

# UNIVERSIDAD AUTONOMA DE BAJA CALIFORNIA

## ESCUELA SUPERIOR DE CIENCIAS BIOLOGICAS

CARRERA DE FISICO



LOCALIZACION EN SISTEMAS DESORDENADOS EN UNA  
DIMENSION EN PRESENCIA DE CAMPO ELECTRICO.

TESIS PROFESIONAL

QUE COMO REQUISITO PARCIAL PARA OBTENER EL TITULO DE:

FISICO

PRESENTA:

Jorge Federico Reyes Spíndola Ramírez Paulín

UNIVERSIDAD AUTONOMA DE BAJA CALIFORNIA

ESCUELA SUPERIOR DE CIENCIAS BIOLOGICAS

LOCALIZACION DE SISTEMAS DESORDENADOS EN UNA  
DIMENSION EN PRESENCIA DE CAMPO ELECTRICO.

TESIS PROFESIONAL QUE COMO REQUISITO PARCIAL  
PARA OBTENER EL TITULO DE :

F I S I C O

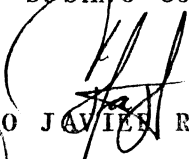
PRESENTA: JORGE FEDERICO REYES SPINDOLA RAMIREZ PAULIN

S I N O D A L E S

PRESIDENTE:

  
DR. LEONEL SUSANO COTA ARAIZA

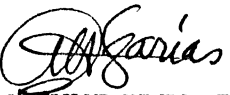
SECRETARIO:

  
DR. CECILIO JAVIER REBOLLAR BUSTAMANTE

SINODAL:

  
DR. JOSE ALBERTO RUBIO MENDEZ

SINODAL:

  
DR. MARIO HUMBERTO FARIAS SANCHEZ

SINODAL:

  
DR. RAMIRO PEREZ CAMPOS

ENSENADA, B. C.

MAYO, 1985.

LOCALIZACION EN SISTEMAS DESORDENADOS EN UNA DIMENSION EN

PRESENCIA DE CAMPO ELECTRICO

## INDICE

|                   |    |
|-------------------|----|
| CAPITULO I.....   | 1  |
| CAPITULO II.....  | 25 |
| CAPITULO III..... | 30 |
| CAPITULO IV.....  | 43 |
| CONCLUSIONES..... | 50 |
| BIBLIOGRAFIA..... | 52 |
| APENDICE I.....   | 54 |
| APENDICE II.....  | 55 |
| APENDICE III..... | 57 |
| APENDICE IV.....  | 59 |
| APENDICE V.....   | 62 |

## RESUMEN INTRODUCTORIO

Se presenta en esta tesis una introducción al estudio de los sólidos desordenados; específicamente, al estudio de los estados localizados en estos sólidos. Se describe y se discute el problema y su interés para el caso de una, dos y tres dimensiones. En particular, aquí se estudiará el problema de la naturaleza y comportamiento de los estados localizados en una dimensión dentro y fuera de un campo eléctrico. Se presta atención especial al comportamiento del parámetro conocido como "longitud inversa de localización" y su relación con la resistencia eléctrica del sistema bajo estudio.

Para el estudio de la longitud inversa de localización, se calcularon coeficientes de transmisión para varios sistemas unidimensionales de longitud variable por medio del método de la matriz de transferencia y se analizaron los resultados.

Estos se comparan con los obtenidos por otros autores, los cuales usaron el método de mapeo de Poincaré. Se demuestra que se pueden obtener los mismos resultados con ambos métodos.

Al final, se presentan los resultados experimentales obtenidos por varios autores al trabajar en sistemas cuasi-unidimensionales. Esto se hace a fin de mostrar que los estados localizados y su relación con las propiedades de transporte son efectivamente observables y no sólo entes matemáticos.

El trabajo se desarrolla como sigue: en el capítulo I se presenta una discusión de los antecedentes del problema. En el

capítulo II se presenta, se explica y se discute el método de la matriz de transferencia. Asimismo, se desarrollan las ecuaciones pertinentes a los casos de  $F=0$  y  $F \neq 0$ .

En el capítulo III se proporciona una explicación de los cálculos realizados, los algoritmos computacionales utilizados, se presentan los resultados obtenidos, y se comparan con los de Sokoulis, et. al. (1983). Finalmente, en el capítulo IV, se hace una breve revisión de los resultados experimentales más relevantes.

## CAPITULO I

### Introducción

Los modelos en la física del estado sólido se basan, por lo general en cristales ideales e infinitos. Estos se caracterizan por un arreglo regular y periódico de los átomos en la red. Son importantes dos aspectos de este ordenamiento.

- 1) Orden de corto alcance. Esto significa el arreglo regular de los átomos en la red en la vecindad inmediata del átomo particular que se esté considerando. Así, Determina el campo cristalino en el cual se encuentra sumergido el átomo.
- 2) Orden de largo alcance. Esto significa la periodicidad estricta y por lo tanto la invariancia traslacional de la red cristalina. El orden de largo alcance conecta las regiones de corto alcance de tal forma que los átomos en sitios equivalentes de la red tienen los mismos alrededores con la misma orientación.

El orden de largo alcance es muy importante para la teoría de bandas de los estados electrónicos del sólido. La invariancia traslacional de la red permite definir estados deslocalizados con un vector de onda dado  $\vec{k}$  y representar a estos estados en una zona de Brillouin en el espacio  $k$ . El orden de largo alcance es también vital para la definición de las excitaciones elementales (fonones, plasmones, etc.) y por lo tanto para la formulación de las interacciones en los sólidos.

Sin embargo, debe de hacerse notar que el orden estricto de largo alcance influye muy poco en las propiedades físicas de un

sólido. La red infinita sin perturbaciones es una idealización que es muy importante cuando se usa como la aproximación cero en el cálculo de las propiedades del estado sólido. En realidad, un cristal siempre se encuentra perturbado, ya sea por la extensión finita del cristal, o por las excitaciones elementales (perturbaciones dinámicas) o por las imperfecciones puntuales (perturbaciones estáticas). Estas perturbaciones se consideran pequeñas en primera aproximación, y luego se analizan sus efectos en las soluciones de la aproximación cero por medio de teoría de perturbaciones. Estas soluciones conducen a la evaluación de los tiempos de vida de las excitaciones elementales en los estados estacionarios de la aproximación cero, y por lo tanto a longitudes características, como por ejemplo, el camino libre medio de un electrón de Bloch entre dos interacciones con el sistema de fonones. Tales longitudes establecen la norma sobre la cual se puede definir el orden de largo alcance.

Recientemente, se ha despertado un marcado interés por el estudio de los sólidos no ordenados [Mott & Twose, (1961); Mott, (1967); Mott & Davis, (1979); Erdos & Herndon, (1982) entre otros] Su importancia radica en el hecho de que muchos de los materiales con los que se trabaja actualmente no se pueden tratar con la teoría convencional de los sólidos ordenados. Estos materiales son por lo regular de importancia tecnológica. Así, hasta la fecha (1985) se ha trabajado en la parte experimental sobre los siguientes aspectos : el comportamiento eléctrico y óptico de los semiconductores líquidos y amorfos;

los metales líquidos; y los semiconductores altamente impurificados (dopados).

-Tipos distintos de desorden.

Se le llamará ordenada a una red si es posible explicar sus características por medio de una red infinita con orden ideal de largo alcance en la aproximación cero, incluyendo además las perturbaciones estáticas y dinámicas por medio de teoría de perturbaciones. Se le llamará desordenado a un arreglo de átomos cuando ésta aproximación no tenga sentido, aún cuando el arreglo desordenado de átomos posee características que son típicas de las redes ordenadas. Una red completamente desordenada, como las que se usan en los modelos de teoría de fluídos, no resulta totalmente adecuada a una descripción de los sólidos desordenados. Para entender lo anterior, considérese la figura #1.

La red cúbica bidimensional de la figura 1.a tiene tres características importantes de orden. Todos los átomos de la red son iguales, los vecinos de un átomo en particular se encuentran arreglados en un orden de corto alcance geométricamente fijo, y el número de coordinación, esto es, el número de vecinos más cercanos, es el mismo para todos los átomos.

La primera señal de orden se encuentra ausente de la figura 1b. Aquí se encuentran estadísticamente distribuidos dos tipos distintos de átomos sobre los sitios disponibles en la red. Este tipo de desorden es conocido como desorden composicional y ocurre en las aleaciones. Se puede imaginar la transición de (1a) a (1b) como la sustitución al azar de unos

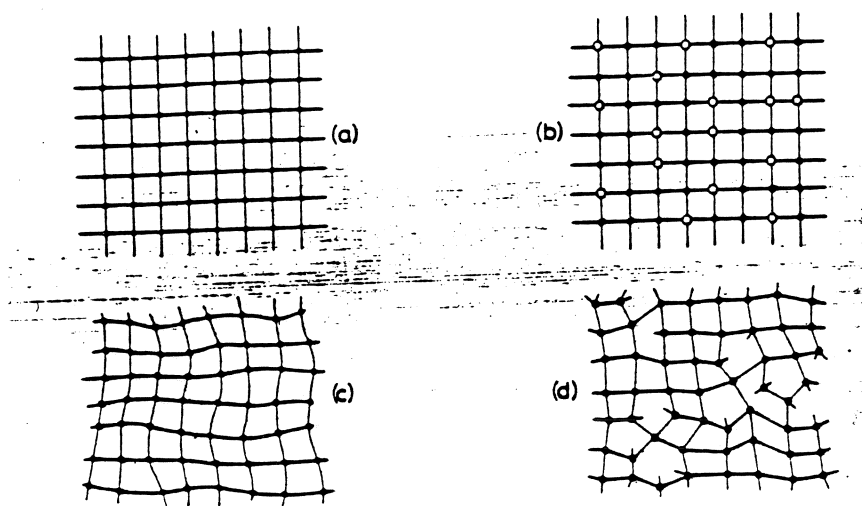


Figura 1.- Tipos posibles de desorden de la red: -  
 (a) red ordenada, (b) formación de cristal mixto  
 por distribución estadística de dos tipos de átomos  
 sobre los sitios de la red: desorden composicional,  
 (c) desorden posicional por distorsión de la red,  
 (d) desorden topológico con formación simultánea de  
 ligaduras colgantes.

átomos por otros en la red ordenada. Para concentraciones bajas de defectos, la red de la figura 1b es una buena aproximación de orden cero. A medida que se van insertando más átomos del otro tipo, la aproximación se vuelve cada vez más mala.

La figura 1c ilustra otro tipo de desorden: desorden posicional. Aquí, todos los átomos de la red son los mismos que en la red ordenada; sin embargo, el arreglo geométrico de los vecinos más cercanos se encuentra estadísticamente perturbado. Un grado de desorden posicional que puede ser tratado por teoría de perturbaciones es el desplazamiento estadístico de cada átomo de la red por su vibración térmica. El desorden posicional es característico de las fases amorfas de un sólido.

Se puede agregar otro tipo de desorden al desorden posicional: el desorden topológico (Fig. 1d). Aquí se encuentra perturbada la topología de la red. Además de los anillos de cuatro átomos que son característicos de la red cúbica, la figura 1d muestra la aparición de anillos con cinco y seis átomos. Si el número de coordinación se mantiene constante a pesar del desorden topológico, las ligaduras entre los vecinos más cercanos permanecen intactas. Si no se mantienen constantes, las valencias individuales quedarán sin saturarse (ligaduras colgantes). Estas forman defectos localizados adicionales, similares a las vacancias en una red ordenada. Las ligaduras colgantes son muy frecuentes en semiconductores amorfos, pero no se asocian necesariamente al desorden topológico.

Se encuentran definidos en la literatura otros tipos de desorden, como el desorden magnético, el cual involucra el

sistema de espines en un cristal que de otro modo estaría ordenado. Se puede definir también como otro tipo de desorden, la inserción aleatoria de impurezas en un semiconductor de por sí muy impurificado. Lo que sucede entonces es que a una red cristalina ordenada se le sobrepone una red desordenada con una constante de red más grande. Las dos subredes contribuyen de maneras distintas a las propiedades físicas del semiconductor.

Se puede entonces inferir que tantos tipos distintos de desorden hacen imposible tener una sola teoría general para los sólidos desordenados, a diferencia de la teoría de sólidos cristalinos. Esto se debe a que los conceptos que se manejan habitualmente en la teoría de los sólidos cristalinos como las zonas de Brillouin, las funciones de Bloch, la invariancia traslacional de la red, etc., pierden toda validez en los sólidos desordenados.

Por lo tanto, para tratar a los sólidos desordenados, se deben plantear algunas preguntas importantes: entre otras, ¿qué propiedades generales son comunes a todos los sólidos desordenados? Dicho de otra forma, de qué manera difieren los sólidos desordenados de los cristalinos?

Se ha visto que junto con los estados deslocalizados o extendidos -como los que se encuentran en el modelo de bandas- existen también los estados localizados, los cuales desempeñan un papel importante, y hasta decisivo.

-Estados localizados.

En los materiales cristalinos la función de onda de cada

electrón es de la forma de Bloch. En los materiales no cristalinos las funciones de onda  $\psi(x,y,z)$  no necesariamente tienen esta forma. De cualquier modo, las soluciones a la ecuación de Schrödinger deben de existir, y por lo tanto es primer concepto que se traslada de la teoría de los cristales a la teoría de los materiales no cristalinos es el de la densidad de estados  $N(E)$ , definida de tal manera que  $N(E)dE$  es el número de eigenestados por unidad de volumen para un electrón en el sistema con una dirección de espín dada y una energía entre  $E$  y  $E+dE$ . Entonces a una temperatura  $T$  el número de electrones en el intervalo de energía  $dE$  es, para cada dirección del espín

$$N(E)f(E)dE$$

donde  $f(E)$  es la función de distribución de Fermi-Dirac

$$f(E) = \frac{1}{\exp((E-E_F)/kT) + 1}$$

La energía de Fermi  $E_F$  es una función de  $T$  y tiende a un valor límite a medida que  $T \rightarrow 0$ ,  $E_F$  separa entonces los estados ocupados de los no ocupados.

Para el cálculo de  $N(E)$  y las funciones de onda correspondientes, se utiliza la aproximación del gas de electrones libres y se supone que los electrones no se dispersan fuertemente. Es bien conocido que en este caso, la energía está dada por:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

donde  $k$  es el vector de onda y  $m$  la masa efectiva. En este caso

la superficie de Fermi es esférica, y la densidad de estados para los electrones está dada para cada dirección del espín por

$$N(E) = \frac{4\pi k^2 / dE}{8\pi^3 / dk} = \frac{km}{2\pi^2 \hbar^2} = \frac{(Em^3/2)^{1/2}}{\pi^2 \hbar^3}$$

En los materiales cristalinos la interacción con los átomos de la red puede llevar a desviaciones grandes de la expresión para  $E$ , debido a que la energía depende de la dirección de  $k$  y debido a la aparición de bandas prohibidas.

Las pequeñas desviaciones a una red perfecta, tales como las ocasionadas por fonones, impurezas o dislocaciones, llevan a un camino libre medio finito  $L$ , pero a menos que  $L$  sea pequeño ( $kL \ll 1$ ) los cambios en la densidad de estados no son grandes. Sin embargo en los materiales no cristalinos el desorden es el responsable de un camino libre medio finito y de las desviaciones de la expresión para  $N(E)$ , la densidad de estados; si la dispersión es fuerte, ocurrirán desviaciones muy grandes. Pueden darse entonces las siguientes situaciones:

1) Que la dispersión por cada átomo sea débil. El vector de onda  $\vec{k}$  es entonces un buen número cuántico, la incertidumbre  $\Delta k$  en  $k$  es tal que  $\Delta k/k \ll 1$ , las superficies de energía constante son esféricas y las expresiones anteriores resultan válidas para la energía y la densidad de estados. Esta es la situación prevaleciente en muchos metales líquidos con valores de  $E$  cercanos a la energía de Fermi.

2) La dispersión por cada átomo es fuerte, de tal manera que  $\Delta k/k \sim 1$ . En este caso  $\vec{k}$  no es un buen número cuántico para describir los eigenestados, y no es válido el concepto de la

superficie de Fermi (para los metales). Ioffe y Regel (1960) han señalado que, bajo estas condiciones, el camino libre medio es del orden de  $1/k$ , y que no puede ser más corto. Cuando  $\Delta k/k \sim 1$ , puede ocurrir una desviación considerable de la expresión para la densidad de estados  $N(E)$ .

3) Si la interacción se vuelve más fuerte, ocurre un nuevo fenómeno que no se encuentra en los materiales cristalinos, a saber, que para una energía  $E$  todas las funciones de onda se encuentran localizadas. Esto quiere decir que cada función de onda se encuentra confinada a una pequeña región del espacio, decayendo exponencialmente con la distancia como  $\exp(-\alpha R)$  y con un valor cuantizado de la energía. Esto fue reconocido por primera vez por P.W.Anderson (1958) en su artículo "The absence of diffusion on certain random lattices" y ésta forma de localización se conoce como localización de Anderson. Por supuesto, no hay nada nuevo en el concepto de una función de onda localizada por debajo de la banda de conducción. Lo que es nuevo es el concepto de que se puede tener una densidad de estados  $N(E)$  finita y continua en la cual todos los estados se encuentran localizados, aunque puede haber un traslape fuerte entre las funciones de onda de estados vecinos. Aun más, si los estados se encuentran llenos hasta una energía de Fermi límite  $E_F$  en el intervalo donde los estados están localizados, la conductividad, que se denota por  $\sigma$ , desaparece a medida que la temperatura tiende a cero. En los cristales, la condición para que ocurra el comportamiento aislante es la desaparición de  $N(E)$  a la energía de Fermi; en los materiales no cristalinos el

comportamiento aislante es compatible con un valor finito de  $N(E)$ . Los materiales donde esto ocurre, donde los estados se encuentran localizados a la energía de Fermi, se les llama "vidrios de Fermi" (Anderson, 1970).

El grado y la extensión de la localización depende de la "cantidad" de desorden del sólido. Parecería que también depende de la dimensionalidad del sistema ya que, para el caso de 1 dimensión, se ha demostrado que todos los eigenestados se encuentran localizados hasta para el más mínimo desorden mientras que en dos y tres dimensiones, los eigenestados están localizados cuando el desorden es suficientemente grande. Además de esta diferencia física, existen varias diferencias prácticas entre la localización en una dimensión y la localización en dos o más dimensiones. En años recientes, se ha estudiado exhaustivamente, por métodos numéricos y analíticos el problema de la localización en una dimensión (Ishii, 1973; Czycholl & Kramer, 1980).

Surge también la pregunta de cómo difiere el transporte por medio de los estados localizados del transporte por medio de los estados deslocalizados o extendidos.

Debido a que las propiedades de transporte, tales como la conductividad eléctrica, dependen fuertemente de la naturaleza de los estados electrónicos, el concepto de localización desempeña un papel clave en las teorías modernas de transporte en sistemas desordenados. En particular, en un sistema donde todos los estados se encuentran localizados, la conducción eléctrica a bajas temperaturas se da por medio de saltos

estado localizado a otro. Debido a que éstos saltos son un proceso térmicamente activado, la probabilidad de salto y por lo tanto la conductividad eléctrica disminuirá, como se mencionó antes, a medida que baja la temperatura y ambas tenderán a cero cuando  $T$  tienda a cero.

Esto contrasta con el comportamiento de un sistema con estados extendidos; en este caso la conductividad a bajas temperaturas es independiente de  $T$  y tiene un valor diferente de cero a medida que  $T$  tiende a cero.

-Localización en dos y tres dimensiones.

P.W.Anderson propuso, en 1958, que, bajo ciertas circunstancias, los eigenestados exactos en una red al azar se pueden encontrar localizados en lugar de estar extendidos a través de la red y presentó una estimación matemática de la condición para la localización de acuerdo a una definición específica de ésta. El estudió la difusión de un electrón a través de la red al azar cuya dinámica se describe por un Hamiltoniano de una banda y amarre fuerte en una representación de estados base completamente localizados en cada punto de la red. En esta representación, las energías  $\epsilon_i$  se asignan a cada punto  $i$  de la red, y el tunelamiento entre los sitios  $i$  y  $j$  es gobernado por una integral de traslape  $V$ . Anderson simuló el desorden en el potencial electrónico asignando a cada  $\epsilon_i$  una distribución de probabilidad. La distribución que se escogió fue una distribución rectangular de anchura  $W$  centrada en cero. Anderson simplificó aún más el problema restringiendo  $V$  a los

vecinos más cercanos e ignorando sus variaciones al azar, tomando  $V$  como una constante. Este modelo particular de una red desordenada es conocido como el modelo de Anderson.

Anderson tomó  $W/V$  como una medida del desorden en la red y propuso que para una estructura dada existe un valor crítico de  $W/V$  llamado  $(W/V)_c$  tal que para todo valor de  $W/V \geq (W/V)_c$  todos los eigenestados se encuentran localizados.

En particular, Mott (1967) puso énfasis en la relevancia de la obra de Anderson en relación con la teoría del transporte de electrones en una variedad de sistemas no cristalinos. Desde los trabajos de Mott, las preguntas clave en la teoría del transporte de electrones en sistemas no cristalinos han sido cuándo y en qué cantidad ocurre la localización.

Numerosas investigaciones de tipo analítico y numérico han examinado el modelo de Anderson y modelos relacionados. De estas investigaciones ha emergido una idea clara de la localización con varias características comúnmente aceptadas. Para  $W/V < (W/V)_c$  el espectro de energías se encuentra separado en ciertos valores críticos de la energía  $E$  llamados bordes de movilidad, en regiones distintas que contienen estados extendidos o localizados. A medida que  $W/V$  se aproxima a  $(W/V)_c$  los bordes de movilidad se juntan, y desaparecen las regiones de estados extendidos. A esta transición se le conoce como transición de Anderson. Se puede ver en la fig. 2 un esquema de una banda electrónica típica en una red desordenada. La banda tiene colas que se pueden encimar o no con las bandas adyacentes. Los estados en las colas de la banda se encuentran localizados pero

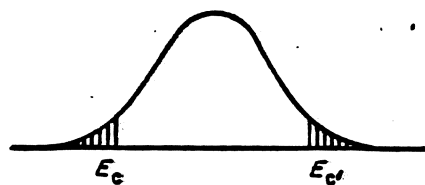


Figura 2.- Banda electrónica de un material amorfo.  
Los estados localizados se encuentran **sombreados**.

aquéllos en el centro están extendidos y en estos estados el electrón puede moverse en la forma habitual.

#### -Localización en una dimensión.

En 1961, Mott y Twose investigaron la naturaleza de las funciones de onda de los electrones en una red desordenada en una dimensión y propusieron que todos los eigenestados se encuentran localizados sin importar el grado o tipo de desorden. La localización, en este caso, se entiende como un decaimiento exponencial de la función de onda fuera de un cierto punto de la red. Mott y Twose demostraron su proposición para un modelo en particular (una cadena desordenada tipo Kronig-Penney). Borland (1961, 1963) y Borland y Bird (1964) elaboraron este argumento de modo más riguroso.

Sin embargo, todavía se carece de una demostración matemáticamente exacta de esto para tipos arbitrarios de desorden (Ishii, 1973), aunque ya existen un cierto número de intentos para lograrlo (Molchanov, 1978; Kunz, 1979). De cualquier modo, hay pocas dudas sobre la validez de las afirmaciones de Mott y Twose y parece que el problema de la localización se encuentra resuelto para sistemas desordenados en una dimensión.

#### -El coeficiente de transmisión y su relación con la localización.

Uno de los parámetros importantes que se han usado extensamente en el estudio del problema de la localización en

sistemas desordenados es el coeficiente de transmisión. Entre las razones más importantes para su estudio está el hecho de que se encuentra directamente relacionado con la conductividad y por ende con la localización de los estados.

Como es que el conocimiento de la transmitividad de un haz monoenergético de electrones permite sacar conclusiones con respecto a la conductividad? Ésta se encuentra definida con respecto a dos depósitos de electrones que se encuentran en los extremos de la cadena de átomos. Estos depósitos se encuentran llenos de electrones hasta el nivel de Fermi, los cuales, bajo la influencia de una pequeña diferencia de potencial descrita por el desplazamiento relativo de estos niveles de Fermi, dan lugar a un flujo de corriente a través de la cadena.

La resistencia a este flujo de corriente es directamente proporcional a la razón entre los coeficientes de reflexión y transmisión de la cadena. Así, conociendo la relación entre reflexión y transmisión para los electrones que posean la energía de Fermi, queda determinada completamente la resistividad del sistema. La relación entre la resistencia y la razón reflexión/transmisión fue determinada por Landauer (1970) y mas recientemente por Anderson, Thouless, et.al. (1980), éstos últimos utilizando teorías de escalamiento.

En particular, Landauer trató el problema de la resistencia en una red uni-dimensional, espacialmente desordenada de  $N$  dispersores idénticos. Supuso que los electrones se encontraban como un gas de Fermi (gas de electrones libres); de esa manera sólo se consideran necesarios para la conducción aquéllos

electrones que se encuentran cerca del nivel de Fermi. Asimismo, desarrolló una expresión para la resistencia que es proporcional a  $\rho_n/\tau_n$  donde  $\rho_n$  y  $\tau_n$  son los módulos cuadrados de las amplitudes complejas de los coeficientes de reflexión y transmisión respectivamente. Luego calculó un promedio para arreglos sobre esta cantidad  $\langle \rho_n/\tau_n \rangle$  promediando  $\rho_n/\tau_n$  y  $1/\tau_n$  sobre la distancia entre el n-ésimo dispersor y los (n-1) dispersores precedentes. Obtuvo así, dos relaciones de recurrencia acopladas que al resolverlas dan

$$\langle S_n \rangle = \langle \rho_n / \tau_n \rangle = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} [(1+|r|^2)/|t|^2]^n$$

donde  $t$  y  $r$  son las amplitudes de transmisión y reflexión para un solo dispersor. El promedio se realiza sobre la distancia entre dos dispersores sucesivos que se supone que es una variable aleatoria con una distribución uniforme sobre un intervalo cuya longitud es un múltiplo estricto de la longitud de onda de deBroglie del electrón.

Se cree que el crecimiento exponencial de la resistencia con la longitud del sistema se encuentra relacionada con el decaimiento exponencial de las funciones de onda (Mott & Twose, 1961) discutidos en conexión con los estados localizados.

Hay que tener en mente que no existe conexión alguna matemáticamente formulada, entre la localización de las funciones de onda y el comportamiento del coeficiente de transmisión. El puente entre estos dos problemas es la resistencia o conductividad del sistema ya que ésta se encuentra dada por los

saltos de los electrones entre los estados localizados y al mismo tiempo, la conductividad se encuentra relacionada con el coeficiente de transmisión por los argumentos de Landauer (1970).

El cálculo del coeficiente de transmisión implica determinar que tanto se transmite o se refleja un haz de electrones al hacerlo pasar a través de una cadena de átomos. Constituye, pues, un problema de dispersión donde se admiten todas las soluciones de la ecuación de Schrödinger pues el haz incidente es en sí solución al entrar en la cadena; mientras que en la localización se considera un problema de condiciones a la frontera, donde se supone que la función de onda desaparece en las fronteras.

Abrahams y Stephen en 1980 investigaron la fluctuación de la resistencia con la longitud en un conductor desordenado unidimensional. Los autores afirman haber calculado exactamente los momentos de orden bajo  $m$   $\langle S_N^m \rangle$  de la resistencia. Sin embargo, Erdős y Herndon (1982) rechazan esta afirmación declarando que es fácil ver que los resultados para  $\langle S_N \rangle$  y  $\langle S_N^2 \rangle$  no son exactos ya que los primeros señalan que son independientes del signo promedio de los potenciales mientras que los segundos demuestran que para un arreglo de potenciales tipo delta al azar,  $\langle S_N \rangle$  si depende del signo promedio de los potenciales, esto es, si son "valles" o "montañas". La pérdida completa de estructura de bandas en sus resultados se debe a la suposición (de Abrahams y Stephen) de que las fases de la función de onda entre dos potenciales, al promediarse, se anulan

completamente. Esta suposición resulta en la pérdida de efectos de interferencia.

Recientemente Czychołł y Kramer (1980) realizaron investigaciones numéricas partiendo de la fórmula de Kubo-Greenwood para la conductividad. Estudiaron la conductividad dc en un modelo unidimensional de Anderson de un sistema desordenado. Utilizaron sistemas grandes del orden de  $10^4$  sitios y afirman haber encontrado algunos resultados sorprendentes. En primer lugar, presentan una aparente evidencia numérica de una conductividad dc diferente de cero a temperatura cero, y en segundo lugar, una transición de Anderson a un valor crítico del desorden  $(W/V)_c$  igual a 1.5. Lo primero contradice todas las teorías analíticas por lo que hay que tomar estos resultados con cuidado.

Los autores ofrecen tres explicaciones posibles a sus resultados: 1) Se predice en algunos trabajos (Abrahams, et.al. 1979) que la conductividad tiene una dependencia exponencial con la longitud del sistema. Los autores investigaron la conductividad en el régimen de desorden fuerte donde todos los estados estarían localizados y que reúnen las condiciones que se mencionan en los trabajos citados mas no detectaron comportamiento exponencial alguno. Proponen entonces una revisión a todas las teorías sobre localización, al menos en una dimensión. 2) Otra explicación es que es posible que por alguna "razón técnica" tal como errores de redondeo o de truncamiento, no hayan obtenido los resultados esperados para la conductividad. Esta se descarta haciendo un análisis de la

longitud de localización y su comportamiento coincide con otro evaluado por teorías de escalamiento. 3) Una última explicación es que quizá la conductividad no sea una cantidad físicamente significativa.

Posteriormente, se ha encontrado que ni  $\alpha$ ,  $\rho$ , o  $\langle S_N \rangle$  son cantidades físicamente significativas, pero en 1980 Anderson, et.al. (1980) usando teorías de escalamiento, encontraron que una cantidad con un significado físico más importante, en el sentido de que obedece el teorema del límite central es la longitud inversa de localización que definieron como  $\alpha = (-\ln T)/L$ .

Andereck y Abrahams (1980) estudiaron las propiedades de transmisión de dos modelos de una red unidimensional de funciones delta. Su intención fue la de verificar numéricamente la proposición de que  $\alpha = (-\ln T)/L$  es una cantidad bien comportada estadísticamente.

El primer modelo consiste en  $N$  potenciales igualmente espaciados cuyas intensidades presentan una distribución uniforme (rectangular) con promedio cero.

Usando el método de la matriz de transferencia (Erdős y Herndon, 1982), los autores calcularon numéricamente de ensambles de cadenas de una longitud dada generadas en la computadora, los promedios  $\langle S_N \rangle$ ,  $\langle S_N^2 \rangle$  y  $\log \langle (1+S_N) \rangle$ , donde  $S_N$  es el cociente entre el coeficiente de transmisión y el de reflexión. Encontraron primeramente que la resistencia y la conductancia resultan cantidades poco adecuadas para promediar ya que las desviaciones estándar son siempre mayores que sus

medias. Sin embargo, usando la variable  $\alpha = -(\ln T)/L$  la cual obedece el teorema del límite central, según demostró Anderson (1980), encontraron que su desviación estándar era siempre menor que la media  $\langle \alpha \rangle$ ; que para un valor dado de  $k$  y de desorden  $q$ , la cantidad  $\langle \alpha \rangle$  resulta independiente de la longitud, lo que indica que no existe dependencia con  $L$  en el coeficiente del exponencial que describe el comportamiento de la resistencia de un sistema en particular y que además era proporcional a  $L^{-1/2}$ , como se esperaría de una distribución gaussiana. También se encontró que era independiente del número de cadenas que constituyen el ensamble (Véanse figuras 3 y 4). Se utilizaron las distribuciones gaussianas de  $\alpha$  y un ajuste por prueba de chi-cuadrada dio un nivel de confianza del 92.5%.

Estos autores (Andereck y Abrahams) también consideraron un modelo con desorden espacial sin desorden en las intensidades de los potenciales delta. Aquí la posición del  $n$ -ésimo potencial delta está en función de una distribución gaussiana centrada en  $a$ , con una anchura proporcional a  $n$ . Erdős y Herndon (1982) comparan este modelo con otro parecido propuesto por ellos; considerando las distancias entre potenciales y las intensidades de éstos como variables aleatorias. Afirman que es fácil demostrar, basándose en el teorema del límite central que, sin importar la distribución de las distancias entre potenciales, para  $n$  grandes, la suma de  $n$  distancias tiende a una distribución gaussiana cuya anchura proporcional a  $n$ . Es de esperarse, entonces, que los resultados analíticos de éstos autores y los de Andereck y Abrahams sean muy parecidos, lo cual

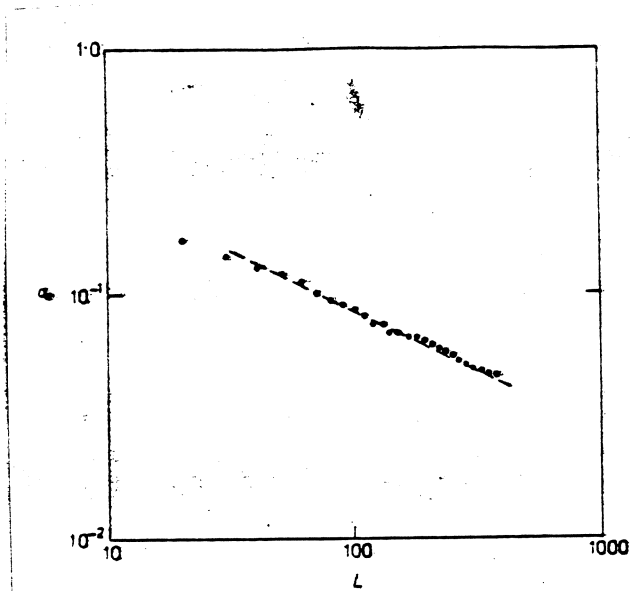


Figura 3.- Una gráfica de  $\ln \alpha$  contra  $L$  para 200 sistemas. La recta ajustada a los puntos tiene una pendiente de  $-(1/2)$  con  $k=1.4$ ,  $Q=3.0$ .

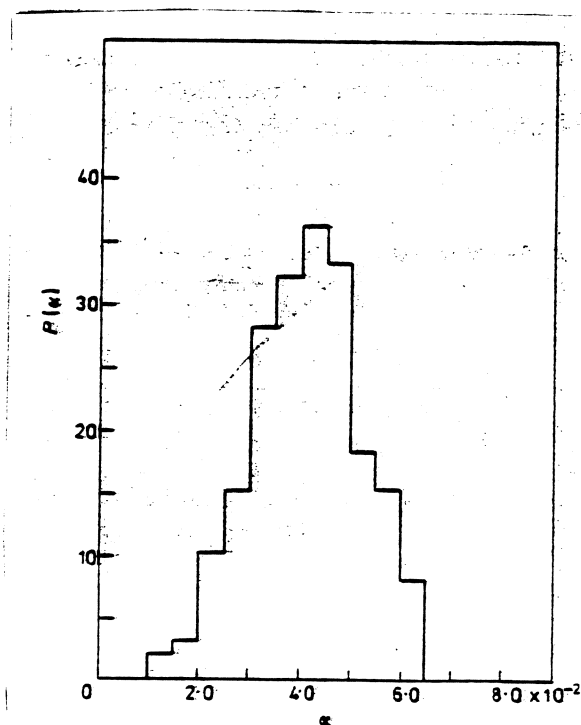


Figura 4.- Gráfica de la distribución de  $\alpha$  para 200 sistemas.  $L$  vale 700;  $k=1.4$ ,  $Q=1.0$ .

de hecho ocurre.

Entre los estudios por métodos Monte-Carlo se cita a Stoll y Schneider (1972), quienes calcularon numéricamente la "probabilidad de tunelamiento" (que es lo mismo que el coeficiente de transmisión) par un arreglo desordenado de potenciales delta. El desorden de su sistema se caracteriza manteniendo fijas las distancias medias entre los potenciales. El coeficiente de transmisión promedio se calcula usando varios miles de configuraciones desordenadas. Encuentran que la banda prohibida decrece a medida que crece el desorden. También encuentran que la probabilidad de que los electrones con energía de una región prohibida realicen un tunelamiento aumenta con el desorden.

Existe una gran cantidad de trabajos en la literatura sobre el problema de la localización, pero no se pretende hacer aquí una revisión exhaustiva del tema. Solo se trata de citar aquí lo más relevante para este trabajo. Si se desea hacer una revisión más a fondo, se sugiere consultar los trabajos de Ishii (1973) y Erdős y Herndon (1982).

-Localización en presencia de campo eléctrico.

Mientras que se ha realizado mucho trabajo sobre el espectro de energías de un electrón en una red periódica finita o infinita en presencia de un campo eléctrico (Wannier, 1960; Rabinovitch y Zak, 1971) es muy poco lo que se ha hecho sobre el problema de un sistema desordenado unidimensional en un campo eléctrico, y en especial en lo que se refiere a estados localizados.

En 1983, Flores, et.al. realizaron un estudio numérico de las propiedades estadísticas de la longitud inversa de localización usando un modelo tipo Kronig-Penney en una dimensión en presencia de un campo eléctrico. Al igual que Andereck y Abrahams, usando el método de la matriz de transferencia, determinaron las distribuciones de  $\alpha$  para  $F=0$  y  $F \neq 0$ , y encontraron que, mientras que para  $F=0$  obedece el teorema del límite central, para  $F \neq 0$  sigue una distribución más complicada de tipo no-gaussiano.

En el mismo año, Soukoulis y colaboradores estudiaron la dependencia del coeficiente de transmisión con el tamaño del sistema cuando se encuentra presente un campo eléctrico. Ellos transformaron la ecuación de Schrödinger para una cadena de funciones delta con un campo eléctrico aplicado a una ecuación de diferencias finitas de segundo orden aproximando el potencial  $F(x)$  por una función escalón y aplicándole un mapeo de Poincaré. Obtuvieron una ecuación de recurrencia cuyas soluciones, para la region entre deltas, están dadas en términos de senos y cosenos en lugar de funciones Airy. Esta forma de la ecuación de Schrödinger es bastante útil para el trabajo numérico ya que como es una fórmula de recurrencia permite trabajar con sistemas bastante grandes.

Encontraron que  $T$  se comporta como  $L^{-m(f)}$  para campos pequeños lo cual indica que la localización obedece una ley de potencia. Se predijo, además, que la resistencia varía como

$$R(f) \approx R_0 \left( 1 - \frac{1}{2E} |f| \right)$$

donde  $R_0$  es la resistencia a  $T = 0$ ,  $L$  es la longitud,  $E$  es la energía del haz y  $F$  es la intensidad del campo eléctrico.

## CAPITULO II

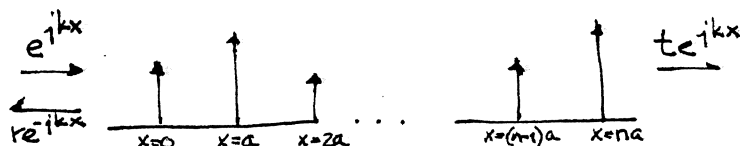
### Método de la matriz de transferencia.

Para el estudio de la transmisión de un haz de electrones con energía  $E$  a través de una cadena de  $N$  potenciales delta igualmente espaciados se utilizará el método de la matriz de transferencia. Este método que es una representación de la relación entre las funciones de onda de un lado a otro de un potencial arbitrario. Es una matriz compleja de  $2 \times 2$ , cuyas propiedades son tales que la matriz de transferencia total para un sistema de  $N$  potenciales se puede escribir como el producto de las matrices de transferencia de cada potencial individual.

El procedimiento es el siguiente: se define la ecuación de Schrödinger para el modelo en general, se resuelve en particular para la región entre dos potenciales y se relacionan las soluciones o funciones de onda con la de su región adyacente.

En primer lugar, se estudiará el modelo de un sistema desordenado en una dimensión sin campo eléctrico con una longitud  $L=na$  donde  $a$  es la distancia interpotencial y  $N=n+1$  es el número de potenciales delta. Este modelo es parecido al de Kronig-Penney usado en la teoría de sólidos ordenados; con la diferencia de que en el modelo de Kronig-Penney se considera una cadena infinita de potenciales delta y aquí sólo se considerarán cadenas de longitudes finitas.

Una representación esquemática de este modelo sería como sigue



$r$  es la amplitud de reflexión y  $t$  es la amplitud de transmisión. Se normaliza de tal manera que la amplitud del haz incidente es igual a 1.

De modo que la ecuación de Schrödinger para este modelo es de la forma

$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} + \sum_{i=0}^N \beta_i \delta(x-a_i) - k^2 \right\} \psi(x) = 0$$

con  $\hbar=2m=1$ ,  $k^2$  es la energía del haz y  $\beta_i$  la intensidad del  $i$ -ésimo potencial delta.

$\beta_i$  es una variable aleatoria con una distribución uniforme, centrada en cero, y de anchura  $Q$ .

Llamaremos región  $i$  a la región comprendida entre la delta  $i-1$  y la delta  $i$ . Puesto que en el caso  $F=0$ , el potencial en esta región vale cero, tenemos que:

$$\psi_i(x) = a_i e^{ikx} + b_i e^{-ikx}$$

y en la región  $i+1$  la solución sería:

$$\psi_{i+1}(x) = a_{i+1} e^{ikx} + b_{i+1} e^{-ikx}$$

Por la condición de continuidad de las funciones de onda de una región interpotencial a otra tenemos que

$$\psi_i(x) \Big|_{x=ia} = \psi_{i+1}(x) \Big|_{x=ia}$$

o sea

$$a_i e^{ikx} + b_i e^{-ikx} = a_{i+1} e^{ikx} + b_{i+1} e^{-ikx}$$

Para obtener la condición sobre las derivadas de la función de onda a través del potencial delta, se integra la ecuación de Schrödinger (véase apéndice I) y se tiene que:

$$\psi'_{i+1}(x) \Big|_{x=ia} - \psi'_i(x) \Big|_{x=ia} = \beta_i \psi_i(x) \Big|_{x=ia}$$

Explícitamente

$$(a_{i+1}jke^{ikia} - b_{i+1}jke^{-ikia}) - (a_i jke^{ikia} - b_i jke^{-ikia}) = \beta_i (a_i e^{ikia} + b_i e^{-ikia})$$

Con esto, se obtienen dos ecuaciones simultáneas las cuales se despejan y se arreglan en forma matricial para obtener así una expresión general para los coeficientes correspondientes a la función de onda de la región  $i+1$  en función de los coeficientes de la región  $i$ :

$$\begin{bmatrix} a_{i+1} \\ b_{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{-ikia} & 0 \\ 0 & e^{ikia} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 - j\beta_i/2k & -\beta_i/2k \\ \beta_i/2k & 1 + j\beta_i/2k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{ikia} & 0 \\ 0 & e^{-ikia} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_i \\ b_i \end{bmatrix}$$

$$= M \begin{bmatrix} a_i \\ b_i \end{bmatrix}$$

que relaciona los coeficientes  $a_i, b_i$  de la función de onda  $\psi_i$  con los coeficientes  $a_{i+1}, b_{i+1}$  de la función, a través de la matriz

$$M_i = \begin{bmatrix} 1 - j\beta_i/2k & -\beta_i e^{2ik/2k} \\ \beta_i e^{2ik/2k} & 1 + j\beta_i/2k \end{bmatrix}$$

Esto se puede hacer para cada uno de los potenciales delta. En particular, para  $x=0$  y tomando las condiciones iniciales  $a_0=1$ ,  $b_0=r$ , donde  $a_0$  es la amplitud normalizada del haz incidente y  $b_0$  es la amplitud de reflexión, se tiene que

$$1 + r = a_1 + b_1$$

$$\beta_0(1 + r) + jk(1 - r) = jk(a_1 - b_1)$$

Arreglando los términos matricialmente

$$\begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 - j\beta_0/2k & -\beta_0/2k \\ \beta_0/2k & 1 - j\beta_0/2k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix}$$

o equivalentemente

$$\begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \end{bmatrix} = M_0 \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix}$$

Similarmente, en el otro extremo de la cadena, considerando que solo se tiene onda saliente tenemos que

$$a_n e^{ikL} + b_n e^{-ikL} = t e^{ikL}$$

$$jk(a_n e^{ikL} - b_n e^{-ikL}) + \beta_n(a_n e^{ikL} + b_n e^{-ikL}) = jk(t e^{ikL})$$

Y en forma de matricial queda

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \beta_n + jk & \beta_n - jk \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{ikL} & 0 \\ 0 & e^{-ikL} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_n \\ b_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{ikL} & e^{-ikL} \\ jk e^{ikL} & -jk e^{-ikL} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t \\ 0 \end{bmatrix}$$

donde  $t$  es la amplitud compleja de transmisión.

De donde

$$\begin{bmatrix} e^{-ikL}/2 & e^{ikL}/2jk \\ e^{ikL}/2 & -e^{-ikL}/2jk \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \beta_n + jk & \beta_n - jk \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{ikL} & 0 \\ 0 & e^{-ikL} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_n \\ b_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t \\ 0 \end{bmatrix}$$

que podemos reescribir en la forma

$$\begin{bmatrix} t \\ 0 \end{bmatrix} = M_n \begin{bmatrix} a_n \\ b_n \end{bmatrix} = M_n M_{n-1} \dots M_0 \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix}$$

De manera que al final se tienen dos ecuaciones simultáneas dadas por

$$\begin{bmatrix} t \\ 0 \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix}$$

donde M es la matriz de transferencia total del sistema. Tenemos pues una relación entre la función de onda de entrada y la función de onda de salida a través de M. La información sobre la naturaleza del potencial queda contenida en M, siendo ésta una matriz compleja de 2 por 2.

Desarrollando la ecuación anterior

$$t = M_{11} + M_{12}r \quad (1)$$

$$0 = M_{21} + M_{22}r \quad (2)$$

despejando r de (2) y sustituyendo en (1)

$$t = \frac{M_{22}M_{11} - M_{12}M_{21}}{M_{22}} = \frac{\det M}{M_{22}} \quad (3)$$

y el coeficiente de transmisión estará dado por:

$$T = \left| \frac{\det M}{M_{22}} \right|^2 \quad (4)$$

La matriz de transferencia, para el caso de  $F=0$  tiene las siguientes propiedades:

a)  $M_{11}^* = M_{22}$ ,  $M_{12}^* = M_{21}$ . Debido a la invariancia de la ecuación de Schrödinger ante la inversión temporal.

b)  $\det M = |M_{11}|^2 - |M_{12}|^2 = 1$ . Debido a la continuidad de la densidad de corriente.

La demostración de estas propiedades se presenta en el Apéndice II.

### CAPITULO III

#### Cálculos

##### 1) Caso de $F=0$

Establecidas estas ecuaciones, se creó un algoritmo computacional para introducir los valores iniciales y así obtener un valor del coeficiente de transmisión.

El flujo del algoritmo es de la forma siguiente: Se establecen los parámetros fijos como la energía del haz  $E$ , el valor del desorden  $Q$  y la longitud  $L$ . Se generan las alturas de las deltas por medio de la subrutina "GGUBFS" de la biblioteca de programas "IMSL". Esta subrutina es un generador de números aleatorios que proporciona un valor entre 0 y 1 con distribución uniforme.

Terminado esto, se calculan las matrices  $M_n, M_{n-1}, \dots, M_0$ , en ese orden, y se van multiplicando por la derecha (ec. ) hasta tener la matriz de transferencia total  $M$ .

Luego, se calcula el coeficiente de transmisión por medio de la ecuación (4), se obtiene el negativo de su logaritmo natural y se guarda en un acumulador. Se crea un nuevo conjunto de valores de  $p_i$  (alturas de las deltas) y se repite el proceso 200 veces.

Al terminar se calcula el promedio de  $\alpha$ , y la desviación estándar. Luego, se incrementa en 50 la longitud de la cadena, y se repite todo el cálculo para otro ensamble de 200 cadenas.

Las longitudes de éstas variaron de 50 a 400 en incrementos de 50 con una distancia interpotencial  $(a)$  fija e igual a 1. El valor  $Q$  del desorden es de  $(12)^{1/2}$  y el haz incidente tiene una

energía  $E=k^2$  igual a 5.0. Estos valores se tomaron de la referencia (1).

Se muestra la gráfica de  $-\langle \ln T \rangle$  contra  $L$  a continuación, pudiendo observar que los puntos obtenidos siguen una tendencia lineal. Esto es,  $T \sim \exp(-\alpha L)$ , donde, en ausencia de campo eléctrico, es una constante independiente de  $L$  (localización exponencial).

Soukoulis, et.al., a partir de un resultado de Kappus y Wegner (1981) para la longitud de localización obtenida para el modelo de Anderson, obtienen una expresión aplicable al modelo de una cadena finita de funciones delta:

$$l_c = \frac{96E}{W^2}$$

Entonces, cuando  $F=0$ , los estados se encuentran exponencialmente localizados con esta  $l_c$ , de tal manera que el promedio del ensamble  $\langle \ln T \rangle = -2L/l_c$ . Haciendo un poco de álgebra se encuentra que

$$\frac{1}{L} - \langle \ln T \rangle = \frac{2W^2}{96E} = 0.05$$

Por medio de una regresión lineal, se obtuvo que la ecuación de la recta que pasa por los puntos de la gráfica es de

$$y = 0.684 + 0.0482x$$

Se puede ver entonces que hay una buena concordancia entre el valor calculado por los autores y el calculado aquí.

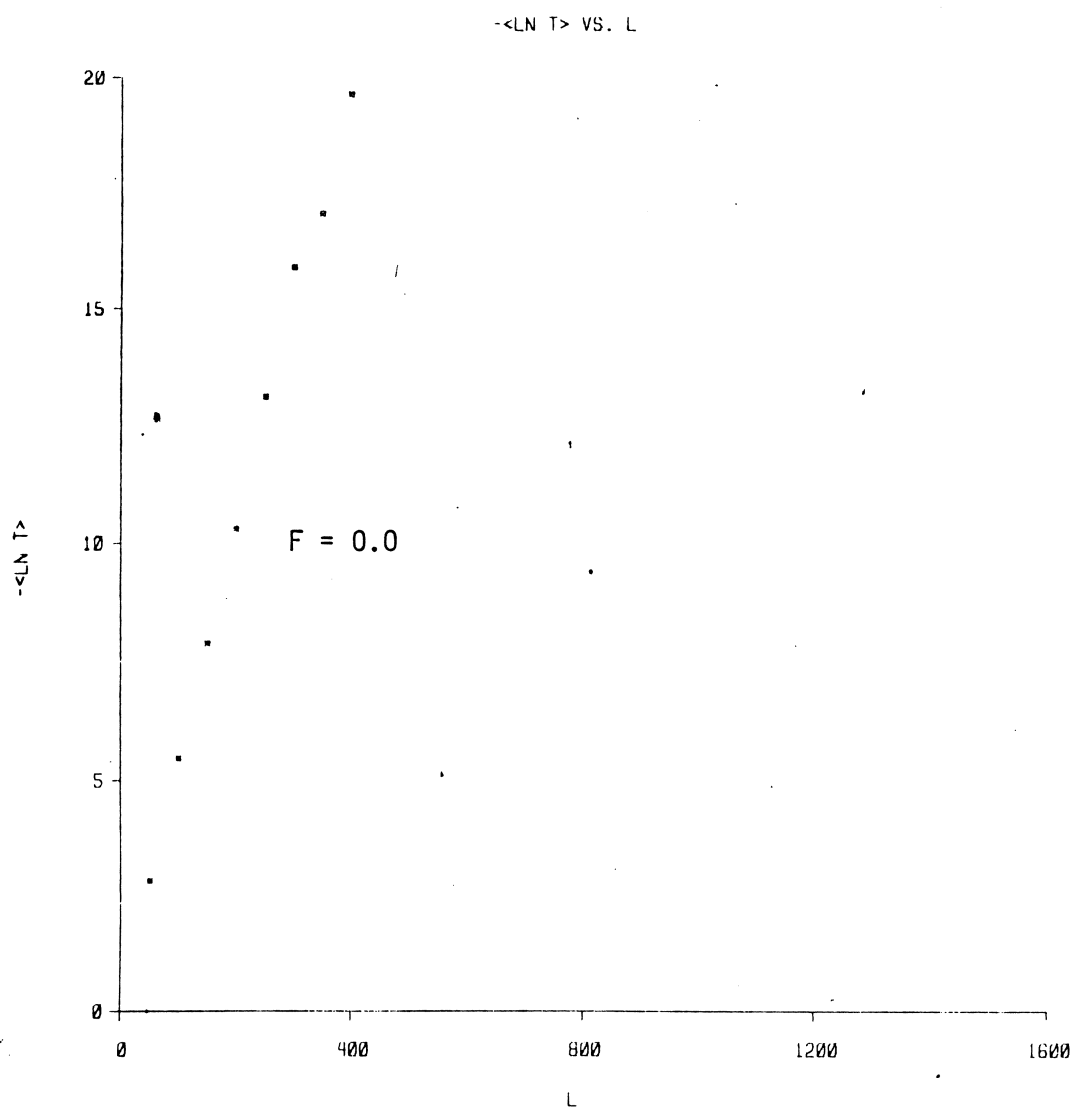


Figura 6

2) Caso de  $F \neq 0$ .

Se verá ahora cuál es el comportamiento de la longitud inversa de localización cuando se le aplica un campo eléctrico a la cadena.

La ecuación de Schrödinger para este modelo es

$$\left\{ -\frac{d^2}{dx^2} + \sum_{i=0}^N \beta_i \delta(x-a_i) - Fx \right\} \psi(x) = E(x)$$

donde, como antes,  $\beta_i$  es la altura del  $i$ -ésimo potencial delta y  $F$  es el producto del campo eléctrico por la carga electrónica  $e$ . Para una región interpotencial, la ecuación de Schrödinger es difícil de resolver. Haciendo un cambio de variable (véase el Apéndice III), esta ecuación se transforma a la ecuación diferencial de Airy (Abramowitz y Stegun, 1964):

$$\frac{d^2 \psi}{dz^2} - z \psi = 0$$

donde  $z = -EF^{2/3} - F^{1/3}x$ . Las soluciones son de la forma

$$\psi(z) = a Ai(z) + b Bi(z)$$

$Ai(z)$  y  $Bi(z)$  son las funciones de Airy, y  $Ai'(z)$ ,  $Bi'(z)$  son sus derivadas. Las funciones de Airy tienen la particularidad de que su wronskiano es

$$\begin{vmatrix} Ai(z) & Bi(z) \\ Ai'(z) & Bi'(z) \end{vmatrix} = \frac{1}{\pi}$$

lo cual simplifica mucho los cálculos como se verá más adelante. Las condiciones iniciales son como en el modelo anterior  $a_0=1$ ,  $b_0=r$ ,  $a_{n+1}=t$ ,  $b_{n+1}=0$ ; con la diferencia de que usaron dos valores de campo eléctrico para determinar el comportamiento de  $\alpha$ :  $F=0.05$  y

$F=0.25$ .

A la entrada de la cadena se tiene:

$$1+r = a_1 A_i(0) + b_1 B_i(0)$$

$$p_0(1+r) + i k_0(1-r) = a_1 A_i'(0) + b_1 B_i'(0)$$

habiendo aplicado las condiciones de continuidad de las funciones y sus derivadas a través de un potencial delta.

Matricialmente

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ p_0 + i k_0 & p_0 - i k_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_i(0) & B_i(0) \\ \gamma A_i'(0) & \gamma B_i'(0) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \end{bmatrix}$$

que se puede reescribir como

$$\begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \end{bmatrix} = M_0 \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix}$$

La razón del factor  $\gamma$  que multiplica a las derivadas de las funciones Airy es la siguiente: debido a que estas derivadas están tomadas con respecto a  $z$ , pero las derivadas de la función de onda se toman con respecto a  $x$ , se debe de establecer una relación entre  $d\psi/dx$  y  $d\psi/dz$ . Por regla de la cadena tenemos:

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{d\psi}{dz} \cdot \frac{dz}{dx}$$

siendo  $z$  la variable definida anteriormente. Derivando  $z$  y sustituyendo queda

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{d\psi}{dz} (-F^{1/3})$$

El factor de  $(-F)^{1/3}$  es lo que se denota aquí como  $\gamma$  y  $k^2=E$ .

Volviendo al modelo, para cualesquier regiones  $i$  e  $i+1$  donde en medio exista un potencial delta, los coeficientes están relacionados en la forma

$$\begin{bmatrix} A_i(x) & B_i(x) \\ \gamma A_i'(x) + \beta_i A_i(x) & \gamma B_i'(x) + \beta_i B_i(x) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_i \\ b_i \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} A_i[(i+1)x] & B_i[(i+1)x] \\ \gamma A_i'[(i+1)x] + \beta_i A_i[(i+1)x] & \gamma B_i'[(i+1)x] + \beta_i B_i[(i+1)x] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{i+1} \\ b_{i+1} \end{bmatrix}$$

De donde

$$\begin{bmatrix} a_{i+1} \\ b_{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{\pi}{\gamma} \\ \gamma \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\gamma}{\pi} - \beta_i A_i(x) B_i(x) & -\beta [B_i(x)]^2 \\ \beta_i [A_i(x)]^2 & \frac{\gamma}{\pi} + \beta_i A_i(x) B_i(x) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_i \\ b_i \end{bmatrix} = M_i \begin{bmatrix} a_i \\ b_i \end{bmatrix}$$

Al final de la cadena se tienen las condiciones

$$t e^{ikL} = a_n A_i(L) + b_n B_i(L)$$

$$i k t e^{ikL} - [a_n A_i'(L) + b_n B_i'(L)] = \beta_n [a_n A_i(L) + b_n B_i(L)]$$

que dan

$$\begin{bmatrix} e^{ikL} & e^{ikL} \\ i k e^{ikL} & -i k e^{-ikL} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_i(L) & B_i(L) \\ \gamma A_i'(L) + \beta_n A_i(L) & \gamma B_i'(L) + \beta_n B_i(L) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_n \\ b_n \end{bmatrix}$$

Despejando queda

$$\begin{bmatrix} t \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{ikL}/2 & e^{ikL}/2 i k \\ e^{ikL}/2 & -e^{ikL}/2 i k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_i(L) & B_i(L) \\ \gamma A_i'(L) + \beta_n A_i(L) & \gamma B_i'(L) + \beta_n B_i(L) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_n \\ b_n \end{bmatrix}$$

$$= M_n \begin{bmatrix} a_n \\ b_n \end{bmatrix} = M_n M_{n-1} M_{n-2} \dots M_0 \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix} =$$

$$M \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix}$$

Donde  $k = (E + FL)^{1/2}$ . Igual que en el modelo anterior, el producto de las matrices que representan las funciones de onda en las

regiones interpotenciales da la matriz de transferencia y se obtiene como antes

$$t = M_{11} + M_{12}r$$

$$0 = M_{21} + M_{22}r$$

y por la conservación de la densidad de corriente

$$T = \frac{k_1}{k_0} \frac{|\det M|^2}{|M_{22}|^2}$$

A diferencia del caso anterior,  $|\det M| \neq 1$  debido a que el campo eléctrico se encuentra interaccionando con la cadena. De hecho resulta es este caso que  $|\det M| = k_0/k_T$  de manera que finalmente  $T = k_0 |M| / k_T$

Una vez establecidas las ecuaciones y la matriz de transferencia para este modelo, se procedió a la creación de un algoritmo computacional para su manejo en la computadora. El algoritmo es similar al descrito para el caso de  $F=0$ , sólo que ahora la solución en las regiones entre funciones delta ya no son de la forma  $\exp(jkx)$  sino que ahora son funciones Airy.

Los resultados de los cálculos de  $-\langle \log T \rangle$  para este modelo y el anterior se muestran en seguida.

Usando ahora el modelo de la cadena con campo eléctrico aplicado, se corrió el programa correspondiente con parámetros de entrada  $E=5.0$ ,  $W=(12)^{1/2}$ , y  $F=0.05$  con longitudes de 100 a 1600 en ensambles de 200. La gráfica de  $-\langle \ln T \rangle$  contra  $L$  se muestra a en la figura.

Es fácil ver que después de cierta longitud,  $-\langle \ln T \rangle$  deja de comportarse linealmente, empieza a doblarse y a aumentar

lentamente.

Repitiendo el cálculo para  $F=.25$ , se obtienen resultados similares (Fig. 7) aunque en este caso observamos que la curva se aleja del comportamiento lineal más rápidamente.

Si ahora graficamos  $-\langle \ln T \rangle$  vs.  $\ln L$  (Fig. #8) obtenemos líneas rectas con pendientes que dependen del valor del campo eléctrico. Para el caso de  $F=0.05$ , la pendiente tiene un cierto valor, mientras que, para  $F=0.25$ , tiene otro valor distinto. Estos resultados sugieren una dependencia del coeficiente de transmisión  $T$  en función de la longitud  $L$  de la forma

$$T \sim L^{-m(F)}$$

donde hemos señalado que el exponente es función del campo eléctrico. Este comportamiento se conoce en la literatura como localización tipo "ley de potencias", a diferencia de la localización exponencial que se obtiene en el caso de  $F=0$ . Las implicaciones de este resultado en el comportamiento de la resistencia como función de la temperatura, han sido discutidas por Soukoulis, et.al.

En estos resultados, como se puede apreciar en la tabla, la desviación estandard es bastante grande, aunque siempre menor que el valor promedio  $\langle \alpha \rangle$ . Esto se debe a que estamos tomando promedios sobre ensambles de 200 elementos. Para mejorar la estadística, es recomendable trabajar con ensambles de más de 1000 elementos, lo cual sin embargo, implica un uso de recursos de cómputo que está fuera de nuestras posibilidades.

-<LN T> VS. L

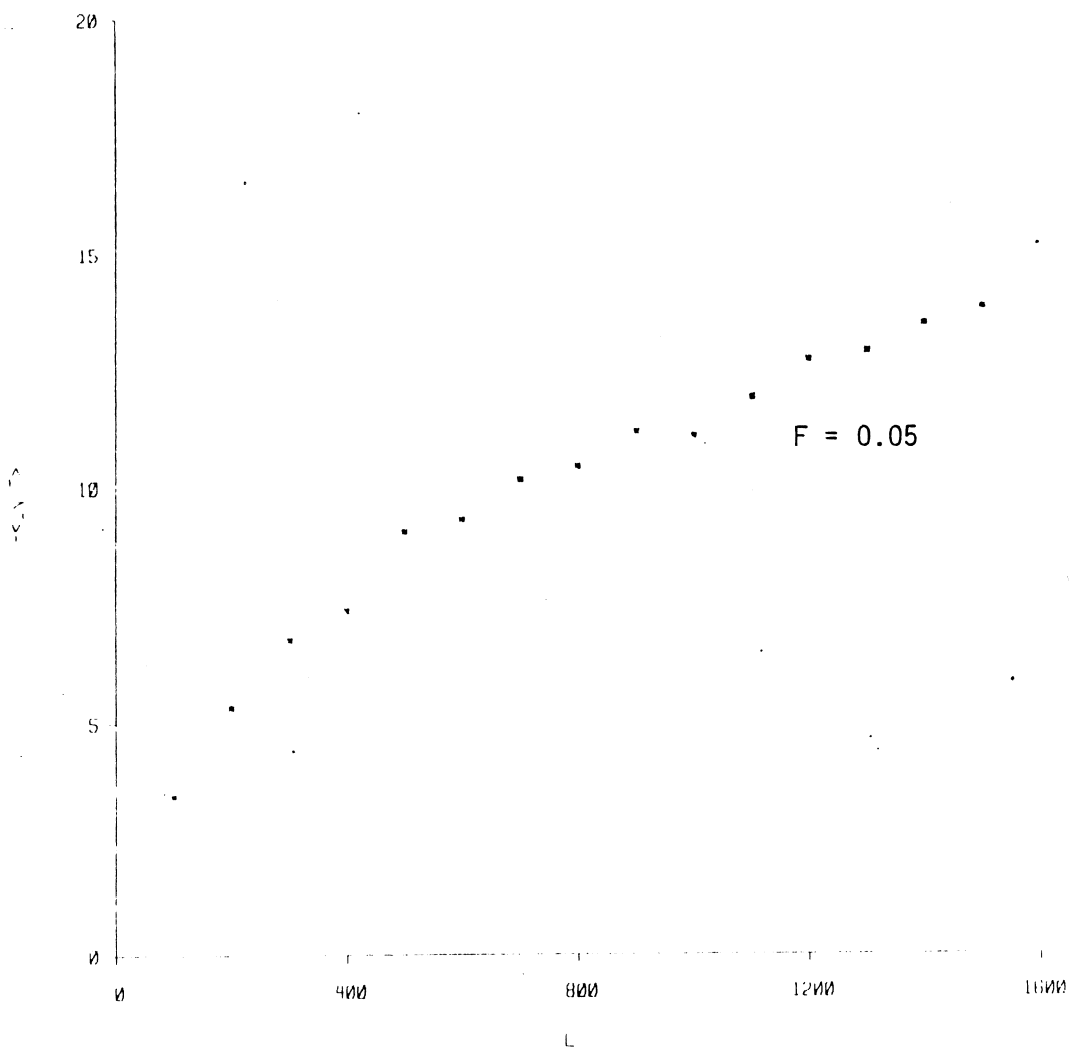


Figura 6

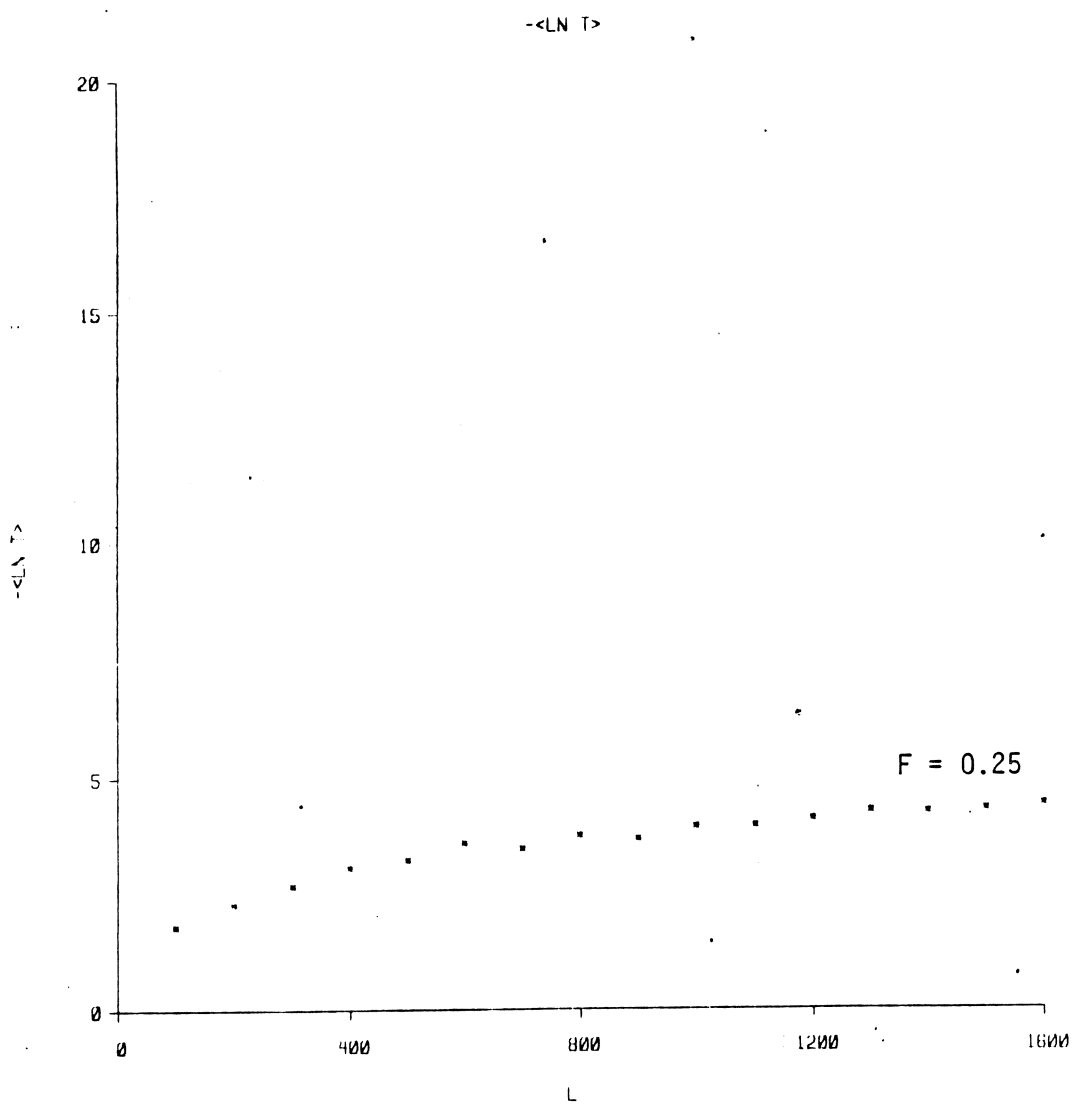


Figura 7

-<LN T> VS. LN L

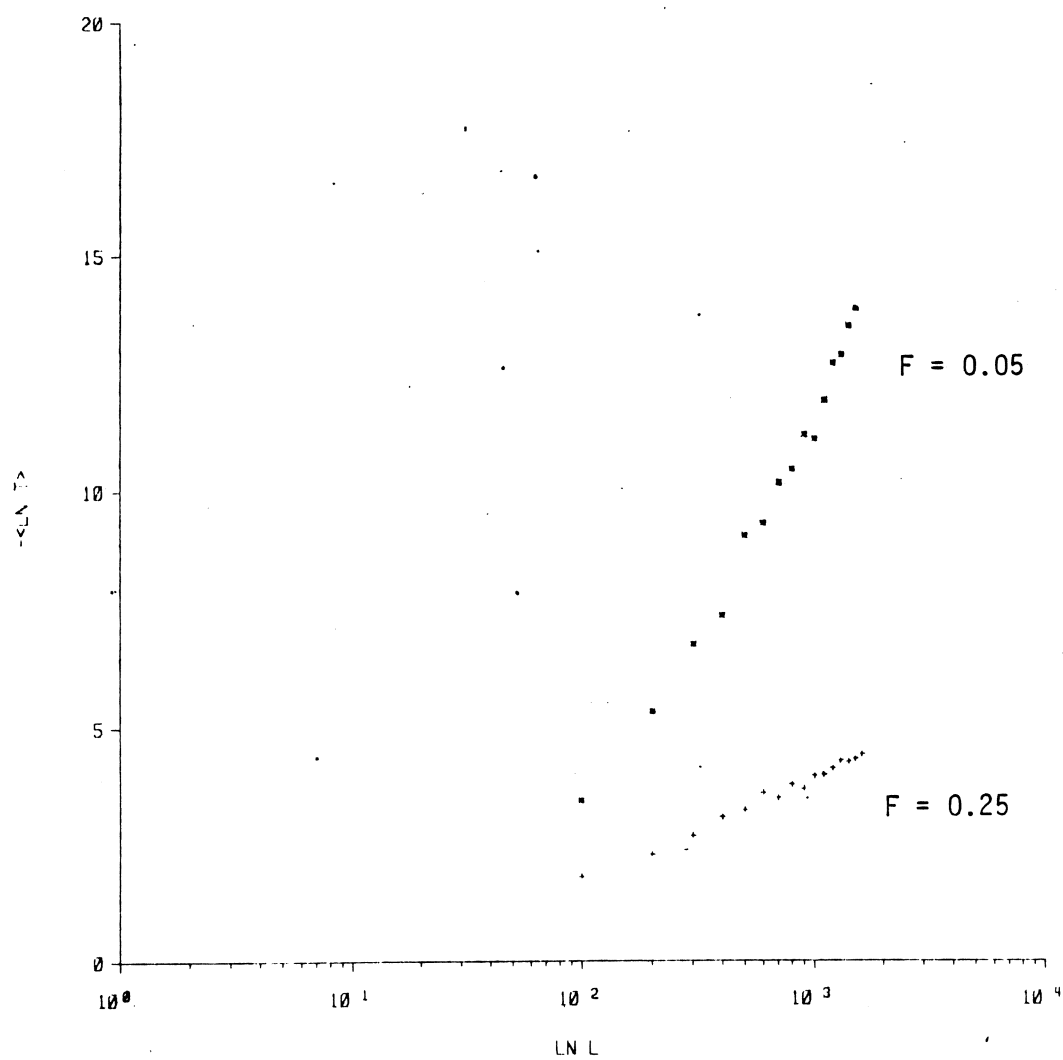


Figura 8

LN ( $\sigma_a$ ) VS. LN L

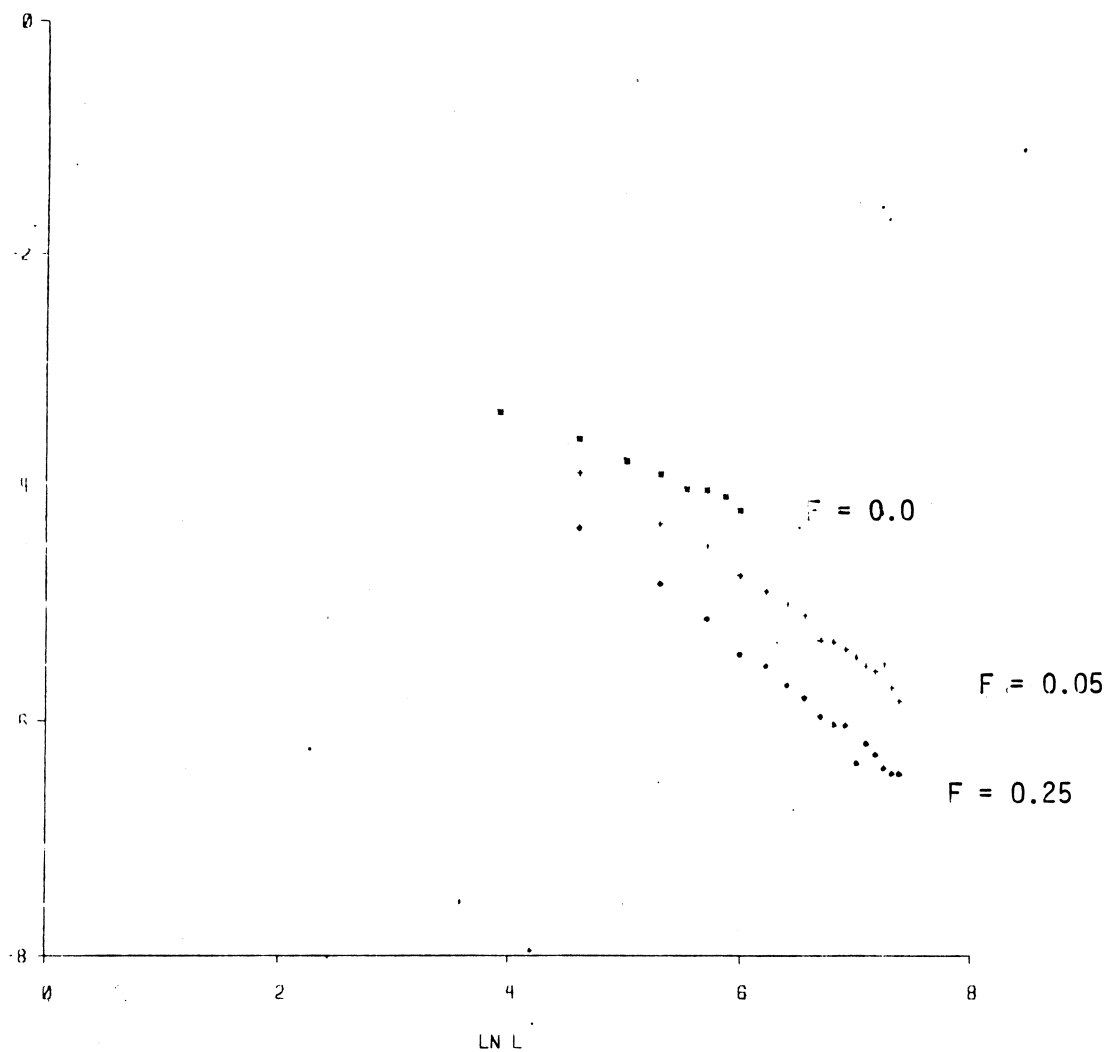


Figura 9

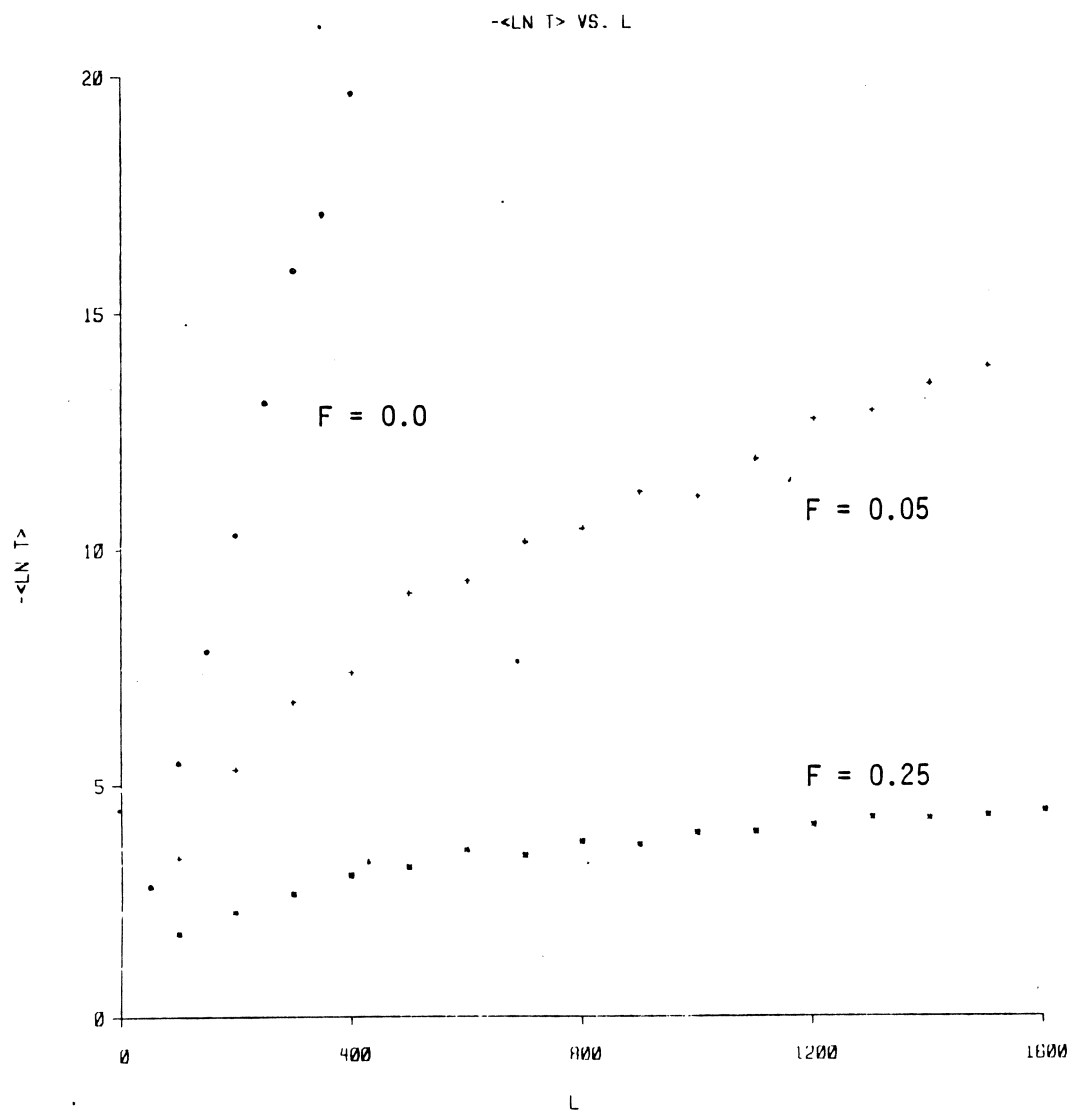


Figura 10

## CAPITULO IV

### Comparación con los experimentos.

La localización de las funciones de onda en sistemas desordenados ha sido estudiada teórica y experimentalmente en sistemas bi y tridimensionales. Mientras que la teoría predecía efectos muy interesantes en una dimensión, parecía imposible realizar experimentos hasta que Thouless (1977) propuso que todos los sistemas se comportan como sistemas unidimensionales, sin importar el área de su sección transversal, siempre y cuando sean lo suficientemente largos. Específicamente, predijo que la localización ocasionaría que todo sistema unidimensional con resistencia debido a impurezas mayor que  $8k\Omega$  presenta una conductividad térmicamente activada a bajas temperaturas y se convierte en aislante en el cero absoluto. Thouless predijo, además, que la temperatura a la que este efecto es observable,  $T_L$ , aumenta al disminuir el área de la sección transversal del alambre y a medida que se aumenta el desorden (la resistencia debida a impurezas).

Para alambres macroscópicos,  $T_L$ , es inalcanzablemente baja, pero con  $A = 2.5 \times 10^{-14} \text{ cm}^2$  (un radio del orden de  $250 \text{ \AA}$ ),  $T_L$  es del orden de  $1\text{K}$ . Giordano (1980) realizó una serie de experimentos sobre las propiedades eléctricas de unos "alambres" metálicos que en realidad consisten en depositos extremadamente finos de una película metálica en forma de escalón sobre un sustrato de vidrio. El proceso se ilustra en la figura 11. Se cubre primero por técnicas litográficas convencionales, la mitad

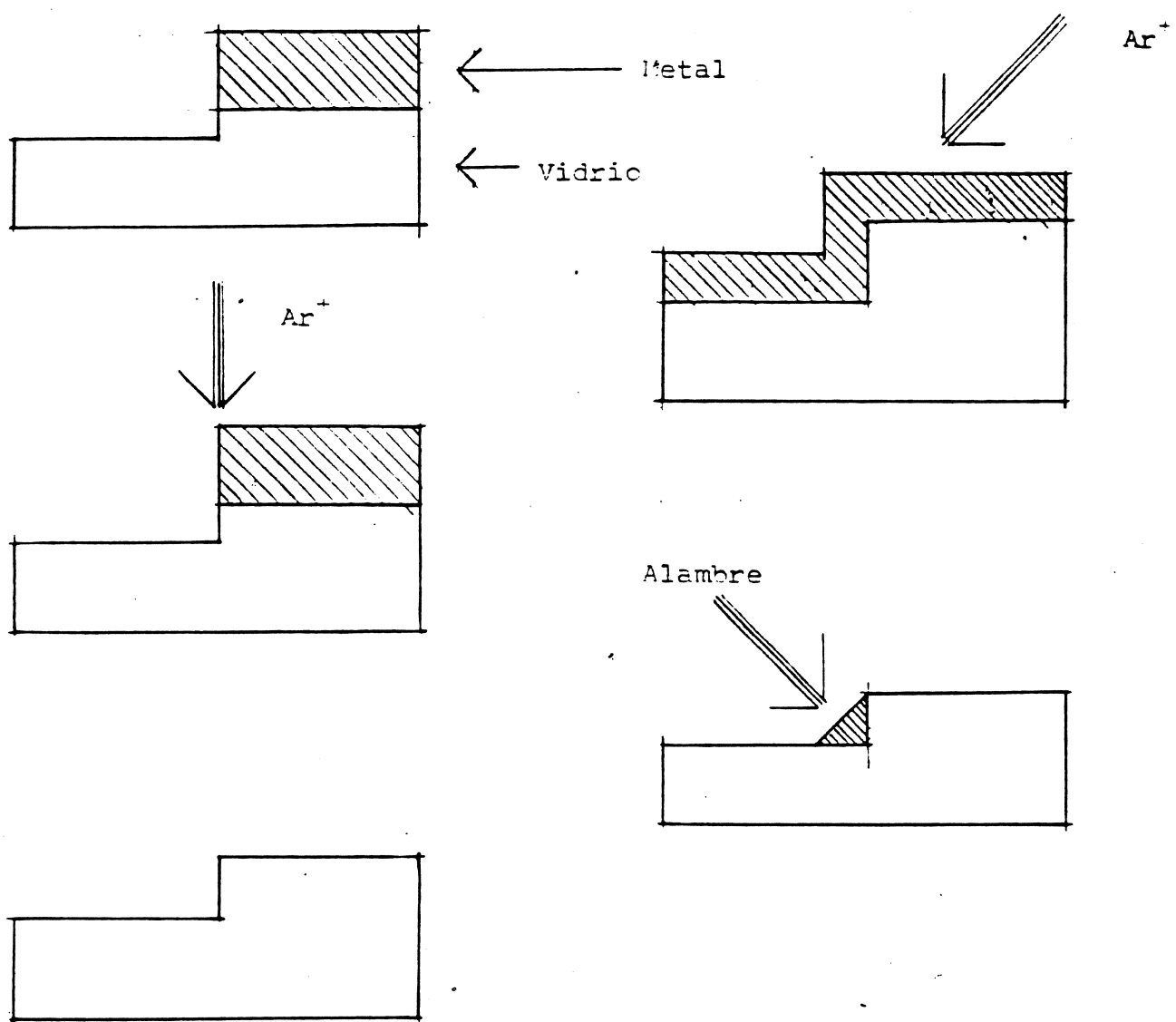


Figura 11.- Proceso litográfico usado para fabricar los alambres utilizados en el experimento de Giordano (1980).

de un sustrato de vidrio. Esta se bombardea entonces con iones de argón a incidencia normal erosionando la superficie descubierta de vidrio. Luego, se quita la película químicamente dejando un escalón en el sustrato. Después se deposita otra película metálica de tal forma que se cubra todo el escalón. La superficie entonces se vuelve a erosionar, sólo que esta vez el haz de iones de Ar incide a cierto ángulo de manera que quede algo de metal entre los escalones. Resulta entonces un alambre que corre a través del escalón. Este alambre simula el sistema unidimensional sobre el cual se va a trabajar. El metal que se usó en este experimento fue  $Au_{10}Pd_{10}$ .

De acuerdo con Thouless (1980), considerando directamente el movimiento de difusión de los electrones, la resistencia de un alambre a temperatura cero se puede escribir de la forma

$$R = R_0 \left( 1 + \frac{\rho_i \sqrt{2D\tau_i}}{R_L A} \right)$$

donde  $R$  es la resistencia debida a dispersión por impurezas,

$\rho$  es la resistividad debida a dispersión por impurezas,

$D$  es el coeficiente de difusión apropiado,

$R_L$  es la resistencia metálica máxima ( $\approx 36.5 \text{ k}\Omega$  de acuerdo con Anderson (1980))

$A$  es el área de la sección transversal

y  $\tau_i$  es el tiempo de dispersión inelástica.

Vemos que el aumento en la resistencia, dado por el segundo término de esta ecuación, debe de exhibir las características siguientes: 1) crece conforme a  $1/A$ , 2) la dependencia con la temperatura está dada por la dependencia con la temperatura de

4. (Ver Apéndice IV).

Se midieron las características de corriente-voltaje a varias temperaturas. En todos los casos, las curvas  $I-V$  resultaron lineales a corrientes bajas mientras que a corrientes altas era evidente un calentamiento de Joule. Los alambres se comportan entonces como resistores óhmicos. Sin embargo, a bajas temperaturas ( $< 8K$ ) se encontro que la resistencia del alambre aumenta rápidamente (Fig. #12a). Se midió la resistencia en alambres de distinta sección transversal y se encontró que el aumento de la resistencia es mayor a medida que disminuye la sección transversal. Por ejemplo, a una temperatura de  $0.3K$ , el alambre con  $\sqrt{A} = 450 \text{ \AA}$  presenta una resistencia mayor que el de  $\sqrt{A} = 910 \text{ \AA}$ . Esto concuerda perfectamente con lo propuesto por Thouless (1977).

En la figura 12b se muestran los mismos resultados graficados en función  $T^{-1/2}$ . Para temperaturas menores que  $5K$ , aproximadamente, se puede observar que los resultados son consistentes con una dependencia como  $T^{-1/2}$ . Finalmente, en la figura 12c se muestra que el aumento en la resistencia, a una temperatura fija, es proporcional a  $A^{-1}$ .

Estos resultados son consistentes con la teoría de Thouless, y por lo tanto, atribuibles a efectos de localización, siempre y cuando el tiempo de dispersión inelástica sea proporcional a  $T^{-1}$  y sea independiente del tamaño del alambre. Como se discutirá en el apéndice IV, un mecanismo que resulta consistente con este comportamiento sería la dispersión por niveles de tunelamiento electrónico (electron-tunneling-level scattering).

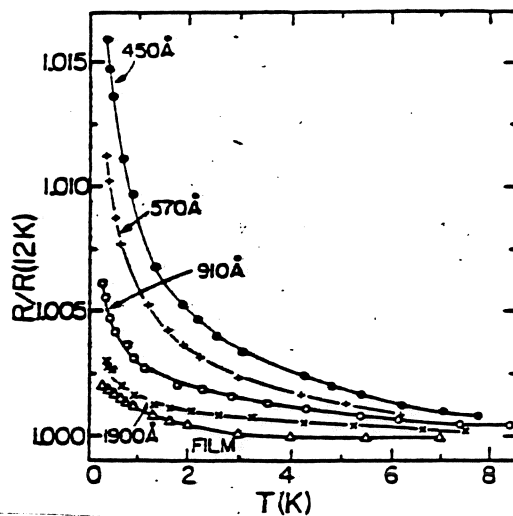


FIGURA 12a.

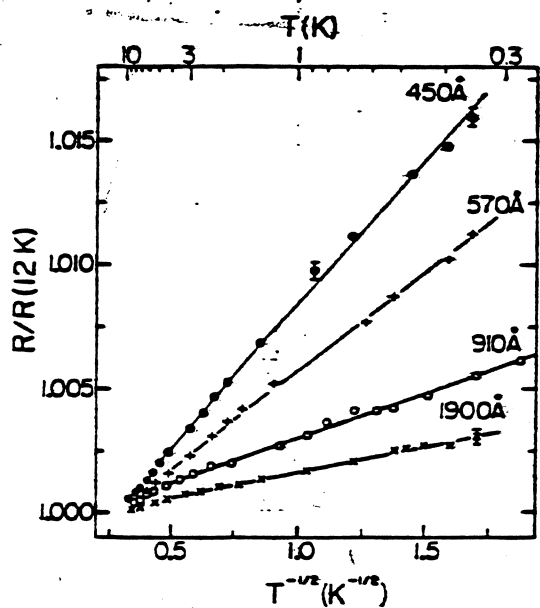


FIGURA 12b.

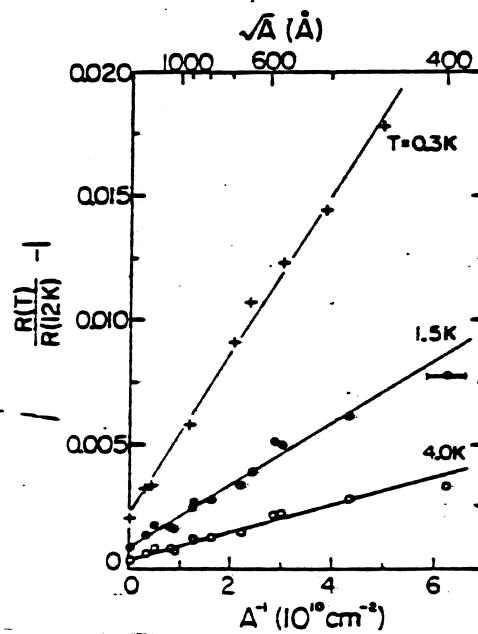


FIGURA 12c.

Sin embargo, estos resultados tambien son consistentes con la teoría de muchos cuerpos de Altschuler (1980), la cual predice que en un sistema desordenado unidimensional, la interacción electrón-electrón conduce al resultado

$$R = R_0 \left[ 1 + \frac{e^2 \rho_c (2-F)}{\pi \hbar A} \left( \frac{D \hbar}{2 k_B T} \right)^{1/2} \right]$$

donde  $k_B$  es la constante de Boltzmann y  $F$  es un parámetro de apantallamiento cuyo valor se encuentra entre 0 y 1. Puesto que  $\hbar/e^2$  es aproximadamente igual a  $R_L$ , resulta que esta predicción tiene la misma forma que la de Thouless, si el mecanismo dominante de dispersión inelástica es el de niveles de tunelamiento electrónico. Dado que la magnitud de este efecto no puede determinarse independientemente, éstos experimentos no pueden distinguir entre las dos teorías.

Chaudhari y Habermeier (1980) reportaron resultados sobre experimentos hechos en tiras de películas de W-Re de dimensiones aproximadas de  $50 \text{ \AA}$  por  $5000 \text{ \AA}$ . Estas exhibieron un incremento en la resistencia proporcional a  $A^{-1}$  y que varía aproximadamente con  $T^{-1/2}$  como en los resultados de Giordano. La magnitud del incremento de la resistencia también concuerda. Pero también reportaron una dependencia de la resistencia con la longitud.

Dolan y Osheroff reportaron un posible comportamiento unidimensional en sus alambres más angostos ( $1000 \text{ \AA}$  de ancho). Notaron, sin embargo, que el comportamiento no era reproducible de muestra a muestra. Algunas de ellas presentaron una dependencia exponencial con la temperatura. A altas temperaturas

esto se reduce a la dependencia con  $T^{-1/2}$  obtenida por Giordano, por lo que pareciera que éstos resultados son consistentes con los de éste.

Los resultados de Giordano y los otros autores antes mencionados son consistentes en forma cualitativa con la teoría de localización. Sin embargo, para que los resultados puedan ser explicados cuantitativamente por esta teoría, es necesario demostrar que el tiempo de dispersión inelástica es proporcional a  $T$ . Un mecanismo que satisface esta condición es, como ya se mencionó, la dispersión por niveles de tunelamiento que se cree existe en sistemas altamente desordenados. (Anderson, et.al. (1972)).

Sin embargo, los resultados también son consistentes con la teoría de Altshuler (1980) que atribuye este comportamiento a efectos de la interacción electrón-electrón. Por lo tanto es necesario profundizar la investigación en este campo, para saber cual de estas teorías es aplicable a los experimentos. Un mayor número de cálculos y experimentos independientes son indispensables para lograr una comprensión adecuada de este fenómeno.

## CONCLUSIONES

Al comparar los resultados obtenidos con los de Soukoulis y colaboradores, lo primero que se puede observar es que son aproximadamente los mismos, con lo cual se puede inferir que tanto el método de la matriz de transferencia como el método de la transformación de la ecuación de Schrödinger por mapeo de Poincaré proporcionan los mismos resultados.

Las discrepancias se deben a que el segundo trata ecuaciones de diferencias finitas lo que resulta en una fórmula de recurrencia para las funciones de onda las cuales están dadas en términos de senos y cosenos y esto hace que numérica y computacionalmente las ecuaciones sean más fáciles de manejar y la propagación de errores al realizar las operaciones sea mucho menor. Ahora bien, la ventaja del método de la matriz de transferencia reside en el hecho de que se trata directamente con las funciones de onda soluciones y que se puede obtener directamente la relación entre funciones a ambos lados de cada potencial delta. Sin embargo, es muy lento y requiere de grandes cantidades de tiempo de computadora para la multiplicación de las matrices, lo que lo hace ineficiente para manipular sistemas muy grandes.

Por otro lado, como se mencionó anteriormente, el coeficiente de transmisión se encuentra estrechamente relacionado con la resistencia por medio de la longitud inversa de localización pues ésta es un parámetro de la densidad de estados localizados los cuales dan lugar a la conducción.

La longitud inversa de localización ( $\alpha$ ) es un parámetro que, aunque sin un sentido físico directo, es una variable bien comportada estadísticamente hablando y proporciona una buena idea sobre el comportamiento de la localización; sin embargo, es evidente por las gráficas de esta variable que acompañan al presente texto, que el comportamiento de  $\alpha$  es muy distinto dentro y fuera de un campo eléctrico.

Por medio de las gráficas podemos observar que en ausencia de un campo eléctrico, la localización es una constante, lo que indica un comportamiento exponencial del coeficiente de transmisión. Al someter el sistema a la influencia del campo eléctrico se puede observar que el coeficiente de transmisión se comporta de una forma no lineal. Analizando la gráfica de  $-\ln T$  vs.  $\ln L$  se puede observar que se obtienen líneas rectas de pendiente distinta. Soukoulis y colaboradores, determinando  $\alpha$  para mas valores del campo eléctrico, concluyeron que la pendiente de estas líneas era una función del campo. Mediante esto, llegaron a la conclusión de que, bajo un campo eléctrico, el sistema poseía estados localizados bajo un régimen de "ley de potencias"

# BIBLIOGRAFIA

- 1) Abrahams, E. & M.J. Stephen (1980), J. Phys. C, (13) L377.
- 2) Abrahams, E. et.al. (1979) Phys. Rev. Lett. (42), 673.
- 3) Abramowitz, M & I. Stegun (1956), Handbook of Mathematical Functions (Dover Publications, New York)
- 4) Altshuler, B.L., A.G. Aronov, P.A. Lee (1980) Phys. Rev. Lett. (44), 1288
- 5) Andereck, B. & E. Abrahams (1980), J. Phys. C, (13) L383.
- 6) Anderson, P.W. (1958), Phys. Rev. (109), 1492.
- 7) Anderson, P.W. (1970), Comments Solid State Phys. (2), 193.
- 8) Anderson, P.W., Thouless, D.J., Abrahams, E. & Fisher, D.S. (1980), Phys. Rev. B (22), 8, p.3519.
- 9) Borland, R.E. (1961), Proc. Phys. Soc. (77), 705.
- 10) Borland, R.E. (1963), Proc. Phys. Soc. A (274), 529.
- 11) Borland, R.E. & N.F. Bird (1964) Proc. Phys. Soc., (83) 23.
- 12) Chaudhari, P. & H.U. Habermeier (1980) Phys. Rev. Lett. (44), 40
- 13) Czychołł, G. & B. Kramer (1980), Z. Physik B (39), 193.
- 14) Dolan, G.J. & D.D. Osheroff (1979) Phys. Rev. Lett. (43), 721
- 15) Erdos, P. & R.C. Herndon (1982), Adv. Phys (31), 2.
- 16) Giordano, N. (1980) Phys. Rev. B (22), 12
- 17) Ioffe & Regel (1960), Sov. Phys. JETP (33), 5.
- 18) Ishii, K. (1973), Prog. Theor. Phys. Suppl. (53), 77.
- 19) Kunz, H. & B. Souillard (1979), Proceedings of the International Colloquium on Random Fields: "Rigorous Results

in Statistical Mechanics and Quantum Field Theory".

- 20) Landauer, R. (1970), Phil. Mag. (21), 263.
- 21) Madelung, O. (1980), Introduction to Solid State Theory  
(Springer, New York)
- 22) Molchanov, S.A. (1978), Math. USSR Isvestija (12), 69.
- 23) Mott, N.F. & W.D. Twose (1961), Adv. Phys. (10), 107.
- 24) Mott, N.F. (1967), Adv. Phys. (16) 49.
- 25) Mott, N.F. & W.A. Davis (1979), Electronic Processes in  
Non-crystalline Materials, second edition (Clarendon Press,  
Oxford).
- 26) Prince, T. (1975), Trans. Math. Soft. (1), 4.
- 27) Rabinovitch, A. & J. Zak (1971) Phys. Rev. B (4), 8.
- 28) Soukoulis, C.M., J.V. Jose, E.P. Economou & P. Sheng (1983),  
Phys. Rev. Lett. (50) 10.
- 29) Stoll, E. & T. Schneider (1972), Solid St. Commun., (11)  
1327.
- 30) Thouless, D.J. (1977) Phys. Rev. Lett. (39), 1167
- 31) Wannier, G.H. (1960), Phys. Rev. (117), 432.
- 32) Visscher, W.M. & Gubernatis, J.M. (1980) Dynamical Properties  
of Solids (G.K. Horton & A.A. Maradudin, eds.) (North  
Holland, Amsterdam)

# APENDICE I

Se mostrará como por medio de la integración de la ecuación de Schrödinger se logra la condición sobre las derivadas de la función de onda a través de un potencial delta.

Se tiene

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} + \beta \delta(x-x_0) \psi = E \psi$$

cambiando signos e integrando de  $x_0 - \epsilon$  a  $x_0 + \epsilon$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \beta \delta(x-x_0) \psi = -E \psi$$

$$\int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \frac{d^2\psi}{dx^2} dx + \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} [E - \beta \delta(x-x_0)] \psi dx = 0$$

nos queda

$$\psi'_+(x_0+\epsilon) - \psi'_-(x_0-\epsilon) + \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} E \psi dx - \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \beta \delta(x-x_0) \psi dx$$

$\psi_+$  y  $\psi_-$  son las derivadas de la función de onda a la derecha y a la izquierda del potencial delta.

Tomando el límite cuando  $\epsilon$  tiende a cero, se tiene que

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[ \psi'_+(x_0+\epsilon) - \psi'_-(x_0-\epsilon) + \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} E \psi dx - \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \beta \delta(x-x_0) dx \right]$$

esto da

$$\psi'_+(x_0) - \psi'_-(x_0) - \beta \psi(x_0) = 0$$

## APENDICE II

Se muestran las siguientes propiedades de la matriz de transferencia:

$$M_{11}^* = M_{22}$$

$$M_{12}^* = M_{21}$$

$$\det M = |M_{11}|^2 - |M_{22}|^2 = 1$$

Para lograr lo anterior, se utilizan las propiedades de invariancia ante la inversión del tiempo y la conservación de la de la densidad de corriente. La primera propiedad proporciona junto con la  $\psi(x)$ , una solución  $\psi^*(x)$  para una  $k$  dada.

$\psi^*(x)$  se expresa con las mismas funciones  $\exp(jkx)$ ,  $\exp(-jkx)$  y su vector de coeficientes se denotará por  $b'$ . Entonces, para cualesquiera dos regiones  $i$  e  $i+1$

$$\vec{b}_A = \sigma_x \vec{b}_A^* \quad A = i, i+1 \quad (a)$$

donde

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (b)$$

Por medio de la ecuación

$$\vec{b}_{i+1} = M \vec{b}_i \quad (c)$$

se obtiene que

$$\vec{b}_{i+1}' = M \vec{b}_i'$$

ya que  $M$  no cambia al invertir el tiempo.

Al combinar esta expresión con la primera obtenemos que

$$\vec{b}_{i+1}' = \sigma_x^{-1} M \sigma_x \vec{b}_i^*$$

Por otro lado, conjugando (c) se obtiene

$$\vec{b}_{i+1}' = M^* \vec{b}_i^*$$

Entonces

$$M^* = \sigma_x^{-1} M \sigma_x$$

esto da  $M_{11}^* = M_{22}$ ,  $M_{12}^* = M_{21}$ .

La densidad de probabilidad de corriente esta dada por

$$j = i \left( \psi \frac{d\psi^*}{dx} - \psi^* \frac{d\psi}{dx} \right)$$

Esto se puede escribir como

$$j_A = 2k \vec{b}_A^+ \sigma_z \vec{b}_A \quad A = i, i+1$$

donde

$$\sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

y  $\vec{b}^+$  es la transpuesta del complejo conjugado de  $\vec{b}$ . Ya que se conserva la probabilidad de densidad de corriente, debe de ser la misma en las regiones  $i$  e  $i+1$ , por lo tanto

$$j_i = j_{i+1}$$

usando la expresion para  $j$  y la ecuacion (c) junto con la anterior se tiene

$$\vec{b}_i^+ \sigma_z \vec{b}_i = \vec{b}_{i+1}^+ \sigma_z \vec{b}_{i+1} = \vec{b}_i^+ M^+ \sigma_z M \vec{b}_i$$

por lo tanto

$$\sigma_z = M^+ \sigma_z M$$

De esto resulta que

$$|M_{11}|^2 - |M_{21}|^2 = 1$$

$$|M_{12}|^2 - |M_{22}|^2 = -1$$

$$M_{11} M_{12}^* - M_{21} M_{22}^* = 0$$

Si se combinan estas ecuaciones con las propiedades demostradas anteriormente resulta que

$$\det M = |M|^2 - |M|^2 = 1$$

Este resultado es valido solamente en el caso de  $F=0$ .

### APENDICE III

Se muestra a continuación el cambio de variable usado para transformar la ecuación de Schrödinger en la ecuación diferencial de Airy, para una cadena tipo Kronig-Penney con un campo eléctrico aplicado.

Se tiene que para una región entre potenciales delta

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - Fx \right) \psi = E\psi$$

haciendo  $\hbar = 2m = 1$ , queda

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} - Fx\psi = E\psi$$

Cambiando signos

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + (E + Fx)\psi = 0$$

Haciendo  $y = (E + Fx)$  y por regla de la cadena se tiene que

$$\frac{d}{dx} = \frac{dy}{dx} \cdot \frac{d}{dy} = F \cdot \frac{d}{dy}$$

$$\frac{d^2}{dx^2} = \frac{d}{dx} \left[ \frac{dy}{dx} \cdot \frac{d}{dy} \right] = \frac{d}{dx} \left( F \cdot \frac{d}{dy} \right) = F \cdot \frac{d}{dy} \cdot \frac{dy}{dx} \cdot \frac{d}{dy} = F^2 \frac{d^2}{dy^2}$$

de manera que

$$F^2 \frac{d^2\psi}{dy^2} + y\psi = 0$$

y

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} + \frac{y}{F^2} \psi = 0$$

Se propone ahora  $z = -y/a$  y una vez más, por regla de la cadena

$$\frac{d}{dy} = \frac{d}{dz} \frac{dz}{dy} = -\frac{1}{a} \frac{d}{dz}$$

$$\frac{d^2}{dy^2} = \frac{d}{dy} \left( -\frac{1}{a} \cdot \frac{d}{dz} \right) = \frac{1}{a^2} \frac{d^2}{dz^2}$$

sustituyendo

$$\frac{1}{a^2} \frac{d^2 \psi}{dz^2} - \frac{az}{F^2} \psi(z) = 0$$

$$\frac{d^2 \psi}{dz^2} - \frac{a^3 z}{F^2} \psi(z) = 0$$

Haciendo  $a^3 = F^2$

$$a = F^{2/3}$$

entonces

$$z = -y/F^{2/3}$$

Sustituyendo el valor de y

$$z = \frac{-E - Fx}{F^{2/3}}$$

lo que da

$$z = -EF^{-2/3} - F^{1/3}x$$

#### APENDICE IV

Se ha encontrado que el tiempo de dispersión inelástica desempeña un papel clave en la predicción de R. Thouless (1977), quien consideró originalmente la dispersión inelástica por fonones y por electrones. Para esta última, el tiempo de dispersión está dado por

$$\tau_i \sim T^{-\alpha} \quad (i)$$

con  $\alpha = 2$ . Para los fonones el tiempo de dispersión se obtiene también por medio de la ecuación anterior pero el valor de depende de si los fonones son tri o unidimensionales, y si el material es sucio o limpio. Determinar la dimensionalidad efectiva de los fonones no es un problema simple ya que en los experimentos actuales los alambres se encuentran adheridos a un sustrato. Para fonones tridimensionales en un material limpio ("limpio" quiere decir que la longitud de onda de un fonón térmico es mucho menor que el camino libre medio electrónico para la dispersión elástica), se espera que

$$\tau_i \sim T^{-3} \quad (ii)$$

donde el coeficiente de proporcionalidad depende de los parámetros del material pero no del tamaño del alambre. Para fonones unidimensionales en un material limpio se espera que

$$\tau_i \sim AT^{-1} \quad (iii)$$

Aquí se muestra explícitamente el factor A del coeficiente de proporcionalidad para hacer énfasis en que en este caso

también depende del área del alambre. En un material sucio (esto es, uno en que la longitud de onda de un fonón térmico es mucho mayor que el camino libre medio electrónico) los resultados para  $\tau_i$  son algo diferentes. En este caso Thouless encontró que para fonones tridimensionales

$$\tau_i \sim T^{-4} \quad (iv)$$

y para fonones unidimensionales

$$\tau_i \sim AT^{-2} \quad (v)$$

Desde la aparición del trabajo original de Thouless, se ha sugerido que la dispersión de los modos de tunelamiento en dos niveles que se cree se encuentra presente en todos los materiales amorfos puede ser importante en los presentes experimentos. Recientemente, ciertos autores han considerado la dispersión inelástica de los modos de tunelamiento y han usado datos experimentales para calcular el valor

$$\tau_i = (2.3 \times 10^{-9}) T^{-1} \text{ sec-K} \quad (vi)$$

para el vidrio metálico PdSiCu. La dependencia con la temperatura de  $\tau_i$ , para la dispersión por modos de tunelamiento de electrones, debe de ser la misma para todos los materiales. Aun cuando el factor numérico anterior sera diferente para materiales distintos, éste indica el orden de magnitud que se debe de esperar.

Tambien se debe hacer notar que se ha demostrado que la presencia de impurezas modificará la razón de dispersiones

electrón-electrón que se discutió anteriormente. Para un sistema unidimensional sucio se ha predicho que

$$\tau_i \sim AT^{-1/2} \quad (\text{vii})$$

El camino libre medio inelástico se determina primariamente por el mecanismo de dispersión que de el valor mínimo de  $\tau$ . Ya que es muy difícil hacer estimaciones cuantitativas de las magnitudes de los tiempos de dispersión inelástica que se mencionaron anteriormente (esto es, los coeficientes de proporcionalidad de las ecuaciones (i) a (vi)), no es posible anticipar que mecanismo sera el predominante en un experimento dado. Es necesario, entonces, recurrir a los resultados experimentales para inferir que mecanismo es el que predomina. Esto es posible ya que los diferentes mecanismos proporcionarán dependencias distintas con la temperatura y el área transversal.

## APENDICE V

Se incluye aquí una copia de los programas utilizados para calcular los resultados obtenidos en esta tesis.

Los programas fueron escritos en FORTRAN 77 debido a que este lenguaje tiene la capacidad de manejar números complejos en precisión doble y fueron corridos en una computadora PRIME 750.

```

C   PROGRAMA PARA CALCULAR EL COEFICIENTE DE TRANSMISION Y REFLEXION
C   DE UNA HAZ DE ELECTRONES A TRAVES DE UNA CADENA DE POTENCIALES
C   DELTA TIPO KRONIG-PENNEY.
      COMPLEX*16 EXPMAT(2,2), TEMPMT(2,2), ENDMAT(2,2), ARG, ARG1, JK1,
      .          DET, TIMMAT(2,2), TEMPMO(2,2), BETAMT(2,2), AUXMT(2,2),
      .          AUXMT1(2,2)
      REAL*8 TT, BETA(1600), SUM, Q, RR, S, KO, L1, TAVER
      INTEGER*4 IOSTAT, I, J, K, L, M

C   SE ESTABLECEN LAS CONSTANTES DEL PROGRAMA

      Q = DSQRT(12.D0)      /* VALOR DEL DESORDEN
      KO = DSQRT(5.D0)      /* ENERGIA DEL HAZ INCIDENTE
      OPEN (12, FILE='CHAINS.OUTPUT', ERR=2000, IOSTAT=LSTAT)
      OPEN (11, FILE='CHAINS.FINAL ', ERR=2000, IOSTAT=LSTAT)
      DO 999 L=50,500,50
      SUM = 0.0 D00
      DO 888 J = 1, 200

C   SE GENERAN LAS ALTURAS DE LAS DELTAS

      DO 777 K = 1, L+1
      BETA(K) = (GGUBFS(65537.D0)-.5D0) * Q
777  CONTINUE
      AUXMT(1,1) = DCMPLX(1.0,0.0)
      AUXMT(2,1) = DCMPLX(0.0,0.0)
      AUXMT(1,2) = DCMPLX(0.0,0.0)
      AUXMT(2,2) = DCMPLX(1.0,0.0)

C   SE MULTIPLICAN LAS MATRICES

      DO 666 M = L, 1, -1
      L1 = DBLE(M)
      ARG = DCMPLX(0.0, KO*L1)
      ARG1 = DCONJG(ARG)
      JK1 = DCMPLX(0.0, KO)
      EXPMAT(1,1) = CDEXP(ARG1)/2.D0
      EXPMAT(2,1) = CDEXP(ARG)/2.D0
      EXPMAT(1,2) = EXPMAT(1,1)/JK1
      EXPMAT(2,2) = -EXPMAT(2,1)/JK1
      BETAMT(1,1) = 1.0D0
      BETAMT(2,1) = DCMPLX(BETA(M+1), KO)
      BETAMT(1,2) = BETAMT(1,1)
      BETAMT(2,2) = DCONJG(BETAMT(2,1))
      CALL CC(TEMPMT, EXPMAT, BETAMT)
      TIMMAT(1,1) = CDEXP(ARG)
      TIMMAT(2,1) = 0.0D0
      TIMMAT(1,2) = 0.0D0
      TIMMAT(2,2) = CDEXP(ARG1)
      CALL CC(TEMPMO, TEMPMT, TIMMAT)
      CALL CC(AUXMT1, AUXMT, TEMPMO)
      AUXMT(1,1) = AUXMT1(1,1)
      AUXMT(2,1) = AUXMT1(2,1)
      AUXMT(1,2) = AUXMT1(1,2)

```

```

666  AUXMT(2,2) = AUXMT1(2,2)
      CONTINUE
      ENDMAT(1,1) = DCMPLX (1.D0, -BETA(1)/(2.*K0))
      ENDMAT(2,1) = -BETA(1)/(2.*JK1)
      ENDMAT(1,2) = BETA(1)/(2.*JK1)
      ENDMAT(2,2) = DCONJG(ENDMAT(1,1))
      CALL CC (AUXMT1, AUXMT, ENDMAT)
      CALL CDET(DET, AUXMT1)

C
C  CALCULOS DEL COEFICIENTE DE TRANSMISION Y EL DE REFLEXION.
C

      TT = (CDABS(DET)**2)/(CDABS(AUXMT1(2,2))**2)
      RR = CDABS(AUXMT1(2,1)/AUXMT1(2,2))**2
      S = TT + RR
      S1 = DLOG(TT) * (-1.0)
      WRITE (12,18) L, TT, RR, S, S1
      SUM = SUM + S1
888  CONTINUE

C
C  CALCULO DEL PROMEDIO DE -LN T SOBRE EL NUMERO DE CADENAS
C  TAVER = SUM/200.D0
C

      WRITE(11,19) L, TAVER
999  CONTINUE
      CLOSE(12, ERR=2000, IOSTAT=LSTATV)
      CLOSE(11, ERR=2000, IOSTAT=LSTATV)
      18  FORMAT (15,4(2X,D13.5))
      19  FORMAT ('L= ',15,2X,'<-LN T>= ',D13.6)
      CALL EXIT
2000 OPEN(11, FILE='ERRFIL', ERR=2001, IOSTAT=LSTAT)
      WRITE(11,20)
      20  FORMAT ('ERROR DE ARCHIVO')
2001 CALL EXIT
      END

C
C  SUBROUTINAS PARA MULTIPLICAR MATRICES
C

      SUBROUTINE CC(A,B,C)
      COMPLEX*16 A(2,2), B(2,2), C(2,2)
      DO 60 I=1,2
      DO 60 J=1,2
      A(I,J) = DCMPLX(0.0, 0.0)
      DO 60 K=1,2
60  A(I,J) = A(I,J) + B(I,K)*C(K,J)
      RETURN
      END
      SUBROUTINE CDET(D,A1)
      COMPLEX*16 D,A1(2,2)
      D = A1(1,1)*A1(2,2) - A1(1,2)*A1(2,1)
      RETURN
      END

```

C PROGRAMA PARA CALCULAR EL PROMEDIO DEL COEFICIENTE DE TRANSMISION  
C A TRAVES DE UNA CADENA DE POTENCIALES DELTA CON UN CAMPO ELECTRICO  
C APLICADO.

COMPLEX\*16 EXPMAT(2,2), TEMPMT(2,2), ENDMAT(2,2), ARG, ARG1, JK1,  
DET, TIMMAT(2,2), TEMPM0(2,2)  
REAL\*8 TT, STMAT(2,2), ALFA, PI, TRANSM(2,2), CONST, BETA(1600),  
Q, AIRMAT(2,2), RR, S, AI, BI, AID, BID, K0, K1, F, L1,  
TAVER, SUM, Z  
INTEGER\*4 IOSTAT, J, K, L, M

C  
C SE DEFINEN LAS CONSTANTES DE LOS CALCULOS  
C

Q = DSQRT(12.D0) /\* VALOR DEL DESORDEN  
K0 = DSQRT(5.D0) /\* ENERGIA DEL HAZ  
PI = 4. \* DATAN(1.0D0)  
F = 0.05D0 /\* VALOR DEL CAMPO ELECTRICO  
ALFA = -(F \*\* (1.D0/3.D0))  
CONST = PI/ALFA  
OPEN (12, FILE='CHAINS.OUTPUT', ERR=2000, IOSTAT=LSTAT)  
OPEN (11, FILE='CHAINS.FINAL ', ERR=2000, IOSTAT=LSTAT)  
DO 999 L=100,1500,200  
SUM = 0.0 D00  
DO 888 J = 1, 500

C  
C SE GENERAN LOS VALORES DE LAS ALTURAS DE LAS DELTAS.  
C

DO 777 K = 1, L+1  
BETA(K) = (GGUBFS(65537.D0)-.5D0) \* Q  
777 CONTINUE  
L1 = DBLE(L)  
K1 = DSQRT(F\*L1 + (K0\*K0))  
ARG = DCMPLX(0.0, K1\*L1)  
ARG1 = DCONJG(ARG)  
JK1 = DCMPLX(0.0, K1)  
EXPMAT(1,1) = CDEXP(ARG1)/2.D0  
EXPMAT(2,1) = CDEXP(ARG)/2.D0  
EXPMAT(1,2) = EXPMAT(1,1)/JK1  
EXPMAT(2,2) = -EXPMAT(2,1)/JK1  
Z = ALFA\*L1 - (K0\*K0)\*F\*\*(-2.D0/3.D0)

C  
C SE LLAMA A LA SUBROUTINA QUE GENERA LAS FUNCIONES DE AIRY  
C

CALL AIRYS(Z,0,0,AI,BI,AID,BID)  
STMAT(1,1) = AI  
STMAT(2,1) = ALFA\*AID + BETA(L+1)\*AI  
STMAT(1,2) = BI  
STMAT(2,2) = ALFA\*BID + BETA(L+1)\*BI  
CALL CR(TEMPMT,EXPMAT,STMAT)

C  
C SE MULTIPLICAN LAS MATRICES DE IZQUIERDA A DERECHA  
C

DO 666 M=L-1, 1, -1  
Z = ALFA\*DBLE(M) - (K0\*K0)\*F\*\*(-2.D0/3.D0)  
CALL AIRYS(Z,0,0,AI,BI,AID,BID)

```

TRANSM(1,1) = (ALFA/PI) - BETA(M+1)*AI*BI
TRANSM(2,1) = BETA(M+1) * AI * AI
TRANSM(1,2) = -BETA(M+1) * BI * BI
TRANSM(2,2) = (ALFA/PI) + BETA(M+1) * AI * BI
CALL CR(TIMMAT, TEMPMT, TRANSM)
CALL MULTCO(TEMPMT, TIMMAT, CONST)
666  CONTINUE
Z = -(K0*K0)*F**(-2.DO/3.DO)
CALL AIRYS(Z,0,0,AI,BI,AID,BID)
AIRMAT(1,1) = ALFA * BID
AIRMAT(2,1) = -ALFA * AID
AIRMAT(1,2) = -BI
AIRMAT(2,2) = AI
CALL MULTCO(TIMMAT, AIRMAT, CONST)
CALL CR(TEMPMO, TEMPMT, TIMMAT)
ENDMAT(1,1) = 1.DO
ENDMAT(2,1) = DCMPLX(BETA(1), K0)
ENDMAT(1,2) = 1.DO
ENDMAT(2,2) = DCONJG(ENDMAT(2,1))
CALL CC(TEMPMT, TEMPMO, ENDMAT)
CALL CDET(DET, TEMPMT)

C
C  CALCULO DE LOS COEFICIENTES DE TRANSMISION Y REFLEXION
C

TT = (K1/K0)*(CDABS(DET)**2)/(CDABS(TEMPMT(2,2))**2)
RR = CDABS(TEMPMT(2,1)/TEMPMT(2,2))**2
S = TT + RR
S1 = DLOG(TT)* (-1.0D0)
WRITE (12,18) L, TT, RR, S, S1
SUM = SUM + S1
888  CONTINUE

C
C  PROMEDIO DE -LN(T) SOBRE EL NUMERO DE CADENAS.
C

TAVER = SUM/200.DO
WRITE(11,19) L, TAVER
999  CONTINUE
CLOSE(12, ERR=2000, IOSTAT=LSTATV)
CLOSE(11, ERR=2000, IOSTAT=LSTATV)
18  FORMAT (I5,4(2X,D13.5))
19  FORMAT ('L= ',I5,2X,'<-LN T>= ',D13.6)
CALL EXIT
2000 OPEN(11, FILE='ERRFIL', ERR=2001, IOSTAT=LSTAT)
WRITE(11,20)
20  FORMAT ('ERROR DE ARCHIVO')
2001 CALL EXIT
END

C
C  SUBROUTINAS PARA MULTIPLICACION DE MATRICES
C

SUBROUTINE MULTCO (A,B,CON)
COMPLEX*16 A(2,2), B(2,2)
REAL*8 CON

```