  en función del vector de Bloch  $k$ . Las líneas continua, cortada y punteada son las gráficas de la ecuación (3.29) con los parámetros  $U = 2$ ,  $\sqrt{\langle u_n^2 \rangle} = 0.4$ ,  $\sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle} = 0.4$ . Las líneas representan los casos  $\eta = -\pi/4$ ,  $0$ ,  $\pi/4$  respectivamente. Los resultados numéricos se muestran con los símbolos (+), (x) y (\*). Se usaron 10000000 números aleatorios para cada tipo de desorden.

que son correlaciones de largo alcance. De la Figura 3.5 se observa que hay bordes de movilidad, estos puntos separan regiones continuas de estados extendidos de estados localizados. Por lo tanto las transiciones localización-deslocalización ocurren como efecto de específicas correlaciones de largo alcance a diferencia de las intercorrelaciones que no generan estados extendidos.

Las gráficas 3.4 y 3.5 lo que nos dicen son dos cosas muy importantes, por un lado que específicas correlaciones de largo alcance del desorden vuelven nulas las densidades espectrales en intervalos continuos de energía y producen transiciones localización-deslocalización, por el otro lado nos dicen que las intercorrelaciones del desorden tienen el efecto de disminuir o aumentar la longitud de localización. La gráfica (3.6) muestra el efecto que tiene el des-

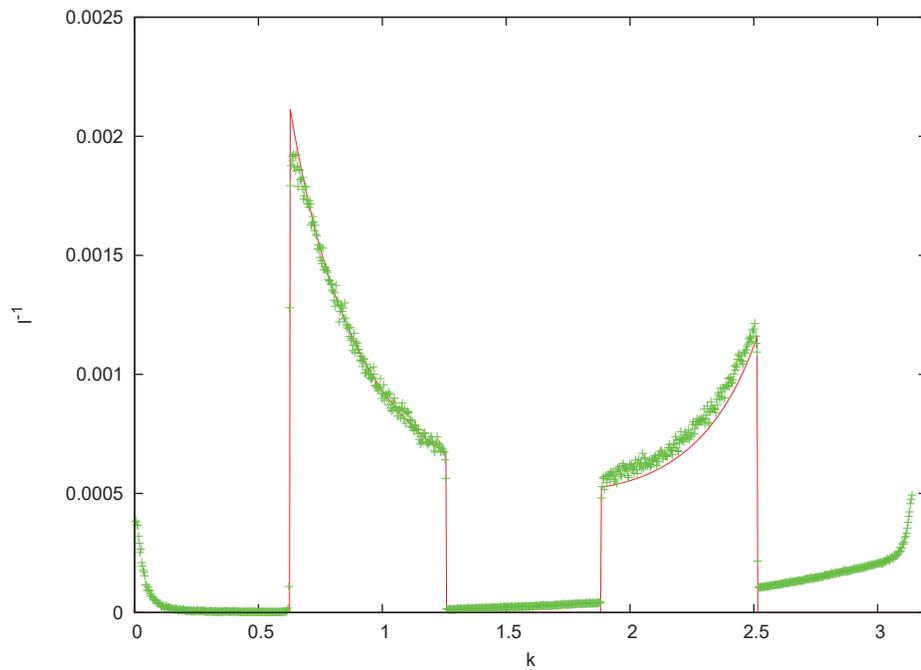


Figura 3.5: Longitud de localización inversa  $l^{-1}$  en función del vector de Bloch  $k$ . La línea continua de color rojo es la gráfica obtenida con la ecuación (3.24) con  $U = 7$ ,  $\sqrt{\langle u_n^2 \rangle} = 0.4$ ,  $\sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle} = 0.5$ , el resultado numérico se muestra de color verde con ( $\times$ ). Se usaron 1000000 de números aleatorios para cada tipo de desorden.

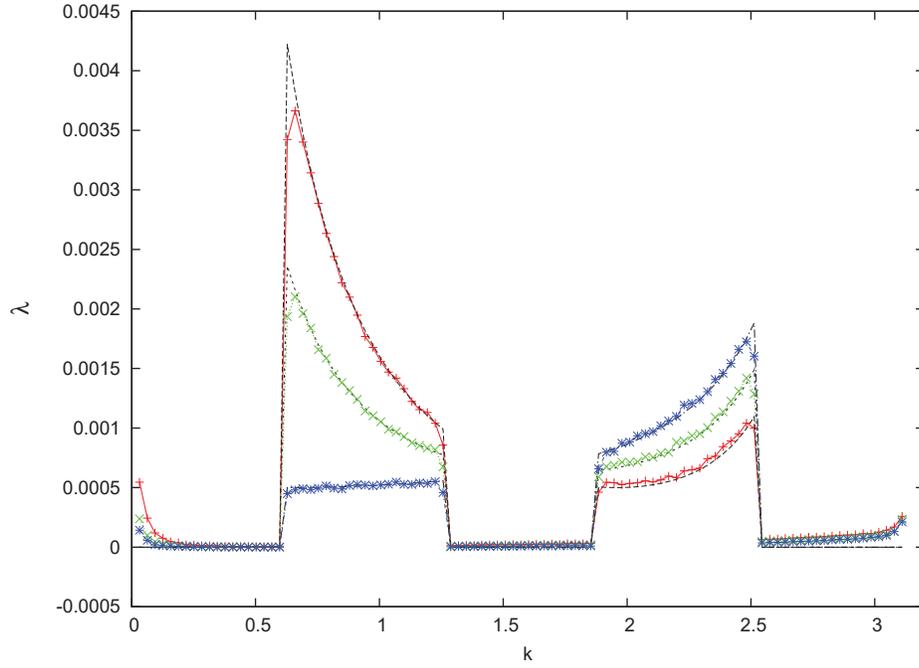


Figura 3.6: Longitud de localización inversa  $l^{-1}$  en función del vector de Bloch  $k$ . Esta gráfica muestra el efecto combinado de las autocorrelaciones y las intercorrelaciones. Los puntos marcados con (+) son el resultado numérico para  $\eta = -\pi/4$ , los puntos marcados con ( $\times$ ) son el resultado numérico para  $\eta = 0$  y los puntos marcados con (\*) son el resultado numérico para  $\eta = \pi/4$ . Los parámetros que se usaron:  $U = 1$ ,  $\sqrt{\langle u_n^2 \rangle} = \sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle} = 0,04$  y se usó una red de 5 millones de sitios.

orden cuando tiene autocorrelaciones e intercorrelaciones, se observa que las autocorrelaciones generan bordes de movilidad y que en la primera ventana de opacidad la anti-intercorrelación en el desorden disminuye la longitud de localización mientras que la total-intercorrelación en el desorden aumenta la longitud de localización. En la segunda ventana de opacidad ocurre lo contrario. La densidad espectral que se utilizó para obtener la gráfica 3.6 está dada por (3.32).

## Capítulo 4

# Transmisión en modelos de enlace fuerte

En este capítulo se estudian las propiedades de transporte en el modelo de Kronig-Penney y se analizan los efectos de las correlaciones del desorden en el coeficiente de transmisión. La transmisión tiene un papel muy importante en el estudio de las ondas y partículas ya que esta cantidad se puede medir experimentalmente. En la parte final de este capítulo se muestran los resultados experimentales que comprueban los efectos que tienen las correlaciones del desorden en la transmisión. El experimento fue realizado por los investigadores O. Dietz y U. Kuhl en Alemania.

Para analizar la transmisión en un modelo de enlace fuerte se considera una cadena de  $N$  partículas con potenciales aleatorios  $U + u_n$  en las posiciones aleatorias  $x_n = na + a_n$  donde  $n$  es un número entero tal que cumple con  $1 \leq n \leq N$ ,  $a$  es la constante de la red y  $a_n$  son las fluctuaciones en la posición. Después se agregan dos cadenas ordenadas semi infinitas de partículas con potencial constante  $U$ , una a la izquierda y otra a la derecha, en estas cadenas  $a_n = 0$  con  $n \leq 0$  y  $n \geq N + 1$ .

Otra forma en la que se puede escribir la ecuación de Schrödinger del modelo de enlace fuerte (3.8) es la siguiente

$$\begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_n & b_n \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix} = \tilde{\mathbf{T}}_n \begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

donde

$$\begin{aligned}
a_n &= \sin q(a + \Delta_n) \left( \cot q(a + \Delta_n) + \cot q(a + \Delta_{n-1}) + \frac{U + u_n}{q} \right) \\
b_n &= -\frac{\sin q(a + \Delta_n)}{\sin q(a + \Delta_{n-1})}
\end{aligned}$$

y  $\tilde{\mathbf{T}}_n$  es la matriz de transferencia. Se hace notar que esta definición es un poco diferente a la que se usó en la sección 1.4, aquí  $\tilde{\mathbf{T}}_n$  da la relación entre dos vectores que son

$$\begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix} \text{ y } \begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

y que contienen la función de onda de dos primeros vecinos. Se deriva la matriz de transferencia en función de las ondas que se mueven a la derecha y las que se mueven a la izquierda de la región de potencial. En un dado sitio  $n$  se expresa la función de onda como superposición de ondas

$$\psi_n = Ae^{ikn} + Be^{-ikn}$$

de aquí inmediatamente se puede encontrar la función de onda para los primeros vecinos del sitio  $n$

$$\begin{aligned}
\psi_{n+1} &= Ae^{ik(n+1)} + Be^{-ik(n+1)} \\
\psi_{n-1} &= Ae^{ik(n-1)} + Be^{-ik(n-1)}
\end{aligned}$$

entonces los vectores (4.2) se pueden expresar como

$$\begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix} = \mathbf{Q} \begin{pmatrix} Ae^{ik(n+1)} \\ Be^{-ik(n+1)} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix} = \mathbf{Q} \begin{pmatrix} Ae^{ikn} \\ Be^{-ikn} \end{pmatrix}$$

donde la matriz  $\mathbf{Q}$  está dada por

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ e^{-ik} & e^{ik} \end{pmatrix}.$$

Para simplificar la notación se hacen las siguientes definiciones  $A_n = Ae^{ikn}$  y  $B_n = Be^{-ikn}$ , así los vectores (4.2) quedan como

$$\begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix} = \mathbf{Q} \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

$$\begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix} = \mathbf{Q} \begin{pmatrix} A_{n-1} \\ B_{n-1} \end{pmatrix}$$

Escribiendo recursivamente la ecuación (4.1) se obtiene

$$\begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix} = \tilde{\mathbf{T}}_n \cdots \tilde{\mathbf{T}}_1 \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_0 \end{pmatrix}. \quad (4.4)$$

Sustituyendo (4.3) en (4.4) se tiene que

$$\begin{pmatrix} A_N \\ B_N \end{pmatrix} = \mathbf{Q}_N \cdots \mathbf{Q}_1 \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = \mathbf{Q}^{(N)} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}$$

en donde la matriz  $\mathbf{Q}_n$  se define como  $\mathbf{Q}_n = \mathbf{Q}^{-1} \tilde{\mathbf{T}}_n \mathbf{Q}$ . Por otro lado se tiene que  $A_N = \psi_R^+$  (ver la sección 1.4) que es la onda del lado derecho de la región de potencial y que se mueve a la derecha,  $B_N = 0$ ,  $A_0 = \psi_L^+$  es la onda del lado izquierdo de la región de potencial y que se mueve a la derecha,  $B_0 = \psi_L^-$  es la onda del lado izquierdo de la región de potencial y que se mueve a la izquierda por lo que la ecuación anterior se puede escribir como

$$\begin{pmatrix} \psi_R^+ \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_L^+ \\ \psi_L^- \end{pmatrix}$$

donde

$$\mathbf{Q}^{(N)} = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} \end{pmatrix}.$$

Para la amplitud de reflexión  $r$  y la amplitud de transmisión  $t$  se tiene que

$$r = \frac{\psi_L^-}{\psi_L^+} = -\frac{Q_{21}}{Q_{22}}$$

$$t = \frac{\psi_R^+}{\psi_L^+} = Q_{11} + Q_{12} \frac{\psi_L^-}{\psi_L^+} = \frac{Q_{11}Q_{22} - Q_{12}Q_{21}}{Q_{22}} = \frac{\det \mathbf{Q}^{(N)}}{Q_{22}}.$$

Dado que la corriente de probabilidad se conserva y que el complejo conjugado de la función de onda es solución de la ecuación de Schrödinger se tiene que

$$\det \mathbf{Q}^{(N)} = 1.$$

Los coeficientes de reflexión y de transmisión están definidos como  $R = |r|^2$ ,  $T = |t|^2$  respectivamente por lo que el coeficiente de transmisión se escribe como

$$T = \frac{1}{|Q_{22}|^2}.$$

O sea que únicamente es necesario calcular el elemento  $Q_{22}$  para obtener el coeficiente de transmisión. Pero este procedimiento no es sencillo porque se debe calcular el producto de matrices  $\mathbf{Q}_N \dots \mathbf{Q}_1$ . Para simplificar el cálculo del coeficiente de transmisión, la matriz  $\mathbf{Q}^{(N)}$  se escribe como  $\mathbf{Q}^{(N)} = \mathbf{Q}^{-1} \tilde{\mathbf{T}}_N \dots \tilde{\mathbf{T}}_1 \mathbf{Q} = \mathbf{Q}^{-1} \tilde{\mathbf{T}} \mathbf{Q}$  donde la matriz  $\tilde{\mathbf{T}}$  es

$$\tilde{\mathbf{T}} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix}$$

por lo que el elemento  $Q_{22}$  de la matriz  $\mathbf{Q}^{(N)}$  en función de los elementos de la matriz  $\tilde{\mathbf{T}}$  toma la siguiente forma

$$Q_{22} = \frac{1}{2i \sin(k)} (-T_{11} e^{-ik} - T_{12} + T_{21} + e^{ik} T_{22}).$$

Dado que el coeficiente de transmisión es el inverso de la magnitud al cuadrado de  $Q_{22}$ , se tiene que

$$T = \frac{4 \sin^2(k)}{|T_{21} - T_{12} + e^{ik} T_{22} - e^{-ik} T_{11}|^2}. \quad (4.5)$$

Ahora se considera la siguiente transformación

$$\begin{pmatrix} \alpha_{n+1} \\ \beta_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{\cos(k)}{\sin(k)} & -\frac{1}{\sin(k)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix} = \mathbf{R} \begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix}, \quad (4.6)$$

con esta transformación se puede escribir todo en función de las variables  $\alpha_n$  y  $\beta_n$

$$\begin{pmatrix} \alpha_{n+1} \\ \beta_{n+1} \end{pmatrix} = \mathbf{R} \tilde{\mathbf{T}}_N \mathbf{R}^{-1} \cdots \mathbf{R} \tilde{\mathbf{T}}_1 \mathbf{R}^{-1} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix} = \mathbf{M}_N \cdots \mathbf{M}_1 \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

donde  $\mathbf{M} = \mathbf{M}_N \cdots \mathbf{M}_1$ . Los elementos de la matriz  $\tilde{\mathbf{T}}$  se pueden escribir en función de los elementos de la matriz  $\mathbf{M}$

$$\begin{aligned} T_{11} &= M_{11} + M_{12} \frac{\cos(k)}{\sin(k)} \\ T_{12} &= -\frac{M_{12}}{\sin(k)} \\ T_{21} &= (M_{11} - M_{12}) \cos(k) + M_{12} \frac{\cos(k)}{\sin(k)} - M_{21} \sin(k) \\ T_{22} &= -M_{12} \frac{\cos(k)}{\sin(k)} + M_{22} . \end{aligned}$$

Sustituyendo los elementos de la matriz  $\tilde{\mathbf{T}}$  en (4.5) se obtiene una nueva expresión para el coeficiente de transmisión

$$T = \frac{4}{M_{11}^2 + M_{22}^2 + M_{12}^2 + M_{21}^2 + 2}. \quad (4.8)$$

Podría parecer que no se ha ganado mucho con la expresión (4.8) debido a que depende de todos los elementos de  $\mathbf{M}$  pero no es así como se muestra a continuación. Considérese un vector  $\vec{v}_1(0)$  tal que

$$\vec{v}_1(1) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

y sea  $\vec{v}_1(N)$  tal que

$$\vec{v}_1(N) = M \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} \\ M_{21} \end{pmatrix}, \quad (4.9)$$

ahora considérese  $\vec{v}_2(1)$  tal que

$$\vec{v}_2(1) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

y sea  $\vec{v}_2(N)$  tal que

$$\vec{v}_2(N) = M \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{12} \\ M_{22} \end{pmatrix}. \quad (4.10)$$

Usando (4.9) y (4.10) en (4.8) el coeficiente de transmisión toma la forma

$$T = \frac{4}{|\vec{v}_1(N)|^2 + |\vec{v}_2(N)|^2 + 2}. \quad (4.11)$$

Haciendo evolucionar los vectores  $\vec{v}_1(1)$  y  $\vec{v}_2(1)$  con la ecuación (4.7) se obtienen los vectores  $\vec{v}_1(N)$  y  $\vec{v}_2(N)$ , sustituyendo estos vectores en la ecuación (4.11) se obtiene el coeficiente de transmisión en una cadena finita.

## 4.1. Transmisión en el modelo de Kronig-Penney aperiódico

Experimentalmente es muy difícil medir la longitud de localización; en vez de ello se mide el coeficiente de transmisión. La localización altera las propiedades de transporte en una muestra. Con el procedimiento mostrado en este capítulo se analizan los efectos de la localización en el coeficiente de transmisión para el modelo de Kronig-Penney con desorden compositivo y estructural correlacionado.

Se considera que tanto el desorden compositivo como el estructural tienen la misma densidad espectral  $W_1(k) = W_2(k) = W(k)$  que está dada por

$$W(k) = \begin{cases} 0 & \text{si } k \in (0, \pi/5) \cup (2\pi/5, 3\pi/5) \cup (4\pi/5, \pi) \\ 5/2 & \text{otro caso} \end{cases} \quad (4.12)$$

por lo que su correspondiente correlador binario toma la forma

$$\frac{\langle \Delta_n \Delta_{n+l} \rangle}{\langle \Delta_n^2 \rangle} = \frac{\langle u_n u_{n+l} \rangle}{\langle u_n^2 \rangle} = \frac{5}{2\pi l} \left[ \sin\left(\frac{4\pi l}{5}\right) - \sin\left(\frac{2\pi l}{5}\right) \right],$$

que son correlaciones de largo alcance. Cabe mencionar que se elige una densidad espectral de la forma dada por la ecuación (4.12) debido a que esta genera ventanas de energías en las que la longitud de localización inversa es nula lo que a su vez se traduce en estados electrónicos extendidos; entonces cuando se tienen cadenas finitas es de esperarse que en estas ventanas donde hay estados extendidos el coeficiente de transmisión sea cercano a 1.

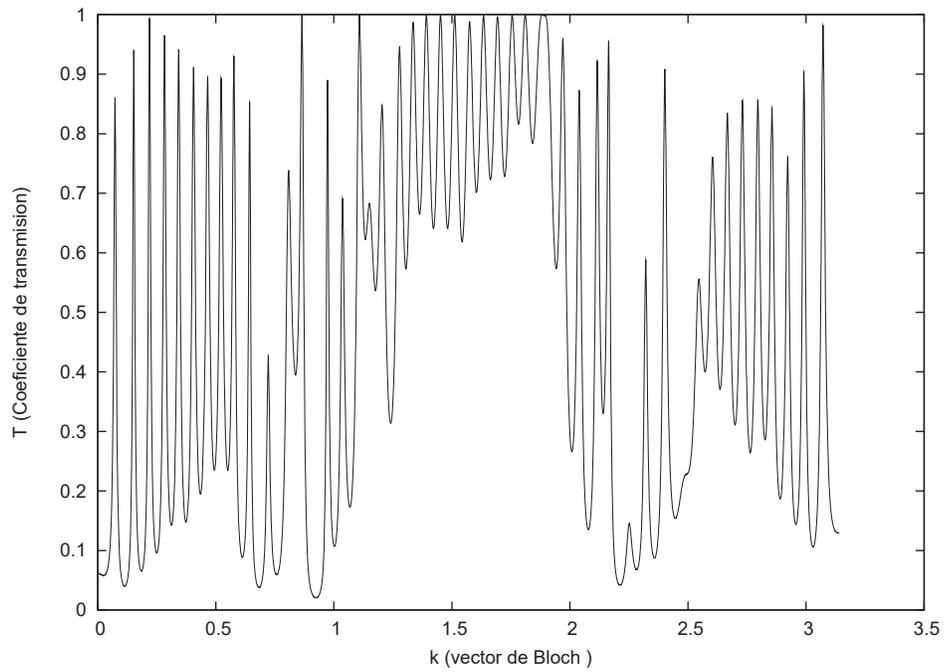


Figura 4.1: Coeficiente de transmisión  $T$  en función vector de Bloch  $k$ . Los parámetros que se utilizaron son  $U = 3$ ,  $\sqrt{\langle u_n^2 \rangle} = \sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle} = 0,05$  y una cadena de 54 sitios.

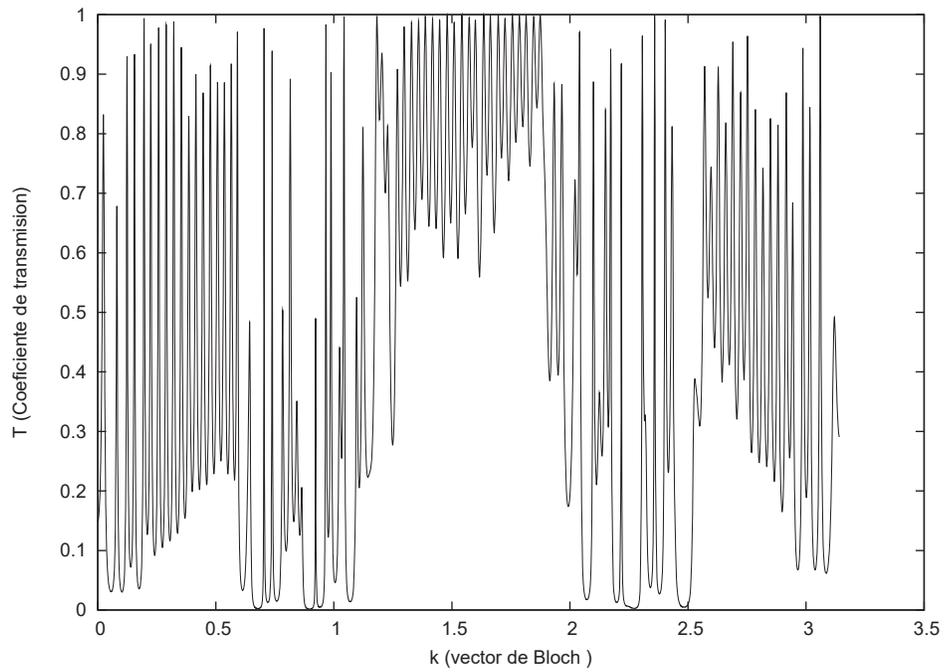


Figura 4.2: Coeficiente de transmisión  $T$  en función vector de Bloch  $k$ . Los parámetros que se utilizarón son  $U = 3$ ,  $\sqrt{\langle u_n^2 \rangle} = \sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle} = 0,05$  y una cadena de 104 sitios.

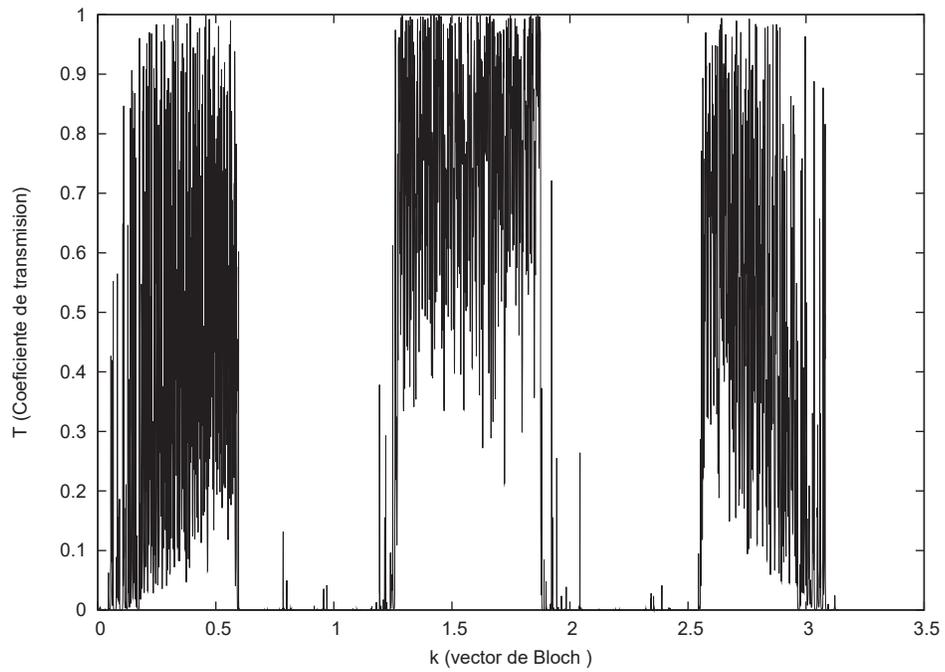


Figura 4.3: Coeficiente de transmisión  $T$  en función vector de Bloch  $k$ . Los parámetros que se utilizarón son  $U = 3$ ,  $\sqrt{\langle u_n^2 \rangle} = \sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle} = 0,05$  y una cadena de 704 sitios.

Las Figuras 4.1, 4.2 y 4.3 muestran el coeficiente de transmisión en función del vector de Bloch mientras que la Figura 4.4 muestra la longitud de localización. De la figura (4.4) se observa que para la intensidad del desorden considerada, la longitud de localización  $l$  en las ventanas de opacidad es de unos 100 sitios. Cuando la longitud de la cadena  $L$  es mucho más corta que la longitud de localización  $l$  se observa en la Figura 4.1 que la transmisión disminuye un poco en las ventanas de opacidad donde la densidad espectral es distinta de cero. Al hacer cada vez mas grande la longitud de la cadena, disminuye la transmisión en estas regiones como lo muestra la Figura 4.2. Cuando la longitud de localización  $l$  es mucho menor que la longitud de la cadena  $L$  la transmisión es casi cero (Figura 4.3) por que en estas regiones es donde están los estados localizados (como se observa en la Figura 4.4). Para las ventanas de energía en las que la densidad espectral es cero siempre hay transmisión y el único cambio es que el coeficiente de transmisión oscila más fuertemente al aumentar el número de sitios. Entonces se tienen dos escalas de longitud importantes para las propiedades de transporte, una es la longitud de la cadena desordenada  $L$  y la otra es la longitud de localización  $l$  de los estados electrónicos de una cadena infinita desordenada.

La Figura 4.5 muestra el efecto que tienen las intercorrelaciones junto a las autocorrelaciones en la transmisión. Como se vió en la sección 3.3, las intercorrelaciones tienen el efecto de aumentar o disminuir la longitud de localización. La total intercorrelación del desorden aumenta la longitud de localización en  $(0 \leq k \leq \pi/2)$  por lo que tendrá el efecto de aumentar la transmisión respecto al caso sin intercorrelaciones del desorden mientras que se produce el efecto contrario en  $(\pi/2 \leq k \leq \pi)$ . La total anti intercorrelación del desorden disminuye la longitud de localización en  $(0 \leq k \leq \pi/2)$  por lo que tendrá el efecto de disminuir la transmisión respecto al caso sin intercorrelaciones del desorden mientras que se produce el efecto contrario en  $(\pi/2 \leq k \leq \pi)$ . Este efecto de las correlaciones se manifiesta claramente en las ventanas de opacidad de la Figura 4.5. En la siguiente sección se muestra como se comprobaron experimentalmente estas predicciones.

En la Figura 4.5 se utiliza la misma densidad espectral para el desorden compositivo y estructural. La densidad espectral  $W(k)$  que se usa es

$$W(k) = \begin{cases} 0 & \text{si } k \in (0, 20\pi/100) \cup (21\pi/100, 79\pi/100) \cup (80\pi/100, \pi) \\ 50 & \text{otro caso} \end{cases} \quad (4.13)$$

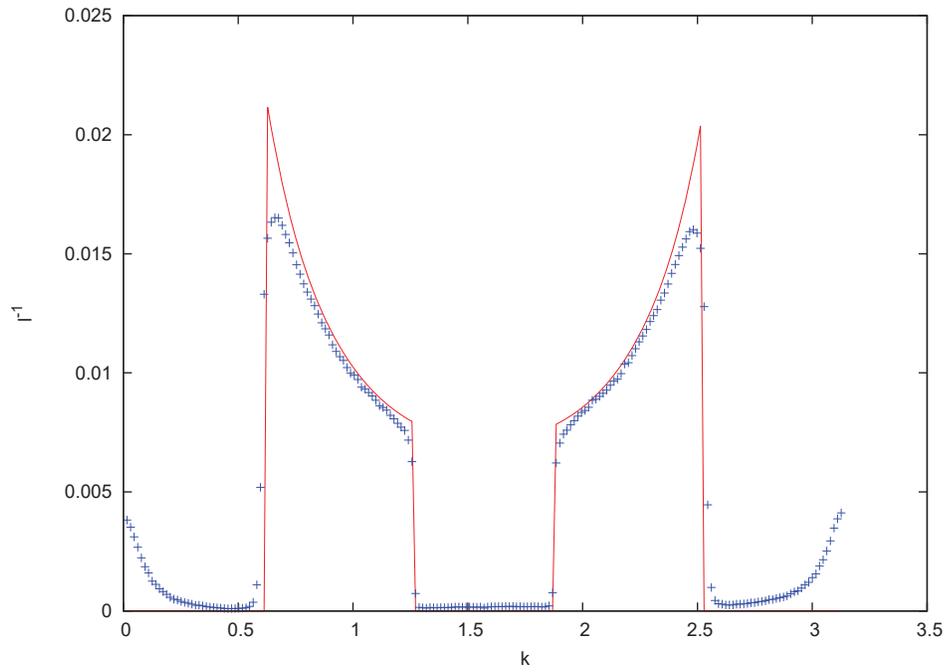


Figura 4.4: Longitud de localización inversa  $l^{-1}$  en función vector de Bloch  $k$ . La línea roja continua representa el resultado analítico mientras que los puntos azules marcados con (+) representa los datos obtenidos numéricamente. Los parámetros que se utilizaron son  $U = 3$ ,  $\sqrt{\langle u_n^2 \rangle} = \sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle} = 0,05$ .

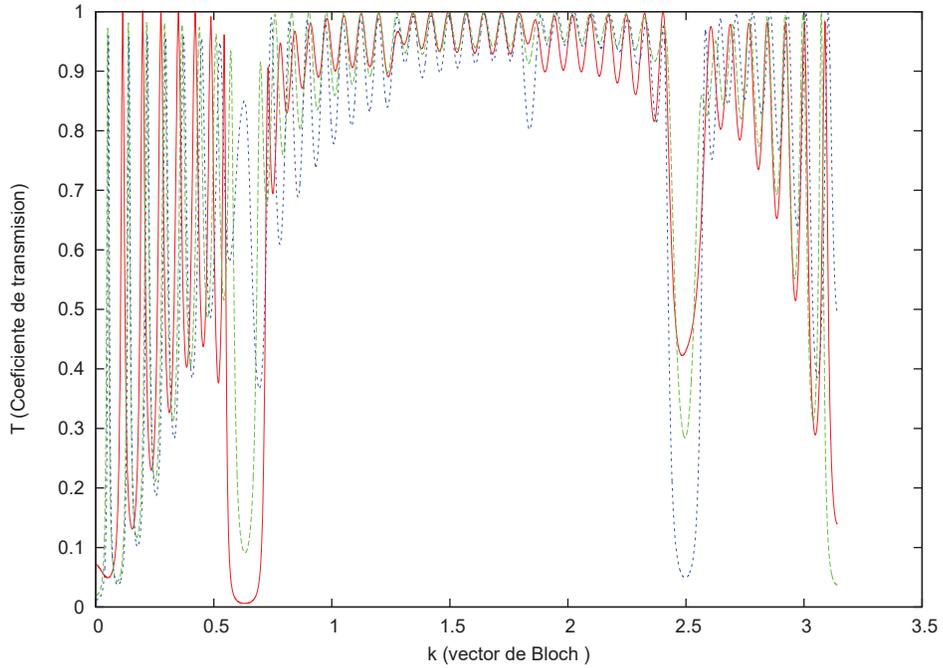


Figura 4.5: Coeficiente de transmisión  $T$  en función del vector de Bloch  $k$ . Los parámetros que se utilizaron son  $U = 1$ ,  $\sqrt{\langle u_n^2 \rangle} = \sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle} = 0,05$  y una cadena de 44 sitios. En las tres curvas el desorden tiene autocorrelaciones de largo alcance pero varía la intercorrelación. La línea continua de color rojo representa el coeficiente de transmisión para  $\eta = -\pi/4$  que es el caso de total anti-intercorrelación. La línea punteada de color azul representa el caso de total correlación esto es  $\eta = \pi/4$  mientras que la línea segmentada es el caso sin intercorrelación, o sea  $\eta = 0$ .

por lo que su correspondiente correlador binario toman la forma

$$\frac{\langle \Delta_n \Delta_{n+l} \rangle}{\langle \Delta_n^2 \rangle} = \frac{\langle u_n u_{n+l} \rangle}{\langle u_n^2 \rangle} = \frac{50}{\pi l} \left[ \sin \left( \frac{42\pi l}{100} \right) - \sin \left( \frac{40\pi l}{100} \right) \right]$$

## 4.2. Comprobación experimental del efecto de las intercorrelaciones en el coeficiente de transmisión

En colaboración con U. Kuhl y O. Dietz se comprobó experimentalmente el efecto que tienen las intercorrelaciones del desorden en el coeficiente de transmisión. Para verificar experimentalmente las predicciones teóricas se uso una guía de onda rectangular como se muestra en la Figura 4.6. Esta guía de onda contiene dos antenas, una en cada extremo de la guía, una de las antenas funciona como fuente de ondas mientras que la otra mide la transmisión. En el espacio que hay entre las antenas se colocan barras de bronce que tienen alturas aleatorias y son colocadas en posiciones aleatorias (la Figura 4.6 muestra como se colocan las barras dentro de la guía de ondas y la Figura (4.7) muestra las alturas de las barras). La altura de las barras se relaciona con la intensidad del potencial en el modelo de Kronig-Penney y la posición de las barras se relaciona con la posición de las barreras de potencial en el modelo de Kronig-Penney.

Para dotar a las alturas y las posiciones de las barras con intercorrelaciones se usa el algoritmo que se presentó en la sección 3.3.1. Esto es, se generan dos sucesiones de 40 números aleatorios que luego aplicando la transformación lineal (3.26) se obtienen dos nuevas sucesiones de números aleatorios pero intercorrelacionadas que a su vez se relacionan con el desorden compositivo y el estructural. A continuación se usa la densidad espectral (4.13) y se hace un producto de convolución como el que se muestra en la sección 3.3.2 para generar desorden con autocorrelaciones. Ya que se tienen los dos tipos de desorden con correlaciones se calcula el coeficiente de transmisión con el método que se mostró en este capítulo. El resultado que se obtiene numéricamente para el coeficiente de transmisión se muestra en la Figura 4.8. Los parámetros que se usaron para obtener la gráfica son:  $U = 1$ ,  $\sqrt{\langle u_n^2 \rangle} = \sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle} = 0.05$

Las Figuras 4.9, 4.10, 4.11 y 4.12 muestran los resultados experimentales.

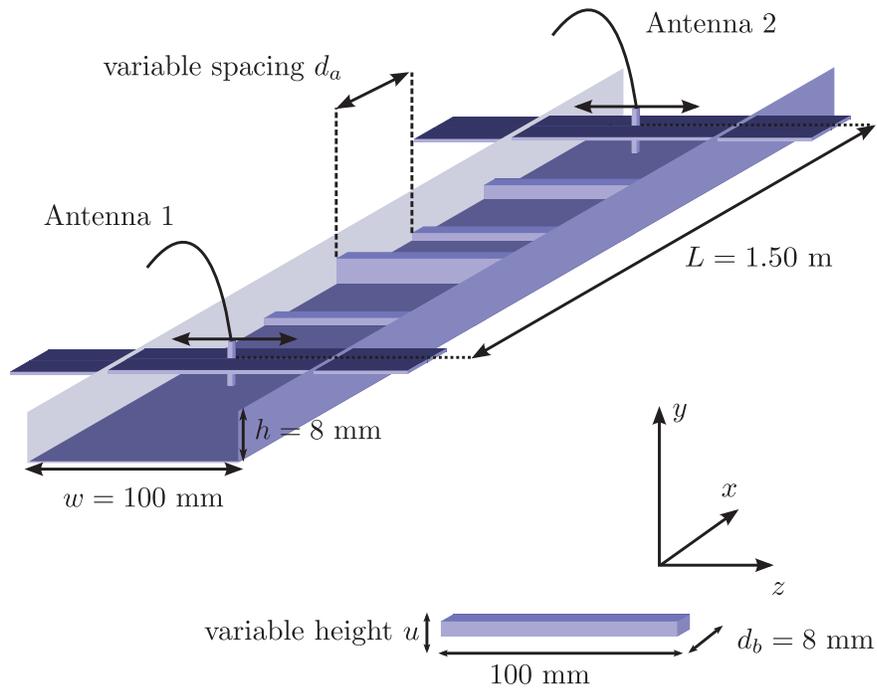


Figura 4.6: Figura realizada por O. Dietz. Dibujo del aparato experimental con la parte de arriba removida. Las barras de bronce se pueden colocar libremente en la guía de onda. La distancia entre las dos antenas es de 1.5 metros, la longitud total de la guía es de 2.38 m. Las paredes absorbentes en los extremos no son mostradas.

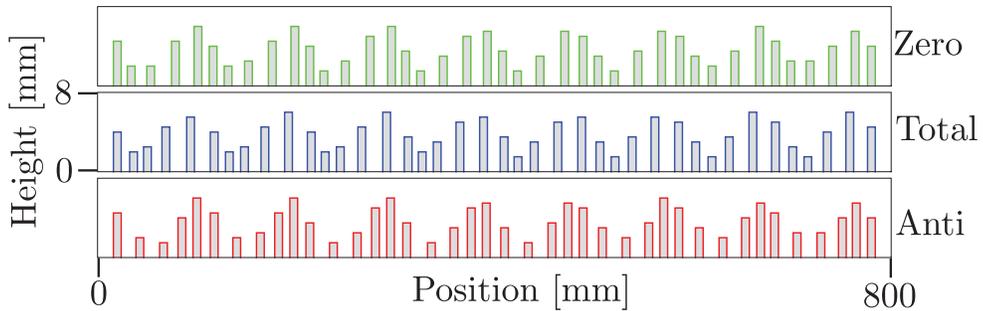


Figura 4.7: Figura realizada por O. Dietz. Esta figura muestra el arreglo de las barras. La parte superior es el caso sin intercorrelaciones, en medio es el caso de total correlación y la parte inferior es el caso de total anti-intercorrelación.

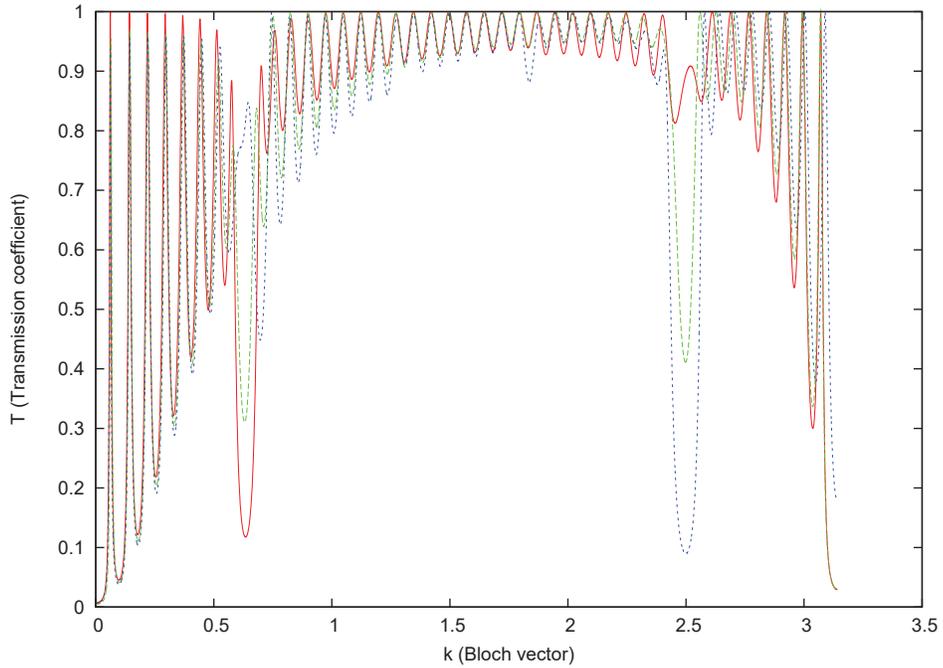


Figura 4.8: Coeficiente de transmisión en función del vector de Bloch  $k$ . La línea continua de color rojo representa el coeficiente de transmisión para  $\eta = -\pi/4$  que es el caso de total anti-intercorrelación. La línea punteada de color azul representa el caso de total correlación esto es  $\eta = \pi/4$  mientras que la línea segmentada es el caso sin intercorrelación, osea  $\eta = 0$ . Se observa que en el intervalo  $(20\pi/100, 21\pi/100)$  hay una clara diferencia en el coeficiente de transmisión (al igual que en el intervalo  $(\pi - 21\pi/100, \pi - 20\pi/100)$ ), este es el efecto que tienen las intercorrelaciones del desorden en el coeficiente de transmisión y que O. Dietz y U. Kuhl midieron como se muestra en las siguientes gráficas.

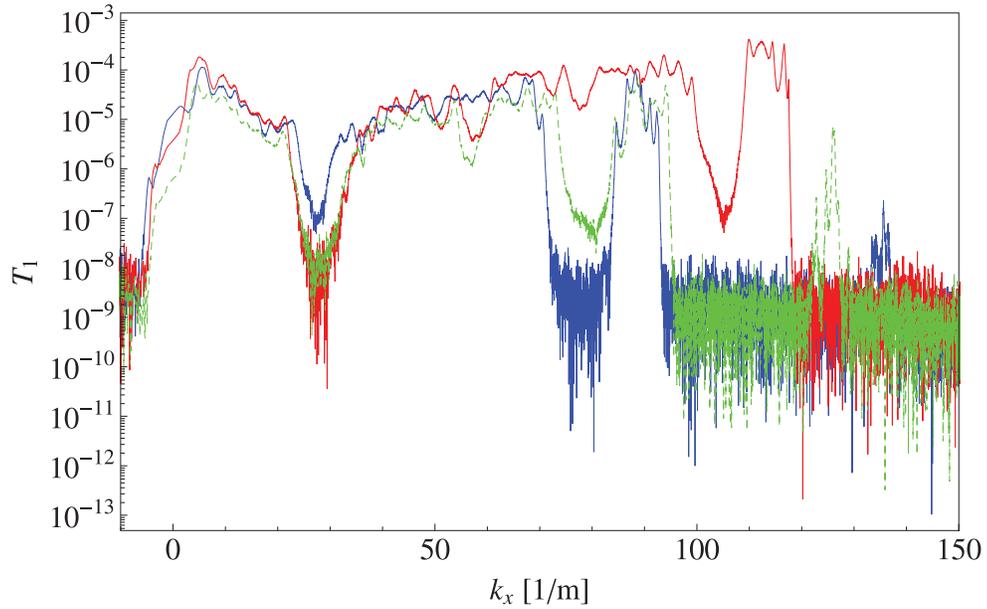


Figura 4.9: Figura obtenida por O. Dietz. Coeficiente de transmisión en función del vector de Bloch. La línea azul representa el caso de total intercorrelación, la línea verde es el caso de cero intercorrelación y la línea roja es el caso de total anti-intercorrelación. Se aprecia que los datos que se obtuvieron con la anti-intercorrelación la banda de energía es mas grande que los otros dos casos, esto se debe a que barras muy altas que se encuentran muy cerca y por lo tanto cubren un gran espacio como si fueran una sola barra muy ancha por lo que la banda de energía se ve modificada; en la parte de abajo de la Figura (4.7) que es la que corresponde al caso de total anti-intercorrelación se ve que cuando aparece una barra muy alta aparece otro al lado tambien muy alta.

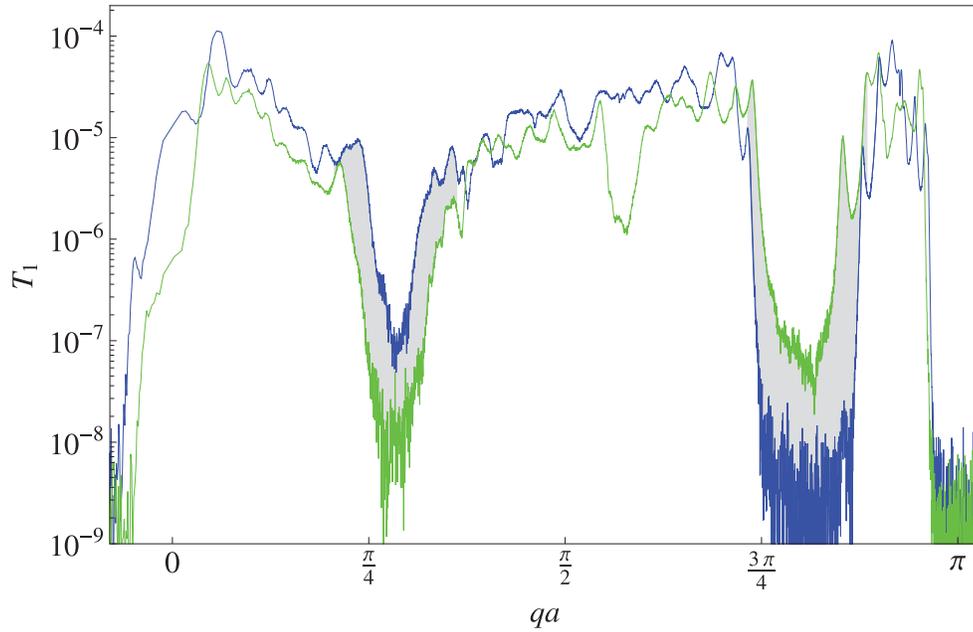


Figura 4.10: Figura obtenida por O. Dietz. Coeficiente de transmisión en función del vector de Bloch. Se presentan los casos de total intercorrelación (Azul) y cero intercorrelación (verde). Se muestra claramente como en la primera ventana de opacidad la transmisión para el caso de total intercorrelación es mayor que la transmisión del caso sin intercorrelación. En la segunda ventana de opacidad sucede lo contrario como se había predicho.

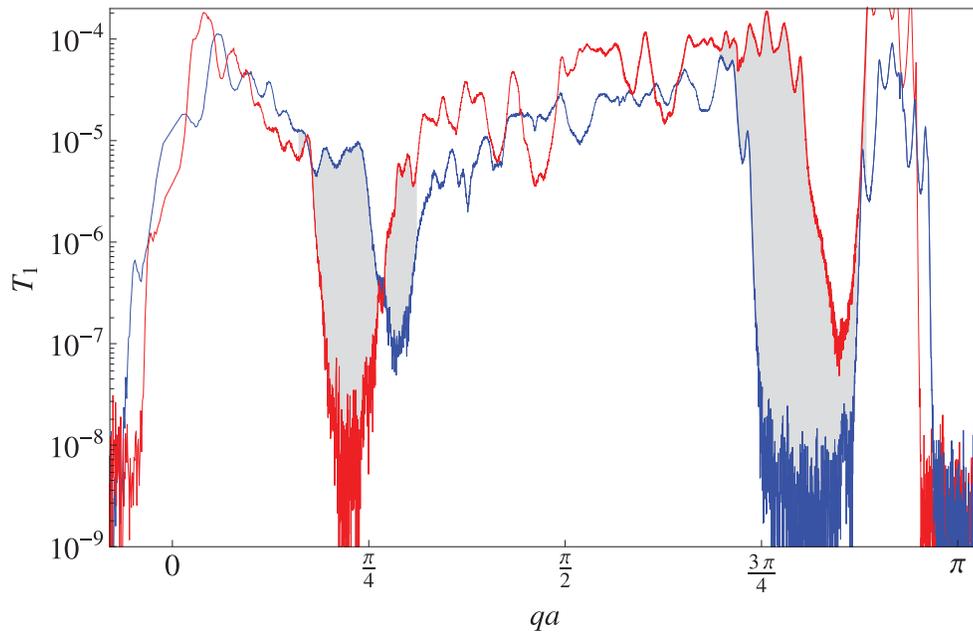


Figura 4.11: Figura obtenida por O. Dietz. Coeficiente de transmisión en función del vector de Bloch. Se presentan los casos de total intercorrelación (Azul) y total anti intercorrelación (rojo). Las dos bandas de energía se han reducido al mismo intervalo.

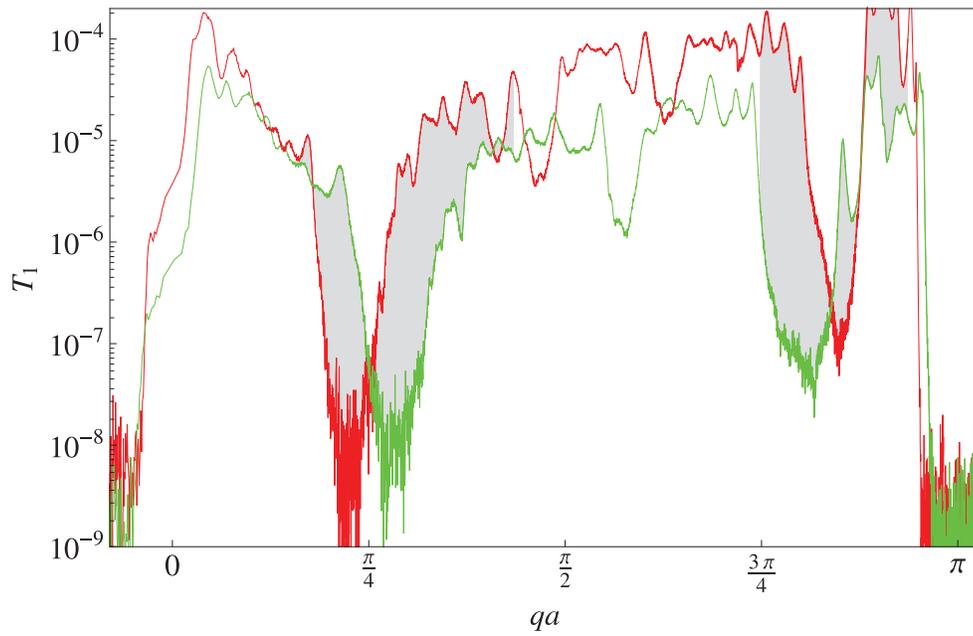


Figura 4.12: Figura obtenida por O. Dietz. Coeficiente de transmisión en función del vector de Bloch. Se presentan los casos sin intercorrelación (Verde) y total anti intercorrelación (rojo). Las dos bandas de energía se han reducido al mismo intervalo.

## Capítulo 5

# Anomalías de la longitud de localización

En este capítulo se analizan las propiedades anómalas de específicos estados electrónicos del modelo de Kronig-Penney con desorden compositivo y estructural débil sin correlaciones. Se obtiene la longitud de localización para estos estados y se muestra que la longitud de localización exhibe efectos de resonancia cerca del centro de la banda y escalamiento anómalo en los bordes de la banda. Estas anomalías son del mismo tipo que las anomalías que se encuentran en el modelo de Anderson con desorden puramente diagonal. Los resultados de este capítulo y el capítulo siguiente se publicaron en [25].

En el capítulo 3 se obtuvo la longitud de localización suponiendo que la distribución de probabilidad para la variable angular era uniforme, pero esto no es correcto cuando  $ka = \pi/2$ . Se puede mostrar que en  $ka = \pi/2$  la distribución para la variable angular es modulada, esto se puede ver de la siguiente manera: Si se elimina el desorden del mapa angular entonces éste toma la forma

$$\theta_{n+1} = \theta_n + \frac{\pi}{2}.$$

En este caso el mapa angular tiene órbitas de período 4, en presencia de desorden débil, las órbitas perturbadas permanecen cerca de las órbitas imperturbadas y se obtiene así una modulación con período  $\pi/2$  que por lo tanto no será uniforme como se supuso inicialmente. La modulación de la distribución invariante implica que la ecuación para la longitud de localización (3.24) no es correcta en  $ka = \pi/2$  porque hay que recordar que esta

ecuación fue obtenida haciendo el promedio de (3.19) con una distribución uniforme. Este razonamiento también se aplica cuando el vector de Bloch toma el valor

$$ka = \frac{\pi}{n} \text{ con } n \text{ entero} \quad (5.1)$$

entonces siempre que el vector de Bloch cumpla con (5.1) se obtendrá una distribución modulada de período  $2n$  y no será correcta la expresión para la longitud de localización (3.24). En la aproximación a segundo orden no es relevante considerar los casos con  $n > 2$ . Esto se debe a que la distribución para la variable angular tiene una modulación que está en función del  $\cos(2n\theta)$  o  $\sin(2n\theta)$  y estos no tiene ningún efecto al promediar la expresión (3.20) para obtener la longitud de localización que sólo contiene términos seno y coseno de argumento  $2\theta$  y  $4\theta$ . Por lo tanto en la aproximación a segundo orden únicamente son importantes los casos  $ka = \pi/2$ ,  $ka = \pi$  y  $ka = 0$ .

En conclusión, en la aproximación a segundo orden sólo hay tres anomalías, una en  $ka = \pi/2$  que es cerca del centro de la banda y otras dos en  $ka = \pi$  y  $ka = 0$  que son los bordes de la banda. Para estos valores de  $k$  la suposición de que la distribución de probabilidad de la variable angular es uniforme debe ser abandonada y se debe encontrar su forma exacta para poder determinar la longitud de localización de los estados electrónicos.

## 5.1. Anomalía cerca del centro de la banda

Vamos a determinar la distribución correcta de la variable angular para el caso en el que no hay ningún tipo de correlación en el desorden (no se considera el caso de desorden con correlaciones debido a la complejidad de los cálculos). Para este fin se sigue el procedimiento presentado en [18] que consiste en pasar del mapa angular discreto a una ecuación diferencial estocástica de Itô. Una vez encontrada esta ecuación se podrá obtener su correspondiente ecuación de Fokker-Planck la cual tiene como solución la distribución de probabilidad de la variable angular.

Evaluando el mapa para la variable angular en  $ka = \pi/2$  se obtiene

$$\begin{aligned}
\theta_{n+1} &= \theta_n + \frac{\pi}{2} \\
&+ \frac{1}{2}[\zeta + \cos(2\theta_n)]\Delta_n \\
&- \frac{1}{2}[1 + \sin(2\theta_n)]\tilde{u}_n \\
&- \frac{1}{8}[2\zeta \sin(2\theta_n) + \sin(4\theta_n)]\tilde{\Delta}_n^2 \\
&+ \frac{1}{8}[2\cos(2\theta_n) + \sin(4\theta_n)]\tilde{u}_n^2
\end{aligned} \tag{5.2}$$

donde

$$\zeta = \frac{q \sin(ka)}{U}(q\alpha^2 + 1/q\alpha^2).$$

En  $k = \pi/2$  se tiene que  $q = q_0$  donde  $q_0$  es tal que

$$\cos(q_0 a) + \frac{U}{2q_0} \sin(q_0 a) = 0.$$

Para pasar del mapa angular a una ecuación diferencial es necesario calcular  $\theta_{n+4}$  en función de  $\theta_n$ , esto se debe a que después de 4 iteraciones  $\theta_{n+4} - \theta_n \ll 1$  y por consiguiente se puede sustituir  $\theta_{n+4} - \theta_n \rightarrow d\theta$ .

Sustituyendo  $\theta_{n+1}$  en si misma se obtiene  $\theta_{n+2}$  en función de  $\theta_n$  y después sustituyendo  $\theta_{n+2}$  en si misma se obtiene  $\theta_{n+4}$  en función de  $\theta_n$  por lo que después de 4 iteraciones

$$\begin{aligned}
\theta_{n+4} - \theta_n &= \frac{1}{2}[\zeta + \cos(2\theta_n)](\tilde{\Delta}_n + \tilde{\Delta}_{n+2}) \\
&+ \frac{1}{2}[\zeta - \cos(2\theta_n)](\tilde{\Delta}_{n+1} + \tilde{\Delta}_{n+3}) \\
&- \frac{1}{2}[1 + \sin(2\theta_n)](\tilde{u}_n + \tilde{u}_{n+2}) \\
&- \frac{1}{2}[1 - \sin(2\theta_n)](\tilde{u}_{n+1} + \tilde{u}_{n+3}) \\
&+ \frac{1}{2}\sin(4\theta_n)(\langle \tilde{u}_n^2 \rangle - \langle \tilde{\Delta}_n^2 \rangle).
\end{aligned} \tag{5.3}$$

En aproximación del segundo orden los términos mixtos no contribuyen y se ha aproximado  $\tilde{u}_n^2 \approx \langle \tilde{u}_n^2 \rangle$  y  $\tilde{\Delta}_n^2 \approx \langle \tilde{\Delta}_n^2 \rangle$ .

Con las siguientes sustituciones se pasa del mapa angular a la ecuación estocástica

$$\begin{aligned}
\theta_{n+4} - \theta_n &\rightarrow d\theta \\
\tilde{\Delta}_n + \tilde{\Delta}_{n+2} &\rightarrow \sqrt{2\langle\tilde{\Delta}_n^2\rangle}dW_1 \\
\tilde{\Delta}_{n+1} + \tilde{\Delta}_{n+3} &\rightarrow \sqrt{2\langle\tilde{\Delta}_n^2\rangle}dW_2 \\
\tilde{u}_n + \tilde{u}_{n+2} &\rightarrow \sqrt{2\langle\tilde{u}_n^2\rangle}dW_3 \\
\tilde{u}_{n+1} + \tilde{u}_{n+3} &\rightarrow \sqrt{2\langle\tilde{u}_n^2\rangle}dW_4
\end{aligned}$$

donde  $dW_i$  es un diferencial de un proceso de Wiener. Es importante hacer notar que esto es posible debido a que se supuso que no hay ningún tipo de correlaciones en el desorden. Usando las sustituciones anteriores la ecuación diferencial estocástica de Itô para nuestra variable angular se escribe como

$$\begin{aligned}
d\theta &= \frac{1}{2}[\zeta + \cos(2\theta)]\sqrt{2\langle\tilde{\Delta}_n^2\rangle}dW_1 \\
&\quad + \frac{1}{2}[\zeta - \cos(2\theta)]\sqrt{2\langle\tilde{\Delta}_n^2\rangle}dW_2 \\
&\quad - \frac{1}{2}[1 + \sin(2\theta)]\sqrt{2\langle\tilde{u}_n^2\rangle}dW_3 \\
&\quad - \frac{1}{2}[1 - \sin(2\theta)]\sqrt{2\langle\tilde{u}_n^2\rangle}dW_4 \\
&\quad + \frac{1}{2}\sin(4\theta)(\langle\tilde{u}_n^2\rangle - \langle\tilde{\Delta}_n^2\rangle)dt.
\end{aligned} \tag{5.4}$$

Dada una ecuación diferencial estocástica de Itô de la forma

$$dX = A(X, t)dt + \vec{b}(X, t) \cdot d\vec{W}$$

se le puede asociar una ecuación de Fokker-Planck de la forma [19]

$$\frac{\partial\rho(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(A(x, t)\rho(x, t)) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(|\vec{b}(x, t)|^2\rho(x, t)\right),$$

que tiene como solución la distribución de probabilidad para la variable estocástica. Usando este hecho se obtiene la ecuación de Fokker-Planck que le corresponde a la ecuación (5.4)

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\theta, t) = \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\theta}(B\sin(4\theta)\rho(\theta, t)) + \frac{1}{4}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}([A + B\cos(4\theta)]\rho(\theta, t))$$

donde se han hecho las siguientes definiciones

$$\begin{aligned} A &= 3\langle \tilde{u}_n^2 \rangle + (2\zeta^2 + 1)\langle \Delta_n^2 \rangle \\ B &= \langle \tilde{u}_n^2 \rangle - \langle \tilde{\Delta}_n^2 \rangle. \end{aligned}$$

Se hace notar que  $B$  puede ser positiva o negativa, primero se supone que  $B > 0$ . Entonces, para el caso estacionario, la ecuación de Fokker-Planck se reduce simplemente a una ecuación diferencial ordinaria

$$\frac{d}{d\theta} (B \sin(4\theta)\rho(\theta)) + \frac{1}{2} \frac{d^2}{d\theta^2} ([A + B \cos(4\theta)] \rho(\theta)) = 0.$$

Integrando se obtiene

$$\frac{1}{2}(A + B \cos(4\theta)) \frac{d\rho(\theta)}{d\theta} - B \sin(4\theta)\rho(\theta) = C$$

donde  $C$  es una constante de integración, para obtener la solución de esta ecuación que es lineal y de primer orden primero encontramos el factor integrante  $\mu(\theta)$  resolviendo la ecuación diferencial

$$\frac{d\mu}{d\theta} = \mu \frac{-2B \sin(4\theta)}{A + B \cos(4\theta)}$$

la cual tiene como solución  $\mu(\theta) = C\sqrt{A + B \cos(4\theta)}$  y por lo tanto la distribución para la variable angular es

$$\rho(\theta) = \int_{\theta_0}^{\theta} \frac{2C\mu(\theta)d\theta}{A + B \cos(4\theta)} + \frac{F}{\sqrt{A + B \cos(4\theta)}}$$

donde  $F$  es una constante. Esta solución debe cumplir con  $\rho(0) = \rho(2\pi)$  por lo que la integral desaparece y queda únicamente

$$\rho(\theta) = \frac{F}{\sqrt{A + B \cos(4\theta)}}.$$

La constante  $F$  se determina por la condición de normalización

$$\int_0^{2\pi} \rho(\theta) = 1.$$

Entonces

$$4 \int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{\sqrt{A + B \cos(4\theta)}} = \frac{4}{\sqrt{A + B}} \int_0^{\pi/2} \frac{d\phi}{\sqrt{1 - \left(\frac{2B}{A+B}\right) \sin^2(\phi)}}$$

donde se usó la identidad  $\cos(4\theta) = 1 - 2 \sin^2(2\theta)$  y el cambio de variable  $\phi = 2\theta$ . La integral del lado derecho es una integral elíptica completa del primer tipo. La distribución de probabilidad para la variable angular normalizada es

$$\rho(\theta) = \frac{\sqrt{A + B}}{4K \left( \sqrt{\frac{2B}{B+A}} \right)} \frac{1}{\sqrt{A + B \cos(4\theta)}}.$$

Si  $B < 0$  se sigue el mismo procedimiento obteniéndose

$$\rho(\theta) = \frac{\sqrt{A - B}}{4K \left( \sqrt{\frac{-2B}{A-B}} \right)} \frac{1}{\sqrt{A + B \cos(4\theta)}}.$$

Estos últimos dos resultados los podemos escribir como uno solo

$$\rho(\theta) = \frac{\sqrt{A + |B|}}{4K(C)} \frac{1}{\sqrt{A + B \cos(4\theta)}} \quad (5.5)$$

en donde

$$K(x) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\phi}{\sqrt{1 - x^2 \sin^2(\phi)}}$$

es la integral elíptica completa de primer tipo y  $C = \sqrt{2|B|/(A + |B|)}$ . La Figura 5.1 muestra la gráfica de la ecuación (5.5).

La distribución que se ha obtenido tiene un período de  $\pi/2$  como era de esperarse. Ahora se puede calcular la longitud de localización con la distribución correcta, para ello se debe hacer el promedio de la ecuación (3.19) usando como medida invariante la obtenida en (5.5), por lo tanto únicamente es necesario calcular el promedio de  $\cos(4\theta)$  con la distribución (5.5)

$$l^{-1} = \frac{1}{8} (1 + \langle \cos(4\theta) \rangle) \langle \tilde{\Delta}_n^2 \rangle + \frac{1}{8} (1 - \langle \cos(4\theta) \rangle) \langle \tilde{u}_n^2 \rangle.$$

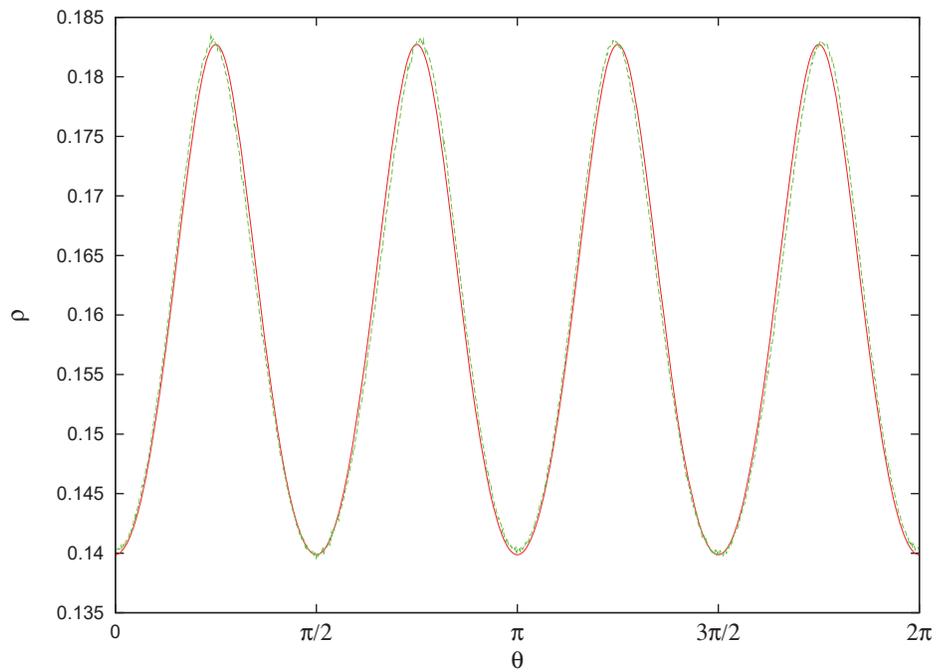


Figura 5.1: Distribución de probabilidad para la variable angular. La línea continua de color rojo es la gráfica de la ecuación (5.5) con los parámetros  $U = 8$ ,  $\langle u_n^2 \rangle = \langle \Delta_n^2 \rangle = 0.02$  mientras que la línea segmentada de color verde es el resultado numérico.

Finalmente el resultado correcto para la longitud de localización en  $ka = \pi/2$  es

$$l^{-1} = \frac{1}{8a} \left( [|B| + A] \frac{E(C)}{K(C)} - 2(\langle u_n^2 \rangle + \zeta^2 \langle \Delta_n^2 \rangle) \right) \quad (5.6)$$

donde

$$E(x) = \int_0^{\pi/2} \sqrt{1 - x^2 \sin^2(\phi)} d\phi$$

es la integral elíptica completa de segundo tipo. La Figura (5.2) muestra el resultado de la ecuación (5.6). Se observa que fuera de un entorno de  $k = \pi/2$  el resultado numérico y el resultado obtenido con la ecuación (3.25) concuerdan muy bien pero en el punto  $\pi/2$  no lo hacen. En  $\pi/2$  el resultado numérico concuerda con la ecuación (5.6).

En conclusión, en el modelo de Kronig-Penney el efecto de resonancia ocurre para  $ka = \pi/2$  y produce una anomalía de la longitud de localización. El efecto tiene la misma naturaleza que la anomalía encontrada en el centro de la banda en el modelo de Anderson con desorden diagonal [17] [18]. En el modelo de Anderson la distribución invariante en  $ka = \pi/2$  está dada por

$$\rho(\theta) = \frac{1}{2K(\frac{1}{\sqrt{2}})} \frac{1}{\sqrt{3 + \cos(4\theta)}}$$

que es una forma muy parecida a la forma de la ecuación (5.5). Mientras que la longitud de localización está dada por

$$l^{-1} = \langle \epsilon_n^2 \rangle \left( \frac{\Gamma(\frac{3}{4})}{\Gamma(\frac{1}{4})} \right)^2$$

que depende linealmente del momento segundo del desorden al igual que la ecuación (5.6) depende únicamente de los momentos segundos del desorden.

## 5.2. Anomalía en el borde de la banda

En esta sección se analiza la anomalía para  $ka = \delta \rightarrow 0^+$ , o sea en una vecindad del borde de la banda. Se vió anteriormente que la distribución de probabilidad para la variable angular en los bordes de la banda no es plana

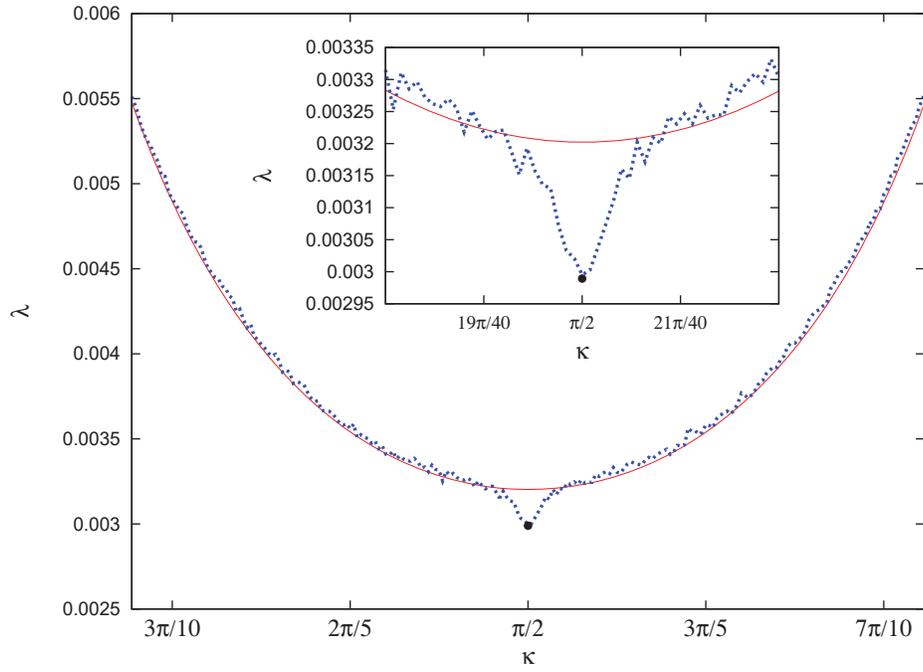


Figura 5.2: longitud de localización inversa (Exponente de Lyapunov  $\lambda$ ) en función del vector de Bloch  $k$ . La línea continua es el resultado analítico, la línea punteada es el resultado numérico y el punto grande en  $\pi/2$  es el resultado de la ecuación (5.6) con  $U = 8$ ,  $\langle u_n^2 \rangle = \langle \Delta_n^2 \rangle = 0.02$ .

por lo que es necesario obtener la distribución correcta para así poder calcular la longitud de localización. El procedimiento que se realiza es el mismo que se hizo en la sección anterior, pasar del mapa a una ecuación diferencial estocástica y usar la ecuación de Fokker-Planck asociada para encontrar la distribución de la variable angular.

Al igual que en la anomalía en  $ka = \pi/2$  se consideró que el desorden no estaba correlacionado aquí se hace lo mismo por la misma razón. Sustituyendo  $ka = \delta$  en el mapa para la variable angular se obtiene

$$\begin{aligned}
\theta_{n+1} - \theta_n &= \delta + \frac{1}{2} \left[ q_0 \left( \frac{1}{q_0 \alpha^2} + q_0 \alpha^2 \right) - U \frac{\cos(2\theta_n + 2\delta)}{\sin(\delta)} \right] \Delta_n \\
&- \frac{\sin(q_0 a)}{2q_0} \left[ \frac{1 - \cos(2\theta_n + \delta)}{\sin(\delta)} \right] u_n \\
&+ \frac{U}{4} \left[ q_0 \left( \frac{1}{q_0 \alpha^2} + q_0 \alpha^2 \right) \frac{\sin(2\theta_n + 2\delta)}{\sin(\delta)} - \frac{U \sin(4\theta_n + 4\delta)}{2 \sin^2(\delta)} \right] \Delta_n^2 \\
&+ \frac{\sin^2(q_0 a)}{4q_0^2 \sin^2(\delta)} \left[ \sin(2\theta_n + \delta) - \frac{1}{2} \sin(4\theta_n + 2\delta) \right] u_n^2
\end{aligned}$$

donde  $q_0$  es tal que

$$\cos(q_0 a) + \frac{U}{2q_0} \sin(q_0 a) - 1 = 0.$$

Desarrollando en serie y conservando únicamente los términos de la forma  $u_n/\delta$ ,  $\Delta_n/\delta$ ,  $\langle u_n^2 \rangle/\delta^2$ ,  $\langle \Delta_n^2 \rangle/\delta^2$  el mapa se reduce a

$$\begin{aligned}
\theta_{n+1} - \theta_n &= \delta + \sin^2(\theta_n) \left[ U \Delta_n - \frac{\sin(q_0 a)}{q_0} u_n \right] \frac{1}{\delta} \\
&+ \cos(\theta_n) \sin^3(\theta_n) \left[ U^2 \langle \Delta_n^2 \rangle + \frac{\sin^2(q_0 a)}{q_0^2} \langle u_n^2 \rangle \right] \frac{1}{\delta^2}. \quad (5.7)
\end{aligned}$$

Para pasar a la ecuación diferencial estocástica se hacen las siguientes sustituciones

$$\Delta_n \rightarrow \sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle} dW_1$$

$$u_n \rightarrow \sqrt{\langle u_n^2 \rangle} dW_2$$

donde  $W_1$  y  $W_2$  son dos procesos de Wiener independientes, obteniendo así la ecuación diferencial estocástica para la variable angular

$$d\theta = \left( \delta + \frac{\sigma^2}{\delta^2} \cos(\theta) \sin^3(\theta) \right) dt + \sin^2(\theta) \frac{U \sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle}}{\delta} dW_1 - \sin^2(\theta) \frac{\sin(q_0 a) \sqrt{\langle u_n^2 \rangle}}{q_0 \delta} dW_2$$

donde se ha definido  $\sigma^2 = U^2 \langle \Delta_n^2 \rangle + \frac{\sin^2(q_0 a)}{q_0^2} \langle u_n^2 \rangle$ . Para obtener la ecuación de Fokker-Planck que le corresponde a esta ecuación diferencial estocástica se define el vector  $\vec{b} = \left( \sin^2(\theta) \frac{U}{\delta} \sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle}, -\sin^2(\theta) \frac{\sin(q_0 a)}{q_0 \delta} \sqrt{\langle u_n^2 \rangle} \right)$ . La magnitud al cuadrado de este vector se puede escribir como  $|\vec{b}|^2 = \sin^4(\theta) \frac{\sigma^2}{\delta^2}$ . Finalmente se obtiene la ecuación de Fokker-Planck

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(\theta, t)}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial \theta} \left[ \left( \delta + \frac{\sigma^2}{\delta^2} \cos(\theta) \sin^3(\theta) \right) \rho(\theta, t) \right] \\ &+ \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \left[ \frac{\sigma^2}{\delta^2} \sin^4(\theta) \rho(\theta, t) \right]. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Dado que tenemos dos parámetros pequeños  $\sigma$  y  $\delta$ , se deben considerar dos límites  $\sigma \rightarrow 0$  y  $\delta \rightarrow 0$  pero esto genera un problema en la ecuación (5.8) debido al cociente  $\sigma/\delta$ . Para resolver este problema se define  $\gamma = \delta^3/\sigma^2$  y se hace un reescalamiento temporal  $\tau = t\sigma^2/\delta^2$ , con esto sólo es necesario considerar un límite  $\gamma \rightarrow 0$  donde el parámetro  $\gamma$  mide que tan lejos o cerca se está de la banda. La ecuación de Fokker-Planck que se obtiene es

$$\frac{\partial \rho(\theta, \tau)}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial \theta} \left[ -(\gamma + \cos(\theta) \sin^3(\theta)) \rho(\theta, \tau) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin^4(\theta) \rho(\theta, \tau)) \right].$$

Lo que se quiere es encontrar la distribución invariante (solución estacionaria), esta se obtiene cuando el tiempo tiende a infinito, para este caso la ecuación de Fokker-Planck se reduce a una ecuación diferencial

$$\frac{d\rho(\theta)}{d\theta} - 2 \left( \frac{\gamma}{\sin^4(\theta)} - \frac{\cos(\theta)}{\sin(\theta)} \right) \rho(\theta) = \frac{C}{\sin^4(\theta)} \quad (5.9)$$

donde  $C$  es una constante de integración. Esta es una ecuación diferencial ordinaria de primer orden y por lo tanto tiene como solución

$$\rho(\theta) = e^{\int_{\pi/2}^{\theta} A(x)dx} \left[ \rho(\pi/2) + \int_{\pi/2}^{\theta} e^{-\int_{\pi/2}^{\theta} A(y)dy} B(x)dx \right]$$

donde

$$A(x) = -2 \left( \frac{\gamma}{\sin^4(x)} - \cot(x) \right)$$

$$B(x) = \frac{C}{\sin^4(x)}.$$

Haciendo la integral de  $A(x)$  se tiene que

$$\Phi(\theta) = \int_{\pi/2}^{\theta} A(x)dx = -2\gamma \left[ \frac{1}{3} \cot^3(\theta) + \cot(\theta) \right] - \ln(\sin^2(\theta));$$

se ha usado  $\pi/2$  como punto inicial en vez de 0 porque así evitamos divergencias. Entonces la solución para la ecuación diferencial se puede escribir como

$$\rho(\theta) = \frac{1}{\sin^2(\theta)} e^{-2\gamma(\frac{1}{3} \cot^3(\theta) + \cot(\theta))} \left[ \rho(\pi/2) + \int_{\pi/2}^{\theta} e^{2\gamma(\frac{1}{3} \cot^3(\phi) + \cot(\phi))} \frac{C}{\sin^2(\phi)} d\phi \right].$$

Para evitar la divergencia cuando  $\theta \rightarrow \pi$  se necesita que

$$\rho(\pi/2) + \int_{\pi/2}^{\theta} d\phi e^{2\gamma(\frac{1}{3} \cot^3(\phi) + \cot(\phi))} \frac{C}{\sin^2(\phi)} = 0.$$

De esta última ecuación se despeja  $\rho(\pi/2)$  y la solución puede escribirse como

$$\rho(\theta) = \frac{\int_{\pi}^{\theta} e^{2\gamma(\frac{1}{3} \cot^3(\phi) + \cot(\phi))} \frac{C}{\sin^2(\phi)} d\phi}{\sin^2(\theta) e^{2\gamma(\frac{1}{3} \cot^3(\theta) + \cot(\theta))}}.$$

Cuando  $\theta \rightarrow \pi$  se tiene una forma indeterminada  $0/0$ , pero usando la regla de l'Hôpital se ve que el límite es finito

$$\lim_{\theta \rightarrow 0^+} \rho(\theta) = \lim_{\theta \rightarrow \pi^-} \rho(\theta) = \frac{-C}{2\gamma}.$$

La contante de integración  $C$  se encuentra usando el hecho que una distribución de probabilidad debe estar normalizada, osea

$$\int_0^{2\pi} \rho(\theta) d\theta = 1.$$

Entonces  $C$  está dada por la siguiente integral

$$\frac{1}{C} = 2 \int_0^\pi \frac{e^{-2\gamma(\frac{1}{3}\cot^3(\theta)+\cot(\theta))}}{\sin^2(\theta)} \int_\pi^\theta \frac{e^{2\gamma(\frac{1}{3}\cot^3(\phi)+\cot(\phi))}}{\sin^2(\phi)} d\phi d\theta$$

esta integral se puede simplificar si primeramente se hace el siguiente cambio de variable,  $y = \cot(\theta)$  y  $x = \cot(\phi)$ . Esto implica que

$$\frac{1}{C} = 2 \int_{-\infty}^\infty e^{-2\gamma(\frac{1}{3}y^3+y)} \int_y^\infty e^{2\gamma(\frac{1}{3}x^3+x)} dx dy;$$

después se sustituye  $t = y - x$  y  $dt = -dx$ , obteniendose así un resultado más simple para  $C$

$$\frac{1}{C} = -\sqrt{\frac{2\pi}{\gamma}} \int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{t}} e^{-2\gamma(\frac{t^3}{12}+t)} dt.$$

Entonces la distribución invariante en el borde de la banda es

$$\rho(\theta) = \frac{\exp(-2\gamma(\frac{1}{3}\cot^3(\theta) + \cot(\theta))) \int_\theta^\pi \frac{d\phi}{\sin^2(\theta)} \exp(2\gamma(\frac{1}{3}\cot^3(\theta) + \cot(\theta)))}{N(\gamma) \sin^2(\theta)} \quad (5.10)$$

en donde

$$N(\gamma) = \sqrt{\frac{2\pi}{\gamma}} \int_0^\infty \frac{dt}{\sqrt{t}} \exp\left(-2\gamma\left(\frac{t^3}{12} + t\right)\right).$$

Ahora que se tiene la distribución invariante se puede encontrar la longitud de localización. En el borde de la banda la longitud de localización inversa se puede escribir como

$$l^{-1} \simeq \frac{1}{a} \left\langle \ln \left[ D_n \left| \frac{\sin(\theta_{n+1})}{\sin(\theta_n)} \right| \right] \right\rangle.$$

El cociente de senos se puede escribir como

$$\frac{\sin(\theta_{n+1})}{\sin(\theta_n)} = 1 + \delta \cot(\theta_n) + \frac{\xi_n}{\delta} \sin(\theta_n) \cos(\theta_n) + \dots$$

donde  $\xi_n = U\Delta_n - \frac{\sin(q_0 a)}{q_0} u_n$ . Por lo tanto la longitud de localización inversa en el borde de la banda se puede escribir como

$$l^{-1} = \frac{\delta}{a} \langle \cot(\theta_n) \rangle = \frac{2\delta}{a} \int_0^\pi \rho(\theta) \cot(\theta) d\theta;$$

promediando la cotangente con la distribución (5.10) se tiene que

$$l^{-1} = \frac{2\delta}{N(\gamma)} \int_0^\pi \frac{e^{-2\gamma(\frac{1}{3}\cot^3(\theta)+\cot(\theta))}}{\sin^2(\theta)} \cot(\theta) \left( \int_\theta^\pi \frac{e^{2\gamma(\frac{1}{3}\cot^3(\phi)+\cot(\phi))}}{\sin^2(\phi)} d\phi \right) d\theta.$$

Para simplificar se hace el cambio de variables  $y = \cot(\phi)$ ,  $x = \cot(\theta)$ , con lo que se obtiene

$$l^{-1} = \frac{2\delta}{N(\gamma)} \int_{-\infty}^\infty x e^{-2\gamma(\frac{1}{3}x^3+x)} dx \int_{-\infty}^x e^{2\gamma(\frac{1}{3}y^3+y)} dy.$$

A continuación se usa la transformación  $t = x - y$ ,  $dt = -dy$  que da

$$l^{-1} = \frac{2\delta}{N(\gamma)} \int_{-\infty}^\infty x e^{-2\gamma(\frac{1}{3}x^3+x)} dx \int_{-\infty}^x e^{2\gamma(\frac{1}{3}(x-t)^3+(x-t))} dy.$$

Finalmente se obtiene la longitud de localización en un entorno del borde

$$l^{-1} = \delta \sqrt{\frac{\pi}{2\gamma}} \frac{1}{N(\gamma)} \int_0^\infty dt \sqrt{t} e^{-2\gamma(\frac{t^3}{12}+t)}. \quad (5.11)$$

Lejos del borde, esto es cuando  $\gamma \rightarrow \infty$  esta ecuación se reduce a

$$l^{-1} = \frac{\sigma^2}{8a\delta^2}$$

que es el resultado que ya se había encontrado en la sección 3.2. En el borde de la banda, osea cuando  $\gamma \rightarrow 0$  la ecuación (5.11) se reduce a

$$l^{-1} \sim \frac{6^{1/3} \sqrt{\pi}}{2a\Gamma(1/6)} (\sigma^2)^{1/3}. \quad (5.12)$$

Este resultado muestra el mismo escalamiento anómalo encontrado en el modelo de Anderson en el borde de la banda. Esto se debe a que en los dos modelos la distribución de probabilidad de la variable angular en el borde tienen la misma forma y además la razón  $\psi_{n+1}/\psi_n$  se reduce a la misma forma en función de  $\theta$ . Para el caso de la anomalía en  $ka = \pi$  se realiza el mismo procedimiento y se obtiene el mismo resultado que para la anomalía en  $ka = 0$ .

## Capítulo 6

# Estados electrónicos anómalamente localizados

En esta sección se discute como específicas intercorrelaciones entre el desorden compositivo y estructural hacen que el modelo de Kronig-Penney tenga estados electrónicos tales que su amplitud decrece como una exponencial estirada lejos del centro de localización  $n_0$ , o sea que

$$|\psi_n| \sim e^{-D\sqrt{|n-n_0|}}$$

donde  $D$  es una constante. Esto corresponde a una exponencial estirada  $\exp(-|x|^\alpha)$  con exponente  $\alpha = 1/2$ . Este fenómeno tiene su contraparte en un modelo de Anderson con energía  $E = 0$  que corresponde al centro de la banda de energía y desorden puramente fuera de la diagonal.

Como se vió en la sección 3.1 el modelo de Kronig-Penney es equivalente a un modelo de enlace fuerte que se obtiene eliminando los momentos del mapa hamiltoniano (3.6) y haciendo la sustitución  $x_n \rightarrow \psi_n$ . Se obtiene así la ecuación

$$\frac{1}{\sin[q(a + \Delta_n)]} \psi_{n+1} + \frac{1}{\sin[q(a + \Delta_{n-1})]} \psi_{n-1} = \left[ \cot[q(a + \Delta_n)] + \cot[q(a + \Delta_{n-1})] + \frac{U + u_n}{q} \right] \psi_n$$

la que a su vez se puede escribir en la forma

$$(1 + \gamma_n)\psi_{n+1} + (1 + \gamma_{n-1})\psi_{n-1} + \epsilon_n\psi_n = E\psi_n \quad (6.1)$$

donde  $E = E(q)$  se define como

$$E(q) = \frac{\frac{1}{q} + 2\langle \cot q(a + \Delta_n) \rangle}{\left\langle \frac{1}{\sin q(a + \Delta_n)} \right\rangle}$$

y las variables aleatorias  $\gamma_n = \gamma_n(q)$  y  $\epsilon_n = \epsilon_n(q)$  están dadas por

$$\gamma_n(q) = \frac{1}{\left\langle \frac{1}{\sin q(a + \Delta_n)} \right\rangle} - 1$$

$$\begin{aligned} \epsilon_n(q) = & \frac{1}{\left\langle \frac{1}{\sin q(a + \Delta_n)} \right\rangle} \left[ 2\langle \cot q(a + \Delta_n) \rangle - \cot q(a + \Delta_n) \right. \\ & \left. - \cot q(a + \Delta_{n-1}) - \frac{u_n}{q} \right]. \end{aligned}$$

Esto dice que el modelo de Kronig-Penney en su forma de modelo de enlace fuerte tiene su contraparte en un modelo de Anderson con desorden tanto en la diagonal principal como fuera de la diagonal. En el caso de desorden estructural nulo, el modelo se reduce al modelo de Anderson ordinario con desorden diagonal.

Ahora se considera el caso en que el desorden compositivo y estructural tienen una intercorrelación de la forma

$$u_n = 2q_c \langle \cot q_c(a + \Delta_n) \rangle - q_c \cot q_c(a + \Delta_n) - q_c \cot q_c(a + \Delta_{n-1}) \quad (6.2)$$

donde  $q_c$  es el vector de onda tal que

$$E(q_c) = 0. \quad (6.3)$$

Tomando en cuenta la ecuación que nos da la estructura de las bandas de energía (3.12), en la aproximación a segundo orden la ecuación (6.3) se puede escribir como

$$\cos(k_c a) = \frac{q_c \langle \Delta_n^2 \rangle U}{2 \sin(q_c a)}.$$

Si el desorden estructural es suficientemente pequeño, el lado derecho de esta ecuación es menor que uno, lo cual implica que existe un vector de Bloch  $k_c$  tal que  $q(k_c)$  es solución de  $E(q_c)$ . Haciendo un desarrollo en serie se obtiene un valor aproximado de  $k_c$

$$k_c \simeq \frac{\pi}{2a} - \frac{\bar{q} \langle \Delta_n^2 \rangle U}{2a \sin(\bar{q} a)} \quad (6.4)$$

donde  $\bar{q} = q(\pi/2a)$ . Para el caso de desorden débil,  $k_c$  no se desvía mucho de  $\pi/2a$  por lo que se puede aproximar  $q_c^2 \simeq \bar{q}^2$  que está cerca del centro de la banda de energía.

Si el desorden estructural y compositivo cumplen con la relación (6.2) y si además el electrón tiene la energía crítica  $q_c$  la ecuación (6.1) se reduce a

$$(1 + \gamma_n(q_c))\psi_{n+1} + (1 + \gamma_{n-1}(q_c))\psi_{n-1} = 0 \quad (6.5)$$

que corresponde a la ecuación de Schrödinger de un modelo de Anderson con desorden puramente fuera de la diagonal y energía cero. Es conocido que este modelo posee estados electrónicos que presentan una localización anómala porque están localizados pero decrecen como una exponencial estirada [20]. Debido a que el modelo de Kronig-Penney con desorden se puede escribir como un modelo de Anderson con energía  $E = 0$  cuando el desorden compositivo tiene la forma (6.2) y el electrón posee una energía  $q_c$ , entonces el modelo de Kronig-Penney también tiene estados electrónicos tales que su amplitud decrece como la exponencial de la raíz de la distancia desde el centro de localización.

Esta propiedad se puede ver de la siguiente manera. La ecuación (6.5) se puede escribir como

$$|(1 + \gamma_n(q_c))\psi_{n+1}| = |(1 + \gamma_{n-1}(q_c))\psi_{n-1}|,$$

tomando el logaritmo natural de ambos lados de esta ecuación se tiene que

$$\ln |\psi_{n+1}| = \ln |\psi_{n-1}| - \ln |1 + \gamma_n(q_c)| + \ln |1 + \gamma_{n-1}(q_c)|,$$

que a su vez se puede escribir de la forma

$$\ln |\psi_{2n}| = \ln |\psi_0| + \sum_{l=0}^{n-1} [\ln |1 + \gamma_{2l}(q_c)| - \ln |1 + \gamma_{2l+1}(q_c)|].$$

Tomando en cuenta el teorema central del limite se puede concluir que la variable aleatoria  $\ln |\psi_n|$  tiene promedio nulo y una varianza que crece linealmente con  $n$ .

Este resultado también es correcto cuando se tienen correlaciones de largo alcance de la forma

$$\chi(l) = \frac{\langle x_n x_{n-l} \rangle}{\langle x_n^2 \rangle} = \frac{1}{c_2 - c_1} \frac{1}{\pi l} [\sin(\pi l c_2) - \sin(\pi l c_1)] \quad (6.6)$$

donde  $c_1$  y  $c_2$  son números reales tales que  $0 \leq c_1 < c_2 \leq 1$ . Esto se debe al siguiente resultado: Sea dada una sucesión de variables aleatorias  $x_n$  correlacionadas con promedio nulo y sea  $S_N = \sum_{n=1}^N x_n$  la suma de los primeros  $N$  términos de la sucesión, entonces la condición mínima que se necesita para que el promedio cuadrático de  $S_N$  crezca linealmente, o sea que

$$\langle (S_N)^2 \rangle \sim N,$$

es que la densidad espectral de  $x_n$  sea finita en el origen [21] [22]. La densidad espectral que corresponde al correlador binario (6.6) es

$$W(ka) = \begin{cases} \frac{1}{c_2 - c_1} & \text{si } ka \in \left[ c_1 \frac{\pi}{2}, c_2 \frac{\pi}{2} \right] \cup \left[ \pi - c_2 \frac{\pi}{2}, \pi - c_1 \frac{\pi}{2} \right] \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases} \quad (6.7)$$

que es cero en el origen. Por lo que se puede concluir que

$$\ln |\psi_n| \sim \sqrt{n}$$

incluso si el desorden tiene correlaciones de largo alcance del tipo (6.7).

Desarrollando a segundo orden  $E(q)$ ,  $\gamma_n(q)$  y la ecuación (6.2) es posible encontrar una expresión para la longitud de localización de los estados electrónicos. Se deriva una ecuación para la longitud de localización de los estados electrónicos al segundo orden cuando el desorden compositivo y estructural se relacionan de la forma (6.2) y además el desorden estructural tiene autocorrelaciones de largo alcance de la forma (6.6).

Al segundo orden la ecuación (6.2) se puede escribir como

$$u_n = \frac{q_c^2}{\sin^2(q_c a)} (\Delta_n + \Delta_{n-1}).$$

o también como

$$\tilde{u}_n = \tilde{c}(\tilde{\Delta}_n + \tilde{\Delta}_{n-1}) \quad (6.8)$$

donde  $\tilde{c} = q_c \sin(qa)/qU \sin(q_c a)$ . Para continuar con los calculos es conveniente pasar a las variables  $\tilde{u}_n$ ,  $\tilde{\Delta}_n$  y calcular los siguientes correladores

$$\begin{aligned} \langle \tilde{u}_n^2 \rangle &= 2\tilde{c}^2(\langle \tilde{\Delta}_n^2 \rangle + \langle \tilde{\Delta}_n \tilde{\Delta}_{n-1} \rangle) \\ \langle \tilde{u}_n \tilde{u}_{n-1} \rangle &= \tilde{c}^2(2\langle \tilde{\Delta}_n \tilde{\Delta}_{n-1} \rangle + \langle \tilde{\Delta}_n \tilde{\Delta}_{n-2} \rangle + \langle \tilde{\Delta}_n \tilde{\Delta}_{n+1} \rangle) \\ \langle \tilde{u}_n \tilde{\Delta}_{n-1} \rangle &= \tilde{c}(\langle \tilde{\Delta}_n \tilde{\Delta}_{n-1} \rangle + \langle \tilde{\Delta}_n \tilde{\Delta}_{n+1} \rangle) \\ \langle \tilde{u}_{n-1} \tilde{\Delta}_n \rangle &= \tilde{c}(\langle \tilde{\Delta}_n \tilde{\Delta}_{n-1} \rangle + \langle \tilde{\Delta}_n \tilde{\Delta}_{n-1} \rangle) \\ \langle \tilde{u}_n \tilde{\Delta}_n \rangle &= \tilde{c}(\langle \tilde{\Delta}_n^2 \rangle + \langle \tilde{\Delta}_n \tilde{\Delta}_{n-1} \rangle) \end{aligned} \quad (6.9)$$

De aquí se puede ver que el correlador  $\langle \tilde{u}_n \tilde{\Delta}_{n-1} \rangle \neq \langle \tilde{u}_{n-1} \tilde{\Delta}_n \rangle$  o sea que  $\langle \tilde{u}_n \tilde{\Delta}_{n-1} \rangle \neq \langle \tilde{u}_n \tilde{\Delta}_{n+1} \rangle$  por lo que no se cumple la propiedad de isotropía que nos dice que  $\langle \tilde{u}_n \tilde{\Delta}_{n-1} \rangle = \langle \tilde{u}_n \tilde{\Delta}_{n+1} \rangle$ . Para obtener la longitud de localización de los estado electrónicos (o sea el exponente de Lyapunov) usamos la ecuación (3.23), que escrita en las variables  $\tilde{u}_n$  y  $\tilde{\Delta}_n$  toma la forma

$$\begin{aligned} 8al^{-1} &= \langle \tilde{u}_n^2 \rangle + \langle \tilde{\Delta}_n^2 \rangle - 2\langle \tilde{u}_n \tilde{\Delta}_n \rangle \cos(ka) \\ &+ 2 \sum_{l=1}^{\infty} \langle \tilde{u}_n \tilde{u}_{n-l} \rangle \cos(2kal) - 2 \sum_{l=1}^{\infty} \langle \tilde{u}_n \tilde{\Delta}_{n-l} \rangle \cos[ka(2l-1)] \\ &+ 2 \sum_{l=1}^{\infty} \langle \tilde{\Delta}_n \tilde{\Delta}_{n-l} \rangle \cos(2kal) - 2 \sum_{l=1}^{\infty} \langle \tilde{u}_{n-l} \tilde{\Delta}_n \rangle \cos[ka(2l+1)]. \end{aligned} \quad (6.10)$$

Sustituyendo las identidades (6.8) y (6.9) en (6.10), la longitud de localización se puede escribir como

$$\begin{aligned} 8al^{-1} &= [1 + 2\tilde{c}^2 - 4\tilde{c} \cos(ka) + 2\tilde{c}^2 \cos(2ka)] \langle \tilde{\Delta}_n^2 \rangle \\ &+ 2[1 + 2\tilde{c}^2 - 4\tilde{c} \cos(ka) + 2\tilde{c}^2 \cos(2ka)] \sum_{l=1}^{\infty} \langle \tilde{\Delta}_n \tilde{\Delta}_{n-l} \rangle \cos(2kal). \end{aligned}$$

Simplificando la ecuación anterior el resultado final es

$$l^{-1} = \frac{\langle \tilde{\Delta}_n^2 \rangle}{8a} \left( 1 - 2 \frac{q_c^2 \sin(qa)}{Uq \sin^2(q_c a)} \cos(ka) \right)^2 W_2(ka) \quad (6.11)$$

El valor que  $l^{-1}$  debe tener en  $q_c$  es cero, esto se puede ver de la siguiente manera:

$$l^{-1} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \ln \left| \frac{\psi_{n+1}}{\psi_n} \right| = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \left| \prod_{n=1}^N \frac{\psi_{n+1}}{\psi_n} \right| = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \left| \frac{\psi_{N+1}}{\psi_1} \right|$$

debido a que en este punto se tiene un estado anómalamente localizado  $\psi_N \sim \exp(-\sqrt{N})$ , entonces  $l^{-1} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\sqrt{N}}{N} = 0$ .

Pero si se evalua la ecuación (6.11) en  $q_c$  el resultado no es cero debido a que esta ecuación se obtuvo usando la ecuación (6.8) que no es exacta en vez de la ecuación (6.2) que si es exacta.

Aunque el resultado (6.11) no es correcto en  $q = q_c$ , es correcto para los demás puntos (excepto los bordes de la banda) cuando el desorden es débil. Esta expresión funciona bien para casi todas las energías pero falla en  $q = q_c$  debido a que se descuidan los términos de orden superior que a su vez producen términos diagonales distintos de cero, a pesar de que son muy pequeños impiden la localización anómala y hacen que el exponente de lyapunov no sea cero como debería ser.

Para terminar, cuando se satisface la siguiente condición

$$1 - 2 \frac{q_c^2 \sin(q(k_e)a)}{Uq(k_e) \sin^2(q_c a)} \cos(k_e a) = 0.$$

el término entre parentesis de la ecuación (6.11) se hace cero, por lo tanto se tiene que  $l^{-1} = 0$ . Esto implica que la longitud de localización se hace infinita, por lo que se tiene un estado electrónico extendido con un vector de Bloch  $k_e$ .

## 6.1. Resultados numéricos

Para realizar cálculos numéricos es necesario conocer la distribución de probabilidad de las variables aleatorias  $\Delta_n$ , la distribución de probabilidad que se usa para estos cálculos es una distribución uniforme dada por

$$\rho(\Delta_n) = \begin{cases} 1/W & \text{si } \Delta_n \in [-W/2, W/2] \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases} \quad (6.12)$$

donde  $W = 0,1732\dots$  lo cual corresponde a una intensidad del desorden  $\sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle} = 0,05$ . Usando la distribución (6.12) se obtiene el resultado para  $E(q)$

$$E(q) = \frac{UW + 2 \ln \left[ \frac{\sin q(a + W/2)}{\sin q(a - W/2)} \right]}{\ln \left[ \frac{\sin q(a + W/2)}{\sin q(a - W/2)} \right]}$$

mientras que las variables aleatorias  $\gamma_n(q)$  y  $\epsilon_n(q)$  toman la forma

$$\gamma_n(q) = \frac{1}{\sin q(a + \Delta_n)} \frac{qW}{\ln \left[ \frac{\sin q(a + W/2)}{\sin q(a - W/2)} \right]}$$

$$\epsilon_n(q) = \frac{1}{\ln \left[ \frac{\sin q(a + W/2)}{\sin q(a - W/2)} \right]} \left( 2 \ln \left[ \frac{\sin q(a + W/2)}{\sin q(a - W/2)} \right] - qW [\cot q(a + \Delta_n) + \cot q(a - \Delta_{n-1})] - Wu_n \right)$$

La Figura (6.1) muestra la longitud de localización inversa en función del vector de Bloch y corresponde al caso de desorden sin autocorrelaciones. Se ve que hay un estado anómalo en  $k_c a / \pi = 0,49517$  que es un valor muy cercano al valor predicho por (6.4) que es  $k_c a / \pi = 0,4996$ . La Figura (6.2) muestra en detalle la longitud de localización en un entorno del punto donde está el estado anómalo.

Para obtener la Figura (6.3) se usaron los mismos parámetros que en la Figura (6.1), el único cambio es que ahora se consideraran correlaciones de largo alcance de la forma (6.6) con  $c_1 = 3/10$  y  $c_2 = 1$ . Se observa como en  $k_c a / \pi = 0,49517$  el exponente de Lyapunov se va a cero lo que prueba que el teorema central del límite es correcto cuando se tienen correlaciones de largo alcance del tipo (6.6). Esto lo único que dice es que existe un estado anómalo pero no quiere decir que realmente decrece como  $\exp(-\sqrt{x})$ , cualquier estado que decrezca como  $\exp(-x^\alpha)$  con  $0 < \alpha < 1$  se tiene que  $l^{-1} = 0$ . Entonces, la forma de demostrar que el exponente  $\alpha$  es  $1/2$  es la siguiente: para el caso de los estados electrónicos anómalos, esto es para  $k = k_c$  la variable aleatoria

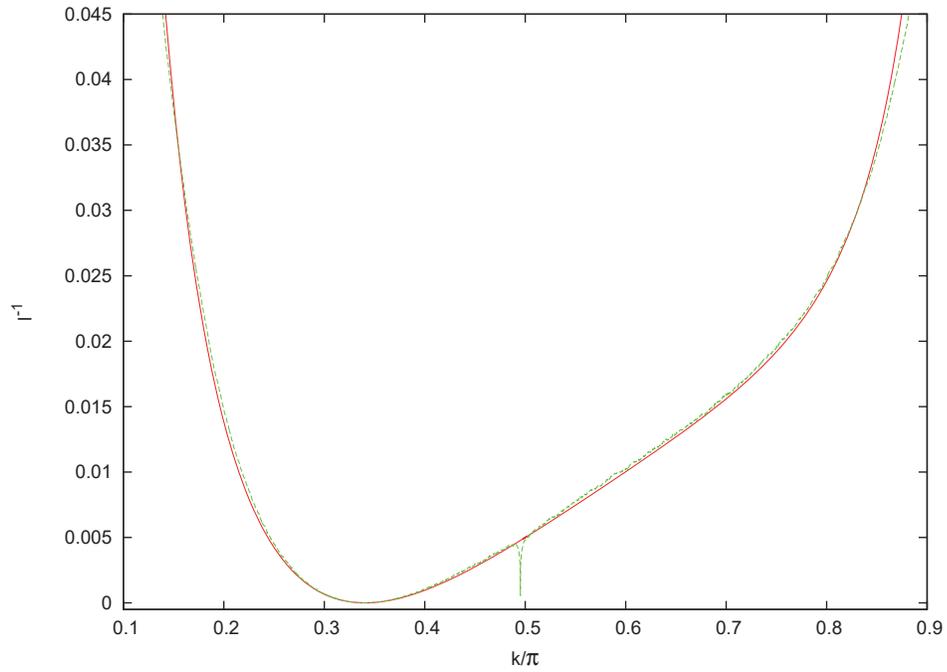


Figura 6.1: La línea continua es la grafica de la ecuación (6.11) mientras que la línea punteada es el resultado numérico. El resultado numérico muestra como la longitud de localización inversa se va a cero en el punto  $k/\pi = 0,49517$  demostrando que en ese punto hay un estado electrónico anómalamente localizado. Parámetros usados  $U = 4$ ,  $\langle \Delta_n^2 \rangle = 0.05$ .

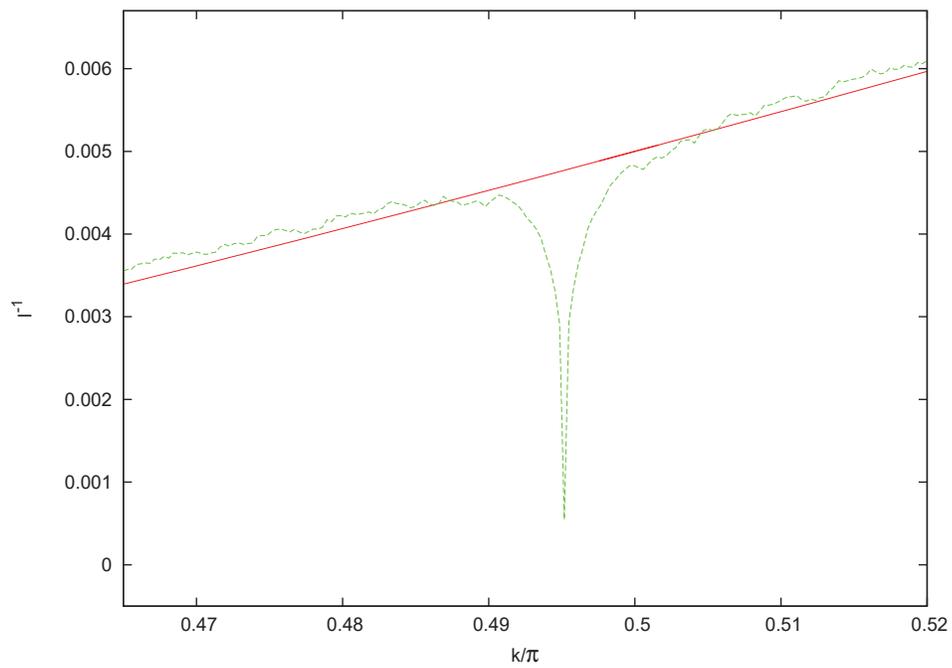


Figura 6.2: Esta gráfica muestra en detalle la longitud de localización en un entorno del punto donde está el estado anómalo.

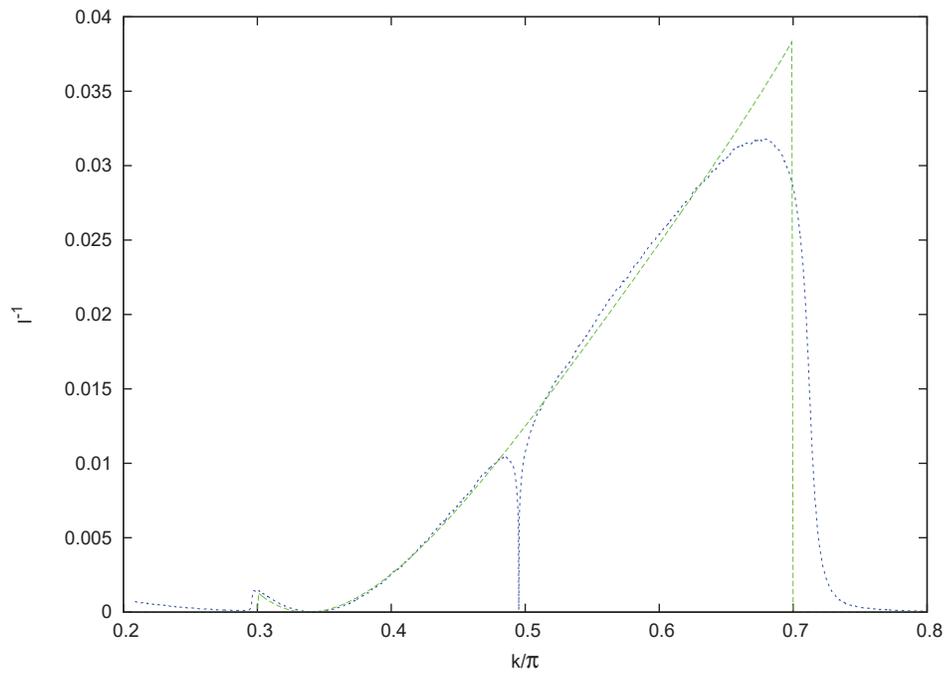


Figura 6.3: Exponente de Lyapunov en función del vector de Bloch. Caso con autocorrelaciones de largo alcance.

$\ln |\psi_n|$  se debe comportar como la posición de un camino aleatorio osea que debe tener promedio nulo y una varianza que crece linealmente en función de  $n$ . Las Figuras (6.4) y (6.5) muestran el primer y segundo momento de la variable aleatoria  $\ln |\psi_n|$ . Para apreciar la diferencia entre el estado anómalo y el que no lo es se toma un vector de Bloch  $k = 0,5036\pi$  cercano al vector de Bloch crítico  $k_c = 0,4996\pi$ . El cálculo de los momentos se hace promediando sobre 1000 realizaciones del desorden donde no se ha considerado ningún tipo de correlación. La Figura (6.4) muestra que el promedio de la variable aleatoria  $\ln |\psi_n|$  es cero mientras que la Figura (6.5) muestra que el segundo momento de  $\ln |\psi_n|$  crece linealmente con  $n$  como se esperaba, resultado que corrobora la conclusión que los estados electrónicos con energía crítica  $q_c$  se comportan asintóticamente como una exponencial estirada con exponente  $1/2$ .

Finalmente se calcula el coeficiente de transmisión. Debido a que el estado anómalo decrece más lentamente que un estado localizado exponencialmente la transmisión debe ser mayor pero como también es un estado localizado la transmisión debe disminuir al aumentar la cantidad de sitios en la cadena. Las Figuras (6.6) y (6.7) muestran el coeficiente de transmisión promedio para una cadena de 500 y 1500 sitios respectivamente. Se observa que en el estado anómalo la transmisión en promedio es mayor que en los estados electrónicos cercanos, además de que hay una disminución al aumentar la longitud de la cadena.

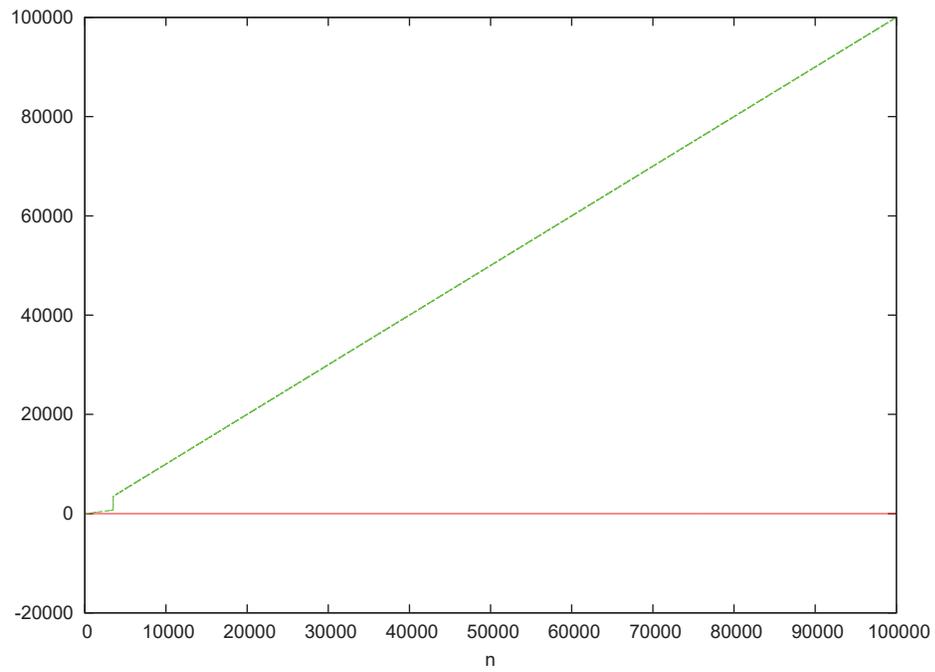


Figura 6.4:  $\langle \ln |\psi_n| \rangle$  en función de  $n$ . La línea continua de color rojo corresponde al valor crítico del vector de Bloch  $k_c = 0,4996\pi$  mientras que la línea segmentada de color verde corresponde a un vector de Bloch  $k = 0,5036\pi$ .

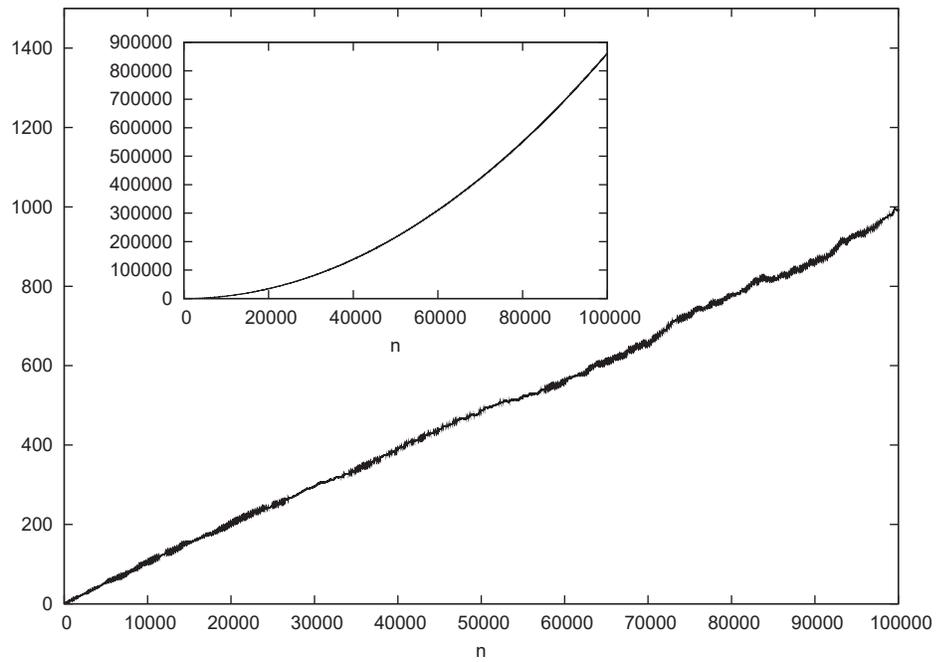


Figura 6.5:  $\langle \ln^2 |\psi_n| \rangle$  en función de  $n$ . La gráfica exterior corresponde al valor crítico del vector de Bloch  $k_c = 0,4996\pi$  donde se observa que hay un crecimiento lineal. La gráfica interna corresponde a un valor de  $0,5036\pi$ , es un valor cercano al valor crítico pero claramente no hay un crecimiento lineal.

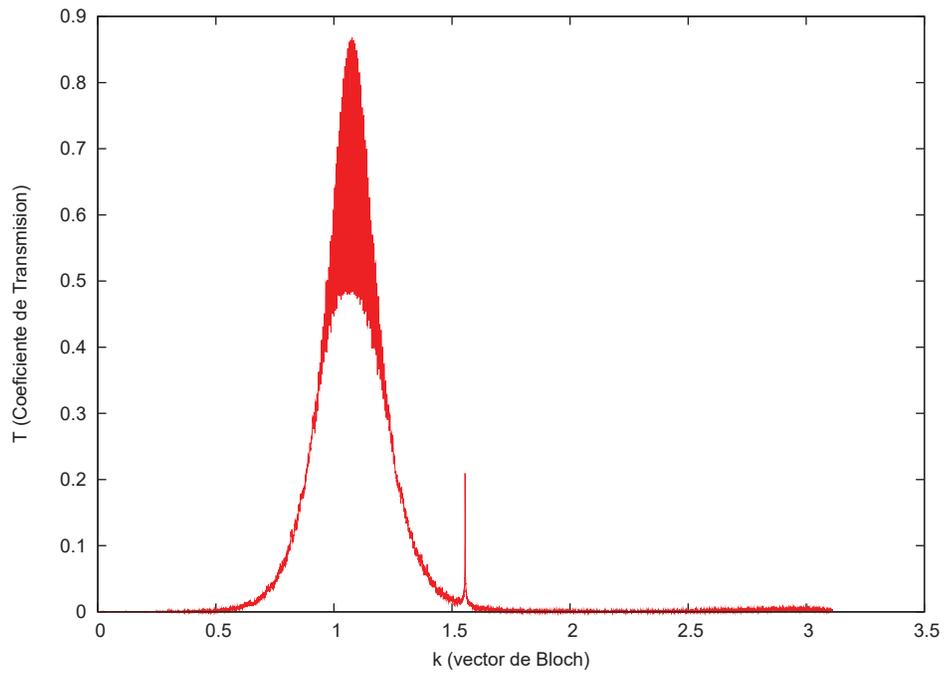


Figura 6.6: Esta gráfica muestra el coeficiente de transmisión promedio en función del vector de Bloch para una cadena de 500 sitios.

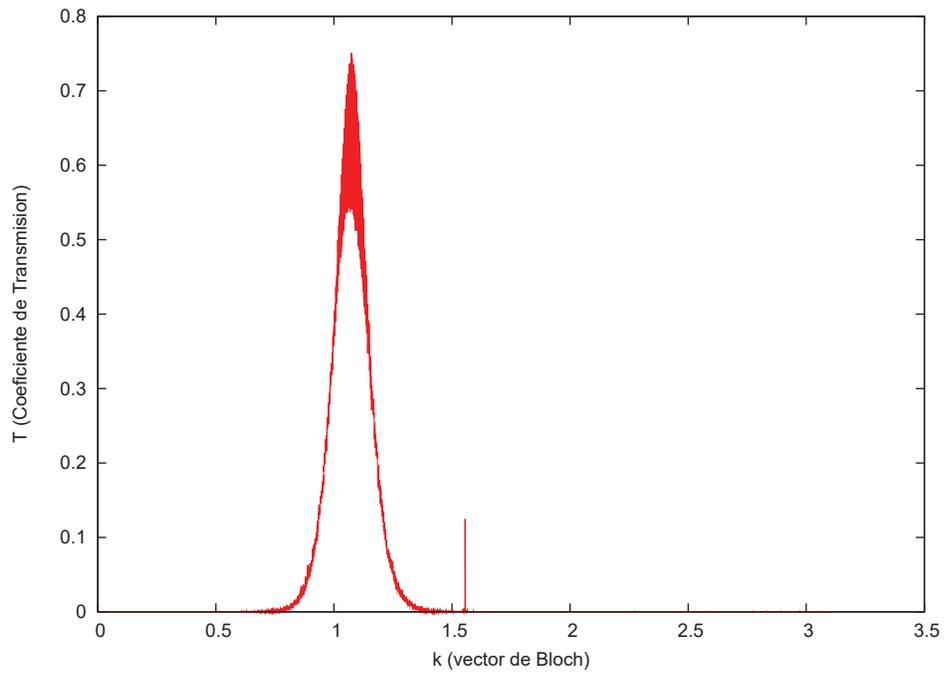


Figura 6.7: Esta gráfica muestra el coeficiente de transmisión promedio en función del vector de Bloch para una cadena de 1500 sitios.

# Conclusiones

En esta tesis se han estudiado los estados electrónicos del modelo de Kronig-Penney con desorden compositivo y estructural correlacionado. El modelo se analizó con el método del mapa hamiltoniano que se basa en la equivalencia matemática que hay entre la ecuación de Schrödinger del modelo de Kronig-Penney y la ecuación dinámica de un oscilador que es golpeado a intervalos de tiempo aleatorios con una fuerza de intensidad aleatoria; esto significa que los estados electrónicos en el modelo de Kronig-Penney equivalen a las orbitas del oscilador estocástico y que la longitud de localización inversa del primer modelo corresponde al exponente de Lyapunov del segundo. Con este método se obtuvo una expresión para la longitud de localización; esta expresión consta de tres términos que describen respectivamente los efectos del desorden compositivo, del desorden estructural y de la presencia simultánea de los dos.

Se analizó la transmisión en un modelo de Kronig-Penney aperiódico finito. Se estudio el efecto que tienen las autocorrelaciones y las intercorrelaciones del desorden en el coeficiente de transmisión. Se mostró que se pueden elegir específicas correlaciones de largo alcance para prediseñar ventanas de energía en las que la transmisión es casi nula y ventanas para las que el coeficiente de transmisión es cercano a la unidad. Al incluir las intercorrelaciones del desorden se puede disminuir aun más la transmisión. En una colaboración con U. Kuhl y O. Dietz se comprobó experimentalmente este efecto de las intercorrelaciones. Con esto se realiza un progreso importante en la construcción de dispositivos unidimensionales con propiedades de transporte hechas a la medida de las necesidades industriales.

Se estudiaron las anomalías del modelo de Kronig-Penney. Se mostró que cuando el vector de Bloch toma los valores  $ka = \pi/2$  y  $ka = 0$ , que corresponden a una energía cercana al centro de la banda y al borde de la banda respectivamente, la ecuación (3.24) no da el valor correcto para la

longitud de localización. Se calcularon analíticamente los valores correctos usando técnicas del cálculo estocástico. Y por último, al escribir el modelo de Kronig-Penney como un modelo de enlace fuerte y proponer una específica intercorrelación entre el desorden compositivo y estructural se generan estados electrónicos anómalamente localizados, esto es, estados que decrecen como una exponencial estirada. Estos estados son análogos a los que se encuentran en el centro de la banda en modelo de Anderson con desorden puramente no-diagonal.

# Bibliografía

- [1] G. Grosso, G. Pastori Parravicini, *Solid State Physics*, Academic Press, Amsterdam (2000)
- [2] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958)
- [3] K. Ishii, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **53**, 77 (1973)
- [4] F. A. B. F. de Moura, M. L. Lyra, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3375 (1998); *Physica A* **266**, 465 (1999)
- [5] F. M. Izrailev, T. Kottos, G. P. Tsironis *Phys. Rev. B* **52** (1995)
- [6] F. M. Izrailev, A. A. Krokhin, *Phys. Rev. Lett.* **82** 4062 (1999)
- [7] U. Kuhl, F. M. Izrailev, A. A. Krokhin, H.-J. Stöckmann, *Appl. Phys. Lett.* **77**, 633 (2000)
- [8] P. Markoŝ, C. M. Soukoulis, *Wave propagation* , Princeton University Press
- [9] F. M. Izrailev, A. A. Krokhin, S. E. Ulloa *Phys. Rev. B* **63** 041102-1 (2000)
- [10] A. Crisanti, G. Paladin, A. Vulpiani, *Products of Random Matrices in Statistical Physics*, Springer Verlag, Berlín (1993)
- [11] A. MacKinnon, “Transfer Matrices and Disordered Systems”, p. 21-30, in *Anderson Localization and Its Ramifications*, T. Brandes and S. Kettemann eds., Springer Verlag, Berlín, (2003)
- [12] H. Furstenberg, *Trans. Amer. Math. Soc.* **108**, 377 (1963)

- [13] R. E. Borland, *Proc. R. Soc. A* **274**, 529 (1963)
- [14] D. C. Herbert, R. Jones, *J. Phys. C: Solid St. Phys.* **4**, 1145 (1971)
- [15] D. J. Thouless, *J. Phys. C: Solid St. Phys.* **5**, 77 (1972)
- [16] D. J. Thouless, *Physics Reports* **13**, 93 (1974)
- [17] M. Kappus and F. Wegner *Z. Phys. B* **85** 15 (1981)
- [18] F. M. Izrailev, S. Ruffo, L. Tessieri, *J. Phys. A: Math. Gen.* **31** 52635270 (1998)
- [19] C. W. Gardiner, *Handbook of stochastic methods*, Springer (1985)
- [20] L. Fleishman, D. C. Licciardello *J. Phys. C: Solid State Phys.* **10** (1977)
- [21] S-K. Ma *Statistical Mechanics* Singapore: World Scientific (1985)
- [22] A. C. Davison, D. R. Cox *Proc. R. Soc. A* **424** **25562** (1989)
- [23] J. C. Hernández-Herrejón, F. M. Izrailev, L. Tessieri *Physica E* **40** (2008)
- [24] J. C. Hernández-Herrejón, F. M. Izrailev, L. Tessieri *Physica E* **42** (2010)
- [25] J. C. Hernández-Herrejón, F. M. Izrailev, L. Tessieri *J. of Phys A* **43** (2010)