



Universidad Michoacana de
San Nicolás de Hidalgo



Instituto de Física y Matemáticas

LOCALIZACIÓN Y TRANSPORTE EN
MEDIOS BIDIMENSIONALES CON
DESORDEN CORRELACIONADO

T E S I S

que para obtener el título de:

Doctor en Ciencias en el Área de Física

P r e s e n t a :

Gabino Corona Patricio

Asesor:

Dr. Luca Tessieri

Morelia Michoacán, febrero de 2021

Índice general

1. Modelo de Kronig-Penney 1D aperiódico	11
1.1. Mapa hamiltoniano	12
1.2. Longitud de localización	15
1.3. Algoritmo para crear bordes de movilidad	18
2. Un modelo de Kronig-Penney 2D con simetría circular	23
2.1. Separación de variables	25
2.2. Método del mapa hamiltoniano	26
2.3. Resultados numéricos para el modelo de Kronig-Penney 2D: exponente de Lyapunov	29
2.4. Transmisión a través del modelo de Kronig-Penney 2D	36
3. Un modelo 2D con desorden en la variable angular	45
3.1. Parte angular: Modelo de Kronig-Penney 1D aperiódico finito	47
3.1.1. Modelo de enlace fuerte asociado al modelo de Kronig-Penney 1D angular continuo	48
3.1.2. Modelo de Kronig-Penney 1D periódico finito (método analítico)	50
3.1.3. Modelo de Kronig-Penney 1D periódico finito (método numérico)	52
3.1.4. Modelo de Kronig-Penney 1D aperiódico finito	54
3.2. Razón de participación inversa para autoestados Θ	58
3.3. Parte radial y función global ψ	61
4. Conclusiones	67

Resumen

En esta tesis se consideran dos modelos aleatorios con hamiltonianos separables en coordenadas polares. Nuestro objetivo es estudiar las propiedades de localización y transporte de sistemas bidimensionales con desorden con correlaciones.

En el primer modelo el potencial aleatorio depende de la coordenada radial, mientras que en el segundo depende de la coordenada angular. La simetría de los potenciales nos permite analizar ambos modelos en términos de sistemas unidimensionales.

En el primer caso, las correlaciones espaciales del desorden permiten fortalecer o reducir la localización de la parte radial de los autoestados en ventanas de energía predefinidas. En el segundo caso, el desorden correlacionado puede usarse para conseguir la localización de autoestados específicos en un reducido intervalo angular. De esta forma se puede obtener un control considerable sobre las propiedades de transmisión de dispositivos electrónicos o electromagnéticos bidimensionales.

Palabras claves

Localización de Anderson, modelos bidimensionales, desorden con correlaciones.

Abstract

In this thesis we consider two random models with Hamiltonians that are separable in polar coordinates. Our purpose is to study the localization and transport properties of two-dimensional systems with correlated disorder.

In the first model the random potential depends on the radial coordinate, while in the second model it depends on the angular coordinate. The symmetry of the potentials allows us to analyze both models in terms of one-dimensional systems.

In the first case the spatial correlations of the disorder make possible to enhance or reduce the localization of the radial part of the eigenstates in predefined energy windows. In the second case, correlated disorder can be used to achieve localization of specific eigenstates in a reduced angular interval. In this way one can obtain considerable control over the transmission properties of two-dimensional electronic or electromagnetic devices.

Keywords

Anderson localization, bidimensional models, correlated disorder.

Introducción

La localización de Anderson es un fenómeno de interferencia que consiste en la ausencia de difusión cuántica en medios desordenados [1]. Para un estudio teórico de este fenómeno, la dimensión del medio desordenado desempeña un papel importante. Los medios unidimensionales, por ejemplo, son más dóciles en el sentido de la manipulación algebraica y cálculos analíticos en comparación con los medios bidimensionales y tridimensionales. E incluso hay propiedades que tienen los modelos unidimensionales pero los tridimensionales no: en medios unidimensionales, por muy pequeña que sea la intensidad de desorden sin correlaciones, todos los autoestados se localizan; sin embargo, a diferencia de los unidimensionales, en los modelos tridimensionales existe una posible transición de localización-delocalización.

Esta tesis está dedicada al estudio de la localización y transporte en medios bidimensionales con desorden correlacionado; para este fin, se proponen dos modelos bidimensionales con hamiltonianos separables en coordenadas polares cuyas simetrías nos permiten estudiarlos en términos de modelos unidimensionales:

- 1) Un modelo de Kronig-Penney 2D finito con potencial aleatorio que depende sólo de la variable radial.
- 2) Un modelo de Kronig-Penney 2D finito con un potencial aleatorio que depende sólo de la variable angular.

Así, el modelo 1) se reduce al análisis de un modelo de Kronig-Penney 1D con una fuerza centrífuga, mientras que el modelo 2) se reduce al estudio de un modelo de Kronig-Penney 1D angular aperiódico finito. Las características de los potenciales de los dos modelos elegidos producen una localización en la parte radial de la función de onda en 1) y una localización de la parte angular de la función de onda en 2).

Gracias al paralelismo de las ecuaciones de Schrödinger y Helmholtz, los resultados sobre las propiedades de localización de los modelos 1) y 2) pueden aprovecharse para la fabricación de dispositivos capaces de localizar ondas electromagnéticas en regiones

o direcciones específicas.

De las primeras investigaciones sobre localización en medios bidimensionales está la realizada por E. Abrahams, P. W. Anderson y D. C. Licciardello, ellos concluyeron de sus estudios teóricos una ausencia de difusión en dos dimensiones; introdujeron la ahora conocida como *Teoría del único parámetro de escala* [4]. Ellos dieron argumentos para decir que a temperatura $T = 0$, la conductancia G de un sistema electrónico desordenado depende de un solo parámetro: el tamaño L de la muestra (siendo L la longitud de un hipercubo de dimensión d). Realizaron un desarrollo asintótico de la función reescalada $\beta(G) = d \ln G / d \ln L$ en los casos límites $G \ll G_c$ y $G \gg G_c$ con $G_c \approx e^2 / \hbar$; donde, en tres dimensiones, G_c es un punto fijo inestable. Ellos concluyeron que en una y dos dimensiones no aparece comportamiento metálico; en dos dimensiones la conductancia pasa de decrecer logarítmicamente a decrecer exponencialmente conforme aumenta L .

En 1981 Patrick A. Lee y Daniel S. Fisher, consideraron un modelo de enlace fuerte sobre una retícula cuadrada; calcularon la conductancia adimensional usando la fórmula de Kubo como función de un único parámetro, la talla L del modelo. Realizaron un desarrollo de $\beta(L) \equiv d \ln g / d \ln L$ en serie de potencias de g^{-1} para desorden débil y observaron una especie de localización *logarítmica*, lo cual concuerda con la teoría del único parámetro de escala [5].

Así, de la teoría del único parámetro de escala tenemos que en sistemas desordenados en una y dos dimensiones, sin importar la intensidad del desorden, los autoestados se localizan. Una de las predicciones de la teoría del único parámetro de escala es que si se conoce la longitud de localización de un sistema de tamaño infinito se pueden describir algunas de las propiedades para muestras de tamaño finito. Este resultado es de bastante utilidad, en especial cuando no es posible obtener expresiones analíticas para estudiar la localización y transporte de algunos modelos. Por ejemplo, en un modelo unidimensional a medida que aumenta la talla L de éste se espera que el logaritmo de la transmisión $\log T$ sea una función de un sólo parámetro: el cociente de la longitud de localización para el caso límite de talla infinita l_{loc} y L , es decir $\log T \sim f(l_{\text{loc}}/L)$.

Se han realizado varios experimentos y empleado métodos para estudios numéricos en sistemas bidimensionales desordenados. De los métodos usados están las matrices de transferencia en representación de los sitios y diagonalización, funciones de Green y fórmula de Helbert-Johnes-Thouless, la fórmula de Kubo, etc. [13] [6]

En 1991, Ping Sheng y Zhao-Qing Zhang usan un modelo de percolación para simular las propiedades del transporte mesoscópico de películas metálicas desordenadas. La conductancia de una muestra mesoscópica se calcula por medio de la fórmula de Landauer con los coeficientes de transmisión y reflexión evaluados numéricamente con

una función recursiva de Green. La distribución de la conductancia se presenta en tres formas: normal, log-normal y entre normal y log-normal dependiendo del tamaño L de la muestra y la fracción del metal p . La variación del promedio con el tamaño de la muestra L produce que la longitud de localización y raíz cuadrática media de las fluctuaciones de la conductancia Δg presente diferentes casos, en uno de ellos Δg es constante en función de L en el orden de $e^2/\hbar$. Basados en los resultados se propone el uso de muestras mesoscópicas de películas metálicas desordenadas para observaciones experimentales de la localización de Anderson en electrones [7].

En 1992, M Schreiber y M Ottomeier reportan resultados numéricos en el estudio del modelo de Anderson usando matrices de transferencia y tamaños a escalas finitas, se obtienen longitudes de localización de estados electrónicos en sistemas 2D con desorden en las energías de sitio en tres modelos. Estos modelos son tres redes con celdas unitarias de distintas formas: de colmena, cuadradas y de triángulos equiláteros. Mientras que las longitudes de localización para un desorden particular difieren para los diferentes números de coordinación, se observa una completa localización en todos los casos. Resultados que concuerdan con la hipótesis del único parámetro de escala [8].

Algunos experimentos y reportes teóricos sugirieron la existencia de autoestados localizados con funciones de onda que no decrecen exponencialmente, es decir, decrecen como una ley de potencias [9]. En esta referencia, se considera un modelo de enlace fuerte bidimensional con desorden estructural de largo alcance observándose una energía crítica (pseudo borde de movilidad) que divide localización exponencial de localización no exponencial.

Al igual que en modelos unidimensionales el desorden con correlaciones modifica las propiedades de localización en modelos bidimensionales. Por ejemplo, en [10] se consideró el modelo de Anderson 2D con desorden en las energías de sitio ϵ_{im} sobre una retícula regular 2D $N \times N$. El desorden sobre las energías de sitio se generó aplicando el método de Fourier con una densidad espectral inversamente proporcional a cierta potencia α_{2D} : $S(k) \propto 1/k^{\alpha_{2D}}$. Usando el formalismo de diagonalización, se estudió la función de participación ξ de todos los autoestados. Para $\alpha_{2D} > 2$ se tiene una fase de estados extendidos en el régimen de bajas energías; además, si se resuelve la ecuación de Schrödinger para un paquete de onda inicialmente localizado, se puede determinar el desplazamiento cuadrático medio dependiente del tiempo ($\sigma^2(t)$) y la función de autocorrelación temporal $C(t)$. De acuerdo a los resultados se tienen estados extendidos a bajas energías en el régimen de fuerte correlaciones ($\alpha_{2D} > 2$).

El desorden con correlaciones puede dar origen a bordes de movilidad que separan estados extendidos de estados exponencialmente localizados [13]. En esta referencia se considera un modelo de Anderson en 2D sobre una retícula cuadrada; el desorden

de las energías de sitio presenta correlaciones, para generar las energías de sitio se usa la densidad espectral $S(k) \propto 1/k^{\alpha_{2D}}$. Se investiga el número de participación y sus fluctuaciones alrededor de la banda de energía. Para $\alpha_{2D} > 2$ se obtiene una especie de transición en las fluctuaciones relativas del número de participación inversa en $E = E_c$, localizando un "borde de movilidad" que separa estados extendidos y estados localizados exponencialmente.

De los resultados anteriormente mencionados, vemos que varios métodos utilizados para el estudio de modelos unidimensionales pueden extenderse para estudiar modelos bidimensionales. Por ejemplo en [22] se resuelve, con un método alternativo, la ecuación de Schrödinger para una partícula cuántica sometida al potencial de un oscilador. El método consiste en desarrollar los autoestados del sistema respecto a la base formada por los autoestados de un pozo de potencial infinito, esto conlleva a relaciones matriciales y diagonalizaciones. Este método ha sido empleado, por los mismos autores, para estudiar modelos de Kronig-Penney 1D con potenciales periódicos de perfil arbitrario (ver [23]) y para modelos de Kronig-Penney 2D definidos sobre una retícula rectangular con potenciales bidimensionales periódicos de perfil arbitrario [24]. Sin embargo, estos modelos de Kronig-Penney 2D son resueltos sólo para casos ordenados.

El objetivo de estudio en el modelo 1) es la transmisión, para ello, se ha utilizado la técnica del mapa hamiltoniano para encontrar la longitud de localización inversa l_{Loc}^{-1} , pues ésta nos brinda información sobre los intervalos de energía en donde la transmisión T se intensifica o debilita. Sin embargo, las predicciones de la longitud de localización inversa sobre T dependen del número de barreras N , cuanto más grande es N mejores son las predicciones. Aún así, los efectos del desorden con correlaciones sobre el modelo reflejados en l_{Loc}^{-1} hacen que sus predicciones sobre T prevalezcan a pesar de la finitud.

El modelo 2) se ha abordado de un modo distinto al 1), pues el modelo de Kronig-Penney 1D angular está definido sobre un dominio finito de longitud 2π y si el desorden fuese débil, existe el riesgo de que $l_{Loc} > 2\pi$. Aunque un desorden fuerte pudiese disminuir l_{Loc} , el desorden fuerte complica el control numérico sobre el desorden estructural en este modelo. Tampoco es viable un número de barreras muy grande, porque éste debilitaría el desorden estructural y posiblemente las posiciones de las barreras se intercambiasen, complicando una vez más, el control numérico sobre el desorden. Sin embargo es posible fortalecer la localización por medio de un desorden débil con correlaciones. Este modelo se ha analizado en términos de un parámetro equivalente a la longitud de localización inversa para modelos finitos, este es la razón de participación inversa IPR.

El contenido de esta tesis está organizado del siguiente modo: en el capítulo 1 presentamos algunos resultados relevantes del modelo de Kronig-Penney 1D aperiódico

con desorden compositivo y estructural, en el capítulo 2 se estudia el modelo con desorden en la variable radial y en el capítulo 3 se analiza el modelo con desorden en la variable angular.

Modelo de Kronig-Penney 1D aperiódico

El modelo de Kronig-Penney 1D fue introducido por primera vez en 1931 para analizar los estados electrónicos y niveles de energía en sistemas cristalinos [27]. Este modelo consiste en un potencial unidimensional formado por una sucesión infinita de barreras rectangulares idénticas y equiespaciadas como se muestra en la Fig. 1.1. El potencial es $V(x) = V_0$ en cada barrera y 0 en los pozos, la anchura de cada

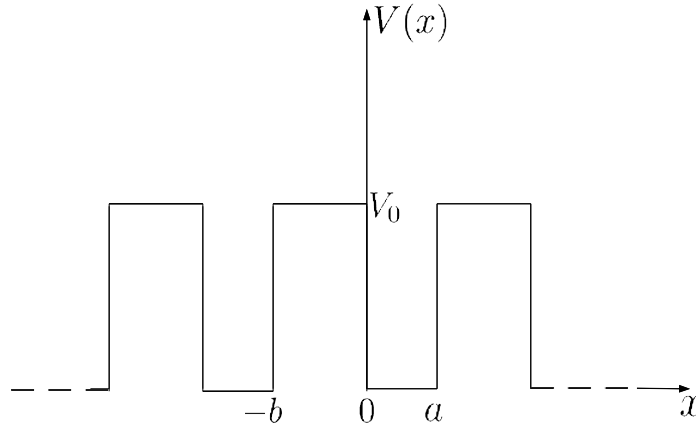


Figura 1.1: Modelo de Kronig-Penney 1D: una partícula está sometida a un potencial formado por una sucesión de barreras idénticas y equiespaciadas.

barrera es b y están separadas por una distancia a . Para estudiar la estructura de bandas de energías permitidas, Kronig y Penney tomaron el caso límite haciendo la anchura de cada barrera infinitesimalmente pequeña y la altura muy grande de modo que $V_0 b = \text{constante}$. En estas condiciones, se tiene una sucesión de potenciales con perfil deltiforme, la ecuación de Schrödinger para este caso es

$$-\psi''(x) + \sum_{n=-\infty}^{\infty} U\delta(x - x_n)\psi(x) = q^2\psi(x) \quad (1.1)$$

donde $x_n = na$ es la posición y U la intensidad de la n -ésima barrera delatiforme y $q^2 = 2mE/\hbar^2$. La periodicidad de este modelo puede romperse de dos formas: cuando la posición de la n -ésima barrera de (1) sufre una desviación aleatoria de su posición original na y la otra cuando las intensidades de las barreras se convierten también en variables aleatorias. En el primer caso se trata de desorden estructural y en el segundo de desorden compositivo.

El modelo de Kronig-Penney 1D únicamente con desorden compositivo en (1) es equivalente al modelo de Anderson 1D, en el cual, se ha estudiado cómo el desorden con correlaciones repercute en las propiedades de localización [28]; un resultado relevante es que la forma apropiada de las correlaciones da origen a bordes de movilidad efectivos. Los resultados del modelo de Anderson con desorden correlacionado fueron extendidos al modelo de Kronig-Penney 1D en [29].

Otro estudio reveló que la presencia de desorden estructural débil en (1), con correlaciones apropiadas, también puede originar bordes de movilidad efectivos [31].

Posteriormente se estudió el modelo de Kronig-Penney 1D en presencia de desorden compositivo y estructural con correlaciones en el régimen débil [30]; en este trabajo se obtiene una expresión analítica para la longitud de localización inversa que extiende los resultados obtenidos en [29] y [31] cuando las intercorrelaciones fortalecen o debilitan la localización. La ecuación de Schrödinger para este caso es

$$-\psi''(x) + \sum_{n=-\infty}^{\infty} U_n \delta(x - x_n) \psi(x) = q^2 \psi(x), \quad (1.2)$$

donde U_n es la intensidad de la n -ésima barrera delatiforme ubicada en $x_n = na + (\delta x)_n$ siendo $(\delta x)_n$ una ligera desviación aleatoria de la barrera alrededor de na . U_n puede descomponerse como la suma de dos términos U y u_n , siendo $U = \langle U_n \rangle$ y u_n las fluctuaciones alrededor de U .

En este capítulo presentaremos una derivación de la expresión analítica de la longitud de localización l_{loc}^{-1} inversa obtenida en [30] usando el método del mapa hamiltoniano; así como el algoritmo desarrollado por los autores para generar desorden intercorrelacionado.

1.1. Mapa hamiltoniano

El método del mapa hamiltoniano consiste en utilizar la equivalencia de la ecuación (1.2) con la ecuación dinámica de un oscilador con frecuencia perturbada a tiempos irregulares

$$\frac{d^2 x}{dt^2} + \left[q^2 - \sum_{n=-\infty}^{\infty} U_n \delta(t - t_n) \right] x = 0, \quad (1.3)$$

donde q es la frecuencia imperturbada, y de acuerdo a la analogía entre las ecuaciones (1.3) y (1.2), se tiene la correspondencia $\psi \rightarrow x$ y $x_n \rightarrow t_n$

Si integramos la ecuación (1.3) sobre el intervalo $[t_n^-, t_{n+1}^-]$ entre dos perturbaciones

CAPÍTULO 1. MODELO DE KRONIG-PENNEY 1D APERIÓDICO

se obtiene el mapa hamiltoniano

$$\begin{bmatrix} x_{n+1} \\ p_{n+1} \end{bmatrix} = \mathbf{Q}_n \begin{bmatrix} x_n \\ p_n \end{bmatrix},$$

donde $x_n = x(t_n^-)$, $p_n = p(t_n^-)$ y la matriz de evolución temporal $\mathbf{Q}_n$ es

$$\mathbf{Q}_n = \begin{bmatrix} \cos[q(a + \Delta_n)] + \frac{U_n}{q} \sin[q(a + \Delta_n)] & \frac{\sin[q(a + \Delta_n)]}{mq} \\ -mq \sin[q(a + \Delta_n)] + mU_n \cos[q(a + \Delta_n)] & \cos[q(a + \Delta_n)] \end{bmatrix}, \quad (1.4)$$

aquí $\Delta_n = (\delta t)_{n+1} - (\delta t)_n$ es el desplazamiento relativo de las barreras. Los siguientes cálculos estarán basados en la suposición de que el desorden es débil, es decir

$$\langle u_n^2 \rangle \ll U^2 \quad (1.5)$$

$$q^2 \langle \Delta_n^2 \rangle \ll 1 \quad \text{y} \quad \langle \Delta_n^2 \rangle U q a^2 \ll 1 \quad (1.6)$$

Para analizar la evolución de las trayectorias usaremos el procedimiento expuesto en [31]. Uno de los primeros pasos es eliminar el efecto del campo medio asociado a U ; esto puede lograrse con la transformación canónica

$$\begin{bmatrix} x_n \\ p_n \end{bmatrix} = \mathbf{P}_n \begin{bmatrix} X_n \\ P_n \end{bmatrix}. \quad (1.7)$$

con

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} \alpha \cos \phi & \frac{1}{q\alpha} \sin \phi \\ -q\alpha \sin \phi & \frac{1}{q\alpha} \cos \phi \end{bmatrix} \quad (1.8)$$

Sea $\tilde{\mathbf{Q}}_n$ la matriz de evolución temporal para (X_n, P_n) . Los parámetros ϕ y α pueden determinarse de la condición de que $\tilde{\mathbf{Q}}_n = \mathbf{P}_n^{-1} \mathbf{Q} \mathbf{P}_n$ se reduce a una rotación en ausencia de desorden, es decir

$$\begin{bmatrix} X_{n+1}^{(0)} \\ P_{n+1}^{(0)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \gamma & \sin \gamma \\ -\sin \gamma & \cos \gamma \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_n^{(0)} \\ P_n^{(0)} \end{bmatrix}.$$

Aplicando esta condición, encontramos que

$$\phi = qa/2$$

$$\alpha^4 = \frac{1}{q^2} \frac{\sin qa - \frac{U}{2q}(\cos qa - 1)}{\sin qa - \frac{U}{2q}(\cos qa + 1)} \quad (1.9)$$

y

$$\cos \gamma = \cos qa + \frac{U}{2q} \sin qa. \quad (1.10)$$

La relación (1.10) es una manifestación del teorema de Bloch y establece la estructura de bandas del modelo de Kronig-Penney 1D en ausencia de desorden; esto sugiere que $\gamma = ka$ siendo k el vector de onda de Bloch.

CAPÍTULO 1. MODELO DE KRONIG-PENNEY 1D APERIÓDICO

Dado que estamos interesados en el caso de desorden débil, podemos hacer un desarrollo de la matriz $\tilde{\mathbf{Q}}_n = \mathbf{P}_n^{-1} \mathbf{Q} \mathbf{P}_n$ en serie de potencias de Δ_n y u_n hasta segundo orden para $|q\Delta_n| \ll 1$ y $u_n \ll U$. Así,

$$\begin{bmatrix} X_{n+1} \\ P_{n+1} \end{bmatrix} = \left[\tilde{\mathbf{Q}}_n^{(0)} + \tilde{\mathbf{Q}}_n^{(1)} + \tilde{\mathbf{Q}}_n^{(2)} + \dots \right] \begin{bmatrix} X_n \\ P_n \end{bmatrix}, \quad (1.11)$$

donde

$$\tilde{\mathbf{Q}}_n^{(1)} = \begin{bmatrix} \frac{\sin qa}{2q} u_n - \frac{1}{\alpha^2} (\sin ka) \Delta_n & \frac{1}{\alpha^2} \left[\frac{1 - \cos qa}{2q^2} u_n - (\cos ka) \Delta_n \right] \\ \alpha^2 q^2 \left[\frac{1 + \cos qa}{2q^2} u_n - (\cos ka) \Delta_n \right] & \frac{\sin qa}{2q} u_n - \alpha^2 q^2 (\sin ka) \Delta_n \end{bmatrix}$$

y

$$\tilde{\mathbf{Q}}_n^{(2)} = \begin{bmatrix} \frac{\cos qa + 1}{2} u_n \Delta_n - \frac{1}{2} q^2 (\cos ka) \Delta_n^2 & \frac{1}{2q\alpha^2} (\sin qa) u_n \Delta_n - \frac{1}{2} q^2 (\sin ka) \Delta_n^2 \\ -\frac{q\alpha^2}{2} (\sin qa) u_n \Delta_n + \frac{1}{2} q^2 (\sin ka) \Delta_n^2 & \frac{\cos qa - 1}{2} u_n \Delta_n - \frac{1}{2} q^2 (\cos ka) \Delta_n^2 \end{bmatrix}.$$

Aquí se han usado las identidades (1.10) y (1.9), éstas implican

$$\sin^2 ka = \left\{ \sin qa - \frac{U}{2q} [\cos qa + 1] \right\} \left\{ \sin qa - \frac{U}{2q} [\cos qa - 1] \right\} \quad (1.12)$$

y

$$\sin^2 ka = q^2 \alpha^4 \left\{ \sin qa - \frac{U}{2q} [\cos qa + 1] \right\}^2. \quad (1.13)$$

De estas expresiones, vemos que la transformación canónica (1.7) no está definida cuando $ka = 0$ o $ka = \pm\pi$, es decir, la transformación está bien definida para cualquier valor excepto en el centro y los bordes de la primera zona de Brillouin.

Es conveniente expresar el mapa (1.11) en términos de las variables acción-ángulo (θ_n, J_n) bajo la transformación

$$X_n = \sqrt{2J_n} \sin \theta_n \quad P_n = \sqrt{2J_n} \cos \theta_n$$

Así, el mapa (1.11) en términos de estas nuevas variables toma la forma

$$\begin{aligned} J_{n+1} &= D_n^2 J_n \\ \theta_{n+1} &= \theta_n + ka - \frac{1}{2} [1 - \cos(2\theta_n + ka)] \tilde{u}_n + \frac{1}{2} [v - \cos(2\theta_n + 2ka)] \Delta_n \\ &\quad + \frac{1}{8} [2 \sin(2\theta_n + ka) - \sin(4\theta_n + 2ka)] \tilde{u}_n^2 \\ &\quad + \frac{1}{8} [2v \sin(2\theta_n + 2ka) - \sin(4\theta_n + 4ka)] \tilde{\Delta}_n^2 \\ &\quad + \frac{1}{4} [\sin ka - 2 \sin(2\theta_n + 2ka) + \sin(4\theta_n + 3ka)] \tilde{u}_n \tilde{\Delta}_n \end{aligned} \quad (1.14)$$

donde

$$\begin{aligned} D_n^2 &= 1 + \sin(2\theta_n + ka)\tilde{u}_n - \sin(2\theta_n + 2ka)\tilde{\Delta}_n \\ &+ \frac{1}{2} \left[1 - \cos(2\theta_n + ka) \right] \tilde{u}_n^2 + \frac{1}{2} \left[1 - v \cos(2\theta_n + 2ka) \right] \tilde{\Delta}_n^2 \\ &+ \left[\cos(2\theta_n + 2ka) - \cos ka \right] \tilde{u}_n \tilde{\Delta}_n. \end{aligned} \quad (1.15)$$

En las ecuaciones (1.14) y (1.15)

$$\tilde{u}_n = \frac{\sin qa}{q \sin ka} u_n \quad \text{y} \quad \tilde{\Delta}_n = \frac{U}{\sin ka} \Delta_n \quad (1.16)$$

con

$$v = \frac{q \sin ka}{U} \left[q\alpha^2 + \frac{1}{q\alpha^2} \right]. \quad (1.17)$$

1.2. Longitud de localización

En esta sección calcularemos la longitud de localización inversa en el modelo de Kronig-Penney 1D (1.2). La longitud de localización inversa se define como

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

el cual, en términos dinámicos, es equivalente al exponente de Lyapunov del mapa hamiltoniano

$$\lambda = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2Na} \sum_{n=1}^N \log \left(\frac{J_{n+1}}{J_n} \right) = \frac{1}{2a} \langle \log D_n^2 \rangle. \quad (1.18)$$

Para calcular el exponente de Lyapunov (1.18) desarrollaremos el logaritmo de D_n^2 y consideraremos los términos hasta segundo orden, esto nos da

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{1}{2a} \left\langle \sin(2\theta_n + ka)\tilde{u}_n - \sin(2\theta_n + 2ka)\tilde{\Delta}_n \right\rangle \\ &+ \frac{1}{8a} \left\langle [1 - 2\cos(2\theta_n + 2ka) + \cos(4\theta_n + 2ka)] \tilde{u}_n^2 \right\rangle \\ &+ \frac{1}{8a} \left\langle [1 - 2v\cos(2\theta_n + 2ka) + \cos(4\theta_n + 4ka)] \tilde{\Delta}_n^2 \right\rangle \\ &- \frac{1}{4a} \left\langle [\cos ka - 2\cos(2\theta_n + 2ka) + \cos(4\theta_n + 3ka)] \tilde{u}_n \tilde{\Delta}_n \right\rangle \end{aligned} \quad (1.19)$$

Ahora, tenemos que calcular los promedios sobre θ_n , u_n y Δ_n . En el caso de desorden débil podemos despreciar las correlaciones entre θ_n y los términos de segundo orden $\tilde{u}_n^2$, $\tilde{\Delta}_n^2$ y $\tilde{u}_n \tilde{\Delta}_n$. Entonces en los sumandos de (1.19) que contienen a éstos términos cuadráticos, los promedios sobre θ_n pueden calcularse por separado de la variables u_n

y Δ_n .

El cálculo de los promedios sobre θ_n requiere una distribución de probabilidad $\rho(\theta)$. Consideremos el mapa (1.14), en ausencia de desorden, este mapa se reduce a

$$\begin{aligned} J_{n+1} &= J_n \\ \theta_{n+1} &= \theta_n + ka \end{aligned} \quad (1.20)$$

El mapa (1.20) sugiere asumir que $\rho(\theta)$ es una distribución uniforme. Sin embargo, esta suposición falla cuando el ángulo de rotación ka es cero ó un múltiplo racional de π . En este último caso, la distribución uniforme de la variable angular se modifica por un término proporcional a $\cos(2n\theta)$ o $\sin(2n\theta)$. Esta modulación altera el valor de la longitud de localización inversa sólo para $n = \pm 1$ y $n = \pm 2$ debido a que en (1.19) sólo aparecen los armónicos de segundo y cuarto orden. Entonces, los siguientes cálculos son válidos para todos los valores de ka excepto $ka = 0$ y $ka = \pm\pi$ (bordes de las bandas de energía) y $ka = \pm\pi/2$ (centro de las bandas).

Usando $\rho(\theta) = 1/2\pi$ tenemos que $\langle \cos^2 \theta_n \rangle = \langle \sin^2 \theta_n \rangle = 1/2$. La expresión del exponente de Lyapunov toma la forma

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{1}{8a} \left[\langle \tilde{u}_n^2 \rangle + \langle \tilde{\Delta}_n^2 \rangle - 2 \langle \tilde{u}_n \tilde{\Delta}_n \rangle \cos \gamma \right] \\ &+ \frac{1}{2a} \langle \tilde{u}_n \sin(2\theta_n + ka) \rangle - \frac{1}{2a} \langle \tilde{\Delta}_n \sin(2\theta_n + 2ka) \rangle. \end{aligned} \quad (1.21)$$

Ahora, es necesario calcular los correladores ruido ángulo

$$\langle \tilde{u}_n \sin(2\theta_n + ka) \rangle \quad (1.22)$$

y

$$\langle \tilde{\Delta}_n \sin(2\theta_n + 2ka) \rangle \quad (1.23)$$

Estos correladores pueden calcularse si extendemos el método en [28] introduciendo los correladores

$$r_l = \langle \tilde{u}_n e^{i2\theta_{n-l}} \rangle \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (1.24)$$

y

$$s_l = \langle \tilde{\Delta}_n e^{i2\theta_{n-l}} \rangle, \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (1.25)$$

de modo que

$$\langle \tilde{u}_n \sin(2\theta_n + ka) \rangle = \text{Im} [r_0 e^{ika}] \quad \text{y} \quad \langle \tilde{\Delta}_n \sin(2\theta_n + 2ka) \rangle = \text{Im} [s_0 e^{i2ka}].$$

Si desarrollamos $e^{i2\theta_{n-l}}$ en serie de potencias hasta segundo orden, podemos escribir r_{l-1} de la forma

$$\begin{aligned} r_l &= \langle \tilde{u}_n e^{i2\theta_{n-l+1}} \rangle = \left\langle \tilde{u}_n e^{i2\theta_{n-l}} e^{i2ka} \right. \\ &\quad \times \left. \left\{ 1 - i \left[1 - \cos(2\theta_{n-l} + ka) \right] \tilde{u}_{n-l} + i \left[v - \cos(2\theta_{n-l} + 2ka) \right] \right\} \right\rangle. \end{aligned} \quad (1.26)$$

CAPÍTULO 1. MODELO DE KRONIG-PENNEY 1D APERIÓDICO

En el régimen de desorden débil, los triple y cuádruple correladores ruido ángulo pueden descomponerse en dos factores promediados donde uno que sólo contiene únicamente a la variable angular y su promedio puede calcularse usando la función de distribución uniforme. Después de promediar respecto a la variable angular se obtiene

$$r_{l-1} = r_l e^{i2ka} + \frac{i}{2} e^{ika} \langle \tilde{u}_n \tilde{u}_{n-l} \rangle - \frac{i}{2} \langle \tilde{u}_n \tilde{\Delta}_{n-l} \rangle.$$

Multiplicando los dos miembros de esta ecuación por $e^{i2ka(l-1)}$ y sumando sobre l desde cero hasta infinito, se obtiene

$$r_0 = \frac{i}{2} e^{-ika} \sum_{l=1}^{\infty} \langle \tilde{u}_n \tilde{u}_{n-l} \rangle e^{2ikal} - \frac{i}{2} e^{-i2ka} \sum_{l=1}^{\infty} \langle \tilde{u}_n \tilde{\Delta}_{n-l} \rangle e^{i2kal}.$$

De esta expresión podemos calcular el correlador ruido ángulo de la expresión (1.22)

$$\langle \tilde{u}_n \sin(2\theta_n + ka) \rangle = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^{\infty} \langle \tilde{u}_n \tilde{u}_{n-l} \rangle \cos 2kal - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^{\infty} \langle \tilde{u}_n \tilde{\Delta}_{n-l} \rangle \cos[(2l-1)ka]. \quad (1.27)$$

Del mismo modo, obtenemos

$$\langle \tilde{\Delta}_n \sin(2\theta_n + 2ka) \rangle = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^{\infty} \langle \tilde{u}_n \tilde{u}_{n-l} \rangle \cos[ka(2l+1)] - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^{\infty} \langle \tilde{u}_n \tilde{\Delta}_{n-l} \rangle \cos 2kal. \quad (1.28)$$

Sustituyendo (1.27) y (1.28) en (1.21), el exponente de Lyapunov adquiere la forma

$$\lambda = \frac{1}{8a} \left[\langle \tilde{u}_n^2 \rangle W_1(2ka) + \langle \tilde{\Delta}_n^2 \rangle W_2(2ka) - 2 \langle \tilde{u}_n \tilde{\Delta}_n \rangle (\cos ka) W_3(2ka) \right] \quad (1.29)$$

donde

$$W_1(2ka) = 1 + 2 \sum_{l=1}^{\infty} \chi_1(l) \cos 2kal \quad (1.30)$$

$$W_2(2ka) = 1 + 2 \sum_{l=1}^{\infty} \chi_2(l) \cos 2kal \quad (1.31)$$

$$W_3(2ka) = 1 + 2 \sum_{l=1}^{\infty} \chi_3(l) \cos 2kal \quad (1.32)$$

y

$$\chi_1(l) = \frac{\langle u_n u_{n+l} \rangle}{\langle u_n^2 \rangle} \quad (1.33)$$

$$\chi_2(l) = \frac{\langle \Delta_n \Delta_{n+l} \rangle}{\langle \Delta_n^2 \rangle} \quad (1.34)$$

$$\chi_3(l) = \frac{\langle u_n \Delta_{n+l} \rangle}{\langle u_n \Delta_n \rangle} \quad (1.35)$$

La expresión (1.29) establece la relación entre la longitud de localización y las correlaciones del desorden. Esta expresión nos permite obtener la longitud de localización si se conocen las propiedades estadísticas de u_n y Δ_n . Además, es posible que la suma de los términos dentro del paréntesis cuadrado en (1.29) sea idénticamente cero para ciertos valores de energía (valores de k), esto implica la existencia de ventanas de energía para los cuales la localización desaparece o se fortalece, es decir, posibles transiciones de localización-delocalización efectivas. Notemos que las densidades espectrales $W_i(2ka)$ están dadas por las series de Fourier en donde los coeficientes son los correladores binarios $\chi_i(l)$. Esto significa que podemos elegir alguna forma de W_i favorable para fortalecer, debilitar, e incluso anular la localización. En la siguiente sección se muestra un algoritmo para obtener dos sucesiones de valores aleatorios u_n y Δ_n a partir de sus densidades espectrales W_i conocidas.

1.3. Algoritmo para crear bordes de movilidad

En esta sección expondremos un algoritmo para construir sucesiones $\{u_n\}$ y $\{\Delta_n\}$ a partir de las densidades espectrales $W_1(2ka)$, $W_2(2ka)$ y $W_3(2ka)$. Como primer paso, consideremos dos sucesiones $\{X_n^{(1)}\}$ y $\{X_n^{(2)}\}$ de variables aleatorias con media cero y varianza uno

$$\langle X_n^{(i)} \rangle = 0 \quad \text{y} \quad \langle X_n^{(i)} X_m^{(j)} \rangle = \delta_{ij} \delta_{nm} \quad (1.36)$$

para $i, j = 1, 2$ y $n, m \in \mathbb{Z}$ y construyamos otras dos sucesiones intercorrelacionadas $\{Y_n^{(1)}\}$ y $\{Y_n^{(2)}\}$ a partir de $\{X_n^{(1)}\}$ y $\{X_n^{(2)}\}$

$$\begin{aligned} Y_n^{(1)} &= X_n^{(1)} \cos \eta + X_n^{(2)} \sin \eta \\ Y_n^{(2)} &= X_n^{(1)} \sin \eta + X_n^{(2)} \cos \eta \end{aligned} \quad (1.37)$$

donde $\eta \in \mathbb{R}$ es un parámetro que determina el grado de intercorrelación de $\{Y_n^{(1)}\}$ y $\{Y_n^{(2)}\}$. De acuerdo con (1.37) se tiene que

$$\langle Y_n^{(i)} \rangle = 0 \quad \text{y} \quad \langle Y_n^{(i)} Y_m^{(j)} \rangle = \delta_{nm} [\delta_{ij} + (1 - \delta_{ij}) \sin 2\eta], \quad (1.38)$$

esto muestra que el intervalo de variación del parámetro η reside en $[-\pi/4, \pi/4]$, y además, $\pi/4$ corresponde a al caso en el que la intercorrelación entre $\{Y_n^{(1)}\}$ y $\{Y_n^{(2)}\}$ es máxima, $\eta = -\pi/4$ al caso en el que la anticorrelación es máxima y $\eta = 0$ cuando no hay intercorrelaciones.

El siguiente paso consiste en filtrar el ruido blanco intercorrelacionado (sucesiones $\{Y_n^{(1)}\}$ y $\{Y_n^{(2)}\}$) para obtener dos sucesiones $\{u_n\}$ y $\{\Delta_n\}$ auto- e inter- correlacionadas; para ello, expresemos u_n y Δ_n como productos de convoluciones de la forma

$$u_n = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \alpha_k Y_{n-k}^{(1)} \quad \text{y} \quad \Delta_n = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \beta_k Y_{n-k}^{(2)} \quad (1.39)$$

CAPÍTULO 1. MODELO DE KRONIG-PENNEY 1D APERIÓDICO

y busquemos los coeficientes apropiados α_k y β_k . Si comenzamos de la Ec. (1.39) obtenemos que

$$\langle u_n \rangle = 0 \quad \langle \Delta_n \rangle = 0$$

y que los correladores binarios satisfacen

$$\langle u_n u_{n+k} \rangle = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \alpha_l \alpha_{l+k}, \quad (1.40)$$

$$\langle \Delta_n \Delta_{n+k} \rangle = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \beta_l \beta_{l+k}, \quad (1.41)$$

y

$$\langle \Delta_n u_{n+k} \rangle = \langle u_n \Delta_{n+k} \rangle = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \alpha_l \beta_{l+k} \sin 2\eta. \quad (1.42)$$

Comparando las Ecs. (1.40) y (1.41) con los correladores binarios $\chi_1(l)$ y $\chi_2(l)$ (Ecs. (1.33) y (1.34)), vemos que

$$\begin{aligned} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \alpha_l \alpha_{l+k} &= \langle u_n^2 \rangle \chi_1(k) \\ \sum_{l=-\infty}^{\infty} \beta_l \beta_{l+k} &= \langle \Delta_n^2 \rangle \chi_2(k) \end{aligned}$$

con

$$\begin{aligned} \alpha_k &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} \sqrt{\langle u_n^2 \rangle} W_1(x) \cos(2kx) dx \\ \beta_k &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} \sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle} W_2(x) \cos(2kx) dx \end{aligned} \quad (1.43)$$

Si sustituimos α_k y β_k de las Ecs. (1.43) en los productos de convoluciones (1.39) se obtienen las variables aleatorias $\{u_n\}$ y $\{\Delta_n\}$ con media cero y los autocorreladores $\chi_1(k)$ y $\chi_2(k)$ de la forma (1.33) y (1.34). Sin embargo, todavía no sabemos nada respecto al intercorrelador $\chi_3(k)$ ni del parámetro η . De las ecuaciones (1.43) y (1.42) encontramos que

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

Sustituyendo en (1.29) el exponente de Lyapunov adquiere la forma

$$\begin{aligned} \lambda = \frac{1}{8a} & \left[\langle \tilde{u}_n^2 \rangle W_1(2ka) + \langle \tilde{\Delta}_n^2 \rangle W_2(2ka) \right. \\ & \left. - 2 \sqrt{\langle \tilde{u}_n^2 \rangle \langle \tilde{\Delta}_n^2 \rangle} W_1(2ka) W_2(2ka) \cos ka \sin 2\eta \right] \end{aligned} \quad (1.44)$$

CAPÍTULO 1. MODELO DE KRONIG-PENNEY 1D APERIÓDICO

donde hemos introducido las fluctuaciones reescaladas

$$\tilde{u}_n = \frac{\sin \mu}{q \sin(ka)} u_n \quad \text{y} \quad \tilde{\Delta} = \frac{U}{\sin(ka)} \Delta_n.$$

Es posible que correlaciones específicas hagan que $\lambda = 0$ en ciertos intervalos de energía. Usando el algoritmo previamente descrito, se pueden obtener sucesiones $\{\Delta_n\}$ y $\{u_n\}$ a partir de la densidad espectral $W(2ka)$ con características deseadas. Consideremos el caso en el que sólo se tiene desorden estructural y además, éste presenta correlaciones, entonces (1.45) se reduce a

$$\lambda = \frac{1}{8a} \langle \tilde{\Delta}_n^2 \rangle W_2(2ka). \quad (1.45)$$

Para generar ventanas en donde $\lambda_{\Delta \text{correl}} = 0$ y $\lambda_{\Delta \text{correl}} \neq 0$, podemos usar la densidad espectral de la forma

$$W_2(2ka) = \begin{cases} \frac{\pi}{2(k_2 - k_1)a} & \text{si } k \in [k_1, k_2] \\ 0 & \text{si } k \in [0, k_1] \cup [k_2, \pi/2a] \end{cases}. \quad (1.46)$$

En la figura 1.2 se muestra un esquema de la densidad espectral (2.23), nótese que $\frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} W(2k) dk = 1$.

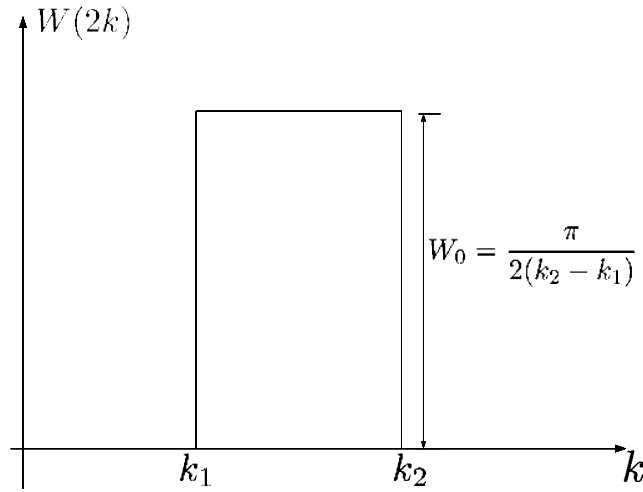


Figura 1.2: Esquema de la densidad espectral (2.23).

A cada vector de onda de Bloch k le corresponde, dentro de cierta banda, un valor de energía E (o bien un $q = \sqrt{2mE/\hbar^2}$). Este valor de energía está dado por

$$\cos ka = \cos qa + \frac{U}{2q} \sin qa. \quad (1.47)$$

CAPÍTULO 1. MODELO DE KRONIG-PENNEY 1D APERIÓDICO

La densidad espectral (2.23) define una ventana de energía $[E_1, E_2]$ o bien $[q_1a, q_2a]$ en donde $\lambda \neq 0$. Por otro lado, de la Ec. (2.21) vemos que la expresión para el exponente de Lyapunov es simétrica respecto a $\pi/2$. Entonces tendremos cuatro bordes de movilidad, es decir, $\lambda \neq 0$ tanto para $k \in [k_1, k_2]$ como para $k \in [k'_2, k'_1]$ siendo $k'_2 = \pi - k_2$ y $k'_1 = \pi - k_1$.

Tomemos la densidad espectral (2.23) con $k_1a = 0.2\pi$ y $k_2a = 0.4\pi$ para $U = 0.7$ y $\sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle} = 0.04$. Los bordes de movilidad q_i ($i=1,2,3,4$) pueden encontrarse sustituyendo $k_1a = 0.2\pi$, $k_2a = 0.4\pi$, $k'_2a = 0.6\pi$, $k'_1a = 0.8\pi$ en (1.47). Resolviendo para energías dentro de la primera banda, se obtienen

$$q_1a \approx 1.03 \quad q_2a \approx 1.50 \quad q_3a \approx 2.05 \quad \text{y} \quad q_4a \approx 2.63. \quad (1.48)$$

En estas condiciones se obtiene la Fig. 1.3.

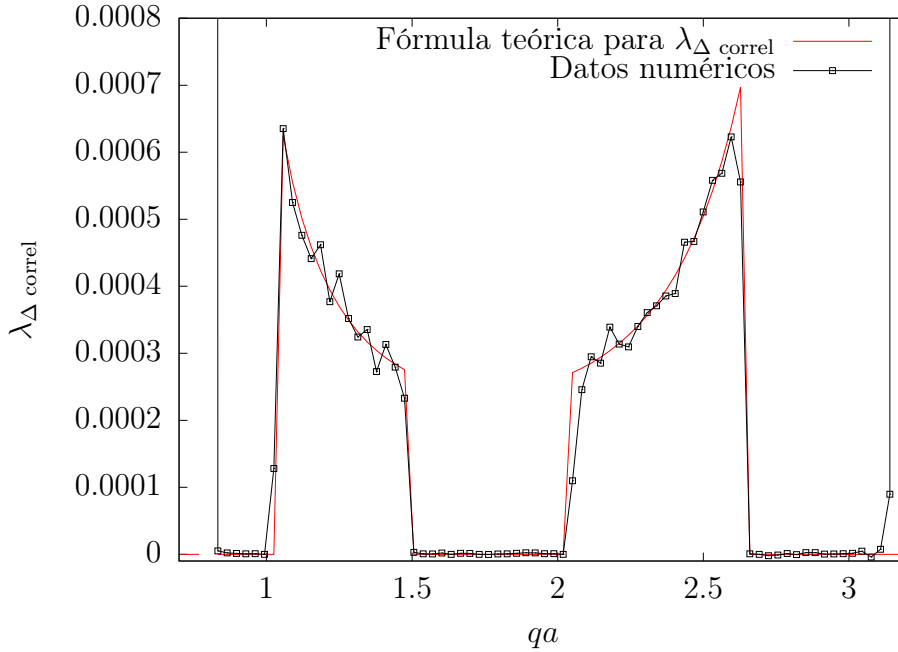


Figura 1.3: Exponente de Lyapunov para una muestra de $N = 1 \times 10^6$ barreras (dentro de la primera banda de transmisión). La intensidad del desorden estructural es $\sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle} = 0.04a$ mientras que la intensidad común de las barreras deltiformes es $U = 0.7/a$. La línea roja representa los valores obtenidos con la fórmula analítica mientras que las figuras guiadas por líneas representan los datos numéricos.

Capítulo 2

Un modelo de Kronig-Penney 2D con simetría circular

En este capítulo estudiaremos las propiedades de transmisión de una partícula cuántica que se propaga a través de un medio cuyo desorden correlacionado depende de la coordenada radial. Este medio desordenado consiste en un modelo de Kronig-Penney 2D. Uno de los objetivos es estudiar cómo el desorden con correlaciones puede fortalecer o debilitar la transmisión en intervalos específicos de energía. Con el fin de describir matemáticamente las propiedades del desorden de nuestro modelo, partamos del caso ordenado y consideremos una partícula cuántica de masa m que se mueve sobre una superficie plana bidimensional bajo la influencia de un potencial formado por un número finito de N barreras circulares concéntricas de perfil deltiforme idénticas y equiespaciadas. Sea U la intensidad común de las barreras y a el espaciamiento de éstas, entonces la ecuación de Schrödinger que describe esta situación está dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + \sum_{n=1}^N U\delta(\rho - \rho_n)\psi = E\psi, \quad (2.1)$$

donde $\rho_n = \rho_0 + (n - 1)a$ es la posición de la n -ésima barrera. La ecuación (2.1) corresponde a un modelo de Kronig-Penney 2D con simetría circular.

Nuestro modelo bidimensional desordenado consiste en un modelo de Kronig-Penney 2D de la forma Ec. (2.1) en donde las posiciones e intensidades de las barreras deltiformes (ρ_n y U_n) adquieren valores aleatorios, es decir, nuestro primer modelo desordenado es un modelo de Kronig-Penney 2D con desorden compositivo y estructural que asumiremos débil.

El desorden compositivo débil se obtiene del siguiente modo: supongamos que la intensidad de la n -ésima barrera del modelo (2.1) sufre una pequeña perturbación u_n , siendo u_n un valor aleatorio. El desorden estructural débil se obtiene cuando las posiciones de las barreras del modelo (2.1) sufren una ligera desviación de sus posiciones originales, sea $(\delta\rho)_n$ la desviación aleatoria de la n -ésima barrera ubicada originalmente en $\rho_n = \rho_0 + na$. Entonces la ecuación de Schrödinger correspondiente a nuestro

CAPÍTULO 2. UN MODELO DE KRONIG-PENNEY 2D CON SIMETRÍA CIRCULAR

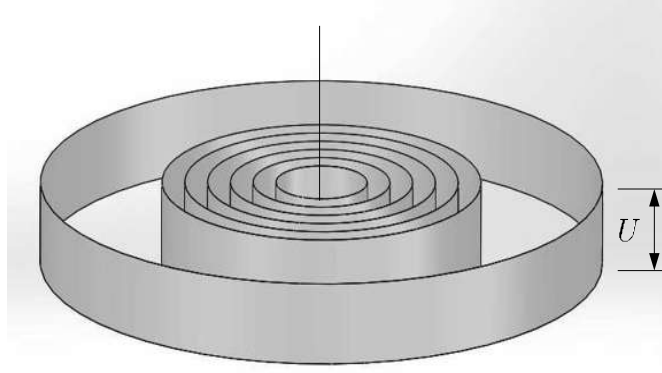


Figura 2.1: En este esquema se muestra una representación de las intensidades de las barreras deltiformes; un modelo de Kronig-Penney bidimensional constituido por un número finito de N barreras deltiformes 2D con simetría circular, equiespaciadas y con intensidad común U .

modelo de Kronig-Penney 2D con desorden compositivo y estructural es

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + \sum_{n=1}^N U_n\delta(\rho - \rho_n)\psi = E\psi, \quad (2.2)$$

donde $U_n = U + u_n$ y $\rho_n = \rho_0 + (n-1)a + (\delta\rho)_n$. Para que el desorden compositivo sea débil, se requiere que las fluctuaciones de las intensidades de las barreras sean pequeñas respecto U , es decir

$$\langle u_n^2 \rangle \ll U^2. \quad (2.3)$$

En el caso del desorden estructural, para que éste sea débil es necesario que

$$q^2 \langle \Delta_n^2 \rangle \ll 1 \quad \text{y} \quad \langle \Delta_n^2 \rangle U q a^2 \ll 1, \quad (2.4)$$

donde $\Delta_n = (\delta\rho)_{n+1} - (\delta\rho)_n$ es el desplazamiento relativo de n -ésima y $(n+1)$ -ésima barreras. Estudiar

Para estudiar los efectos del desorden sobre la transmisión procederemos del siguiente modo, calcularemos la longitud de localización inversa para el caso límite $N \rightarrow \infty$. La razón de esta estrategia es la relación de la longitud de localización inversa con el coeficiente de transmisión T_N por medio de la expresión $l_{\text{Loc}}^{-1} \sim -\frac{\langle \ln T_N \rangle}{2Na}$ para valores de N muy grandes.

Primero aprovechemos la simetría del modelo en coordenadas polares para simplificar nuestro análisis. Después, usaremos la técnica del mapa hamiltoniano para calcular el exponente de Lyapunov pues éste es igual al recíproco de la longitud de localización.

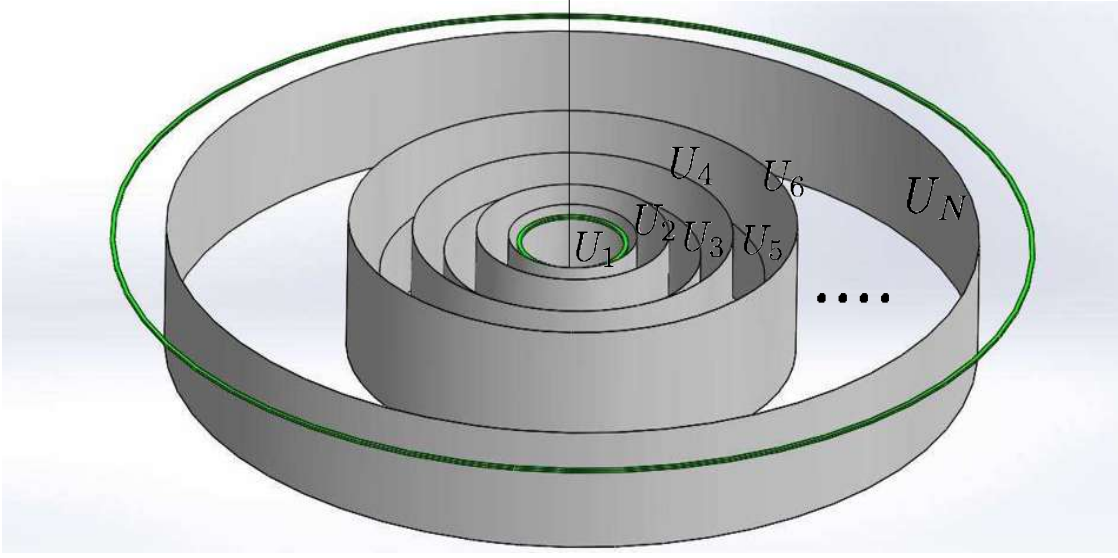


Figura 2.2: En este esquema se muestran las intensidades de las barreras del modelo (2.2). Cada barrera está situada a una distancia aleatoria del centro y posee una intensidad U_n . Los círculos son una representación de la solución de la ecuación de Schrödinger dentro del primer pozo y fuera de la última barrera: ondas circulares de probabilidad cuya amplitud decrece proporcionalmente con el inverso de la raíz cuadrada de la posición.

2.1. Separación de variables

Dado que el modelo que estamos estudiando posee simetría circular es útil expresar el operador ∇^2 en coordenadas polares, éste es

$$\nabla^2 = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}. \quad (2.5)$$

Si proponemos a ϕ de la forma $\psi(\rho, \phi) = R(\rho)\Theta(\theta)$ y sustituimos (2.5) en (2.2) obtenemos dos ecuaciones; una parte angular

$$d^2\Theta/d\theta^2 = -l^2\Theta, \quad \text{con } l = 1, 2, 3... \quad (2.6)$$

y otra parte radial

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left[q^2 - \sum_{n=1}^N U_n \delta(\rho - \rho_n) - \frac{l^2}{\rho^2} \right] R = 0, \quad (2.7)$$

donde $q^2 = 2mE/\hbar^2$.

La ecuación radial (2.7) puede expresarse de la forma

$$\frac{d^2\chi}{d\rho^2} + \left[q^2 - \sum_{n=1}^N U_n \delta(\rho - \rho_n) + \frac{1/4 - l^2}{\rho^2} \right] \chi = 0 \quad (2.8)$$

CAPÍTULO 2. UN MODELO DE KRONIG-PENNEY 2D CON SIMETRÍA CIRCULAR

donde $\chi(\rho) = R(\rho)/\sqrt{\rho}$.

La ecuación (2.8) puede interpretarse como el modelo de Kronig-Penney 1D descrito por la ecuación (1.2) sometido a un potencial centrífugo, $(1/4 - l^2)/\rho^2$. A continuación usaremos el método del mapa hamiltoniano para obtener la longitud de localización inversa correspondiente a (2.8).

2.2. Método del mapa hamiltoniano

Los autoestados del modelo (2.7) pueden analizarse usando el método del mapa hamiltoniano. La ecuación (2.8) tiene la misma forma que la de un oscilador con frecuencia perturbada a tiempos irregulares en presencia de un potencial centrífugo, el cual está definido por la función hamiltoniana

$$H = \frac{p^2}{2} + \frac{1}{2}m \left[q^2 - \sum_{n=1}^N U_n \delta(t - t_n) + \frac{1/4 - l^2}{t^2} \right] x^2, \quad (2.9)$$

donde $m = 1$, el vector de onda q juega el papel de la frecuencia imperturbada y queda establecida la correspondencia $\chi \rightarrow x$ y $\rho_n \rightarrow t_n$. Integrando sobre el intervalo de tiempo $[t_n^-, t_{n+1}^-]$ entre dos perturbaciones, se obtiene el mapa hamiltoniano

$$\begin{bmatrix} x_{n+1} \\ p_{n+1} \end{bmatrix} = \mathbf{R}_n \begin{bmatrix} x_n \\ p_n \end{bmatrix}, \quad (2.10)$$

donde

$$\begin{aligned} [\mathbf{R}_n]_{11} = U_n & \left\{ \frac{\pi \sqrt{t_n t_{n+1}}}{2} [J_l(qt_n)Y_l(qt_{n+1}) - J_l(qt_{n+1})Y_l(qt_n)] \right\} + \\ & \left\{ \frac{\pi}{4} \sqrt{\frac{t_{n+1}}{t_n}} [J_l(qt_{n+1})Y_l(qt_n) - J_l(qt_n)Y_l(qt_{n+1})] + \right. \\ & \left. \frac{\pi q \sqrt{t_n t_{n+1}}}{2} [J_l(qt_{n+1})Y_l'(qt_n) - J_l'(qt_n)Y_l(qt_{n+1})] \right\} \end{aligned}$$

$$[\mathbf{R}_n]_{12} = \frac{\pi \sqrt{t_n t_{n+1}}}{2} [J_l(qt_n)Y_l(qt_{n+1}) - J_l(qt_{n+1})Y_l(qt_n)]$$

CAPÍTULO 2. UN MODELO DE KRONIG-PENNEY 2D CON SIMETRÍA CIRCULAR

$$\begin{aligned}
 [\mathbf{R}_n]_{21} = U_n & \left\{ \frac{\pi}{4} \sqrt{\frac{t_n}{t_{n+1}}} \left[J_l(qt_n) Y_l(qt_{n+1}) - J_l(qt_{n+1}) Y_l(qt_n) \right] \right. \\
 & + \frac{\pi q}{2} \sqrt{t_n t_{n+1}} \left[J_l(qt_n) Y_l'(qt_{n+1}) - J_l'(qt_{n+1}) Y_l(qt_n) \right] \Big\} \\
 & + \left\{ \frac{\pi}{8 \sqrt{t_n t_{n+1}}} \left[J_l(qt_{n+1}) Y_l(qt_n) - J_l(qt_n) Y_l(qt_{n+1}) \right] \right. \\
 & + \frac{\pi q}{4} \sqrt{\frac{t_n}{t_{n+1}}} \left[J_l(qt_{n+1}) Y_l'(qt_n) - J_l'(qt_n) Y_l(qt_{n+1}) \right] \\
 & + \frac{\pi m q}{4} \sqrt{\frac{t_{n+1}}{t_n}} \left[J_l'(qt_{n+1}) Y_l(qt_n) - J_l(qt_n) Y_l'(qt_{n+1}) \right] \\
 & \left. + \frac{\pi q^2}{2} \sqrt{t_n t_{n+1}} \left[J_l'(qt_{n+1}) Y_l'(qt_n) - J_l'(qt_n) Y_l'(qt_{n+1}) \right] \right\}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\mathbf{R}_n]_{22} = \frac{\pi}{4} \sqrt{\frac{t_n}{t_{n+1}}} & \left[J_l(qt_n) Y_l(qt_{n+1}) - J_l(qt_{n+1}) Y_l(qt_n) \right] \\
 & + \frac{\pi q}{2} \sqrt{t_n t_{n+1}} \left[J_l(qt_n) Y_l'(qt_{n+1}) - J_l'(qt_{n+1}) Y_l(qt_n) \right]
 \end{aligned}$$

Con el fin de obtener una expresión para el exponente de Lyapunov, desarrollemos $\mathbf{R}_n$ en serie de potencias de $1/t_n$ para valores de t_n muy grandes hasta segundo orden, después de varios cálculos

$$\mathbf{R}_n = \mathbf{R}_n^{(0)} + \mathbf{R}_n^{(2)} + \dots$$

donde

$$\mathbf{R}_n^{(0)} = \begin{bmatrix} \cos[q(a + \Delta_n)] + \frac{U_n}{q} \sin[q(a + \Delta_n)] & \frac{\sin[q(a + \Delta_n)]}{mq} \\ -mq \sin[q(a + \Delta_n)] + mU_n \cos[q(a + \Delta_n)] & \cos[q(a + \Delta_n)] \end{bmatrix}.$$

mientras que

$$\left[\mathbf{R}_n^{(2)} \right]_{22} = \left\{ \frac{(4l^2 - 1)(a + \Delta_n) \sin[q(a + \Delta_n)]}{8q} \right\} \frac{1}{t_n^2}$$

$$\begin{aligned}
 \left[\mathbf{R}_n^{(2)} \right]_{21} = & \left\{ \frac{(4l^2 - 1)}{8q} \left[\sin[q(a + \Delta_n)] + [q(a + \Delta_n)] \cos[q(a + \Delta_n)] \right] \right. \\
 & \left. + \left[\frac{(4l^2 - 1)(a + \Delta_n) \sin[q(a + \Delta_n)]}{8} \right] \frac{U_n}{q} \right\} \frac{1}{t_n^2}
 \end{aligned}$$

$$\left[\mathbf{R}_n^{(2)} \right]_{12} = \left\{ \frac{(4l^2 - 1)}{8q^3} \left[\sin[q(a + \Delta_n)] - [q(a + \Delta_n)] \cos[q(a + \Delta_n)] \right] \right\} \frac{1}{t_n^2}$$

CAPÍTULO 2. UN MODELO DE KRONIG-PENNEY 2D CON SIMETRÍA CIRCULAR

$$[[\mathbf{R}_n]^{(2)}]_{11} = \left\{ \frac{(4l^2 - 1)(a + \Delta_n) \sin[q(a + \Delta_n)]}{8q} + \frac{(4l^2 - 1)}{8q^2} \left[\sin[q(a + \Delta_n)] - [q(a + \Delta_n)] \cos[q(a + \Delta_n)] \right] \frac{U_n}{q} \right\} \frac{1}{t_n^2}$$

Vemos que no aparece corrección al primer orden respecto al tiempo; sin embargo, dado que estamos interesados en el caso del desorden débil, podemos desarrollar las matrices $\mathbf{R}_n^{(0)}$ y $\mathbf{R}_n^{(2)}$ en series de potencias con respecto a las fluctuaciones, esto con el fin de encontrar cuándo es que las fluctuaciones correspondientes al modelo de Kronig-Penney 1D se vuelven dominantes con respecto al potencial centrífugo. Si desarrollamos por ejemplo $[\mathbf{R}_n^{(0)}]_{22}$ y $[\mathbf{R}_n^{(2)}]_{11}$, $[\mathbf{R}_n^{(0)}]_{21}$ y $[\mathbf{R}_n^{(2)}]_{12}$ (despreciando los términos superiores al segundo orden) nos da

$$[\mathbf{R}_n^{(0)}]_{22} = \cos[q(a + \Delta_n)] = \cos qa - q\Delta_n \sin qa - \frac{q^2 \Delta_n^2}{2} \cos qa + \dots$$

$$[\mathbf{R}_n^{(2)}]_{11} = \frac{4l^2 - 1}{8qt_n^2} \left[a \sin qa + (qa \cos qa + \sin qa)\Delta_n + (q \cos qa - \frac{q^2 a \sin qa}{2})\Delta_n^2 \right] + \dots \quad (2.11)$$

$$\begin{aligned} [\mathbf{R}_n^{(0)}]_{21} &= -q \sin[q(a + \Delta_n)] + U_n \cos[q(a + \Delta_n)] \\ &= [U \cos qa - q \sin qa] - [Uq \sin qa + q^2 \cos qa] \Delta_n + \frac{1}{2} [q^3 \sin qa - Uq^2 \cos qa] \Delta_n^2 \\ &\quad + (\cos qa)u_n - (q \sin qa)u_n \Delta_n \quad (2.12) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [\mathbf{R}_n^{(2)}]_{12} &= \frac{4l^2 - 1}{8qt_n^2} \left\{ \left[(Ua + 1) \sin qa + qa \cos qa \right] \right. \\ &\quad \left[(Ua + 2)q \cos qa + (U - q^2 a) \sin qa \right] \Delta_n \\ &\quad + \left[\left(U - \frac{q^2 a}{2} \right) q \cos qa - \frac{(Ua + 3)}{2} q^2 \sin qa \right] \Delta_n^2 \\ &\quad \left. + [a \sin qa] u_n + [qa \cos qa + \sin qa] u_n \Delta_n \right\} \quad (2.13) \end{aligned}$$

Comparemos las fluctuaciones debidas al desorden compositivo del modelo de Kronig-Penney 1D con el potencial centrífugo

$$|(\cos qa)u_n| \gg \left| \frac{4l^2 - 1}{8qt_n^2} a u_n \sin qa \right|.$$

CAPÍTULO 2. UN MODELO DE KRONIG-PENNEY 2D CON SIMETRÍA CIRCULAR

Por lo tanto, los efectos debidos al potencial centrífugo se pueden hacer tan pequeños como se desee respecto al ruido eligiendo un valor de t_n tal que, para cierto parámetro de red e intervalo de energía ,

$$t_n^2 \gg t_c^2 = \left| \frac{4l^2 - 1}{8q} a \tan qa \right|.$$

Del mismo modo, para el desorden estructural,

$$t_n^2 \gg t_c^2 = \left| \frac{(4l^2 - 1) [(Ua + 2)q + (U - q^2a) \tan qa]}{8q [qU \tan qa + q^2]} \right|$$

Consideremos un resultado que nos permite concluir que el exponente de lyapunov para nuestro modelo bidimensional coincide con el del modelo de Kronig-Penney 1D aperiódico.

Teorema de Furstenberg para producto matrices aleatorias de 2×2 : *Si partimos de un vector inicial $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^2$ y sobre éste se aplica un producto de matrices aleatorias unimodulares de 2×2 independientes e idénticamente distribuidas entonces el*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log |\mathbf{T}_n \mathbf{T}_{n-1} \dots \mathbf{T}_c \mathbf{u}| = 2\lambda > 0$$

siempre que las matrices $\mathbf{T}_n$ no conmuten para cualquier $\mathbf{u} \neq 0$.

Si elegimos un vector inicial $\mathbf{u}_c = (p_c, x_c)$ correspondiente a un tiempo mucho mayor al tiempo t_c de modo que el ruido domine sobre las fluctuaciones moduladas con el término centrífugo, las matrices

$$\mathbf{R}_n = \begin{bmatrix} \cos[q(a + \Delta_n)] + \frac{U_n}{q} \sin[q(a + \Delta_n)] & \frac{\sin[q(a + \Delta_n)]}{q} \\ -q \sin[q(a + \Delta_n)] + U_n \cos[q(a + \Delta_n)] & \cos[q(a + \Delta_n)] \end{bmatrix}.$$

satisfacen las condiciones del teorema de Furstenberg siempre que $q(a + \Delta_n) \neq s\pi$ ($s \in \mathbb{N}$).

Finalmente, podemos concluir que es posible despreciar el término centrífugo de nuestro modelo bidimensional para distancias lo suficientemente grandes dadas las intensidades de desorden $\langle \Delta_n^2 \rangle$ y $\langle u_n^2 \rangle$, pues las fluctuaciones combinadas con el término centrífugo hacen que los efectos de éste disminuyan considerablemente a partir de un t_c . Además, el teorema de Furstenberg garantiza la convergencia de $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log |\mathbf{T}_n \mathbf{T}_{n-1} \dots \mathbf{T}_c \mathbf{u}| = 2\lambda > 0$. Así, el exponente de Lyapunov para este modelo de Kronig-Penney 2D aperiódico es igual al del modelo de Kronig-Penney 1D aperiódico.

2.3. Resultados numéricos para el modelo de Kronig-Penney 2D: exponente de Lyapunov

Consideremos la parte radial de la ecuación de Schrödinger (Ec. (2.7)); la solución de ésta dentro del n -ésimo pozo es

$$R_{\text{pozo } n} = A_{n-1} H_l^{(1)}(q\rho) + B_{n-1} H_l^{(2)}(q\rho) \quad (2.14)$$

CAPÍTULO 2. UN MODELO DE KRONIG-PENNEY 2D CON SIMETRÍA CIRCULAR

Podemos construir la solución de la Ec. (2.7) en el $(n + 1)$ -ésimo pozo a partir de la solución dentro del n -ésimo usando el método de matrices de transferencia. Las amplitudes A_n y B_n pueden expresarse en términos de A_{n-1} y B_{n-1} a través de la matriz de transferencia $\mathbf{M}_n$ definida por

$$\begin{bmatrix} A_n \\ B_n \end{bmatrix} = \mathbf{M}_n \begin{bmatrix} A_{n-1} \\ B_{n-1} \end{bmatrix}. \quad (2.15)$$

donde

$$\mathbf{M}_n = \begin{bmatrix} 1 - \frac{i\pi\rho_n U_n}{4} H_l^{(1)}(q\rho_n) H_l^{(2)}(q\rho_n) & -\frac{i\pi\rho_n U_n}{4} \left[H_l^{(2)}(q\rho_n) \right]^2 \\ \frac{i\pi\rho_n U_n}{4} \left[H_l^{(1)}(q\rho_n) \right]^2 & 1 + \frac{i\pi\rho_n U_n}{4} H_l^{(1)}(q\rho_n) H_l^{(2)}(q\rho_n) \end{bmatrix}. \quad (2.16)$$

Sea $r_{n+1} = A_{n+1}/A_n$, si eliminamos la amplitud B_n de (2.16) obtenemos la siguiente fórmula recursiva

$$\begin{aligned} r_{n+1} = & 1 - \frac{i\pi\rho_{n+1} U_{n+1}}{4} H_l^{(1)}(q\rho_{n+1}) H_l^{(2)}(q\rho_{n+1}) \\ & - \frac{\pi^2 \rho_n \rho_{n+1} U_n U_{n+1}}{16} \left[H_l^{(2)}(q\rho_n) H_l^{(2)}(q\rho_{n+1}) \right]^2 \Bigg/ \left[1 + \frac{i\pi\rho_n U_n}{4} H_l^{(1)}(q\rho_n) H_l^{(2)}(q\rho_n) \right] \\ & - \frac{\rho_{n+1} U_{n+1}}{\rho_n U_n} \left[H_l^{(2)}(q\rho_{n+1}) / H_l^{(2)}(q\rho_n) \right]^2 \frac{1}{r_n} \end{aligned} \quad (2.17)$$

El exponente de Lyapunov puede definirse por medio de la relación

$$\lambda = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \left| r_n \right| \quad (2.18)$$

Esta fórmula nos permite calcular el exponente de Lyapunov o longitud de localización inversa numéricamente.

Para ver los efectos del desorden con correlaciones primero calcularemos el exponente de Lyapunov cuando sólo se tiene desorden estructural, después cuando sólo se tiene desorden compositivo y, finalmente, cuando se tienen los dos tipos de desorden simultáneamente.

Podemos obtener el exponente de Lyapunov para el caso de desorden estructural de forma numérica (con o sin correlaciones) si usamos la fórmula recursiva (2.17) para $U_1 = U_2 = \dots = U_N = U$. Así

$$\begin{aligned} (r_\Delta)_{n+1} = & 1 - \frac{i\pi\rho_{n+1} U}{4} H_l^{(1)}(q\rho_{n+1}) H_l^{(2)}(q\rho_{n+1}) \\ & - \frac{\pi^2 \rho_n \rho_{n+1} U^2}{16} \left[H_l^{(2)}(q\rho_n) H_l^{(2)}(q\rho_{n+1}) \right]^2 \Bigg/ \left[1 + \frac{i\pi\rho_n U}{4} H_l^{(1)}(q\rho_n) H_l^{(2)}(q\rho_n) \right] \\ & - \frac{\rho_{n+1}}{\rho_n} \left[H_l^{(2)}(q\rho_{n+1}) / H_l^{(2)}(q\rho_n) \right]^2 \frac{1}{(r_\Delta)_n}. \end{aligned} \quad (2.19)$$

CAPÍTULO 2. UN MODELO DE KRONIG-PENNEY 2D CON SIMETRÍA CIRCULAR

Cuando el desorden en el modelo de Kronig-Penney 2D es puramente estructural y sin correlaciones la expresión para el exponente de Lyapunov (1.29) se reduce a la expresión

$$\lambda_{\Delta} = \frac{U^2}{8 \sin^2 ka} \langle \Delta_n^2 \rangle. \quad (2.20)$$

En Fig. 2.3 y 2.4 se muestra el exponente de Lyapunov en la primera y segunda banda de transmisión respectivamente para una realización sin correlaciones.

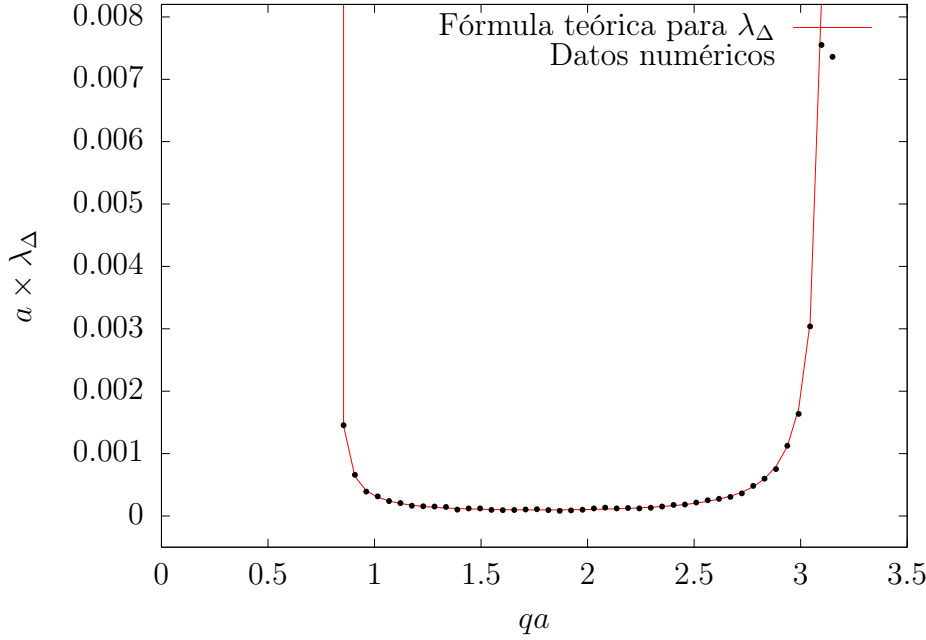


Figura 2.3: Exponente de Lyapunov para una muestra de $N = 1 \times 10^6$ barreras (primera banda). La intensidad del desorden estructural es $\sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle} = 0.04a$ mientras que la intensidad común es $U = 0.7/a$. Los puntos corresponden a los valores obtenidos numéricamente y la línea roja a los obtenidos con la fórmula recursiva (2.19)

CAPÍTULO 2. UN MODELO DE KRONIG-PENNEY 2D CON SIMETRÍA CIRCULAR

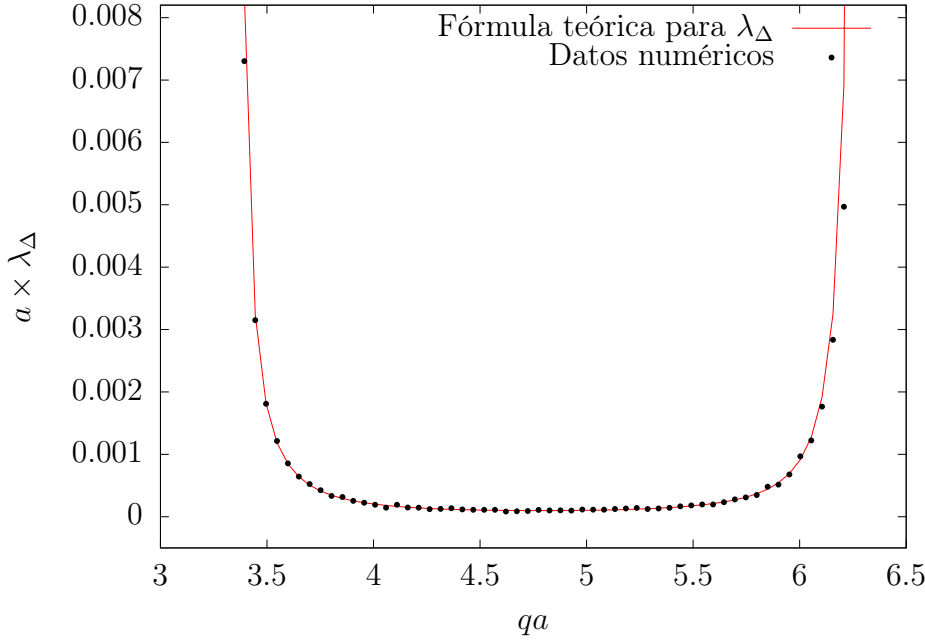


Figura 2.4: Exponente de Lyapunov para una muestra de $N = 1 \times 10^6$ barreras (segunda banda de transmisión). La intensidad del desorden estructural es $\sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle} = 0.04a$ mientras que la intensidad común de las barreras deltiformes es $U = 0.7/a$.

Para el caso en el que el desorden estructural presenta correlaciones, el exponente de Lyapunov está dado por

$$\lambda_{\Delta \text{ correl}} = \frac{U^2}{8 \sin^2 ka} \langle \Delta_n^2 \rangle W_2(k). \quad (2.21)$$

con

$$W_2(2ka) = 1 + 2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\langle \Delta_n \Delta_{n+l} \rangle}{\langle \Delta_n^2 \rangle} \cos 2kal \quad (2.22)$$

Dado que los exponentes de Lyapunov para el modelo de Kronig-Penney 1D infinito y el modelo de Kronig-Penney 2D (para N lo suficientemente grande) coinciden, es posible que correlaciones específicas también hagan que $\lambda_{\Delta} = 0$ en ciertos intervalos de energía. Usando el algoritmo presentado en el capítulo anterior se pueden obtener sucesiones $\{\Delta_n\}$ a partir de la densidad espectral $W_2(2ka)$ con características deseadas. Queremos generar ventanas en donde $\lambda_{\Delta \text{ correl}} = 0$ y $\lambda_{\Delta \text{ correl}} \neq 0$; para este fin consideremos la densidad espectral

$$W_1(2ka) = \begin{cases} \frac{\pi}{2(k_2 - k_1)a} & \text{si } k \in [k_1, k_2] \\ 0 & \text{si } k \in [0, k_1] \cup [k_2, \pi/2a] \end{cases}. \quad (2.23)$$

A continuación presentaremos algunos resultados numéricos tomándonos la densidad espectral (2.23) con $k_1 a = 0.2\pi$ y $k_2 a = 0.4\pi$ para $U = 0.7$ y $\sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle} = 0.04$;

CAPÍTULO 2. UN MODELO DE KRONIG-PENNEY 2D CON SIMETRÍA CIRCULAR

resolviendo para energías dentro de la primera banda usando (1.47), encontramos que los bordes de movilidad son

$$q_1 a \approx 1.03, \quad q_2 a \approx 1.50, \quad q_3 a \approx 2.05, \quad \text{y} \quad q_4 a \approx 2.63. \quad (2.24)$$

En estas condiciones se obtiene la Fig. 2.5.

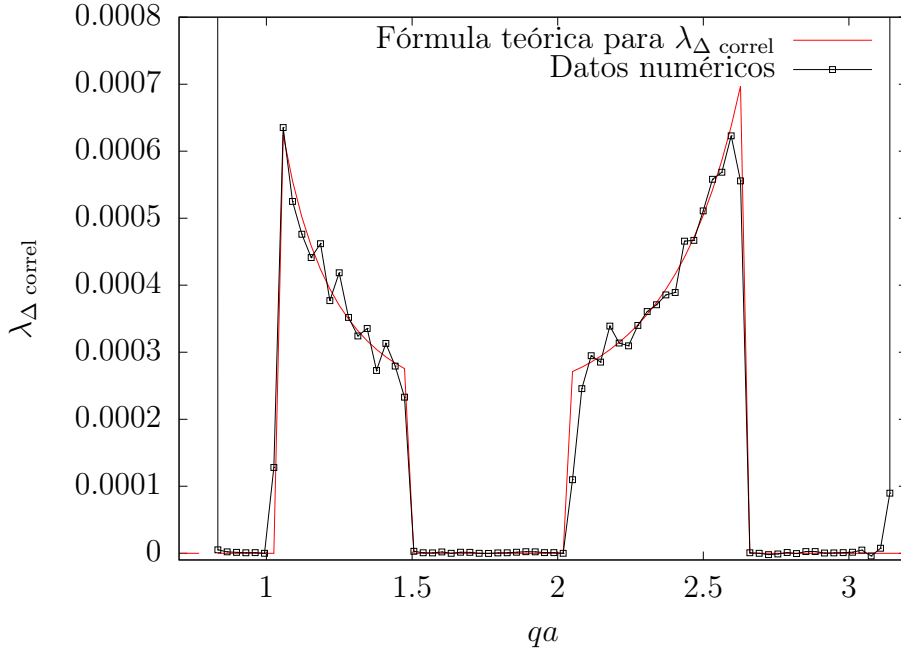


Figura 2.5: Exponente de Lyapunov para una muestra de $N = 1 \times 10^6$ barreras (dentro de la primera banda de transmisión). La intensidad del desorden estructural es $\sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle} = 0.04a$ mientras que la intensidad común de las barreras deltiformes es $U = 0.7/a$. La línea roja representa los valores obtenidos con la fórmula analítica mientras que las figuras guiadas por líneas representan los datos numéricos.

Cuando el modelo de Kronig-Penney 2D presenta únicamente desorden compositivo se tiene que (1.29) se reduce a

$$\lambda = \frac{\sin^2(qa) \langle u_n^2 \rangle}{8q^2 \sin^2(ka)} W_1(2ka) \quad (2.25)$$

con

$$W_1(2ka) = 1 + 2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\langle u_n u_{n+l} \rangle}{\langle u_n^2 \rangle} \cos 2kal \quad (2.26)$$

De forma similar al caso de presencia de desorden puramente estructural, se pueden obtener sucesiones $\{u_n\}$ a partir de la densidad espectral $W_1(2ka)$ para generar ventanas en donde $\lambda_u = 0$ y $\lambda_u \neq 0$; consideremos la densidad espectral $W_1(2ka) = W_2(2ka)$

$$W_2(2ka) \begin{cases} \frac{\pi}{2(k_2 - k_1)a} & \text{si } k \in [k_1, k_2] \\ 0 & \text{si } k \in [0, k_1] \cup [k_2, \pi/2a] \end{cases} \quad (2.27)$$

CAPÍTULO 2. UN MODELO DE KRONIG-PENNEY 2D CON SIMETRÍA CIRCULAR

con los mismos bordes de movilidad dados en (2.24). En la Fig. 2.6 se muestra una comparación del exponente de Lyapunov obtenido por la fórmula (2.25) con el obtenido usando la relación recursiva (2.17) con $\Delta_n = 0$.

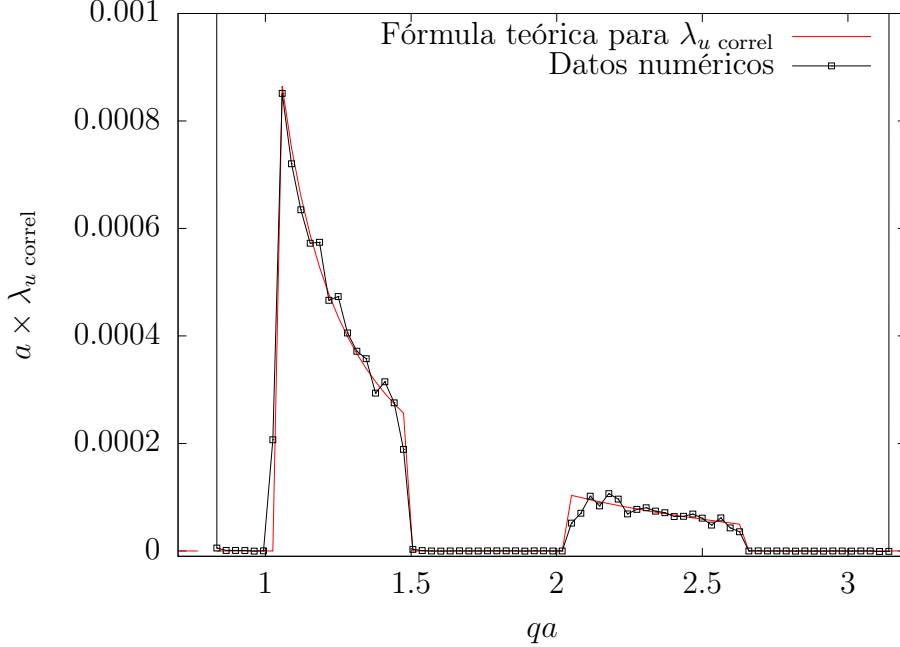


Figura 2.6: Exponente de Lyapunov para una muestra de $N = 1 \times 10^6$ barreras (dentro de la primera banda de transmisión). La intensidad del desorden estructural es $\sqrt{\langle u_n^2 \rangle} = 0.04/a$ mientras que la intensidad media de las barreras deltiformes es $U = 0.7/a$. La línea roja representa los valores obtenidos con la fórmula analítica mientras que las figuras guiadas por líneas representan los datos numéricos.

Ahora, veamos el caso en el que el modelo de Kronig-Penney 2D presenta desorden estructural y compositivo simultaneamente, para este caso debemos considerar la expresión (1.29).

$$\lambda = \frac{1}{8a} \left[\langle \tilde{u}_n^2 \rangle W_1(2ka) + \langle \tilde{\Delta}_n^2 \rangle W_2(2ka) - 2\sqrt{\langle \tilde{u}_n^2 \rangle \langle \tilde{\Delta}_n^2 \rangle} W_1(2ka) W_2(2ka) \cos ka \sin 2\eta \right]. \quad (2.28)$$

El tercer término de (2.28) determina el efecto de las intercorrelaciones entre Δ_n y u_n ; este término será máximo en magnitud cuando $|\sin 2\eta| = 1$. Así, el grado de intercorrelación y anticorrelación entre Δ_n y u_n serán máximos cuando $\eta = \pi/4$ y $\eta = -\pi/4$, respectivamente.

Para mostrar el efecto de las intercorrelaciones, generaremos las siguientes gráficas tomando las densidades espectrales $W_1(2ka) = W_2(2ka)$ de la forma

$$W_1(2ka) = W_2(2ka) \begin{cases} \frac{\pi}{2(k_2 - k_1)a} & \text{si } k \in [k_1, k_2] \\ 0 & \text{si } k \in [0, k_1] \cup [k_2, \pi/2a] \end{cases}. \quad (2.29)$$

CAPÍTULO 2. UN MODELO DE KRONIG-PENNEY 2D CON SIMETRÍA CIRCULAR

con $k_1a = 0.2\pi$ y $k_2a = 0.4\pi$. Las sucesiones apropiadas $\{u_n\}$ y $\{\Delta_n\}$ se han obtenido usando el algoritmo expuesto en el capítulo 1. En la Fig. 2.8 se presentan tres gráficas para el exponente de Lyapunov dentro de la primera banda de transmisión para intercorrelación máxima $\eta = \pi/4$, anticorrelación máxima $\eta = -\pi/4$ e intercorrelación nula $\eta = 0$.

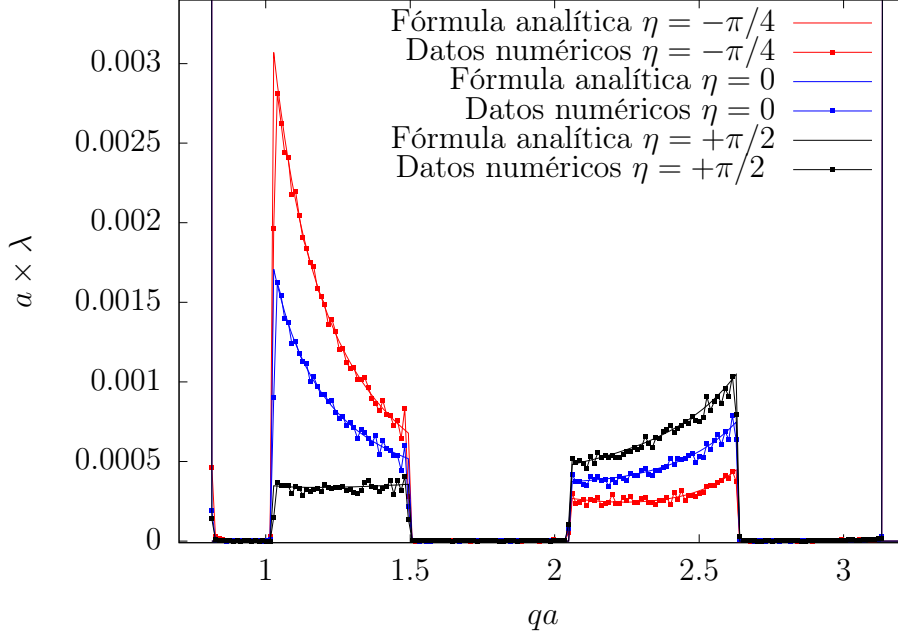


Figura 2.7: Exponente de Lyapunov para distintos grados de intercorrelación. Los datos numéricos se obtuvieron para una realización de $N = 1 \times 10^6$ barreras en cada caso usando el algoritmo presentado en [30]. El intervalo de energía corresponde a la primera banda de transmisión. Las intensidades de desorden son $\sqrt{\langle u_n^2 \rangle} = 0.04/a$ y $\sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle} = 0.04a$ mientras que la intensidad media de las barreras deltiformes es $U = 0.7/a$. Las líneas sólidas representan los valores obtenidos con la fórmula analítica y las figuras guiadas por líneas representan los datos numéricos.

Notemos que, para el caso en el que la densidad espectral sea de la forma (2.23), entre más estrecho sea el intervalo $[k_1, k_2]$ el valor de λ alcanzará valores más grandes dentro de éste. Por ejemplo, si consideramos la misma situación: $U = 0.7/a$, $\sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle} = 0.04a$ y $\sqrt{\langle u_n^2 \rangle} = 0.04/a$ pero ahora con vectores de Bloch $k_1a = 0.29\pi$ y $k_2a = 0.31\pi$ tenemos que

$$q_1a \approx 1.22, \quad q_2a \approx 1.26, \quad q_3a \approx 2.31, \quad \text{y} \quad q_4a \approx 2.37. \quad (2.30)$$

Con estos datos se obtiene la Fig. 2.9.

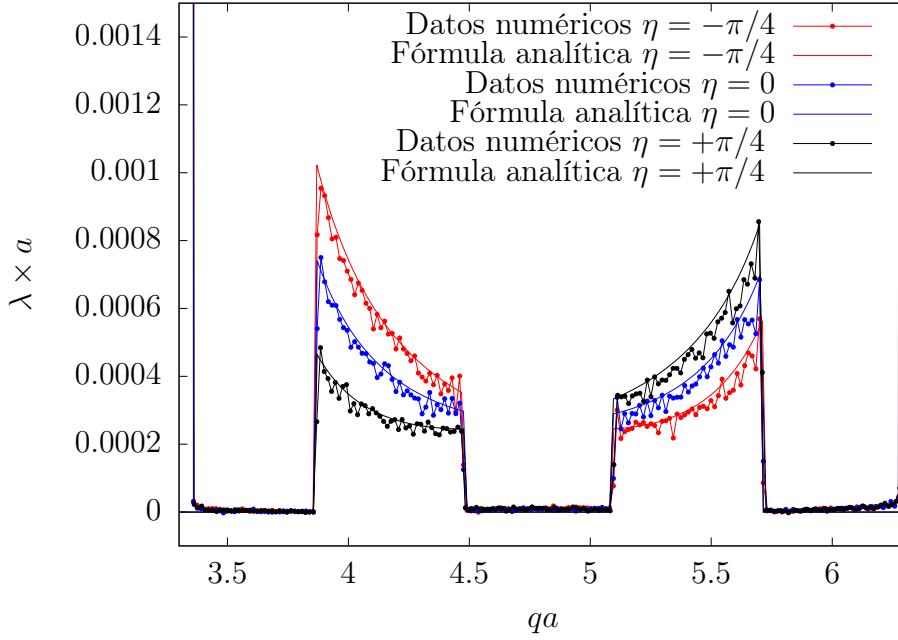


Figura 2.8: Las condiciones son las mismas que en la Fig. 2.8 pero ahora el intervalo de energía de inspección corresponde a la segunda banda de transmisión.

2.4. Transmisión a través del modelo de Kronig-Penney 2D

En esta sección expondremos cómo el efecto del desorden compositivo y estructural con correlaciones repercute sobre la transmisión para nuestro modelo (2.2) pero con un número finito N de barreras. Como punto de partida, extendemos la definición del coeficiente de transmisión en dos dimensiones y mostramos cómo calcularlo numéricamente usando la técnica de matrices de transferencia.

Para el modelo de Kronig-Penney 2D que estamos estudiando, la solución de la ecuación de Schrödinger dentro de los pozos es de la forma

$$\psi = R(\rho)\Theta(\theta) = R\Theta = [Fe^{il\theta} + Ge^{-il\theta}] [AH_l^{(1)}(q\rho) + BH_l^{(2)}(q\rho)]. \quad (2.31)$$

donde $\Theta = Fe^{il\theta} + Ge^{-il\theta}$ es la solución de la ecuación angular (2.6) siendo A, B, F y G constantes y $l \in \mathbb{Z}$.

La forma conveniente del operador ∇ en este caso es

$$\begin{aligned} \nabla\psi &= \frac{\partial\psi}{\partial\rho}\hat{\rho} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\hat{\theta} = \\ &\Theta\frac{dR}{d\rho}\hat{\rho} + \frac{1}{\rho}R\frac{d\Theta}{d\theta}\hat{\theta}. \end{aligned}$$

CAPÍTULO 2. UN MODELO DE KRONIG-PENNEY 2D CON SIMETRÍA CIRCULAR

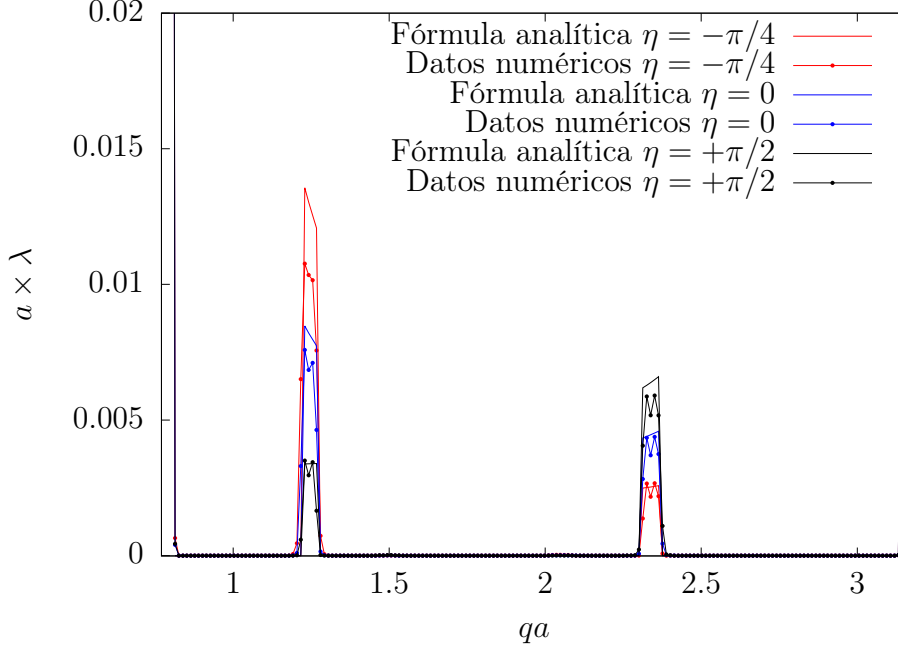


Figura 2.9: La situación es similar a la de la Fig. 2.8 pero ahora $k_1 a = 0.29\pi$ y $k_2 a = 0.31\pi$.

Por otro lado, sabemos que la corriente de probabilidad es asociada a una partícula de masa m está dada por

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*] = \frac{\hbar}{mi} \text{Re} [\psi^* \nabla \psi]. \quad (2.32)$$

Sustituyendo $\psi = R\Theta$ en la Ec. (2.32), vemos que

$$\mathbf{J} = |\Theta|^2 \mathbf{J}_R + \frac{|R|^2}{\rho} \mathbf{J}_\Theta$$

donde

$$\mathbf{J}_R = \frac{\hbar}{2mi} \left[R^* \frac{dR}{d\rho} - R \frac{dR^*}{d\rho} \right] \hat{\rho} = \frac{\hbar k}{2mi} (|B|^2 - |A|^2) W [H_l^{(1)}(q\rho), H_l^{(2)}(q\rho)] \hat{\rho} \quad (2.33)$$

y

$$\mathbf{J}_\Theta = \frac{\hbar}{2mi} \left[\Theta^* \frac{d\Theta}{d\theta} - \Theta \frac{d\Theta^*}{d\theta} \right] \hat{\theta} = \frac{\hbar l}{m} (|F|^2 - |G|^2) \hat{\theta}.$$

En (2.33) $W(f_1, f_2)$ representa el wronskiano de las funciones f_1 y f_2 ; las funciones de Hankel satisfacen $W [H_l^{(1)}(q\rho), H_l^{(2)}(q\rho)] = -4i/(q\pi\rho)$, sustituyendo en (2.33) se obtiene

$$\mathbf{J}_R = \frac{2\hbar}{\pi\rho m} (|A|^2 - |B|^2) \hat{\rho}$$

Notemos que $\mathbf{J}_R$ puede interpretarse, análogamente al caso unidimensional, como suma de dos densidades de corrientes: una saliente, $\frac{2\hbar}{\pi\rho m} (|A|^2)$; y otra entrante, $\frac{2\hbar}{\pi\rho m} (|B|^2)$.

CAPÍTULO 2. UN MODELO DE KRONIG-PENNEY 2D CON SIMETRÍA CIRCULAR

Ahora que conocemos la densidad de corriente podemos calcular el flujo de probabilidad inmediatamente antes y después de la n -ésima barrera. Sea S una superficie cerrada y $\mathbf{F}$ un campo vectorial, entonces el flujo de $\mathbf{F}$ se define como

$$\Phi = \oint_S \mathbf{J} \cdot d\mathbf{S} \quad (2.34)$$

donde $d\mathbf{S} = \hat{\mathbf{n}}dS$ y $\hat{\mathbf{n}}$ es un vector normal a la superficie S . Definimos las densidades de probabilidad entrante y saliente como

$$\mathbf{J}_{\text{saliente}} = \frac{2\hbar|\Theta|^2}{\pi\rho m}|A|^2\hat{\rho}$$

y

$$\mathbf{J}_{\text{entrante}} = -\frac{2\hbar|\Theta|^2}{\pi\rho m}|B|^2\hat{\rho}.$$

Sustituyendo $\mathbf{J}_\Theta$ y $\mathbf{J}_{\text{saliente}}$ en (2.34), vemos que el flujo debido a la onda saliente, inmediatamente antes de la n -ésima barrera, es

$$\Phi_{n-1} = \int_0^{2\pi} \left[\frac{2\hbar|\Theta|^2}{\pi\rho m}|A_{n-1}|^2\hat{\rho} \right] \cdot \hat{\rho} \Big|_{\rho=\rho_n} \rho_n d\theta = \frac{4\hbar}{m}(|F|^2 + |G|^2) |A_{n-1}|^2.$$

Del mismo modo, inmediatamente después de la n -ésima barrera,

$$\Phi_n = \frac{4\hbar}{m}(|F|^2 + |G|^2) |A_n|^2.$$

Entonces, el coeficiente de transmisión relativo a la n -ésima barrera es

$$T_n = \left| \frac{\Phi_n}{\Phi_{n-1}} \right| = \left| \frac{A_n}{A_{n-1}} \right|^2. \quad (2.35)$$

Por lo tanto, el coeficiente de transmisión a través de las N barreras será igual a

$$T_N = \left| \frac{A_N}{A_0} \right|^2. \quad (2.36)$$

Es posible expresar el coeficiente de transmisión en términos de matrices de transferencia definidas por la Ec. (2.16). Si conocemos las matrices de transferencia $\mathbf{M}_n$ para cada barrera podemos construir la solución de la ecuación de Schrödinger después de la N -ésima barrera a partir de la solución en el centro común de las barreras.

$$\begin{bmatrix} A_N \\ 0 \end{bmatrix} = \mathbf{M}_N \mathbf{M}_{N-1} \dots \mathbf{M}_3 \mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1 \begin{bmatrix} A_0 \\ B_0 \end{bmatrix}. \quad (2.37)$$

Llamaremos matriz de transferencia total, $\mathcal{M}_N$, a la matriz producto $\mathbf{M}_N \mathbf{M}_{N-1} \dots \mathbf{M}_3 \mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1$. Si conocemos esta matriz podemos calcular el coeficiente de transmisión.

$$A_N = [\mathcal{M}_N]_{11}A_0 + [\mathcal{M}_N]_{12}B_0$$

CAPÍTULO 2. UN MODELO DE KRONIG-PENNEY 2D CON SIMETRÍA CIRCULAR

$$0 = [\mathcal{M}_N]_{21}A_0 + [\mathcal{M}_N]_{22}B_0.$$

Eliminando B_0 obtenemos

$$A_N = \frac{\det(\mathcal{M}_N)}{[\mathcal{M}_N]_{22}}A_0 = \frac{1}{[\mathcal{M}_N]_{22}}A_0.$$

Por lo tanto el coeficiente de transmisión, en términos de $\mathcal{M}_N$ es

$$T_N = \frac{1}{|[\mathcal{M}_N]_{22}|^2}. \quad (2.38)$$

Nótese que hemos usado $\det(\mathbf{M}_n) = 1$.

De acuerdo con la teoría del único parámetro de escala, en el caso límite $N \gg 1$, se espera que el logaritmo del coeficiente de transmisión decrezca linealmente con el incremento del número de barreras de acuerdo con la relación [34]:

$$\langle \log T_N \rangle = -2Na\lambda.$$

Así, $T_N \approx 1$ cuando $\lambda \approx 0$. En la Fig. 2.10 vemos que las predicciones concuerdan con los resultados numéricos

En las siguientes gráficas mostramos las fluctuaciones correspondientes a las gráficas de la Fig. 2.10 alrededor de los promedios sobre las realizaciones.

Consideremos ahora la densidad espectral con sus respectivos bordes de movilidad dados por Ec. (2.30), en la Fig. 2.12 se muestran las gráficas del logaritmo del coeficiente de transmisión promediado sobre varias realizaciones para las primeras dos bandas cuando el desorden presenta correlaciones mientras que en la Fig. 2.13 se muestran las correspondientes fluctuaciones.

Estos resultados numéricos concuerdan con las predicciones teóricas, a medida que el número de barreras aumenta, las fluctuaciones alrededor de $\langle \log T_N \rangle$ disminuyen, y las predicciones de la relación $\langle \log T_N \rangle = -2Na\lambda$ mejoran. Pero si el número no es lo suficientemente grande, las fluctuaciones son muy grandes; sin embargo, las correlaciones favorecen la transmisión en intervalos de energía previamente dictados, haciendo que, a pesar de que N no sea grande, sobrevivan los bordes de movilidad. Así, el desorden con correlaciones puede usarse para seleccionar intervalos de energía deseados para intensificar o debilitar la transmisión en modelos finitos.

CAPÍTULO 2. UN MODELO DE KRONIG-PENNEY 2D CON SIMETRÍA CIRCULAR

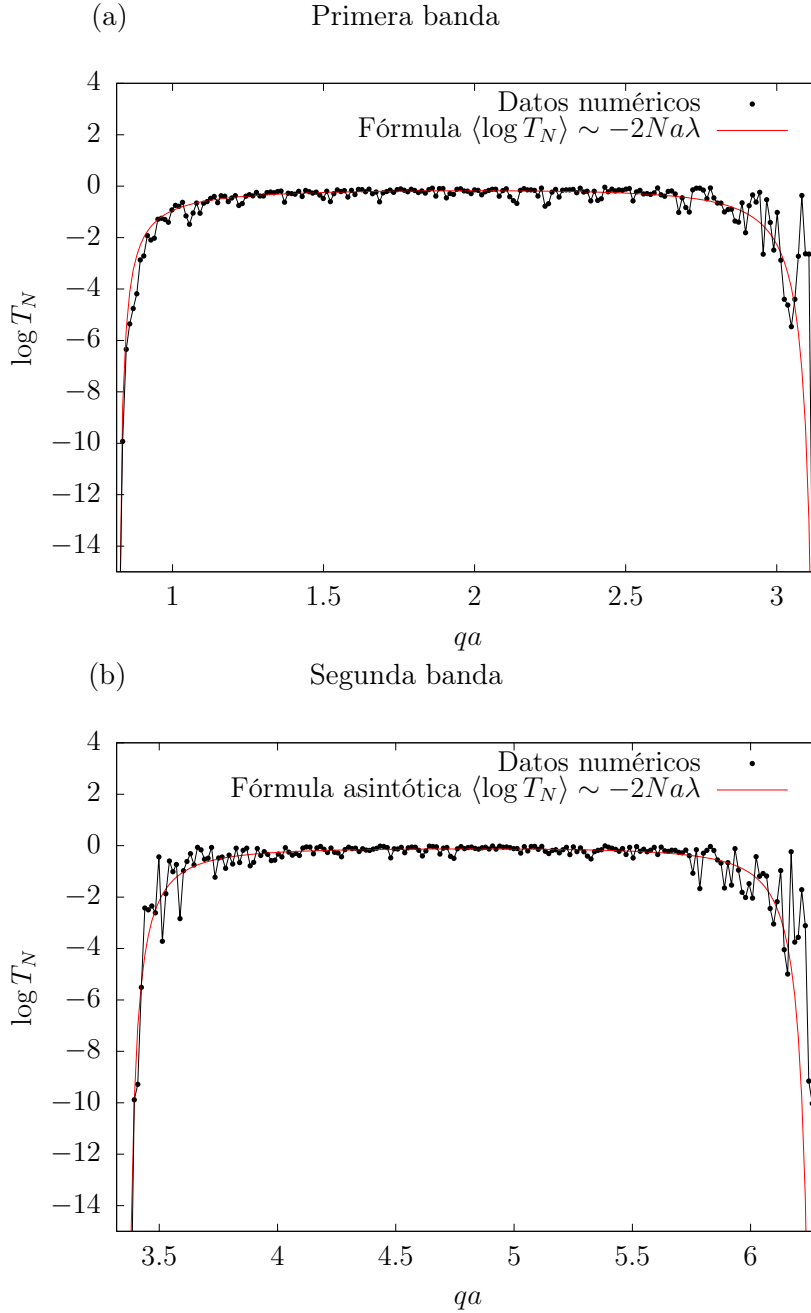


Figura 2.10: Logaritmo del coeficiente de transmisión dentro de la primera y segunda banda para una sucesión de $N = 600$ barreras con desorden sin correlaciones. Estas gráficas se obtuvieron promediando sobre 100 realizaciones. La intensidad promedio de las barreras deltiformes es $U = 0.7/a$. Las intensidades de desorden son $\sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle} = 0.04a$ y $\sqrt{\langle u_n^2 \rangle} = 0.04/a$.

CAPÍTULO 2. UN MODELO DE KRONIG-PENNEY 2D CON SIMETRÍA CIRCULAR

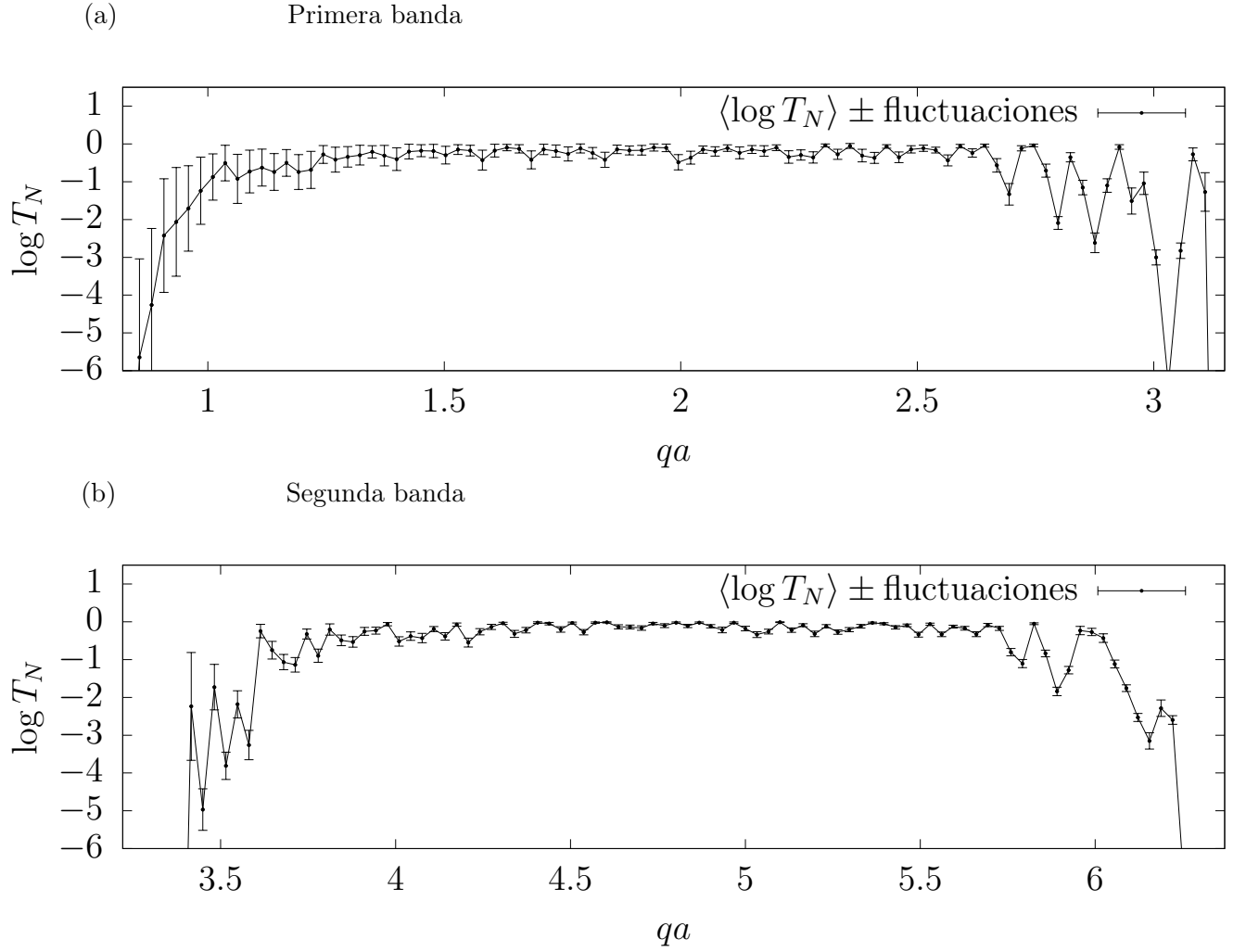


Figura 2.11: Fluctuaciones alrededor de $\langle \log T_N \rangle$ para la primera y segunda banda correspondientes a las gráficas de la Fig. 2.10.

CAPÍTULO 2. UN MODELO DE KRONIG-PENNEY 2D CON SIMETRÍA CIRCULAR

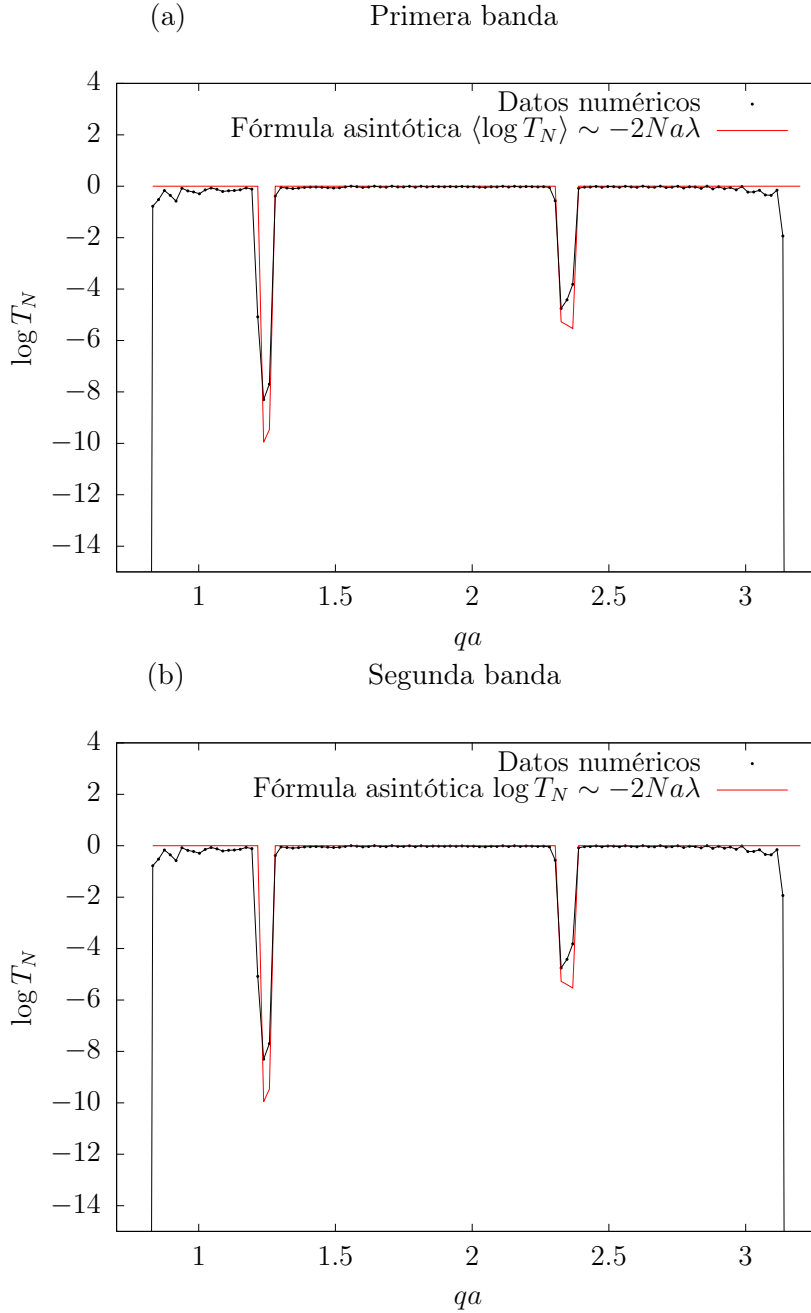


Figura 2.12: Logaritmo del coeficiente de transmisión (a) en la primera banda y (b) en la segunda para una sucesión de $N = 600$ barreras con desorden correlacionado, los bordes de movilidad están dados por la Ec. (2.30). Estas gráficas se obtuvieron promediando sobre 100 realizaciones. Las intensidades de desorden son $\sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle} = 0.04a$ y $\sqrt{\langle u_n^2 \rangle} = 0.04/a$. La intensidad promedio de las barreras deltiformes es $U = 0.7/a$.

CAPÍTULO 2. UN MODELO DE KRONIG-PENNEY 2D CON SIMETRÍA CIRCULAR

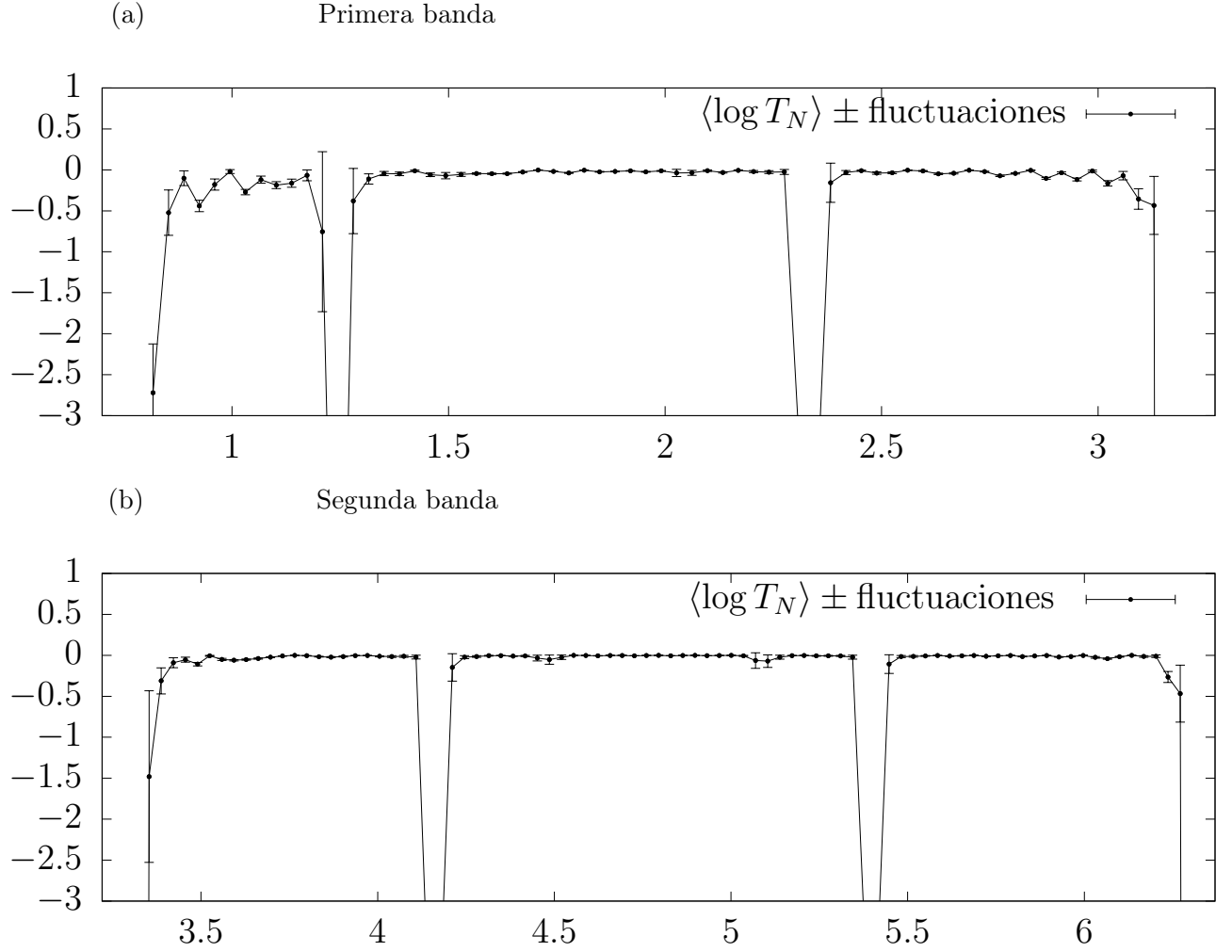


Figura 2.13: Fluctuaciones alrededor de $\langle \log T_N \rangle$ correspondientes a las gráficas de 2.12.

CAPÍTULO 2. UN MODELO DE KRONIG-PENNEY 2D CON SIMETRÍA CIRCULAR

Capítulo 3

Un modelo 2D con desorden en la variable angular

Estamos interesados en estudiar los efectos del desorden cuando la variable angular en modelos bidimensionales presenta desorden. Surgen las preguntas, ¿es posible que una función de onda se localice angularmente? y si sí, ¿bajo qué condiciones? Para evitar tratar con ecuaciones complejas, proponemos el potencial

$$U(\rho, \theta) = \frac{1}{\rho^2} V(\theta) = \frac{\hbar^2}{2m\rho^2} \sum_{n=1}^N U_n \delta(\theta - \theta_n). \quad (3.1)$$

Este potencial gobierna la función de onda de una partícula cuántica de masa m en una región bidimensional limitada por dos círculos concéntricos de radios interior ρ_1 y exterior ρ_2 (ver Fig. 3.1).

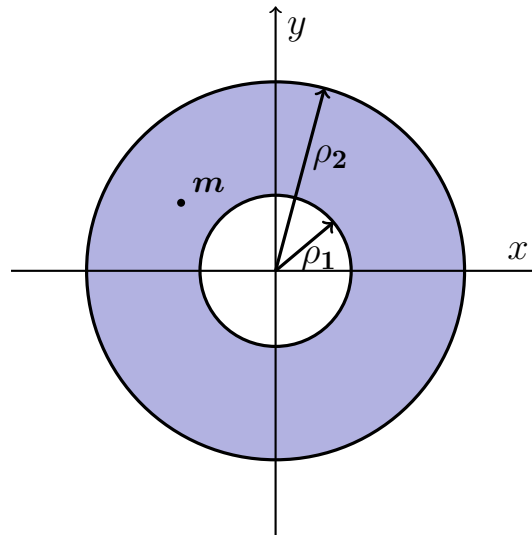


Figura 3.1: Partícula atrapada en una región anular con radios ρ_1 y ρ_2

CAPÍTULO 3. UN MODELO 2D CON DESORDEN EN LA VARIABLE ANGULAR

Un potencial de la forma $V(\theta)/\rho^2$ nos permite estudiar algunos modelos bidimensionales en términos de uno unidimensional respecto la variable angular con potencial $V(\theta)$, el cual hemos elegido convenientemente.

Para un radio fijo ρ ($\rho_1 < \rho < \rho_2$), el potencial (3.1) consiste en una sucesión finita de N barreras deltiformes con intensidades $\hbar^2 U_n / 2m\rho^2$ y posiciones angulares aleatorias $\{\theta_0 < \theta_1 < \theta_2 < \theta_3 \dots \theta_{N-1} < \theta_N\}$. Los valores aleatorios U_n y θ_n pueden descomponerse como suma de un valor medio más fluctuaciones:

$$U_n = U + u_n \quad \text{y} \quad \theta_n = n\alpha + (\delta\theta)_n$$

donde

$$\langle U_n \rangle = U \quad \text{y} \quad \langle \theta_n \rangle = n\alpha.$$

El símbolo α es el espaciamiento de red cuando desaparece el desorden, en este caso

$$\alpha = 2\pi/N$$

Para esta partícula, la ecuación de Schrödinger está dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U(\rho, \theta) \psi = E \psi \quad (3.2)$$

donde potencial $U(\rho, \theta)$ puede escribirse como

$$U(\rho, \theta) = \frac{1}{\rho^2} V(\theta) \quad \text{con} \quad V(\theta) = \sum_{n=1}^N U_n \delta(\theta - \theta_n).$$

La simetría del modelo en coordenadas polares sugiere el uso del método de separación de variables y suponer que $\psi = R(\rho)\Theta(\theta)$. En coordenadas polares, el operador laplaciano toma la forma

$$\nabla^2 = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}.$$

Esto nos permite descomponer la ecuación (3.2) en dos ecuaciones:

Una ecuación para la parte angular de ψ

$$\frac{d^2 \Theta}{d\theta^2} + \left[l^2 - \sum_{n=1}^N U_n \delta(\theta - \theta_n) \right] \Theta = 0. \quad (3.3)$$

Y otra para la parte radial

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left(q^2 - \frac{l^2}{\rho^2} \right) R = 0, \quad (3.4)$$

donde $q = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ y l es una constante de separación que toma valores reales positivos.

La Ec. (3.3) corresponde a un modelo de Kronig-Penney 1D aperiódico finito angular mientras que la Ec. (3.4) es una ecuación diferencial de Bessel.

Para resolver este problema primero debemos encontrar los autoestados angulares Θ y sus respectivos valores permitidos para l en (3.3) y después resolver la Ec. (3.4) para el valor de l previamente encontrado.

A pesar de que la Ec. (3.3) es un modelo de Kronig-Penney 1D, no es posible usar los resultados para el modelo infinito (1.2). Por ejemplo, si el desorden estructural es muy débil, es muy posible que la longitud (sector angular) de localización correspondiente al modelo (1.2) sea más grande 2π , teniendo así, autoestados extendidos. Además, un desorden estructural muy fuerte puede intercambiar el orden físico de las posiciones de las barreras cuando estaban equiespaciadas; si al menos una barrera intercambia su orden con otra, se debe considerar la nueva configuración, redefinir los índices para ordenar de forma creciente y comparar esta nueva configuración reordenada con la imperturbada para poder analizar las propiedades estadísticas.

Sin embargo, es posible fortalecer la localización introduciendo desorden débil con correlaciones de largo alcance [39]. Esto nos evita tratar con desorden fuerte. Para analizar las propiedades de localización de la parte angular Θ , utilizaremos una cantidad equivalente a la longitud de localización para modelos finitos: la razón de participación inversa IPR [40], la cuál es el recíproco de la integral del módulo cuarto de Θ (número de participación) [41].

3.1. Parte angular: Modelo de Kronig-Penney 1D aperiódico finito

Consideremos la ecuación diferencial (3.3) para la parte angular

$$\frac{d^2\Theta}{d\theta^2} + \left[l^2 - \sum_{n=1}^N U_n \delta(\theta - \theta_n) \right] \Theta = 0.$$

Nuestro objetivo, dada la configuración de barreras y cierto valor l , es encontrar la función de onda Θ dentro del intervalo $[0, 2\pi]$; sin embargo, sólo los valores correctos de l nos conducirán a soluciones Θ físicamente aceptables. Por ejemplo, si el desorden desaparece, se espera que las soluciones físicamente aceptables sean onda de Bloch.

La ecuación (3.3) puede estudiarse en términos de su modelo de enlace fuerte asociado. Para obtener el modelo de enlace fuerte se puede usar el método del mapa hamiltoniano visto en el capítulo 1 y en sus referencias.

CAPÍTULO 3. UN MODELO 2D CON DESORDEN EN LA VARIABLE ANGULAR

3.1.1. Modelo de enlace fuerte asociado al modelo de Kronig-Penney 1D angular continuo

Siguiendo el procedimiento en [30], encontramos que el mapa hamiltoniano asociado a la Ec (3.3) está dado por

$$\begin{bmatrix} \Theta_{n+1} \\ \Theta'_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos[l(\alpha + \Delta_n)] + \frac{U_n}{l} \sin[l(\alpha + \Delta_n)] & \frac{\sin[l(\alpha + \Delta_n)]}{l} \\ -l \sin[l(\alpha + \Delta_n)] + U_n \cos[l(\alpha + \Delta_n)] & \cos[l(\alpha + \Delta_n)] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Theta_n \\ \Theta'_n \end{bmatrix}, \quad (3.5)$$

donde $\Theta(\theta_n^-) = D\Theta_n$ y $\Theta'(\theta_n^-) = D\Theta'_n$, D es una constante de normalización que se definirá más adelante para el caso continuo y $\Delta_n = (\delta\theta)_{n+1} - (\delta\theta)_n$. Si se eliminan Θ'_n y Θ'_{n+1} del sistema formado por (3.5), se obtiene el siguiente modelo de enlace fuerte

$$\gamma_{n+1}\Theta_{n+1} + \gamma_n\Theta_{n-1} = \epsilon_n\Theta_n, \quad (3.6)$$

donde

$$\gamma_n = \frac{1}{\sin[l(\alpha + \Delta_n)]}$$

y

$$\epsilon_n = \cot[l(\alpha + \Delta_n)] + \cot[l(\alpha + \Delta_{n-1})] + \frac{U_n}{l}.$$

De la fórmula definida por (3.6), puede verse que para conocer Θ_{n+1} se necesita conocer a Θ en dos sitios sucesivos previos o posteriores. Esto puede resolverse si, considerando que θ_i y $\theta_i + 2\pi$ representan el mismo sitio, se impone que las posiciones θ_0 y θ_N son iguales, de este modo se tienen las condiciones periódicas

$$\Theta_0 = \Theta_N$$

y

$$\Theta'_0 = \Theta'_N.$$

La Ec. (3.6) puede interpretarse como un sistema de ecuaciones homogéneo de $N \times N$ en donde las incógnitas son las Θ_n 's. Tomando en cuenta la periodicidad, las ecuaciones son

$$\gamma_1\Theta_N + \gamma_2\Theta_2 - \epsilon_1\Theta_1 = 0, \quad \gamma_2\Theta_1 + \gamma_3\Theta_3 - \epsilon_2\Theta_2 = 0, \quad \gamma_3\Theta_2 + \gamma_4\Theta_4 - \epsilon_3\Theta_3 = 0, \dots$$

Este sistema de ecuaciones puede expresarse matricialmente como

$$\mathbf{M}(l) \begin{bmatrix} \Theta_1 \\ \Theta_2 \\ \Theta_3 \\ \vdots \\ \Theta_N \end{bmatrix} = \vec{0}, \quad (3.7)$$

CAPÍTULO 3. UN MODELO 2D CON DESORDEN EN LA VARIABLE ANGULAR

donde

$$\mathbf{M}(l) = \begin{bmatrix} -\epsilon_1 & \gamma_2 & 0 & \dots & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & \gamma_1 \\ \gamma_2 & -\epsilon_2 & \gamma_3 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_3 & -\epsilon_3 & \gamma_4 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & & & & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & & & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & & & \vdots \\ \vdots & & & & 0 & \gamma_{n+1} & -\epsilon_n & \gamma_{n+1} & 0 & & & \vdots \\ \vdots & & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & \gamma_{N-2} & -\epsilon_{N-2} & \gamma_{N-1} & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & \gamma_{N-1} & -\epsilon_{N-1} & \gamma_N \\ \gamma_1 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & \gamma_N & -\epsilon_N \end{bmatrix}. \quad (3.8)$$

Resolver el modelo de enlace fuerte (3.6) es equivalente a resolver el modelo continuo (3.3). Si se conoce un vector solución del sistema (3.7), se puede construir una solución para (3.3) dentro de cada pozo. Para el n -ésimo pozo limitado por (θ_n, θ_{n+1}) se pueden tomar Θ_n y Θ_{n+1} como valores en la frontera. Dentro (θ_n, θ_{n+1}) la función Θ satisface

$$\Theta(\theta) = A_n \cos(l\theta) + B_n \sin(l\theta). \quad (3.9)$$

Las constantes A_n y B_n pueden encontrarse haciendo $\theta = \theta_n$ y $\theta = \theta_{n+1}$. Así, la función Θ para cualquier valor de $\theta \in (\theta_n, \theta_{n+1})$ está dada por

$$\Theta(\theta) = D \left\{ -\Theta_n \frac{\sin[l(\theta - \theta_{n+1})]}{\sin[l(\theta_{n+1} - \theta_n)]} + \Theta_{n+1} \frac{\sin[l(\theta - \theta_n)]}{\sin[l(\theta_{n+1} - \theta_n)]} \right\}. \quad (3.10)$$

La constante D puede obtenerse con la condición de normalización

$$\int_0^{2\pi} |\Theta(\theta)|^2 d\theta = 1. \quad (3.11)$$

El sistema de ecuaciones homogéneo (3.7) tiene solución no nula cuando $\det [\mathbf{M}(l)] = 0$; la matriz $\mathbf{M}(l)$ sólo será singular para valores específicos de l . Desafortunadamente no es posible obtener una expresión analítica para calcular los valores permitidos de l , este problema deberá abordarse numéricamente. Después de conocer los valores correctos de l , el paso siguiente es resolver el sistema de ecuaciones, es decir, diagonalizar la matriz $\mathbf{M}(l)$: a un autovector correspondiente un autovalor nulo será solución del sistema de ecuaciones homogéneo.

Para encontrar el espectro de valores l , podemos hacer que l tome diferentes valores continuos dentro de un intervalo (l_i, l_f) , diagonalizar la matriz $M(l)$ y evaluar su

CAPÍTULO 3. UN MODELO 2D CON DESORDEN EN LA VARIABLE ANGULAR

Se trata de una red de N sitios y con parámetro de red α . Sabemos que en este caso los autoestados son ondas de Bloch

$$\Theta_n = e^{ink_\theta\alpha} \quad (3.13)$$

siendo k_θ el vector de onda de Bloch angular. Sustituyendo en (3.12) vemos que

$$\cos(k_\theta\alpha) = \cos(l\alpha) + \frac{U}{2l} \sin(l\alpha). \quad (3.14)$$

Si la red consiste en N sitios, entonces se tendrán N vectores de Bloch

$$k_\theta = \frac{2\pi}{N\alpha} \ell \quad \text{para} \quad \ell = 0, 1, 2, 3, \dots, N-1.$$

Por cada vector de onda de Bloch se tendrá una ecuación (3.14), si etiquetamos con un índice cada valor de l de menor a mayor que satisfacen (3.14) para cierto k_θ , podemos formar variando k_θ para un mismo índice conjuntos de valores de l llamados bandas. En la Fig. 3.3 se muestran las primeras cuatro bandas para un sistema de $N = 36$ barreras y $U = 15$.

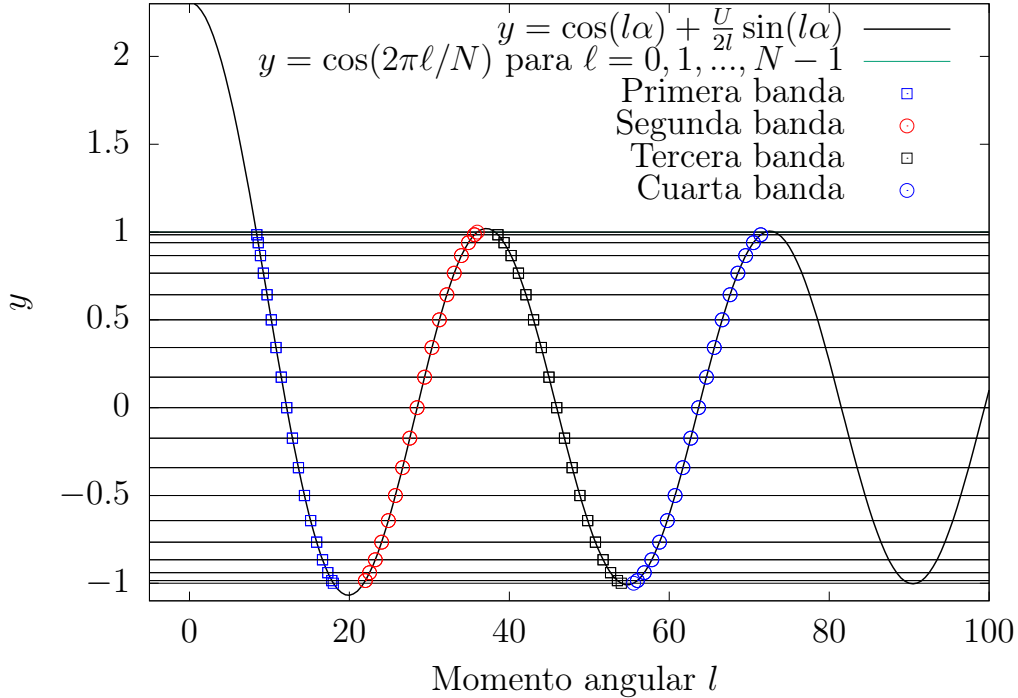


Figura 3.3: En este ejemplo $N = 36$ y $U = 15$. Cada punto de intersección de las curvas $y = \cos(k_\theta\alpha)$ y $y = \cos(l\alpha) + \frac{U}{2l} \sin(l\alpha)$ representa un valor permitido para l , formando conjuntos discretos de valores o bandas.

CAPÍTULO 3. UN MODELO 2D CON DESORDEN EN LA VARIABLE ANGULAR

Es posible conocer Θ para todo θ dado un vector de onda de Bloch k_θ y un valor de l que satisfaga (3.14). Si se sustituye (3.13) en (3.10) se obtiene

$$\Theta(\theta) = D \frac{e^{ik_\theta n \alpha}}{\text{sen}(l\alpha)} \left\{ e^{ik_\theta \alpha} \text{sen}[l(\theta - n\alpha)] - \text{sen}[l(\theta - n\alpha - \alpha)] \right\} \quad (3.15)$$

En la Fig. 3.4 se muestra una solución para un sistema formado por $N = 36$ y $U = 15$, se ha tomado el vector $k_\theta \alpha = 2\pi(9)/36$ y la raíz $l = 12.165395527806645$.

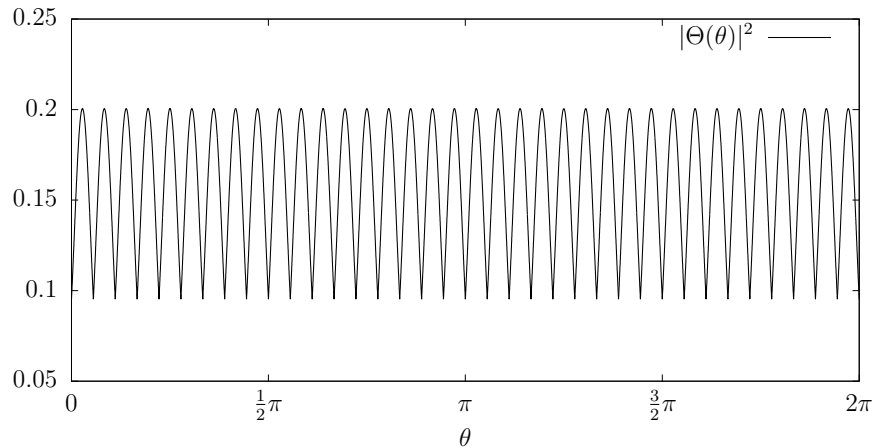


Figura 3.4: Módulo cuadrado de la parte angular de la función de onda, se ha tomado el vector de onda de Bloch $k_\theta \alpha = 2\pi(9)/36$.

3.1.3. Modelo de Kronig-Penney 1D periódico finito (método numérico)

Con el fin de idear una estrategia para resolver el sistema (3.7), primero resolveremos el problema sin desorden numéricamente. Observemos que en ausencia de desorden

$$\gamma_n \equiv \gamma = \frac{1}{\text{sen}(l\alpha)} \quad \text{y} \quad \epsilon_n \equiv \epsilon = 2 \cot(l\alpha) + \frac{U}{l}.$$

CAPÍTULO 3. UN MODELO 2D CON DESORDEN EN LA VARIABLE ANGULAR

Entonces, la matriz tridiagonal se reduce a

$$\mathbf{M}(l) = \begin{bmatrix} -\epsilon & \gamma & 0 & \dots & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & \gamma \\ \gamma & -\epsilon & \gamma & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \gamma & -\epsilon & \gamma & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & & & & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & & & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & & & \vdots \\ \vdots & & & & 0 & \gamma & -\epsilon & \gamma & 0 & & & \vdots \\ \vdots & & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & \gamma & -\epsilon & \gamma & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & \gamma & -\epsilon & \gamma \\ \gamma & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & \gamma & -\epsilon \end{bmatrix}. \quad (3.16)$$

Analíticamente, sabemos que esta matriz se vuelve singular para todos los valores de l que satisfacen la Ec. (3.14)

$$\cos(k_\theta \alpha) = \cos(l\alpha) + \frac{U}{2l} \sin(l\alpha).$$

Además, gracias a la simetría de la función coseno, podemos ver que para cada índice ℓ se cumple que

$$\cos\left[\frac{2\pi}{N}\ell\right] = \cos\left[\frac{2\pi}{N}(N - \ell)\right].$$

Sustituyendo los vectores de Bloch $k_\theta = 2\pi\ell/N$ y $k_\theta = 2\pi(N - \ell)/N$ en la Ec. (3.14), se deduce que $l_N = l_{N-\ell}$, es decir, estos dos vectores de Bloch generan un mismo valor permitido para l . Así, si numéricamente se obtiene un valor para l que vuelve singular a (3.16), entonces la matriz tendrá un autovalor nulo con multiplicidad 2 para dicho l . Notemos que no importa si N es par o impar, pues usando la periodicidad, siempre se puede agregar un renglón más a la matriz (3.16) para obtener autovalores con su respectivo par. Por lo tanto, siempre se pueden obtener dos vectores solución linealmente independientes Θ_1 y Θ_2 .

Imaginemos que sólo conocemos los intervalos de cada banda para l pero no los valores específicos de l que satisfacen (3.14). Un método para saber si la matriz es singular es diagonalizarla y tomar los valores propios más pequeños, la cercanía de éstos a cero servirá como criterio para aceptarlos como valores permitidos o no. Debido a que la matriz $\mathbf{M}(l)$ es casi singular, es conveniente usar el método de descomposición en valores singulares (SVD) [42]. El método SVD consiste en descomponer cierta matriz A como un producto de tres matrices:

$$\mathbf{A} = \mathbf{LWR}^T,$$

CAPÍTULO 3. UN MODELO 2D CON DESORDEN EN LA VARIABLE ANGULAR

donde $\mathbf{W}$ es una matriz diagonal

$$\mathbf{W} = \begin{bmatrix} w_1 & & & & \\ & w_2 & & & \\ & & w_3 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & w_N \end{bmatrix}$$

y las matrices $\mathbf{L}$ y $\mathbf{R}$ satisfacen $\mathbf{LR}^T = \mathbb{I}$. Si la matriz es compleja entonces las matrices $\mathbf{L}$ y $\mathbf{R}$ deben ser unitarias y la descomposición es de la forma $\mathbf{A} = \mathbf{LWR}^\dagger$.

Usando el método SVD, lo que se debe hacer es encontrar los valores singulares w_j de la matriz $\mathbf{M}(l)$, ordenarlos de mayor a menor y tomar los valores singulares más pequeños. La solución general del sistema homogéneo es una combinación lineal de Θ_1 y Θ_2

$$\mathbf{v} = \mathbf{E}\Theta_1 + \mathbf{F}\Theta_2. \quad (3.17)$$

Notemos que las soluciones Θ_1 y Θ_2 son reales porque las entradas de la matriz (3.16) son reales, se puede verificar analítica y numéricamente que estas dos soluciones son de la forma

$$\Theta_1 \propto \begin{bmatrix} 1 \\ \cos(k_\theta \alpha) \\ \cos(2k_\theta \alpha) \\ \vdots \\ \cos[(N-1)k_\theta \alpha] \end{bmatrix} \quad \text{y} \quad \Theta_2 \propto \begin{bmatrix} \sin(0) \\ \sin(k_\theta \alpha) \\ \sin(2k_\theta \alpha) \\ \vdots \\ \sin[(N-1)k_\theta \alpha] \end{bmatrix}.$$

Una solución que satisface el sistema homogéneo y conduce a ondas de Bloch se encuentra haciendo $\mathbf{F} = i\mathbf{E}$, así, la Ec. (3.17) se reduce a

$$\Theta = \mathbf{E}(\Theta_1 + i\Theta_2).$$

Después de obtener las soluciones físicamente aceptables $\Theta_1, \Theta_2, \Theta_3, \dots, \Theta_N$, se puede calcular $\Theta(\theta)$ para todo $\theta \in (0, 2\pi)$ usando (3.10). Los resultados numéricos y analíticos son, con alta precisión, prácticamente idénticos.

3.1.4. Modelo de Kronig-Penney 1D aperiódico finito

Podemos resolver la ecuación (3.7) usando el mismo procedimiento que en el caso ordenado, primero, buscamos los autovalores nulos de (3.8) y sus correspondientes autovectores usando el método de descomposición en valores singulares. Sin embargo, con desorden, los autoestados no son ondas de Bloch y la ecuación de dispersión (3.14) ya no se cumple. Al romperse la simetría, los autovalores de (3.8) dejan de tener multiplicidad dos, pero si el desorden es débil los autovalores no difieren mucho.

CAPÍTULO 3. UN MODELO 2D CON DESORDEN EN LA VARIABLE ANGULAR

Un camino para encontrar los valores permitidos para l es hacer variar l como “parámetro libre” dentro de cierta banda, evaluar el determinante de (3.8) para varios valores de l y seleccionar aquéllos para los cuales éste es aproximadamente cero. Sin embargo, aún sin desorden, el determinante de (3.8) (el cual es igual a $w_1 w_2 w_3 \cdots w_N$) sufre cambios muy bruscos, por ejemplo puede variar desde 0 hasta 1×10^{40} . Otro camino es seleccionar los dos autovalores más pequeños y hacer variar l hasta que los autovalores estén lo más cerca posible de cero. Para evitar los cambios bruscos, en vez de tomar el producto $w_1 w_2 w_3 \cdots w_N = \det \mathbf{M}(l)$, se ha optado por considerar el producto de los valores singulares más pequeños w_1 y w_2 . En las figuras 3.5 y 3.6 se muestran las gráficas de la función $g(l) = w_1 w_2$ para dos configuraciones de $N = 36$ y $U = 15$ con distintas intensidades de desorden estructural y compositivo sin correlaciones, respectivamente.

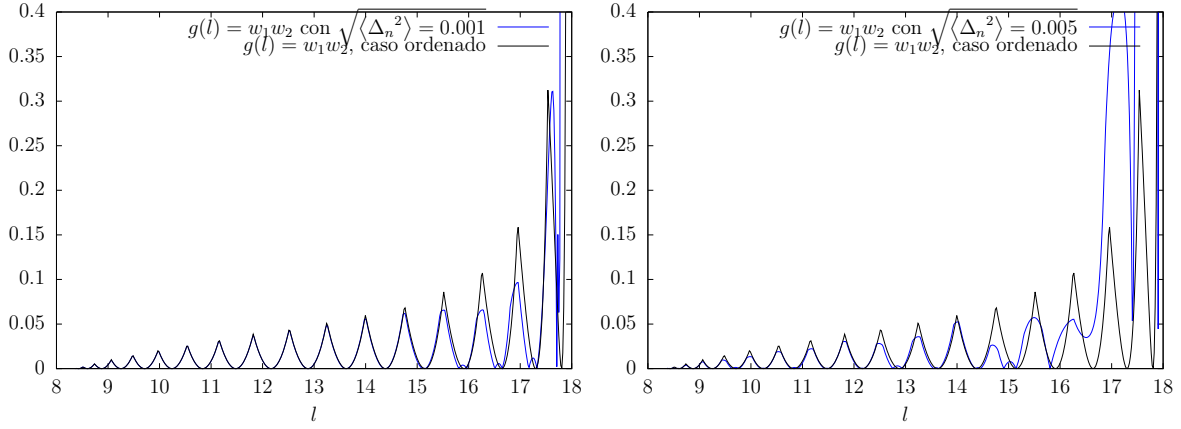


Figura 3.5: En esta figura la curva de color negro para las dos gráficas corresponde al caso ordenado, se verifica que los valores de l tales que $g(l) = 0$ coinciden con los que predice la Ec. (3.14). La curva azul corresponde al caso perturbado, en ésta se muestra cómo los ceros de $g(l)$ del extremo superior de la banda con desorden se desplazan respecto a los del caso ordenado conforme aumenta la intensidad del desorden.

CAPÍTULO 3. UN MODELO 2D CON DESORDEN EN LA VARIABLE ANGULAR

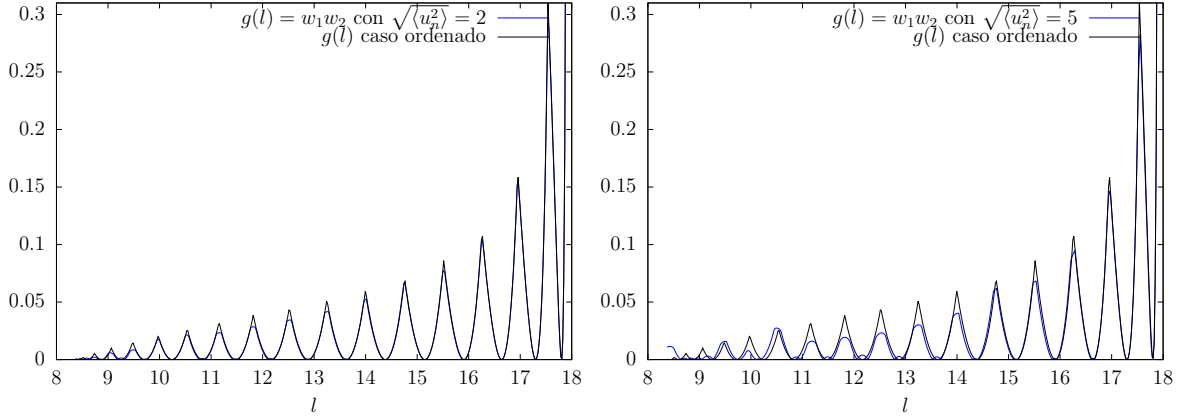


Figura 3.6: Sistema formado por $N = 36$ y $U = 15$. En esta figura se muestran las gráficas para $g(l) = w_1 w_2$, la curva de color negro para las dos corresponde al caso ordenado y la curva azul corresponde al caso con desorden puramente compositivo.

De las gráficas 3.5 y 3.6, podemos ver que la intensidad de desorden compositivo influye menos en el desplazamiento de los valores permitidos para l con respecto al caso imperturbado. En las figuras 3.7 y 3.8 se muestran la funciones de onda respectivas para las mismas realizaciones de las figuras 3.5 y 3.6.

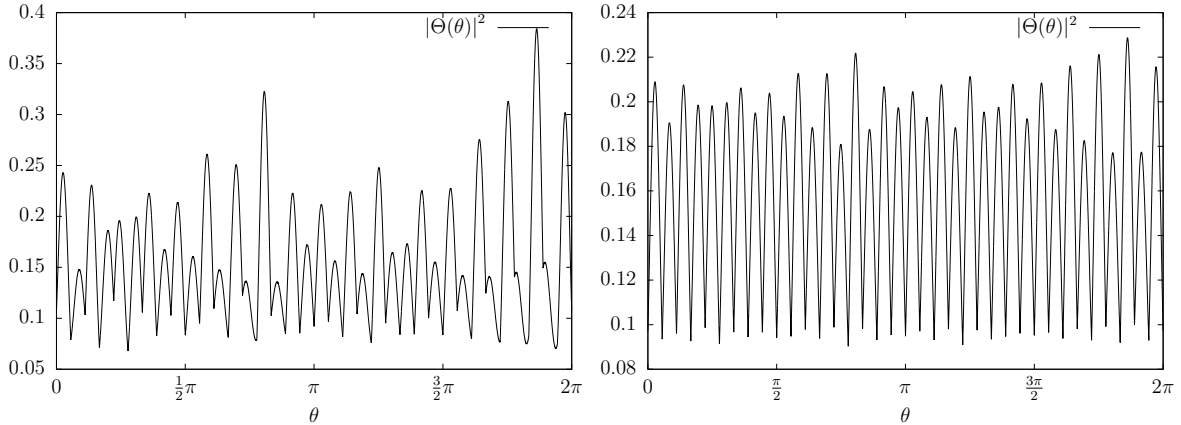


Figura 3.7: Funciones de onda de dos configuraciones de $N = 36$ barreras y $U = 15$ con distintas intensidades de desorden estructural, $\sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle}$

Aunque el desorden compositivo es fuerte, la finitud del modelo no nos permite visualizar la localización. Sin embargo, podemos usar el desorden con correlaciones para fortalecer la localización en nuestro modelo finito aún con desorden débil. El desorden con correlaciones puede obtenerse por medio del algoritmo desarrollado en [15] (visto en el capítulo 2), el cual nos permite construir sucesiones de valores aleatorios

$$\{\Delta_1, \Delta_2, \Delta_3, \dots, \Delta_N\} \quad \text{y} \quad \{u_1, u_2, u_3, \dots, u_N\}$$

CAPÍTULO 3. UN MODELO 2D CON DESORDEN EN LA VARIABLE ANGULAR

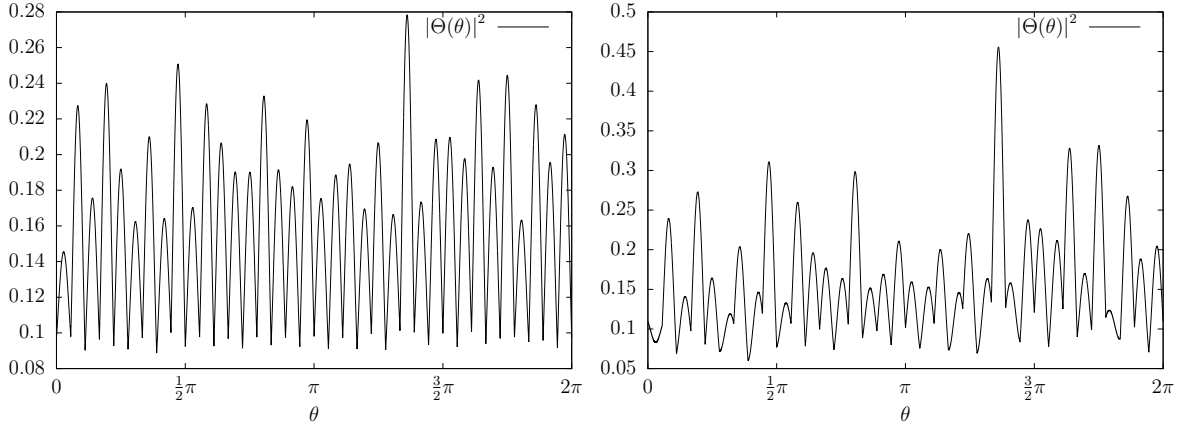


Figura 3.8: Funciones de onda de dos configuraciones de $N = 36$ barreras y $U = 15$ con distintas intensidades de desorden compositivo, $\sqrt{\langle u_n^2 \rangle} = 2$ y $\sqrt{\langle u_n^2 \rangle} = 5$

a partir de las densidades espectrales

$$W_1(k_\theta \alpha) = 1 + 2 \sum_{j=1}^{\infty} \chi_1(j) \cos(2k_\theta \alpha j) \quad \text{y} \quad W_2(k_\theta \alpha) = 1 + 2 \sum_{j=1}^{\infty} \chi_2(j) \cos(2k_\theta \alpha j), \quad (3.18)$$

donde

$$\chi_1(j) = \frac{\langle u_n u_{n+j} \rangle}{\langle u_n^2 \rangle} \quad \text{y} \quad \chi_2(j) = \frac{\langle \Delta_n \Delta_{n+j} \rangle}{\langle \Delta_n^2 \rangle}. \quad (3.19)$$

Podemos usar el desorden con correlaciones para fortalecer la localización en nuestro modelo finito aún con desorden débil. En el capítulo 2 habíamos construido ventanas de energía en las que se fortalecía la localización para el modelo de KP-1D aperiódico infinito. A pesar de que el exponente de Lyapunov o longitud de localización inversa para el modelo infinito no es apropiado para nuestro modelo finito, nos brinda información sobre en qué intervalos se puede fortalecer la localización dentro de cierta banda gracias a la expresión

$$\lambda = \frac{1}{8\alpha} \left[\langle \tilde{u}_n^2 \rangle W_1(k_\theta \alpha) + \langle \tilde{\Delta}_n^2 \rangle W_2(k_\theta \alpha) - 2 \langle \tilde{u}_n \tilde{\Delta}_n \rangle (\cos k_\theta \alpha) W_3(k_\theta \alpha) \right] \quad (3.20)$$

donde

$$W_3(k_\theta \alpha) = 1 + 2 \sum_{j=1}^{\infty} \chi_3(j) \cos 2k_\theta \alpha j \quad (3.21)$$

es la densidad espectral correspondiente a las intercorrelaciones entre u_n y Δ_n con correlador binario

$$\chi_3(j) = \frac{\langle u_n \Delta_{n+j} \rangle}{\langle u_n \Delta_n \rangle} \quad (3.22)$$

Además, podemos expresar la tercera densidad espectral $W_3(k_\theta \alpha)$ en términos de $W_1(k_\theta \alpha)$ y $W_2(k_\theta \alpha)$ por medio de un parámetro η que indica el grado de interco-

CAPÍTULO 3. UN MODELO 2D CON DESORDEN EN LA VARIABLE ANGULAR

relación. Así, la longitud de localización inversa está dada por

$$\lambda = \frac{1}{8\alpha} \left[\langle \tilde{u}_n^2 \rangle W_1(k_\theta \alpha) + \langle \tilde{\Delta}_n^2 \rangle W_2(k_\theta \alpha) - 2\sqrt{\langle u_n^2 \rangle \langle \Delta_n^2 \rangle} W_1(k_\theta \alpha) W_2(k_\theta \alpha) \cos k_\theta \alpha \sin(2\eta) \right] \quad (3.23)$$

Con el fin de fortalecer la localización dentro las bandas, tomemos la siguiente densidad espectral

$$W_1(k_\theta \alpha) = W_2(k_\theta \alpha) = \begin{cases} \frac{\pi}{2(k_{\theta 2} - k_{\theta 1})\alpha} & \text{si } k_\theta \in [k_{\theta 1}, k_{\theta 2}] \\ 0 & \text{si } k_\theta \in [0, k_{\theta 1}] \cup [k_{\theta 2}, \pi/(2\alpha)] \end{cases} \quad (3.24)$$

En la siguiente sección se estudiará la localización para este modelo finito por medio de la razón de participación inversa, así como los efectos del desorden con correlaciones.

3.2. Razón de participación inversa para autoestados Θ

Una cantidad que nos ayuda a distinguir autoestados localizados de extendidos es la razón de participación inversa (IPR); ésta se define como el recíproco de la razón de participación

$$\text{PR} = \int_{Vol} |\Psi|^4 dV.$$

Es decir, $\text{IPR} = 1/\text{PR}$. Cuantitativamente, el IPR representa la porción del espacio en donde el módulo cuadrado de la función de onda difiere significativamente de cero. Si el IPR de un autoestado es del orden del tamaño del sistema $\text{IPR} \sim Vol$, entonces se trata de un autoestado extendido; pero si el $\text{IPR} < Vol$ significativamente, se trata de un autoestado localizado. Para nuestro modelo esperamos que si un autoestado Θ es extendido, entonces

$$\text{IPR} = \left[\int_0^{2\pi} |\Theta(\theta)|^4 d\theta \right]^{-1} \sim 2\pi.$$

En la Fig. 3.9 se muestra la razón de participación inversa para un sistema formado por $N = 36$ y $U = 15$ sin desorden.

Con el fin de estudiar la localización en nuestro modelo, introduzcamos el desorden con correlaciones para fortalecer la localización en subintervalos de las bandas, para ello, consideremos la densidad espectral

$$W_1(k_\theta \alpha) = W_2(k_\theta \alpha) = \begin{cases} \frac{\pi}{2(k_{\theta 2} - k_{\theta 1})\alpha} & \text{si } k_\theta \in [k_{\theta 1}, k_{\theta 2}] \\ 0 & \text{si } k_\theta \in [0, k_{\theta 1}] \cup [k_{\theta 2}, \pi/(2\alpha)] \end{cases} \quad (3.25)$$

CAPÍTULO 3. UN MODELO 2D CON DESORDEN EN LA VARIABLE ANGULAR

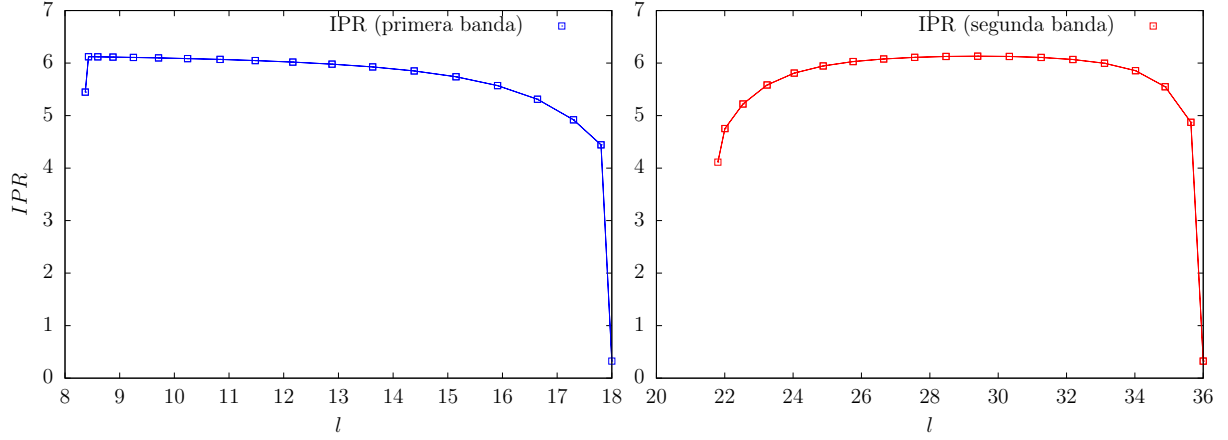


Figura 3.9: Razón de participación inversa para un sistema ordenado de $N = 36$ y $U = 15$ en función de l para las primero 2 bandas en ausencia de desorden.

En la Fig. 3.10 se muestra la razón de participación para una configuración con desorden con correlaciones generado a partir de una densidad de la forma (3.25) con $[k_{\theta_1}\alpha, k_{\theta_2}\alpha] = [0.35\pi, 0.4\pi]$, sustituyendo en (3.14) se tiene que a los vectores de Bloch $0.35\pi/\alpha$ y $0.4\pi/\alpha$ les corresponden los valores $l \approx 10.414$ y $l \approx 10.961$ en la primera banda. En la Fig. 3.11 se muestra la razón de participación pero ahora con

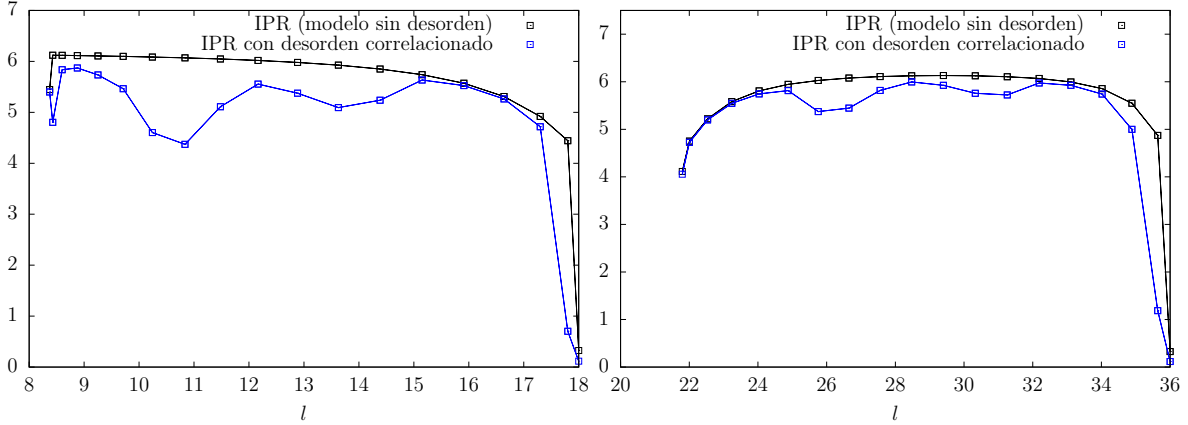


Figura 3.10: Razón de participación para una configuración de $N = 36$ barreras, $U = 15$ con $\sqrt{\langle u_n^2 \rangle} = 5$, $\sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle} = 0.001$ e intensidad de intercorrelación $\eta = \pi/2$ dentro de las primeras dos bandas.

$[k_{\theta_1}\alpha, k_{\theta_2}\alpha] = [0.45\pi, 0.5\pi]$, sustituyendo en (3.14) se tiene que a los vectores de Bloch $0.45\pi/\alpha$ y $0.5\pi/\alpha$ les corresponden los valores $l \approx 11.546$ y $l \approx 12.165$ en la primera banda.

Si tomamos el valor de l correspondiente al valor más pequeño del IPR podemos obtener la función de onda con mayor intensidad de localización, para la Fig. 3.11 este valor es $l \approx 12.165$ en la primera banda. El autoestado angular correspondiente al

CAPÍTULO 3. UN MODELO 2D CON DESORDEN EN LA VARIABLE ANGULAR

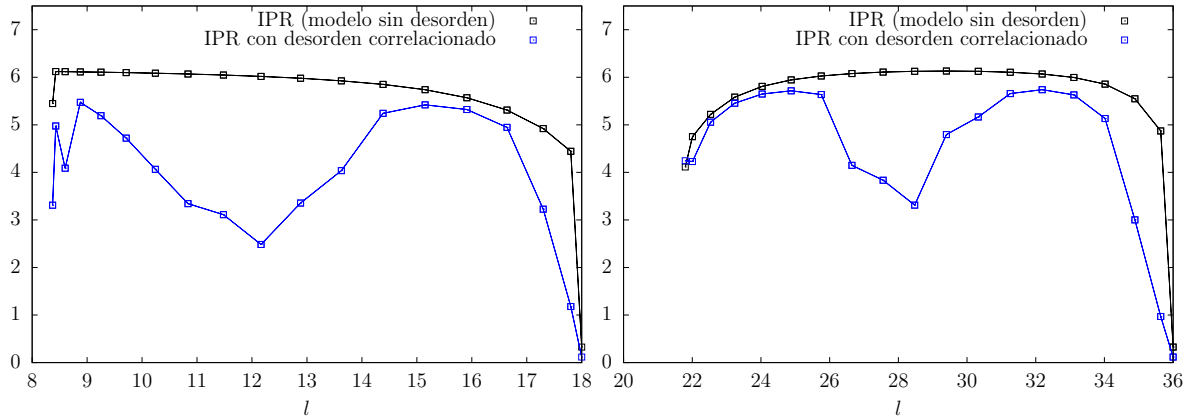


Figura 3.11: Razón de participación para una configuración de $N = 36$ barreras, $U = 15$ con $\sqrt{\langle u_n^2 \rangle} = 5$, $\sqrt{\langle \Delta_n^2 \rangle} = 0.001$ e intensidad de intercorrelación $\eta = \pi/2$ dentro de las primeras dos bandas

arreglo con el que se se obtuvo la Fig. 3.11 se muestra en la Fig. 3.12

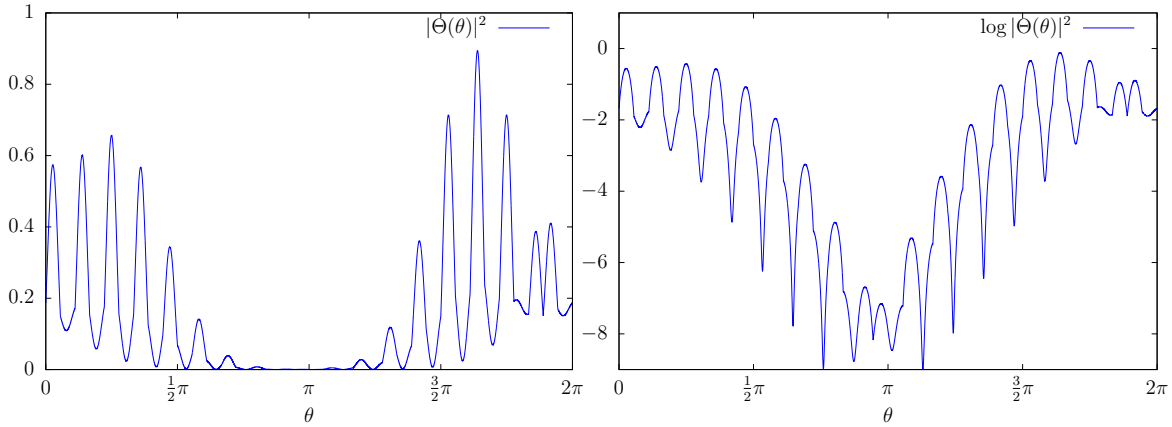


Figura 3.12: Módulo cuadrado de la función de onda Θ y su logaritmo.

CAPÍTULO 3. UN MODELO 2D CON DESORDEN EN LA VARIABLE ANGULAR

Ahora veamos como cambia la razón de participación inversa cuando tenemos distintas configuraciones pero con la misma intensidad del desorden y parámetros U y N . Para ello, consideremos un desorden estructural débil tal que los momentos angulares l no se desplacen más de una centésima de sus valores iniciales del caso imperturbado, si tomamos mil configuraciones y promediamos se obtiene la Fig. 3.13

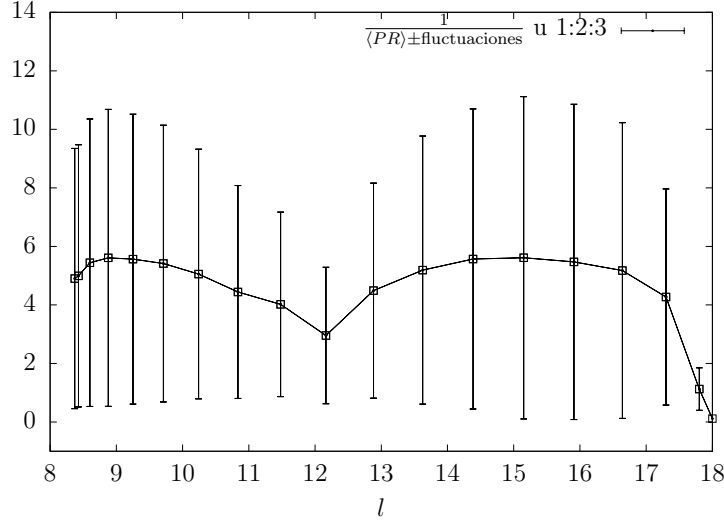


Figura 3.13: Razón de participación inversa promediada para 1000 realizaciones.

La razón de participación inversa cambia drásticamente de una realización a otra, esto implica fluctuaciones muy grandes. Esto se debe a que la razón de participación inversa no se autopromedia como la longitud de localización inversa. El hecho de que las razón aumente o disminuya considerablemente de una a otra realización significa que, a pesar de que el desorden es débil, es posible seleccionar una realización con menor IPR . Conocer dicha realización puede aprovecharse para la construcción de dispositivos que localicen ondas en algún sector angular. Veamos cómo obtener una realización con un IPR favorable. Notemos que a pesar de las fluctuaciones, la menor IPR cae en $l \approx 12.165$. Podemos fijar $l = 12.165$, almacenar el IPR de 1000 configuraciones y seleccionar aquella con el IPR menor; para dicha configuración la función de onda tendrá una intensidad de localización que será mayor. En la Fig. 3.14 se muestra la función de onda correspondiente a la configuración con la menor IPR .

3.3. Parte radial y función global ψ

En la sección anterior se estudió cómo obtener los momentos angulares l permitidos de la Ec. (3.3), esto nos permite establecer la ecuación diferencial de la parte radial (3.4)

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left(q^2 - \frac{l^2}{\rho^2} \right) R = 0,$$

CAPÍTULO 3. UN MODELO 2D CON DESORDEN EN LA VARIABLE ANGULAR

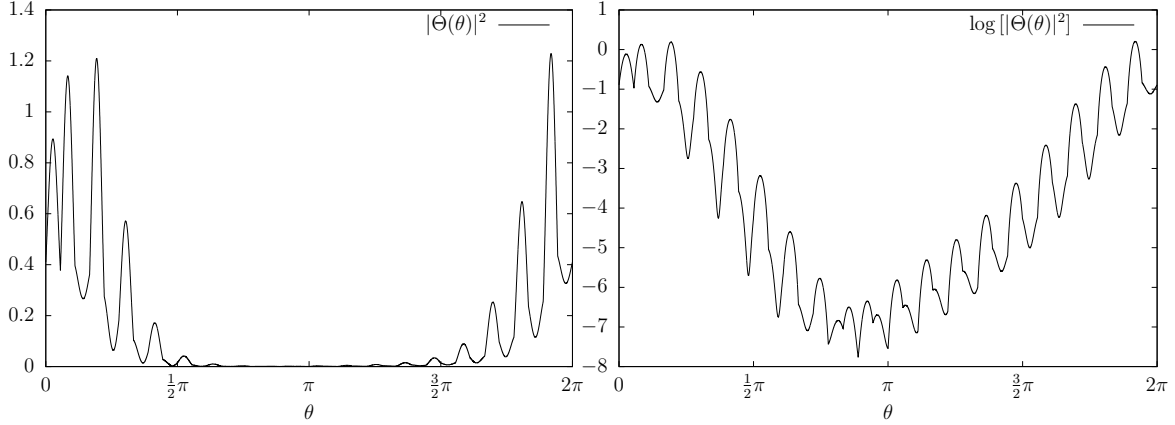


Figura 3.14: Módulo cuadrado de la función de onda cuya realización manifiesta mayor localización de las 1000 configuraciones de la Fig. 3.13.

donde $q = \sqrt{2mE/\hbar^2}$. La Ec. (3.4) tiene como solución general una combinación lineal de funciones de Bessel

$$R(\rho) = A_1 J_l(q\rho) + A_2 Y_l(q\rho). \quad (3.26)$$

De la condición $R(\rho_1) = 0$ vemos que (3.26) adquiere la forma

$$R(\rho) = A_0 \left[Y_l(q\rho_1) J_l(q\rho) - J_l(q\rho_1) Y_l(q\rho) \right] \quad (3.27)$$

donde A_0 puede encontrarse con la condición de normalización

$$\int_{\rho_1}^{\rho_2} |R(\rho)|^2 \rho d\rho = 1.$$

La condición $R(\rho_2) = 0$ nos proporciona una ecuación de dispersión que q debe satisfacer

$$Y_l(q\rho_1) J_l(q\rho_2) - J_l(q\rho_1) Y_l(q\rho_2) = 0. \quad (3.28)$$

En la Fig. 3.15 se muestra una gráfica de la función $f(q) = Y_l(q\rho_1) J_l(q\rho_2) - J_l(q\rho_1) Y_l(q\rho_2)$ para $\rho_1 = 10\text{cm}$ y $\rho_2 = 25\text{cm}$ con $l = 12.165395527806645$.

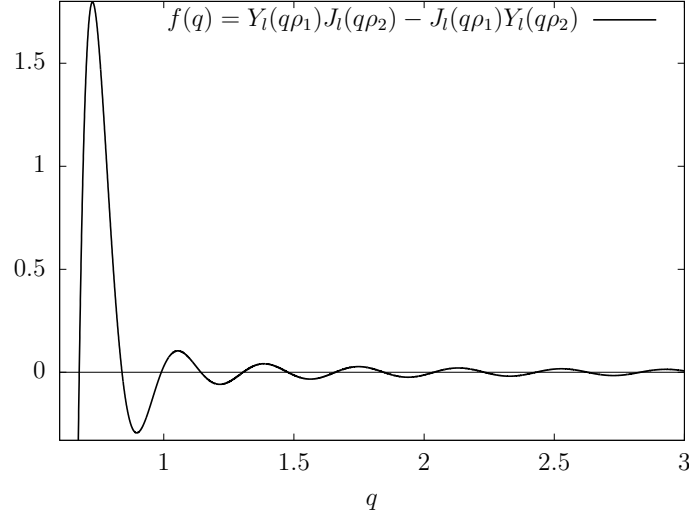


Figura 3.15: Ecuación de dispersión para las energías permitidas del modelo.

De forma análoga a la ecuación de dispersión (3.14), es conveniente ordenar los valores de q que satisfacen (3.28) para cierto valor l de forma creciente y etiquedarlos con el índice $s = 1, 2, 3, \dots$ e índice de banda n : $\{q_{n1}, q_{n2}, q_{n3}, \dots\} = \{q_{ns}\}$. En la Fig. 3.16 se muestran los primeros dos valores permitidos de q cuando l toma valores dentro de la primera y segunda banda, donde l satisface (3.14).

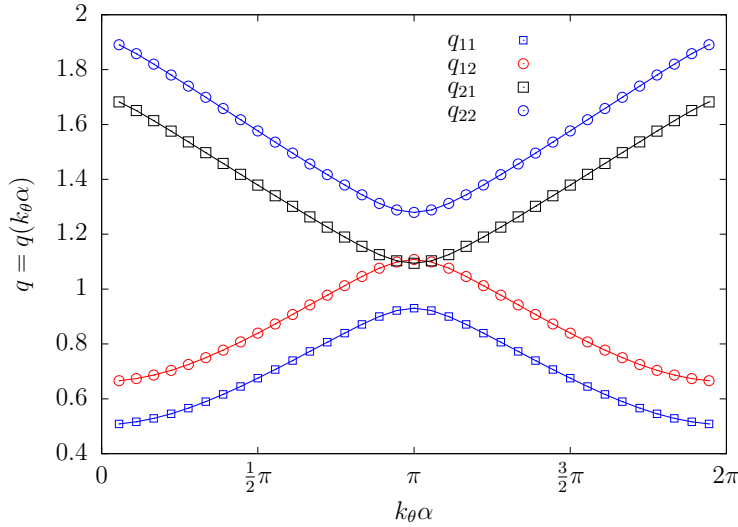


Figura 3.16: Primeros dos valores permitidos de q ($s = 1, 2$) en función de los vectores de onda de Bloch $k_\theta \alpha$ para las primeras dos bandas ($n = 1, 2$).

Así, la solución de la forma (3.27) quedará establecida cuando se especifiquen los números cuánticos n y s . Consideremos el valor $l = 12.165$ ($n = 1$) y los primeros cuatro valores permitidos de q .

CAPÍTULO 3. UN MODELO 2D CON DESORDEN EN LA VARIABLE ANGULAR

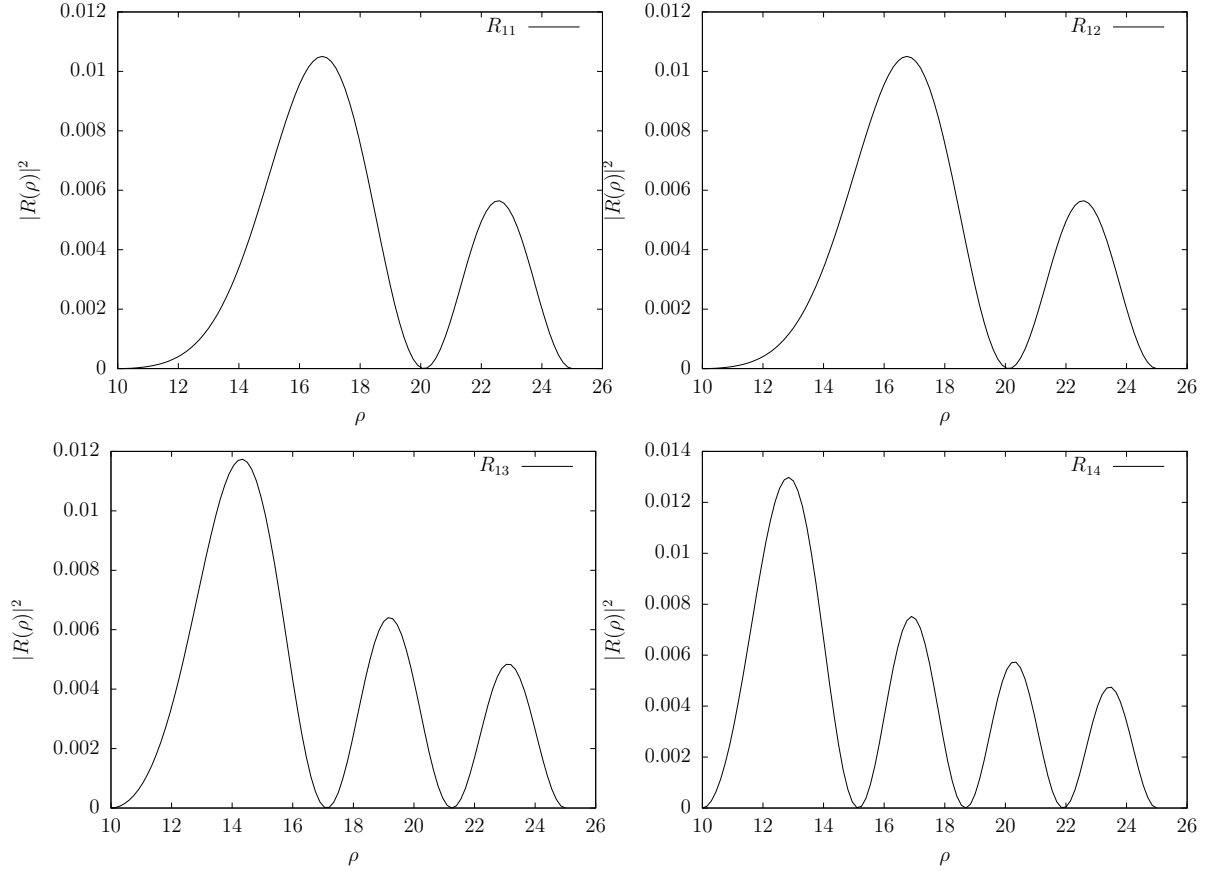


Figura 3.17: Módulo cuadrado de la función de onda R_{ns} para $n = 1$ y $s = 1, 2, 3, 4$.

La función de onda global está dada por $\psi = R(\rho)\Theta(\theta)$: si se especifica la banda n y el momento angular l en (3.3), entonces podemos encontrar los valores de q_s por medio de (3.28). Así, la función se puede representar como

$$\psi_{nls} = R_{ls}(\rho)\Theta^{(l)}(\theta)$$

En la Fig. 3.18 se muestra la función de onda global para $l = 12.165$ y $s = 1, 2, 3$ con desorden correlacionado en la variable angular, podemos ver cómo la función de onda se localiza en un sector angular. Gracias a la equivalencia con la ecuación de Helmholtz, de estos resultados podemos concluir que es posible seleccionar frecuencias específicas para localizar ondas electromagnéticas en sectores angulares.

CAPÍTULO 3. UN MODELO 2D CON DESORDEN EN LA VARIABLE ANGULAR

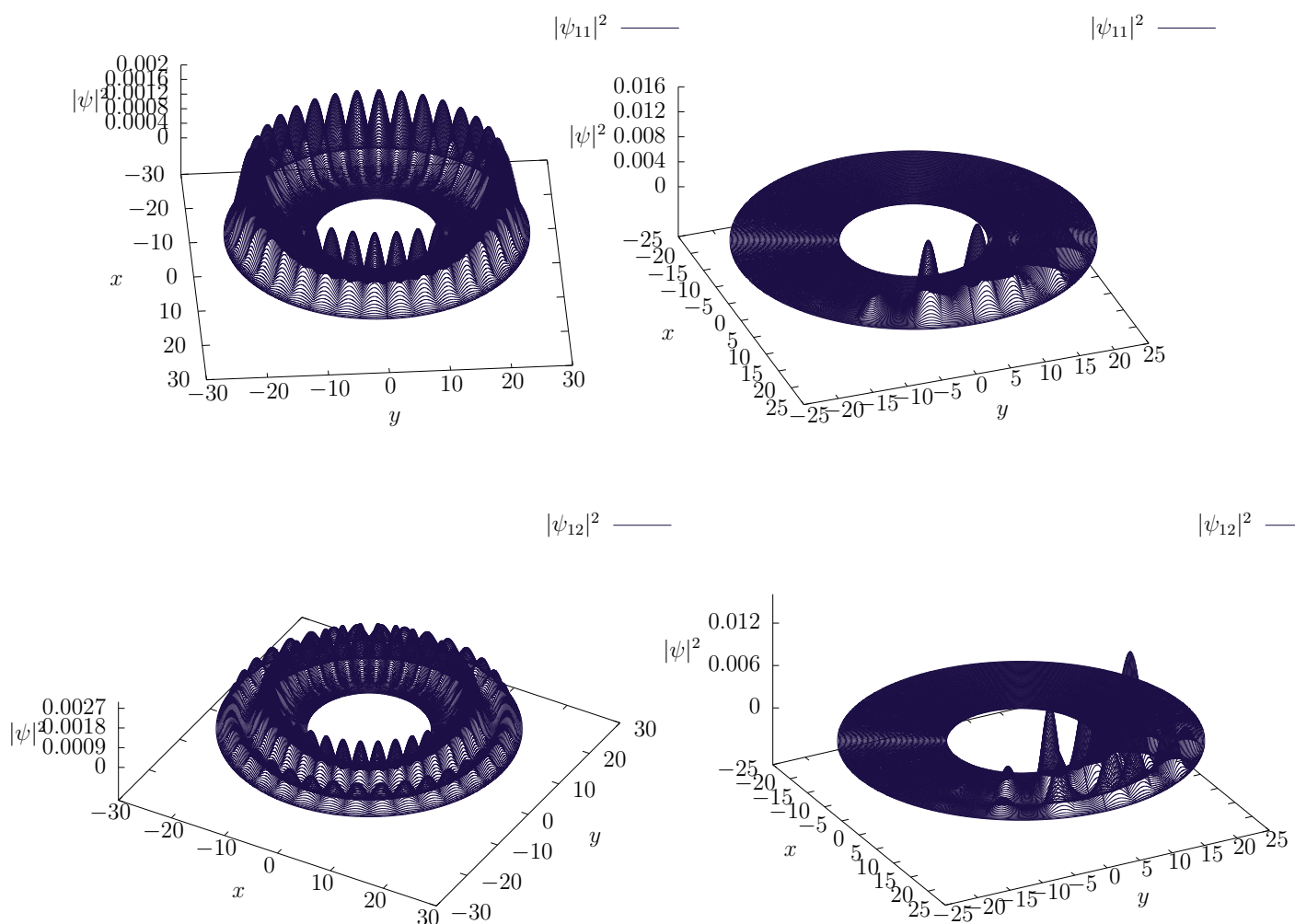


Figura 3.18: Función de onda ψ_{nls} para $s = 1, 2, 3, 4$. Las gráficas de la izquierda corresponden al caso ordenado y las gráficas a la derecha al caso con desorden con correlaciones en donde la parte angular de ψ_{nls} es la misma que en la Fig. 3.14.

CAPÍTULO 3. UN MODELO 2D CON DESORDEN EN LA VARIABLE ANGULAR

Conclusiones

Con el fin de estudiar la localización y transporte en medios bidimensionales, se propusieron dos modelos bidimensionales con potenciales separables en coordenadas polares: uno de ellos con desorden únicamente en la variable radial y el otro con desorden únicamente en la variable angular. El hecho de que estos modelos sean separables en coordenadas polares permite reducir su estudio al análisis de modelos unidimensionales. Para el modelo 2D con desorden en la variable radial su modelo 1D asociado es un modelo de Kronig-Penney 1D finito aperiódico con un potencial centrífugo mientras que para el modelo 2D con desorden en la variable angular su modelo 1D asociado es un modelo de Kronig-Penney 1D aperiódico angular y finito; en el primer caso lo que se localiza es la parte radial de la función de onda cuando se considera al modelo infinito y en el segundo caso lo que se localiza es la parte angular.

Es importante mencionar que en los modelos unidimensionales asociados a los bidimensionales propuestos la finitud cobra mucha importancia. En el caso del modelo con desorden en la variable radial debemos elegir un número de barreras N lo suficientemente grande para que el ruido domine sobre el potencial centrífugo. En el caso del modelo con desorden en la variable angular, no es posible elegir un número de barreras N arbitrariamente grande porque el modelo está definido en un dominio finito (2π); además, el desorden no puede ser muy débil porque existe el riesgo que $l_{\text{Loc}} > 2\pi$ y tampoco fuerte porque éste complicaría el control sobre el desorden (las barreras podrían desplazarse demasiado e intercambiar sus posiciones con el resto).

Uno de los efectos del desorden con correlaciones es la existencia de intervalos de energía en donde se puede fortalecer o debilitar la localización de los estados cuánticos en el modelo de Kronig-Penney 1D aperiódico; este resultado puede aprovecharse para estudiar las propiedades de transmisión y localización para nuestros dos modelos de Kronig-Penney 2D. Otro resultado relevante es que la longitud de localización y transmisión están relacionados por la tendencia $\langle \log T_N \rangle \sim -2N/l_{\text{Loc}}$ para valores muy grandes de N .

CAPÍTULO 4. CONCLUSIONES

Si existen intervalos de energía en donde se fortalece o debilita la localización entonces, gracias a la relación $\langle \log T_N \rangle \sim -2N/l_{\text{Loc}}$ siempre que N tienda a ser muy grande, se puede encontrar teóricamente que existen intervalos de energía para los cuales la transmisión se puede fortalecer o debilitar en el modelo de Kronig-Penney 1D finito (referencia). Basándonos en estos resultados, se estudiaron las propiedades de transmisión para el modelo 2D (finito) con desorden correlacionado en la variable radial, encontrándose que es posible elegir configuraciones específicas en donde el coeficiente de transmisión se debilite o fortalezca. Para el modelo 2D con desorden correlacionado en la variable angular se calcularon los autoestados, en donde se encontró que se puede elegir una configuración en la cual la parte angular de la función de onda se localice en ciertos sectores angulares.

Poder generar bordes de movilidad en estos modelos abre camino al estudio de la transmisión y localización de ondas electromagnéticas. Uno de los siguientes proyectos es la fabricación de dispositivos capaces de localizar microondas en alguna región o dirección, así como la selección de frecuencias para las cuales la transmisión se fortalezca o debilite. Otro proyecto puede ser el estudio de localización y transporte en modelos bidimensionales irreducibles a problemas unidimensionales.

Bibliografía

- [1] Anderson, P. W. (1958). Absence of Diffusion in Certain Random Lattices. *Physical Review*, 109(5), 1492–1505.
- [2] Lagendijk, A., Tiggelen, B. van, & Wiersma, D. S. (2009). Fifty years of Anderson localization. *Physics Today*, 62(8), 24–29.
- [3] Segev, M., Silberberg, Y., & Christodoulides, D. N. (2013). Anderson localization of light. *Nature Photonics*, 7(3), 197–204.
- [4] Abrahams, E., Anderson, P. W., Licciardello, D. C., & Ramakrishnan, T. V. (1979). Scaling Theory of Localization: Absence of Quantum Diffusion in Two Dimensions. *Physical Review Letters*, 42(10), 673–676.
- [5] Lee, P. A., & Fisher, D. S. (1981). Anderson Localization in Two Dimensions. *Physical Review Letters*, 47(12), 882–885.
- [6] Ekuma, C. E., Terletska, H., Meng, Z. Y., Moreno, J., Jarrell, M., Mahmoudian, S., & Dobrosavljević, V. (2014). Effective cluster typical medium theory for the diagonal Anderson disorder model in one- and two-dimensions. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 26(27), 274209.
- [7] Sheng, P., & Zhang, Z.-Q. (1991). Mesoscopic transport properties of 2D disordered metallic films: a proposal for the observation of Anderson localization. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 3(23), 4257–4267.
- [8] Schreiber, M., & Ottomeier, M. (1992). Localization of electronic states in 2D disordered systems. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 4(8), 1959–1971
- [9] Goda, M., Ya. Azbel, M., & Yamada, H. (2001). Non-exponential-localized eigenstates in a 2D-disordered system. *Physica B: Condensed Matter*, 296(1-3), 66–71.
- [10] Moura, F. A. B. F. de, Coutinho-Filho, M. D., Lyra, M. L., & Raposo, E. P. (2004). Delocalization and ballistic dynamics in the two-dimensional Anderson model with long-range correlated disorder. *Europhysics Letters (EPL)*, 66(4), 585–591.

BIBLIOGRAFÍA

- [11] Dos Santos, I. F., de Moura, F. A. B. F., Lyra, M. L., & Coutinho-Filho, M. D. (2007). Critical behavior of the two-dimensional Anderson model with long-range correlated disorder. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 19(47), 476213.
- [12] Riboli, F., Barthelemy, P., Vignolini, S., Intonti, F., De Rossi, A., Combrie, S., & Wiersma, D. S. (2011). Anderson localization of near-visible light in two dimensions. *Optics Letters*, 36(2), 127.
- [13] I. F. Dos Santos, F. A. B. F. de Moura, M. L. Lyra, & Coutinho-Filho, M. D. (2007). Critical behavior of the two-dimensional Anderson model with long-range correlated disorder. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 19(47), 476213.
- [14] Amini, M., Jafari, S. A., & Shahbazi, F. (2009). Anderson transition in disordered graphene. *EPL (Europhysics Letters)*, 87(3), 37002.
- [15] Hernández-Herrejón, J. C., Izrailev, F. M., & Tessieri, L. (2010). Electronic states and transport properties in the Kronig–Penney model with correlated compositional and structural disorder. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 42(9), 2203–2210.
- [16] Tessieri, L., Herrera-González, I. F., & Izrailev, F. M. (2012). Anomalous localisation near the band centre in the 1D Anderson model: Hamiltonian map approach. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 44(7-8), 1260–1266.
- [17] Izrailev, F. M., Ruffo, S., & Tessieri, L. (1998). Classical representation of the one-dimensional Anderson model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 31(23), 5263–5270.
- [18] Jović, D., & Denz, C. (2012). Disorder-induced localization of light in one- and two-dimensional photonic lattices. *Physica Scripta*, T149, 014042.
- [19] Riboli, F., Barthelemy, P., Vignolini, S., Intonti, F., De Rossi, A., Combrie, S., & Wiersma, D. S. (2011). Anderson localization of near-visible light in two dimensions. *Optics Letters*, 36(2), 127.
- [20] Ishii, K., Localization of eigenstates and transport phenomena in one-dimensional disordered systems. *Prog. Theor. Phys. Suppl.* 53, 77 (1973).
- [21] Anderson, P. W., D. J. Thouless, E. Abrahams, and S. D. Fisher, New method for a scaling theory of localization. *Phys. Rev. B* 22, 3519 (1980).
- [22] Marsiglio, F. (2009). The harmonic oscillator in quantum mechanics: A third way. *American Journal of Physics*, 77(3), 253–258.
- [23] Pavelich, R. L., & Marsiglio, F. (2015). The Kronig-Penney model extended to arbitrary potentials via numerical matrix mechanics. *American Journal of Physics*, 83(9), 773–781.

- [24] Pavelich, R. L., & Marsiglio, F. (2016). Calculation of 2D electronic band structure using matrix mechanics. *American Journal of Physics*, 84(12), 924–935.
- [25] Ishii, K. (1973). Localization of Eigenstates and Transport Phenomena in the One-Dimensional Disordered System. *Progress of Theoretical Physics Supplement*, 53, 77–138.
- [26] Amini, M., Jafari, S. A., & Shahbazi, F. (2009). Anderson transition in disordered graphene. *EPL (Europhysics Letters)*, 87(3), 37002.
- [27] De L. Kronig, R., & Penney, W. G. (1931). Quantum Mechanics of Electrons in Crystal Lattices. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 130(814), 499–513.
- [28] Izrailev, F. M., & Krokhin, A. A. (1999). Localization and the Mobility Edge in One-Dimensional Potentials with Correlated Disorder. *Physical Review Letters*, 82(20), 4062–4065.
- [29] Kuhl, U., Izrailev, F. M., Krokhin, A. A., & Stöckmann, H.-J. (2000). Experimental observation of the mobility edge in a waveguide with correlated disorder. *Applied Physics Letters*, 77(5), 633–635.
- [30] Hernández Herrejón, J. C., Izrailev, F. M., & Tessieri, L. (2008). Anomalous properties of the Kronig–Penney model with compositional and structural disorder. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 40(10), 3137–3140.
- [31] Izrailev, F. M., Krokhin, A. A., & Ulloa, S. E. (2001). Mobility edge in aperiodic Kronig–Penney potentials with correlated disorder: Perturbative approach. *Physical Review B*, 63(4).
- [32] Borland, R. E. (1963). The Nature of the Electronic States in Disordered One-Dimensional Systems. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 274(1359), 529–545.
- [33] Abrahams, E., Anderson, P. W., Licciardello, D. C., & Ramakrishnan, T. V. (1979). Scaling Theory of Localization: Absence of Quantum Diffusion in Two Dimensions. *Physical Review Letters*, 42(10), 673–676.
- [34] Anderson, P. W., Thouless, D. J., Abrahams, E., & Fisher, D. S. (1980). New method for a scaling theory of localization. *Physical Review B*, 22(8), 3519–3526.
- [35] Izrailev, F. M., & Krokhin, A. A. (1999). Localization and the Mobility Edge in One-Dimensional Potentials with Correlated Disorder. *Physical Review Letters*, 82(20), 4062–4065.
- [36] Tessieri, L., Herrera-González, I. F., & Izrailev, F. M. (2012). Anomalous localisation near the band centre in the 1D Anderson model: Hamiltonian map approach. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 44(7-8), 1260–1266.

BIBLIOGRAFÍA

- [37] Izrailev, F. M., Ruffo, S., & Tessieri, L. (1998). Classical representation of the one-dimensional Anderson model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 31(23), 5263–5270.
- [38] F. M. Izrailev, A. A. Krokhin, N. M. Makarov, Anomalous Localization in Low-Dimensional Systems with Correlated Disorder. *Physics Reports* 512 (2012) 125–254
- [39] Kuhl, U., Izrailev, F. M., & Krokhin, A. A. (2008). Enhancement of Localization in One-Dimensional Random Potentials with Long-Range Correlations. *Physical Review Letters*, 100(12).
- [40] Höf, D., & Wegner, F. (1986). Calculation of anomalous dimensions for the non-linear sigma model. *Nuclear Physics B*, 275(4), 561–579.
- [41] Bell, R. J., & Dean, P. (1970). Atomic vibrations in vitreous silica. *Discussions of the Faraday Society*, 50, 55.
- [42] William H. Press, Saul a. Teukolsky, William T. Vetterling, Brian P. Flannery (1996). "Numerical Recipes in Fortran 77: the Art of Scientific Computing. Second Edition", vol. 1.
- [43] Izrailev, F. M., & Krokhin, A. A. (1999). Localization and the Mobility Edge in One-Dimensional Potentials with Correlated Disorder. *Physical Review Letters*, 82(20), 4062–4065.