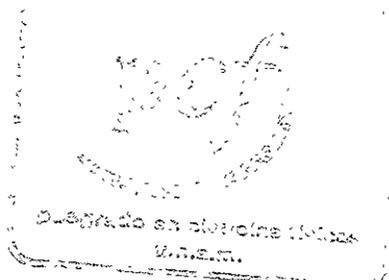


00362



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA  
DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS



ESTABILIDAD DEL MAPEO DE LA TRAZA  
Y LOCALIZACION EN UNA CADENA  
UNIDIMENSIONAL DE HARPER

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE  
MAESTRO EN CIENCIAS (FISICA)  
P R E S E N T A  
SINHUE GARCIA FLORES

ASESOR: DR. GERARDO GARCIA NAUMIS



2001



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Universidad Nacional Autónoma de México

ESTABILIDAD DEL MAPEO DE LA  
TRAZA Y LOCALIZACIÓN EN UNA  
CADENA UNIDIMENSIONAL DE  
HARPER

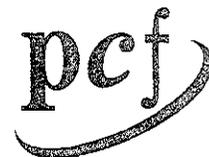
TESIS

que para obtener el título de  
Maestro en Ciencias (Física)

Presenta:  
Sinhué García Flores



Asesor: Dr. Gerardo García Naumis  
Ciudad Universitaria, México, D. F. Abril del 2001.



posgrado en ciencias físicas  
u n a m

OFICIO PCF/019/2001  
ASUNTO Designación de jurado

ING. LEOPOLDO SILVA GUTIÉRREZ  
DIRECTOR GENERAL DE LA ADMINISTRACIÓN ESCOLAR  
UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
P R E S E N T E

At'n: Biol. Francisco Javier Incera Ugalde  
Jefe de la Unidad de Administración del Posgrado

El Comité Académico del Posgrado en Ciencias Físicas en su sesión del 28 de noviembre de 2000 ha designado como Jurado del Fis. **Sinhué García Flores** con número de cuenta 76604557 y número de expediente 3932038, para dictaminar sí el trabajo desarrollado como tesis titulado: "*Estabilidad del mapeo de la traza y localización en una cadena unidimensional de Harper*", dirigida por el Dr. Gerardo García Naumis, tiene los méritos para obtener el grado de *Maestro en Ciencias (Física)* conforme al plan de estudios 462

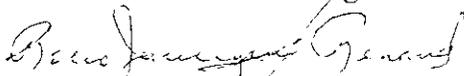
PRESIDENTE:	DRA JULIA TAGÜEÑA PARGA
SECRETARIO:	DR GERARDO GARCÍA NAUMIS
VOCAL:	DR. ALFREDO GÓMEZ RODRÍGUEZ
VOCAL:	DR. MANUEL TORRES LABANSAT
VOCAL:	DR. FRAY DE LANDA CASTILLO
SUPLENTE:	DR. GUILLERMO AGUILAR SAHAGÚN
SUPLENTE:	DR. RAFAEL DEL RÍO CASTILLO

Atentamente

"POR MI RAZA HABLARÁ EL ESPÍRITU"

Ciudad Universitaria, D F., a 15 de enero de 2001

La Coordinadora del Posgrado en Ciencias Físicas

  
Dra. Rocío Jáuregui Renaud

c.c.p.- Cada miembro del sínodo

c.c.p.- Interesado.

c.c.p - Expediente

# Índice

Introducción . . . . .	5
<b>1 Antecedentes</b>	<b>7</b>
1.1 Propiedades electrónicas y transiciones de localización . . . . .	7
1.1.1 Teorema de Bloch . . . . .	7
1.1.2 Transición de Anderson . . . . .	11
1.1.3 Teoría de escalamiento . . . . .	13
1.1.4 Escalamiento . . . . .	15
1.1.5 Cuasicristales . . . . .	19
<b>2 Localización de Sistemas Unidimensionales</b>	<b>22</b>
2.1 Ecuación de enlace fuerte . . . . .	22
2.2 Coeficientes de Lyapunov . . . . .	23
2.3 Localización y estabilidad del mapeo de la traza . . . . .	28
2.3.1 Escalamiento de bandas . . . . .	28
2.3.2 Estabilidad del mapeo de la traza . . . . .	29
2.4 Cadena Periódica con una impureza . . . . .	33
<b>3 Localización y espectro de la ecuación de Harper</b>	<b>39</b>
3.1 Dedución de la ecuación de Harper . . . . .	39
3.2 Cálculo del espectro . . . . .	41
3.3 Estabilidad en la ecuación de Harper . . . . .	43

4	Defectos en la cadena de Harper	55
4.1	Defectos . . . . .	55
4.2	Funciones de Green . . . . .	55
4.3	Sistemas con impurezas . . . . .	59
4.4	Inestabilidad en la ecuación de Harper debido a Impurezas . . . . .	62
5	Conclusiones	64
A	Apéndice	67

# Agradecimientos

*Pensaba que ninguna necesidad  
tenía nadie de ayudar a otros,  
a ver mas claro o a ser más listo.*

Ñ. Ñesse.

Sin embargo, ustedes me han brindado la oportunidad de acercarme a la investigación científica. Con todos sus riesgos y aciertos.

Deseo agradecer a mi asesor de tesis:

**Dr. Gerardo García Naumis** por su amable disposición, paciencia e interés, por dirigir esta tesis.

También al honorable jurado:

**Dra. Julia Tagüeña Parga.**

**Dr. Alfredo Gómez Rodríguez**

**Dr. Manuel Torres Labansat.**

**Dr. Fray de Landa Castillo.**

**Dr. Guillermo Aguilar Sahagún.**

**Dr. Rafael del Rio.Castillo**

Por su dedicación en la revisión y sugerencias realizadas para el mejoramiento y la finalización de este trabajo.

A la Escuela Nacional Preparatoria

“**GabinoBarreda**” plantel 1 UNAM.

Por la licencia otorgada para realizar esta tesis

Y finalmente a la **UNAM.**

Por su gratuidad

A la cual le debo mi formación académica.

# Dedicatoria

*Por que en realidad olvidamos.*

*Olvidamos durante días, meses y años.*

*Olvidamos a nuestros padres, a los amigos.*

*Sin embargo, estamos unidos a ellos*

*Y lo sabemos si los perdemos,*

*Si corremos el riesgo de perderlos.*

A mi mamá: **Isabel Flores Alquicira**, (q.e.d)

Lo que recuerdo, proviene de alguna manera de ti.

A mi hermano y su familia, **Manrique, Eduardo, Laura y Rosa**

Por estar juntos.

A mis compañeros; **Víctor Ortega, F. Javier Becerra, Daniel Vázquez, Oliverio Jitrik, Jesús Ortega, Jesús, Hortensia Moreno, Fidel Alquicira.**

A mi amiga **Martha Molero Milo** y su familia, **Alicia, Roberto y Silvia.**

A mis compañeros de cubículo **Aurora, Adrián, Apolinar y Jorge**

Por su amistad y su palabras de aliento.

Desearía no haber tenido algo que ver con ella.

(accica de la mecánica cuántica. Schrödinger)

Y ahora siento. que si no camino a tu lado, no ticne sentido caminar,

pero, sin embargo, si tu no estas aqui, no quiero estar así,

no se que diablos hago amandote..

# Introducción

El objetivo fundamental de este trabajo de tesis, es analizar diversos criterios para estudiar las propiedades de localización electrónica en sistemas desordenados, periódicos y cuasiperiódicos. Como se verá, los métodos usados tradicionalmente presentan algunos problemas, por lo cual se desarrolla un nuevo método basado en las propiedades de escalamiento de las bandas electrónicas. El método se aplicará a la ecuación de Harper en una dimensión debido a que este sistema presenta diversos tipos de localización electrónica.

Con el objeto de enmarcar el presente trabajo, la estructura de la tesis tiene el siguiente formato: en el capítulo 1 se da una introducción general sobre el tema a desarrollar.

En el capítulo 2, se realizará una breve revisión de los métodos usuales de análisis para encontrar propiedades de localización y el espectro de energías. Para ello se utiliza el método de la matriz de transferencia para cadenas en una dimensión; también se presenta una discusión sobre el llamado exponente de Lyapunov, que es utilizado para medir la longitud de localización de las funciones de onda. En particular, se mostrará que estos exponentes presentan algunos problemas prácticos, aun cuando su uso está muy extendido en la literatura sobre el tema. Por ello, en el capítulo 2 se introduce el escalamiento de bandas como una herramienta de diagnóstico para encontrar la localización y eventualmente se verá que esto lleva a una conexión natural con la teoría de sistemas no-lineales.

En el capítulo 3, se desarrolla un breve resumen de las propiedades de la ecuación de Harper en función de sus parámetros, así como de su espectro de energías. También se aplicará la técnica de escalamiento al estudio de propiedades de localización, en particular se estudiarán

los estados críticos o fractales que no han sido caracterizados adecuadamente con el método de los coeficientes de Lyapunov. Se probarán los métodos desarrollados en el capítulo 2 para estudiar propiedades de localización mediante el desarrollo de programas computacionales, y se deducirán qué características tienen los espectros de energía en tres regiones distintas dadas por el parámetro  $\lambda$  de la ecuación de Harper. Se compararán los resultados obtenidos mediante esta técnica con los expuestos en la literatura.

El capítulo 4 contiene otra aplicación de esta nueva técnica, consistente en el problema de una cadena de Harper con una impureza. Se verá que el espectro es muy inestable al introducir una impureza. Para entender el origen de esta inestabilidad, así como la aparición de estados localizados, utilizamos una técnica perturbativa para las funciones de Green. En dicho capítulo se estudian dichas funciones y la técnica de perturbaciones mencionada.

Finalmente, se describen las conclusiones obtenidas de los resultados. Se discutirá el alcance y proyecciones de esta técnica y su relación con los parámetros de localización.

Además, también se incluyen en el apéndice los programas para obtener el espectro de energías y el cálculo de la inestabilidad al introducir la impureza.

# Capítulo 1

## Antecedentes

### 1.1 Propiedades electrónicas y transiciones de localización

Para entender muchas de las propiedades físicas de un sólido cristalino o amorfo, es necesario estudiar el comportamiento de los electrones en estos materiales. La mayoría de los fenómenos electrónicos son intrínsecos a la mecánica cuántica, pero los detalles dependen de la estructura del material. Por ejemplo, el grafito y el diamante están ambos formados por átomos de carbono, pero sus propiedades físicas difieren de manera fundamental, debido al ordenamiento geométrico de los átomos (así, el diamante es transparente y el grafito tiene un brillo metálico). En general, atendiendo a su estructura los materiales se dividen en cristales, amorfos o cuasicristales. Los cristales tienen una estructura periódica, los amorfos sólo tienen orden de corto alcance [1], y los cuasicristales son estructuras intermedias que presentan orden cuasiperiódico [2].

#### 1.1.1 Teorema de Bloch

Las propiedades electrónicas para un sólido cristalino están dadas por el teorema de Bloch [2], el cual permite introducir la teoría de bandas, tal como se explicará a continuación.

Dicha teoría de bandas es la teoría de electrones que no interactúan entre sí, lo cual supone la existencia de un conjunto de estados estacionarios disponibles para cualquier electrón, y que todos los electrones están distribuidos a lo largo de estos estados de acuerdo con la estadística de

Fermi-Dirac [3]. En una dimensión, estos estados están dados por la ecuación de Schrödinger,

$$H\Psi_{nk} = E_{nk}\Psi_{nk},$$

en la cual el operador hamiltoniano  $H$  incluye un término de energía cinética electrónica  $p^2/2m = -(\hbar/2m)(d^2/dx^2)$ , siendo  $m$  la masa del electrón y  $\hbar$  la constante de Planck, y un término  $V(x)$  de potencial cristalino, el cual está pensado para contar la interacción de un electrón con los núcleos atómicos en el cristal y  $\Psi_{nk}$  es la función de onda de un electrón. Si  $V(x)$  es periódico (por lo tanto, también lo es  $H$ ) en el espacio, con la periodicidad traslacional de un cristal, es decir,  $V(x+a) = V(x)$ , donde  $a$  es la constante de la red, entonces el teorema de Bloch dice que las funciones de onda son funciones de la forma,

$$\Psi_{nk}(x) = e^{ikx}u_{nk}(x).$$

donde la función  $u_{nk}(x)$  es periódica,  $u_{nk}(x+a) = u_{nk}(x)$ , y modulada por la onda plana  $e^{ikx}$ . El número cuántico característico de cada función de onda, es el vector de onda  $\mathbf{k}$  ( $-\pi/a < k < \pi/a$ ), un índice  $n$  de la banda entera, y el valor propio de la energía  $E_{nk}$  o  $E_n(\mathbf{k})$ . La forma funcional de la dependencia de  $E_n(\mathbf{k})$  sobre el momentum del cristal ( $\hbar\mathbf{k}$ ) para cada banda  $n$ , especifica la estructura de la energía electrónica de bandas de un sólido cristalino. A esta forma funcional se le conoce como relación de dispersión. Cada banda puede acomodar  $2N$  electrones, donde  $N$  es el número de celdas unitarias en el cristal y el factor 2 aparece debido a la degeneración del espín.

En la teoría de electrones en cristales de Bloch, un sólido es un aislante si cada banda está completamente ocupada o vacía, y es un metal si una banda está parcialmente ocupada. A temperatura cero, el potencial químico puede identificarse con la energía de Fermi ( $E_F$ ), y todos los estados con energías más bajas que  $E_F$  están ocupados por electrones, mientras que todos los estados colocados más alto que  $E_F$  están vacíos. Para un metal, la estructura de bandas y el número de electrones es tal que  $E_F$  queda dentro de una banda, la cual está sólo parcialmente ocupada. Para un aislante,  $E_F$  queda en el borde de bandas, junto a una banda prohibida de energía que separa la banda más alta quedando ocupada (Valencia) y la banda más baja quedando vacía (Conducción). Existen otros materiales que presentan un comportamiento

que los sitúa entre los metales y los aislantes. Dichos materiales, llamados semiconductores, tienen un llenado de bandas muy similar al que ocurre en los aislantes, sin embargo, su brecha energética es pequeña comparada con la brecha de los aislantes. De hecho, el ancho de la brecha es de orden  $kT$ , donde  $k$  es la constante de Boltzmann y  $T$  es una temperatura mayor que cero. Entonces, a temperaturas finitas, algunos electrones pasan a la banda de conducción, mientras que algunos estados de la banda de valencia se desocupan, dando lugar a una conducción débil. Debe hacerse notar que a temperatura cero, los semiconductores son aislantes, porque en ese caso la banda de valencia queda totalmente llena, y sólo puede ser desocupada mediante una activación térmica.

La transición de metal a aislante ( $M \leftrightarrow A$ ) puede ilustrarse por una estructura de banda esquemática mostrada en la Fig. 1-1.

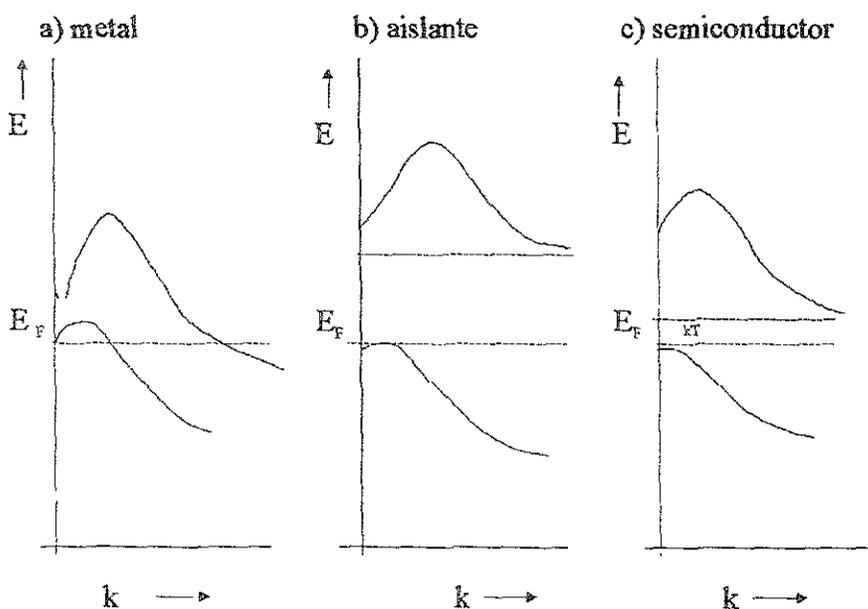


Figura 1-1: En la teoría de Bloch para electrones en cristales. Una transición de metal a aislante puede ocurrir vía un cambio en la estructura de bandas, en la cual el traslape se remueve entre las bandas completas o vacías.

Un material cristalino, compuesto de átomos con un número par de electrones, que sean

suficientes para llenar un número entero de bandas, está cerca del caso límite en el que las bandas limitan el nivel de Fermi, por lo cual, o bien se traslapan en energía como en la Fig. 1-1a, o se pierde el traslape (como en la Fig. 1-1b), por lo tanto está cerca de una transición metal-aislante, la cual podría inducirse por un pequeño cambio de presión o temperatura.

En este tipo de transición metal-aislante, las funciones de onda electrónicas en la vecindad de  $E_F$  corresponden a *estados extendidos*, tales funciones de onda tienen una amplitud apreciable por todo el cristal. Para los cristales, éstas son funciones de Bloch y tienen la forma bosquejada en la Fig. 1-2. La línea sólida en la Fig. 1-2. representa la parte real (o parte imaginaria) de  $\Psi$ , mientras la línea punteada indica la envolvente de la onda plana correspondiente al vector de onda con valor propio  $k$ .

Para sólidos amorfos,  $k$  no es un buen número cuántico, debido a la ausencia del orden de largo alcance. La validez de las soluciones de las funciones de Bloch depende de la presencia del orden cristalino. La teoría de bandas colapsa para sólidos amorfos, ya que aún si están presentes estados electrónicos extendidos y sean importantes, ellos no pueden ser caracterizados por los valores cuantizados del vector de onda como en un cristal. En este caso, no existe ningún teorema general equivalente al de Bloch, sino que sólo existen algunos modelos que ilustran las propiedades electrónicas en materiales desordenados. De estos modelos, el más conocido es el de Anderson, que da lugar a una transición metal $\leftrightarrow$ aislante.

La transición correspondiente al lado aislante, no tiene estados extendidos en bandas ocupadas como en un tipo de transición de Bloch en cristales, pero en cambio, tiene estados electrónicos los cuales son localizados

El significado de un estado localizado está indicado por la Fig. 1-2b. La función de onda está concentrada cerca de un centro, compuesto sólo de pocos átomos y tiene amplitud despreciable en cualquier otra parte del sólido. Lejos de la pequeña región que contiene esencialmente toda su probabilidad integrada  $\int |\Psi|^2 dr$ , la amplitud espacial decae en forma exponencial con la distancia. Este comportamiento se muestra en la línea punteada de la envolvente de la función de onda en la Fig. 1-2b, que decrece como  $e^{-\gamma R}$  en una distancia grande  $R$  desde el centro de localización: un parámetro importante para un estado localizado dado, es conocido como la *longitud de localización inversa*  $\equiv \gamma$ .

En sólidos cristalinos, los estados localizados son introducidos frecuentemente por impurezas

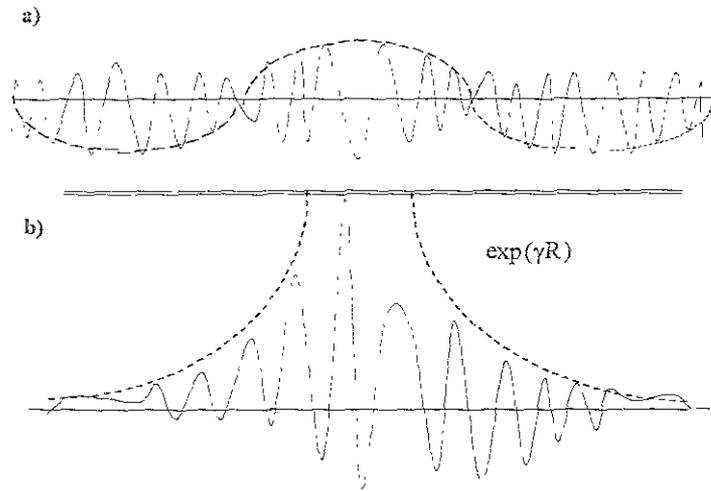


Figura 1-2: a) La función de onda para un estado extendido tipo Bloch. b) Función de onda para un estado localizado.

químicas. Un ejemplo es el caso de impurezas donantes en cristales semiconductores, tal como los átomos de fósforo en un silicio cristalino, en el cual los estados localizados están asociados a energías discretas dentro del espectro de energías prohibidas del cristal. Estos estados son extrínsecos al sólido, (como en el cristal perfecto, sin impurezas químicas o defectos estructurales), cuyos estados intrínsecos son funciones extendidas de Bloch [3].

### 1.1.2 Transición de Anderson

Uno de los modelos más sencillos y que captura la física fundamental de los efectos del desorden en un amorfo, es el llamado modelo de Anderson. Este modelo, propuesto en 1958, y que le valió el Premio Nobel a su autor [4], consiste en estudiar el problema de un electrón en una red bajo la aproximación de amarre fuerte, pero suponiendo un potencial aleatorio en cada sitio de la red.

En la Fig. 1-3b los pozos del potencial representan los sitios atómicos. La profundidad de los pozos varía de sitio a sitio de una manera aleatoria, siguiendo una distribución de probabilidad uniforme. Así, el potencial desordenado sirve como modelo del sólido amorfo, porque la característica del desorden de un sólido es que todos los sitios son diferentes.

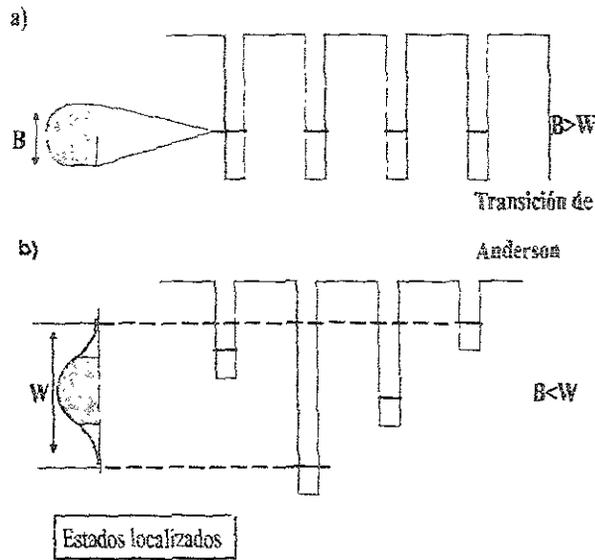


Figura 1-3: Esquema del potencial atómico en: a) un material ordenado, y b), para un amorfo donde ocurre la transición de Anderson.

En lugar de un pozo sencillo profundo como sucede en el caso cristalino de la Fig. 1-3a, en el amorfo hay una distribución de pozos profundos, como en el caso esquematizado en la Fig. 1-3b.

El ancho de esta distribución, especifica el intervalo de energía de las fluctuaciones espaciales de la energía potencial vista por un electrón en los sitios atómicos, y se denota por  $W$ .  $B$  es el ancho de banda del cristal en ausencia del desorden, y tiene que ver con la energía cinética de los electrones. La competencia entre la energía cinética y potencial influye sobre los estados electrónicos, que reside en la relación  $W/B$ . Cuando el ancho de desorden  $W$  excede el traslape del ancho de banda  $B$ , tiene lugar la localización debida al desorden en el potencial atómico .

Anderson en 1958 [4] muestra que cuando el *parámetro adimensional de desorden*  $W/B$  es suficientemente grande, todos los estados en la banda de valencia electrónica están localizados,

$$W > B \text{ (localización de desorden inducido).}$$

La localización de Anderson del electrón libre completamente independiente aparece como

consecuencia del desorden, y de ahí viene su gran importancia, ya que aún en la hipotética ausencia de dispersión de los electrones por colisiones, no habría conducción por el sólo hecho del desorden.

La existencia de la transición de Anderson no sólo depende del grado de desorden sino también de la dimensionalidad del sistema. De hecho, de un modo general puede decirse que en una dimensión todos los estados están localizados aún con una cantidad muy pequeña de desorden [4]. En tres dimensiones existe un valor crítico del desorden para el cual aparece la transición, y si es suficientemente grande, todos los estados en la banda de valencia se vuelven localizados. En dos dimensiones se cree que todos los estados son localizados, aunque de manera débil para desorden pequeño [5].

Todas estas conclusiones, están basadas en la teoría de escalamiento, propuesta en 1979 por Abrahams, Anderson y Ramakrishnan [5], y que se expondrá a continuación por ser relevante para el desarrollo ulterior del método desarrollado en este trabajo.

### 1.1.3 Teoría de escalamiento

La teoría de escalamiento, emplea una reformulación del modelo de Anderson, donde en lugar de considerar un sólo sitio atómico, ahora la unidad básica es un bloque de volumen  $L^d$ , que contiene muchos sitios.

El sólido se forma pegando estos bloques, acoplados cada uno con otro. Las dos energías  $W$  o  $B$  características del modelo de Anderson, son reemplazadas por energías características, las cuales se miden respectivamente en el desorden dentro de un bloque y en el acoplamiento electrónico entre los bloques adyacentes.

$W$  se sustituye por  $\Delta E$  que es el *promedio de espaciamiento entre los niveles de energía dentro de un bloque*. La conexión cualitativa entre  $\Delta E$  y  $W$  esta dada en términos de densidad de estados  $\eta(E)$ , es decir, el número de estados que hay en el intervalo  $[E, E + dE]$ . Este número de estados depende de la forma en que están distribuidas en promedio las energías permitidas por unidad de volumen. El promedio de espaciamientos  $\Delta E$ , que hay en el ancho de la distribución  $W$  para un número de estados  $N$ , es por lo tanto,

$$\Delta E = \frac{W}{N},$$

y la unidad básica de volumen del bloque es  $L^d$ , de este modo la densidad de estados es, [6]

$$\eta(E) = \frac{1}{L^d \Delta E}. \quad (1.1)$$

Ahora en el sitio de acoplamiento entre bloques, tenemos otra energía  $\delta E$  que es *una medida de la sensibilidad de un estado dentro de un bloque, para un cambio en las condiciones de frontera*, en la interfaz de dos bloques adyacentes.

Un argumento heurístico, basado en el principio de incertidumbre se delinea en las siguientes ecuaciones, que conectan  $\delta E$  a la conductividad  $\sigma$  en un límite macroscópico. Empezamos observando el principio de incertidumbre para las variables energía y tiempo

$$\delta E \approx \frac{\hbar}{t_D}, \quad (1.2)$$

donde  $t_D$  es en este caso, el tiempo de difusión del paquete de onda de un extremo a otro del bloque. El principio de incertidumbre nos proporciona un cambio característico de tamaño  $\hbar/t_D$  en la energía debido a la difusión, y por lo tanto da una idea del corrimiento en energía debido al cambio en las condiciones de frontera del bloque.

Por otra parte, el paquete de ondas del electrón, al difundirse en un bloque de tamaño  $L$ , llegará a la frontera en un tiempo  $t_D$  dado por la ecuación

$$t_D \approx \frac{L^2}{D}, \quad (1.3)$$

donde  $D$  es la constante de difusión del paquete.

La ecuación para la conductividad  $\sigma$  y la difusión  $D$  está dada por la relación de Einstein

$$\sigma \approx e^2 \eta(E) D, \quad (1.4)$$

siendo  $\eta(E)$  la densidad de estados y  $e$  la carga del electrón. Combinando las tres últimas ecuaciones, obtenemos la siguiente expresión

$$\delta E \approx \frac{\sigma \hbar}{e^2 L^2 \eta(E)}.$$

entonces

$$\frac{\Delta E}{\delta E} \approx \frac{e^2}{\sigma \hbar L^{d-2}}$$

La relación  $\Delta E/\delta E$  es ahora una medida de la *fuerza del desorden*, en analogía con la relación  $W/B$  en el modelo tradicional de Anderson. En un espectro donde los estados son extendidos, al cambiar las condiciones de frontera existe un corrimiento grande de las energías propias de los estados con respecto al espaciamento promedio, es decir,  $\delta E > \Delta E$ , mientras que si los estados son localizados, los eigenestados casi no sienten los cambios en la frontera, por lo cual el corrimiento es pequeño  $\delta E < \Delta E$ .

La condición de localización  $\delta E < \Delta E$  puede interpretarse como la desigualdad entre los niveles de energía de bloques adyacentes; si se excede el alcance en el que los cambios en la interfaz tengan efecto, se hace imposible la alineación de niveles y por lo tanto el transporte electrónico.

#### 1.1.4 Escalamiento

En vista de lo expuesto en la sección anterior, podemos definir un parámetro para evaluar la magnitud del desorden respecto a la magnitud del acoplamiento entre bloques. Este parámetro se denota por  $g^{-1}(L)$ , y está dado por

$$\frac{1}{g(L)} = \frac{\Delta E(L)}{\delta E(L)}. \quad (1.5)$$

La razón  $g(L)$  está dada por la sustitución de las expresiones de  $\Delta E$  y  $\delta E$  para las dos energías características

$$g(L) = \left( \frac{\hbar}{e^2} \right) \sigma L^{d-2}. \quad (1.6)$$

Esta ecuación se aplica a estados extendidos en un límite macroscópico. Reconocemos a  $\sigma L^{d-2}$  como la conductancia de un cubo de lado  $L$  y conductividad  $\sigma$ , vemos que  $g(L)$  es una relación fundamental que podemos interpretar como una *conductancia generalizada* expresada en unidades de  $e^2/\hbar$ . Este es un parámetro relevante para determinar la eficacia del acoplamiento de la función de onda de bloque a bloque, cuando los bloques de tamaño  $L^d$  son emparejados, y es la variable que expresa la física esencial del sistema electrónico desordenado.

La teoría de escalamiento examina la dependencia de la longitud de escala ( $L$ ) de  $g(L)$  si conocemos  $g_0 = \delta E(L_0)/\Delta E(L_0)$  para el sistema compuesto de cubos acoplados de tamaño  $L_0^d$ . La teoría de escalamiento asume que, dada  $g_0(L_0)$  en la escala de longitud  $L_0$ , está determina  $g(L)$  en una escala de longitud más grande  $L = bL_0$ , en la cual los cubos originales de tamaño  $b^d$  han sido combinados para formar nuevos cubos de tamaño  $L^d = (bL_0)^d$ .

En la situación de escalar hacia arriba, cuando el tamaño del sistema ha crecido por un factor  $d$ , los cubos grandes ahora tienen niveles de separación intracúbicos dados por  $\Delta E(L)$  y el acoplamiento intracúbico es  $\delta E(L) = g\Delta E(L)$ . Ambos  $\Delta E$  y  $\delta E$  son pequeños en la longitud de escala  $bL_0$ , pero la conductancia reescalada  $g(bL_0)$  puede ser más grande o más pequeña que  $g(L_0)$ .

En la nueva escala de longitud  $bL_0$ ,  $g$  está determinada completamente por el viejo valor  $g_0$  y el factor de escala  $b$ , es como,

$$g = f(g_0, b).$$

Si  $b$  se trata como una transformación continua (es decir,  $b = 1 + \epsilon$ , donde  $\epsilon \ll 1$ ), entonces el comportamiento de escalamiento puede especificarse con una función diferencial de escalamiento  $\beta(g)$ :

$$\beta(g) = \frac{d \ln g(L)}{d \ln L}. \quad (1.7)$$

Para  $\beta$  positivo,  $g$  aumenta cuando se incrementa  $L$ ; para  $\beta$  negativo,  $g$  disminuye con  $L$  creciendo. El comportamiento cualitativo de  $\beta(g)$  aparece esbozado en la Fig. 1 – 4, para una, dos y tres dimensiones.

Las curvas de la Fig. 1-4, fueron propuestas por Abrahams et al. [5], quién comprendió que podría determinarse el comportamiento físico de  $\beta(g)$  "por inspección" en los límites asintóticos de  $g \rightarrow \infty$  y  $g \rightarrow 0$ . Para  $g$  grande, la teoría del transporte macroscópico aplicada a  $L$  grande para la Ec. (1.7) puede usarse, y así

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \beta(g) = d - 2. \quad (1.8)$$

Por consiguiente en tres dimensiones  $\beta(\infty)$  es  $+1$ , en dos dimensiones  $\beta(\infty) = 0$ , y en una

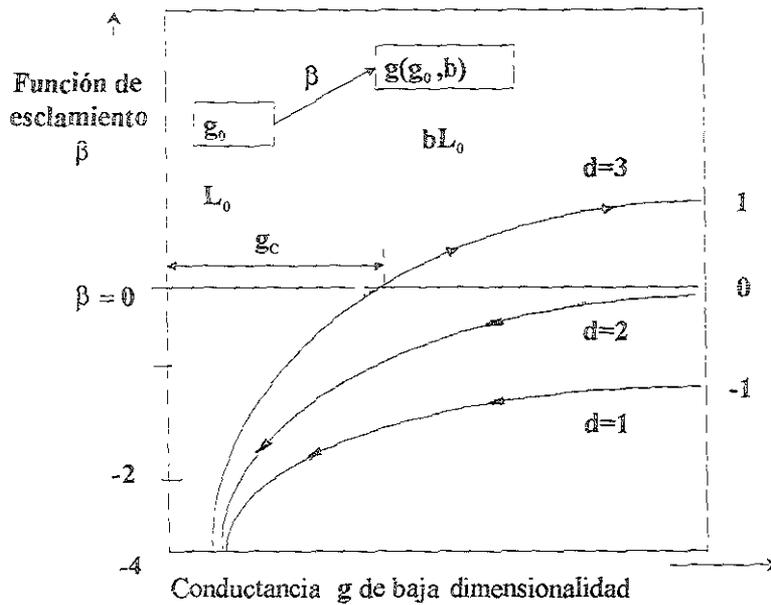


Figura 1-4: Comportamiento cualitativo de  $\beta(g)$  para una, dos y tres dimensiones, en la teoría de escalamiento, las flechas indican el cambio de  $g$  cuando  $L$  se incrementa.

dimensión  $\beta(\infty) = -1$ , como se indica en el lado derecho de la Fig. 1-4, cuando  $g$  tiende a  $\infty$ . Para  $g$  pequeño, el límite del acoplamiento débil y de desorden fuerte en el cual  $g \ll 1$ , el teorema de Anderson nos dice que los estados del electrón están localizados y decaen exponencialmente a distancias grandes como en la Fig. 1-2b. En la frontera de un bloque de dimensión lineal  $L$ , la amplitud de la función de onda de un electrón localizado dentro del bloque es del orden  $e^{-\alpha L}$ , donde  $1/\alpha$  es la longitud de localización. Para quitar el acoplamiento entre bloques,  $g$  también decae exponencialmente con  $L$ , de lo cual se sigue que

$$\lim_{g \rightarrow 0} \beta(g) = \ln g. \quad (1.9)$$

Por lo tanto  $\beta(g)$  se aproxima a  $-\infty$  cuando  $g$  se aproxima a cero, independientemente de la dimensionalidad. Suponiendo que varía suavemente y monótonamente entre la Ec. (1.8) y la Ec. (1.9) produce las curvas esbozadas en Fig 1-4.

Esto se muestra por las flechas sobre las tres curvas de la Fig. 1-4, las cuales representan la dirección en que  $g$  cambia, cuando crece  $L$ : para  $g$  grande si  $\beta(g) > 0$ , y para  $g$  pequeño si

$\beta(g) < 0$ . Para la curva representada en la Fig. 1-4 en tres dimensiones  $d = 3$ , reconocemos un valor especial de  $g$  para la cual este parámetro permanece invariante bajo el cambio de escala. Está localizado por el cruce en cero de la curva de  $\beta(g)$  en  $d = 3$ . En este valor crítico  $g_c$  de la conductancia adimensional, se satisface la siguiente condición,

$$\beta(g_c) = 0. \quad (1.10)$$

Para la curva  $d = 1$ , de la Fig. 1-4,  $\beta(g)$  siempre es negativo, para que todo valor de  $g$  tienda al límite localizado en  $g = 0$ . Esto significa que todos los estados del electrón están localizados.

Para el caso de  $d = 1$ , estos resultados ya eran conocidos antes de la teoría de escalamiento, los primeros estudios de Lauder y J. C. Helland en sistemas desordenados de una dimensión [7], habían propuesto que los estados propios pueden localizarse. Después Mott y Twose [8] propusieron que todos los estados propios en sistemas aleatorios de una dimensión están localizados.

Posteriormente, Borland [9] demostró que para una serie de funciones  $\delta$  aleatorias, las soluciones a la ecuación diferencial (con valores fijos de las funciones y sus derivadas) crecen exponencialmente en el promedio con la distancia. Este crecimiento exponencial es un resultado directo de la incoherencia de fase. El cuadro que emerge en las pruebas básicas de Borland es que, para cada energía hay dos soluciones independientes de la ecuación de Schrödinger, una incrementando y la otra disminuyendo exponencialmente (en promedio) cuando la distancia  $x$  aumenta. En un conjunto energías propias, la solución crece hacia la izquierda igualando en algún punto a la solución que crece a la derecha para formar la función propia que decae hacia cero cuando  $|x| \rightarrow \infty$ . Según este cuadro, la longitud de localización es la misma que la inversa de la media proporción de crecimiento de la solución a la ecuación diferencial.

Wegner [10] demostró la localización de funciones propias a través de diferentes métodos, tales como métodos estocásticos aplicados al producto de matrices aleatorias. Estos métodos están discutidos muy claramente en un artículo de Halperin [11], o pueden consultarse materiales adecuados en los libros de Hori [12] o el de Lieb y Mattis [13].

Una situación similar puede aplicarse muy bien al resultado del escalamiento en  $d = 2$  de la Fig. 1-4, ya que la función  $\beta(g)$  queda cerca del eje  $\beta = 0$  (para que  $g(L)$  disminuya muy

espacio cuando  $L$  crezca) para una  $g$  grande.

La longitud de la localización puede exceder las dimensiones de la muestra en muchas situaciones experimentales que involucran sistemas desordenados en  $2d$  (2 dimensiones).

Esto puede explicar por qué algunas simulaciones de la computadora en sistemas con  $d = 2$  exhiben una transición de Anderson de localizada a extendida [4], aunque la teoría de escalamiento como consecuencia de la Ec. (1.8) requiere  $d > 2$  para que las transiciones ocurran.

Así, la teoría de escalamiento explica a grandes rasgos las propiedades electrónicas de sistemas desordenados. Sin embargo, cuando ya se pensaba que las propiedades electrónicas en los sólidos habían sido básicamente comprendidas, en 1984 se encontró un material que parecía violar uno de los teoremas más viejos y fundamentales de la cristalografía [14]. A estos nuevos materiales se les llamó cuasicristales, de los cuales se hablará la siguiente sección.

### 1.1.5 Cuasicristales

Estos materiales incluyen un nuevo tipo de orden, intermedio entre lo cristalino y lo amorfo, porque parecen tener el mismo tipo de orden que es inherente a un cristal, pero con simetrías que son físicamente imposibles para cualquier sustancia cristalina.

Ciertas simetrías son inherente a cada estructura cristalina, ya que por ejemplo, se pueden tener ejes de simetría rotacional cuádruple o séxtuple (como en el cuadrado y el hexágono respectivamente). Los cristales nunca pueden tener ejes de simetría rotacional cinco. La razón por la cual sucede esto, es la misma por la cual es imposible llenar un plano cubriéndolo completamente con formas que tienen ejes de simetría cinco y que no se traslapen, es decir, usando sólo pentágonos, o como el icosaedro, que además tiene cinco caras que se encuentran en cada uno de sus vértices y así no puede servir como la celda unitaria de un cristal convencional.

Los materiales con este nuevo tipo de orden parecen forjar un eslabón entre los cristales convencionales y los materiales llamados cristales amorfos, que son sólidos formados cuando los metales fundidos se enfrian rápidamente y sus átomos constitutivos no tienen tiempo para formar un enrejado cristalino. A estos nuevos materiales se le ha llamado cuasicristales.

El nuevo tipo de orden presente en estos materiales es de tipo cuasiperiódico, es decir el potencial no es periódico, sin embargo existe un cuasiperíodo en el sentido de que para un número pequeño  $\varepsilon$ , existe una distancia  $T$  para la cual se cumple que;  $|V(x + T) - V(x)| < \varepsilon$

[3]. De hecho, un potencial cuasiperiódico se caracteriza porque su transformada de Fourier contiene dos períodos incomensurables entre sí, como por ejemplo la función,

$$V(x) = \cos(x) + \cos(\alpha x),$$

donde  $\alpha$  es un número irracional.

Como los sistemas cuasiperiódicos representan otra categoría de sistemas, resulta importante investigar sus propiedades electrónicas, de las cuales se podrían esperar nuevos efectos, diferentes a los obtenidos con sistemas periódicos y desordenados.

Este problema ha sido investigado desde dos frentes, el experimental y el teórico.

En el experimental se trata de determinar algunas propiedades físicas, tales como la conductividad, la capacidad calorífica, la termopotencia, la elasticidad, la magnetoresistencia y el efecto Hall [15]. Existen comportamientos anómalos, por ejemplo, la conductividad aumenta cuando los defectos estructurales están presentes o cuando se eleva la temperatura por encima de los  $1000K$  [16].

En lo teórico, se ha estudiado el efecto cuasiperiódico usando hamiltonianos simples, así como cálculos de estructura electrónica para algunas aleaciones. El estudio de propiedades electrónicas se ha dividido en dos clases. Una clase consiste en realizar cálculos realistas basados en funciones de densidad en cristales aproximantes [17], donde los cristales están formados por celdas unitarias que cada vez van creciendo hasta aproximarse a un cuasicristal. La otra son estudios basados en la aproximación de enlace fuerte en redes cuasiperiódicas simples [17].

El estudio de hamiltonianos cuasiperiódicos en una dimensión, ha mostrado que el espectro electrónico tiene una estructura fractal, similar a un polvo de Cantor [15] las funciones de onda son también fractales y no pueden considerarse ni como localizadas ni extendidas. La caracterización de este nuevo tipo de funciones, es un problema todavía abierto, por lo cual en esta tesis se propondrán algunos criterios para resolver este problema.

Aún más, como hemos visto, existen diferentes propiedades de localización dependiendo del tipo de sistema físicos. Por otra parte, existen diferentes métodos para evaluar la localización. Sin embargo, no resulta claro que éstos puedan utilizarse en sistemas de naturalezas muy diferentes. Por ello, en esta tesis se propone una nueva manera de medir localización usando

una técnica de escalamiento de las bandas del espectro.

Para evaluar si este método es eficaz tanto para estados críticos como localizados y extendidos, nos hemos propuesto aplicarlo a la ecuación de Harper, ya que en este sistema podemos obtener diferentes tipos de estados variando un sólo parámetro.

La ecuación unidimensional de Harper es en realidad la ecuación a la que se llega al considerar una red cuadrada sometida a un campo magnético constante. El método de localización presentado en este trabajo nos permite estudiar de una manera sencilla las propiedades electrónicas de este sistema unicamente variando este parámetro, que con los métodos tradicionales no se podían determinar. En el siguiente capítulo, justamente se desarrollará la técnica que permite estudiar la localización de las funciones de onda, y que será aplicada a la ecuación de Harper en capítulos posteriores.

## Capítulo 2

# Localización de Sistemas Unidimensionales

### 2.1 Ecuación de enlace fuerte

Tal y como se dijo anteriormente, en este capítulo se considerará el problema de cómo medir la localización de un electrón en un sistema unidimensional en la aproximación de enlace fuerte, ya que esta aproximación resulta muy sencilla, pero contiene mucha de la física esencial que aparece en el fenómeno de localización.

En lo que sigue, se estudiará un hamiltoniano de enlace fuerte para una banda  $s$ , definida en una cadena de  $N$  sitios, donde existe un potencial  $V_n$  en el sitio  $n$ , e integral de salto  $t_n$  entre sitios  $n$  y  $n + 1$ ,

$$t_n\psi_{n-1} + t_{n+1}\psi_{n+1} + V_n\psi_n = E\psi_n, \quad (2.1)$$

donde  $\psi_n$  es el valor de la función de onda en el sitio  $n$ . Normalmente se consideran dos casos: el problema diagonal, donde  $t_n$  es una constante que no depende del sitio, y el de fuera de la diagonal, donde  $V_n$  es igual para todos los sitios. En esta tesis, vamos a considerar sólo desorden diagonal ( $t_n = t$ ), ya que es el que aparece en la ecuación de Harper. El tratamiento para el desorden fuera de diagonal es muy parecido, aunque requiere modificar ligeramente algunas fórmulas.

Empezaremos nuestro análisis de localización con la Ec. (2.1), que puede ser escrita en

términos de la llamada matriz de transferencia  $M(n)$ ,

$$\Psi_n = \begin{pmatrix} (E - V_n)/t & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \Psi_{n-1} \equiv M(n) \Psi_{n-1}, \quad (2.2)$$

donde  $\Psi_n$  es un vector con componentes,

$$\Psi_n = \begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

Si tenemos una cadena con  $n$  sitios, y aplicamos sucesivamente la Ec. (2.2), obtenemos la ecuación de onda en el sitio  $n$ , como una función del valor de  $\Psi_n$  al principio de la cadena,

$$\Psi_n = M(n)M(n-1)M(n-2)M(n-3)\dots M(2)\Psi_1 \equiv \mathbf{T}(n)\Psi_1. \quad (2.4)$$

Como veremos más adelante, la traza de la matriz total de transferencia ( $\tau_n \equiv \text{tr}\mathbf{T}(n)$ ) determina el espectro, ya que un valor permitido de la energía se caracteriza porque la traza es menor que dos [18]. Debido a esto, la traza es determinante en la obtención del tipo de espectro de una cadena. Aún más, existen casos en los cuales puede escribirse una relación de recurrencia entre las trazas de cadenas más pequeñas,

$$\tau_n = f(\tau_{n-1}, \tau_{n-2}, \tau_{n-3}, \dots, \tau_{n-j}), \quad (2.5)$$

lo cual permite calcular el espectro sin evaluar el producto completo de las matrices de transferencia. Una relación de este tipo se le llama *mapeo de la traza*. Veremos en la siguiente sección, que este mapeo puede usarse para determinar las propiedades de localización en la cadena.

## 2.2 Coeficientes de Lyapunov

Para caracterizar la localización de funciones de onda, generalmente se utiliza el llamado coeficiente de Lyapunov definido como [1, 18],

$$\gamma(E) \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \gamma_n(E) \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \|T(n)\|, \quad (2.6)$$

donde  $\|T(n)\|$  es la llamada norma matricial,

$$\|T(n)\| = \sup \|\Psi\| / \|T(n)\Psi\|. \quad (2.7)$$

En esta definición,  $\Psi$  es cualquier vector que maximice  $\|T(n)\|$ . La razón de su definición es que para estados localizados, esta norma crece como  $\exp(-n\gamma)$ , por lo cual  $\gamma$  es el recíproco de la longitud de localización ( $\xi^{-1}$ ).

En general, el crecimiento de la norma a medida que nos desplazamos por la cadena, está determinado por el valor propio con norma máxima de la matriz de transferencia [19], el cual denotamos por  $|\lambda|_{\max}$ ,

$$\gamma(E) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log |\lambda|_{\max}. \quad (2.8)$$

Ahora bien, puesto que queremos utilizar la traza para evaluar la longitud de localización, el paso natural es relacionar este valor propio máximo con la traza. Para ello encontramos los valores propios de  $T(n)$ . Si la matriz  $T(n)$  está dada por,

$$T(n) = \begin{pmatrix} a_n & b_n \\ c_n & d_n \end{pmatrix},$$

la ecuación característica de  $T(n)$  es,

$$\det(\lambda - T(n)) = \lambda^2 - \lambda(a_n + d_n) + (a_n d_n - c_n b_n) = \lambda^2 - \lambda \tau_n + 1 = 0, \quad (2.9)$$

la cual puede escribirse así, porque el determinante del producto de matrices es el producto del determinante de cada matriz, que en este caso es uno. Nótese que la traza es un invariante ante transformaciones unitarias, de donde se sigue que la ecuación anterior es válida en cualquier otra base. Resolviendo la Ec. (2.9) encontramos los dos valores propios de  $T(n)$ ,

$$\lambda_{\pm} = \frac{\tau_n \pm \sqrt{\tau_n^2 - 4}}{2}. \quad (2.10)$$

Observamos que si  $\|\tau_n\| > 2$ , los valores propios serán reales y el coeficiente de Lyapunov,

obtenido de considerar el valor propio que tiene norma máxima es,

$$\gamma(E) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \left( |\tau_n| + \sqrt{\tau_n^2 - 4} \right). \quad (2.11)$$

Cuando  $\|\tau_n\| \leq 2$ ,  $\lambda_{\pm}$  son dos números complejos,

$$\lambda_{\pm} = \frac{\tau_n \pm i\sqrt{4 - \tau_n^2}}{2},$$

ambos con norma unitaria, ya que,

$$\|\lambda_{\pm}\| = \frac{(\tau_n)^2 + \left(\sqrt{4 - \tau_n^2}\right)^2}{4} = 1,$$

y entonces el coeficiente de Lyapunov es cero,

$$\gamma(E) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log(1) = 0$$

Justamente, de aquí se obtiene que las energías permitidas deben tener la propiedad de que la traza de la matriz de transferencia debe ser menor que dos, porque de otro modo, si los eigenvalores no son imaginarios, las soluciones divergen y no se pueden satisfacer las condiciones de frontera. La divergencia proviene del hecho que  $\|T(n)\|$  crece como  $e^{\lambda_{\max} n}$ , y dado que el determinante de  $T(n)$  siempre es uno, se cumple,

$$\lambda_+ = \frac{1}{\lambda_-}, \quad (2.12)$$

de donde se sigue que una solución crece y la otra decrece. La solución creciente siempre domina a la solución decreciente en una solución arbitraria, debido a que ésta es una combinación lineal arbitraria de los dos vectores propios de la matriz de transferencia.

Debe decirse que a primera vista, se ve extraño que para los estados dentro del espectro, el exponente de Lyapunov sea cero, sin importar la forma de la función de onda, ya que para un estado localizado queremos encontrar su correspondiente longitud de localización. De hecho, esta dificultad ha sido mensopreciada en la literatura hecha por los físicos, sin embargo, los matemáticos utilizan una definición alternativa que en principio resolvería el problema. aunque

en la práctica es muy difícil de utilizar.

La solución para este problema se relaciona con la conjetura de Borland [9], y con la aparición de bandas cuando usamos la matriz de transferencia, incluso para los valores propios aislados. Para explicar este punto, consideremos el problema de una impureza en una cadena lineal periódica (poniendo,  $V_0 = \delta$ , y,  $V_n = 0$ ,  $n \neq 0$ ,  $t_n = t$ ). Como es sabido, el espectro de esta cadena es la banda original de la cadena periódica (es decir,  $E$  toma valores continuos en el intervalo  $-2 \leq E \leq 2$ ), más un modo de impureza localizado en  $E_c = \sqrt{4 + \delta^2}$  [20]. ¿Cómo podemos obtener la longitud de localización de este modo usando la matriz de transferencia?

Generalmente, en el método de la matriz de transferencia, si nosotros ponemos una excitación a la izquierda de la cadena en una brecha espectral de una cadena periódica, el crecimiento de la excitación es exponencial, con una velocidad determinada por el valor propio más grande de la matriz de transferencia, a menos que iniciemos con un vector que corresponda al vector propio con el valor propio más bajo, en tal caso la excitación decrece. Ahora, si nosotros atravesamos la cadena desde la derecha a la izquierda, obtenemos el resultado opuesto, entonces la excitación crece de derecha a izquierda [1]. A primera vista, esto puede parecer paradójico para el modo de impureza, porque necesitamos satisfacer las condiciones límite fijas en ambos extremos de la cadena, con un máximo en el sitio de impureza.

La solución para este problema es que la función que crece de izquierda a derecha, es la misma que disminuye de derecha a izquierda [9]. Para una energía que corresponde a un valor propio de la cadena completa, la excitación puede ser unida en un sitio de impureza, para satisfacer las condiciones límite en ambos lados de la cadena [9]. Esta unión se logra haciendo que la solución que crece se haga súbitamente cero en el sitio de impureza.

Así, si definimos sólo el exponente de Lyapunov a media cadena ( $\gamma_{\pm}(E)$ ), desde el sitio de la impureza izquierda (derecho), el exponente de Lyapunov puede mostrarse que está dado por [20],

$$\gamma_{\pm}(E_c) \equiv \lim_{n \rightarrow \pm\infty} \log \frac{1}{n} \|T(n)\| = \log \left( \frac{|E_c| + \sqrt{E_c^2 - 4}}{2} \right). \quad (2.13)$$

Pero si consideramos la cadena completa, el exponente es cero porque la excitación no crece para satisfacer las condiciones límite. Esto está de acuerdo con los resultados previos, los cuales mostraron que, siempre que nosotros tengamos un estado permitido,  $\gamma(E)$  de una cadena

completa es cero.

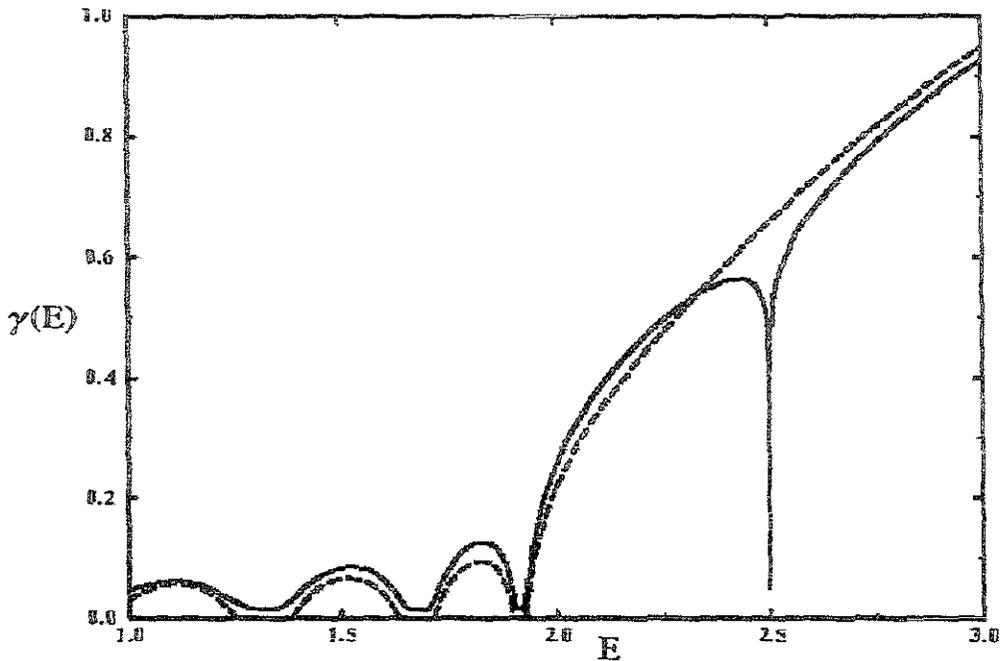


Figura 2-1: El exponente de Lyapunov de la cadena completa (línea sólida), obtenido usando la Ec. (2.6), y la mitad de esta (línea punteada), se muestra cuando  $\delta = 1.5$  ( $E_c = 2.5$ ).

Para la Fig. 2-1, los cálculos fueron llevados a cabo usando la norma del producto de matrices de transferencia sucesivas para una excitación inicial dada. El Lyapunov de la mitad de la cadena da la longitud de localización correcta, mientras que el coeficiente de la cadena completa da una inmersión pronunciada, que se aproxima a cero en la energía que corresponde al modo de impureza.

El problema con este método es que necesitamos conocer por adelantado dónde está el máximo de la función de onda, y entonces proceder a estudiar el exponente de Lyapunov. Claramente, en muchos casos esta información es difícil de obtener, así que el método es impráctico. Sin embargo como veremos en la siguiente sección, el problema puede ser evitado usando el escalamiento del espectro de ancho de bandas. Aún más, al final de este capítulo, se considerará el problema de una impureza en una cadena periódica, y como se verá, el método

predice el resultado de manera correcta sin necesidad de considerar límites por la izquierda y derecha.

## 2.3 Localización y estabilidad del mapeo de la traza

### 2.3.1 Escalamiento de bandas

Un segundo enfoque para el uso del mapeo de la traza como una herramienta de diagnóstico de localización, es adaptar un argumento cualitativo similar al usado por Abrahams [5] en su teoría de escalamiento.

Consideramos un trozo de cadena con  $n$  sitios. Por el momento no importa la estructura interna, la cual puede ser periódica, desordenada o cuasiperiódica. Ahora construiremos un cristal mediante una repetición periódica de la pieza escogida, la cual actúa como una celda unitaria del cristal.

Consideremos primero que la celda es también un cristal. Debido a la periodicidad del supercristal, los estados serán extendidos y habrá  $n$  bandas de anchos  $W_n$ . Este ancho puede ser visto como un traslape entre dos estados similares,  $|\psi_1\rangle$  y  $|\psi_2\rangle$  en dos celdas unitarias contiguas. Este traslape, para un hamiltoniano del tipo que aparece en la Ec. (2.1), está dado por,

$$W_n \sim \langle \psi_1 | H | \psi_2 \rangle \sim t, \quad (2.14)$$

donde usamos el hecho de que los estados extendidos no decaen con  $n$ , y así su traslape es independiente de  $n$ , dependiendo sólo de la integral de salto  $t$ . Esto muestra que el tamaño de la banda, es también independiente de  $n$ .

Luego, consideramos que la celda unitaria es desordenada, con estados propios que son exponencialmente localizados con una longitud  $\xi$  ( $n \gg \xi$ ). El traslape principal para  $W_n$  es entonces del orden,

$$W_n \sim \langle \psi_1 | H | \psi_2 \rangle \sim t e^{-\frac{n}{\xi}}, \quad (2.15)$$

debido al decaimiento de la función de onda. Aquí el ancho de banda depende de  $n$ , es decir, el ancho de banda es reducido exponencialmente cuando  $n \rightarrow \infty$ . Así, es natural definir la inversa

de la longitud de localización como,

$$\gamma_n(E) \equiv \frac{1}{\xi} = \lim_{n \rightarrow \infty} -\frac{1}{n} \log \left( \frac{W_n}{t} \right). \quad (2.16)$$

Cuando la celda es un cuasicristal, las funciones de onda son críticas (autosimilares o fractales en el espacio real), y se escalan con un exponente  $\beta(E)$  como  $|\psi(n)| \sim n^{-\beta(E)}$  [21]. Esto permite que el traslape y el escalamiento del ancho de banda con el tamaño del sistema vaya como,  $W_n \sim tn^{-2\beta(E)}$ . La Ec. (2.16), implica que en el límite  $\lim_{n \rightarrow \infty} \gamma_n(E) = \lim_{n \rightarrow \infty} \beta(E) \log(n)/n = 0$ , por lo cual no se tendría información sobre el exponente crítico del escalamiento. En este caso, sin embargo, podemos obtener más información si definimos a la siguiente cantidad como,

$$\beta(E) = \lim_{n \rightarrow \infty} -\frac{\log(W_n/t)}{\log(n)}, \quad (2.17)$$

la cual permanece finita para una ley de potencias de estados localizados. Observe que  $\beta(E)$  tiene la forma de una dimensión fractal. En general podemos esperar pequeñas oscilaciones de  $\beta(E)$  cuando el tamaño del sistema se incrementa, ya que los estados críticos pueden mostrar una naturaleza multifractal [21, 22, 24, 25], es decir, el sistema no tiene una sola dimensión fractal, sino que presenta una distribución de dimensiones.

### 2.3.2 Estabilidad del mapeo de la traza

Cuando establecemos la relación entre la localización y el ancho de banda, las propiedades de escalamiento de las bandas son encontradas fácilmente con el mapeo de la traza, ya que  $W_n$  está determinado por las energías que son las raíces de  $\tau_n^2(E) - 4 = 0$ , es decir, si la banda empieza en una energía  $E_1^n$  para una cadena de tamaño  $n$ , se cumplirá que  $\tau_n^2(E_1^n) = 4$ . Dentro de la banda,  $\tau_n^2(E)$  será menor que cuatro, hasta llegar a una energía, que denotamos por  $E_2^n$ , donde otra vez se cumpla que  $\tau_n^2(E_2^n) = 4$ . Esta energía determina el final de la banda, por lo tanto, el ancho  $W_n$  será  $W_n = E_2^n - E_1^n$ . Análogamente, procedemos con las otras bandas, y si acomodamos los bordes de las bandas en orden decreciente (denotados por  $E_i^n$ ), el ancho de cada una de ellas es,  $W_n^i = (E_{2i}^n - E_{2i-1}^n)$ . Nótese que algunas veces en este trabajo consideraremos el cuadrado de la traza, en lugar de la traza, para evitar hacer diferencias entre los puntos 2 y -2, lo cual complicaría el álgebra involucrada.

Para aquellas energías que están en el espectro de  $H_n$ , el recíproco de la longitud de localización de esos estados puede ser estimado usando la Ec. (2.16),

$$\gamma_n(E) = \lim_{n \rightarrow \infty} -\frac{1}{n} \log \left( \frac{E_{2i}^n - E_{2i-1}^n}{t_n} \right) = \lim_{n \rightarrow \infty} -\frac{1}{n} \log \left( \tau_{n,2i}^{-1}(\pm 2) - \tau_{n,2i-1}^{-1}(\pm 2) \right).$$

En este último paso usamos que  $E_{2i}^n = \tau_{n,2i}^{-1}(\pm 2)$ , donde  $\tau_{n,2i}^{-1}$  es el inverso de  $\tau_n$  de la rama  $2i$ .

Usando todos estos elementos, podemos clasificar las propiedades de localización en términos del mapeo de la traza. Consideremos primero el caso de una banda de estados extendidos. En la subsección anterior, se mostró que el ancho de banda no depende del tamaño del sistema, es decir, las energías que son bordes de banda no cambian con el tamaño, son fijas. Entonces,

$$\tau_n(E_{2i}^n) = \pm 2, \tau_n(E_{2i-1}^n) = \pm 2$$

son independiente de  $n$ , por lo cual  $\tau_n(E_{2i}^n)$  y  $\tau_n(E_{2i-1}^n)$  son puntos fijos, dado que la traza permanece fija a medida que el mapeo es iterado. Estos puntos fijos tienen la siguiente propiedad, si comenzamos a iterar el mapeo con una energía cercana a  $E_{2i}^n$ , pero dentro de la banda ( $E_{2i}^n - \varepsilon$ ), entonces  $\tau_n(E_{2i}^n - \varepsilon)$  es acotado ya que el ancho de banda es constante, pero hacia el otro lado de  $E_{2i}^n$ , la órbita correspondiente al mapeo es ilimitada ya que  $\gamma(E_{2i}^n + \varepsilon)$  es positiva definida fuera de la banda. Estos tipos de puntos fijos son llamados puntos silla.

Alrededor de un estado propio localizado ( $E_c$ ), la banda se reduce de una manera exponencial, lo cual significa que si  $\tau_n(E_{2i}^n) = \pm 2$ , después de algunos pasos de crecimiento de la cadena,  $E_{2i}^n$  debe quedar fuera de la banda. Así, el único punto que satisface  $|\tau_n(E)| < 2$  cuando  $n$  va a infinito es  $E_c$  porque, para pequeños  $\varepsilon$  y  $n$  bastante grande,  $|\tau_n(E_c + \varepsilon)| > 2$ . Cualquier desviación de las condiciones iniciales,  $\tau_1(E_c), \tau_2(E_c), \dots$ , del mapeo de la traza, eventualmente divergirá en el futuro exponencialmente conforme iteremos el mapeo de la traza. Así, un estado localizado exponencialmente corresponde a un punto fijo inestable de la traza.

El ancho de la banda puede estimarse haciendo una expansión de la traza en serie de Taylor, o aún mejor, el cuadrado de ésta, para simplificar el número de casos bajo consideración. Si expandemos alrededor de  $E_c$ , se tiene

$$4 = \tau_n^2(E_{2i}^n) \simeq \tau_n^2(E_c) + \frac{1}{2} \left( \frac{W_n}{2} \right)^2 \left[ \frac{d^2 \tau_n^2}{dE^2} \right]_{E=E_c}. \quad (2.18)$$

donde usamos que la primera derivada es cero en  $E = E_c$ , debido a que el cuadrado de la traza debe tener un mínimo dentro de la banda y  $W_n \simeq 2(E_c - E_i^n)$

El recíproco de la longitud de localización se obtiene usando la Ec. (2.16), cuando  $n \rightarrow \infty$ ,

$$\gamma_n(E) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{2n} \log \left| \left[ \frac{d^2 \tau_n^2}{dE^2} \right]_{E=E_c} \right|. \quad (2.19)$$

Esta fórmula general se puede reducir en los casos cuando  $\tau_n^2(E_c) = 0$  (este es el caso de una cadena lineal con una impureza, como veremos en la siguiente sección), para obtener,

$$\gamma_n(E) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \left| \left[ \frac{d\tau_n}{dE} \right]_{E=E_c} \right|. \quad (2.20)$$

La sensibilidad ante condiciones iniciales del mapeo de la traza también puede ser caracterizada por sus exponentes de Lyapunov, ahora en el sentido usado en *la teoría del caos* para estudiar sistemas dinámicos. Estos exponentes son definidos como [26],

$$\sigma(E) = \lim_{n \rightarrow \infty, \varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{n} \log \left| \frac{\tau_n(E + \varepsilon) - \tau_n(E)}{\varepsilon} \right|, \quad (2.21)$$

los cuales miden cómo difieren dos puntos con condiciones iniciales muy cercanas, cuando ellos son iterados por el mapeo. Si comparamos la última ecuación con Ec. (2.20), está claro que ellas son iguales. Entonces, el recíproco de la longitud de la localización está dado por el exponente de Lyapunov del mapeo de la traza, usado en el mismo sentido de la teoría del caos.

Las cadenas cuasiperiódicas son mucho más difíciles para su estudio, porque el cambio del ancho de banda es llevado a cabo usualmente por la aparición de nuevas brechas cuando el sistema crece de tamaño. Este mecanismo es similar al que se usa en la generación del conjunto de Cantor. Sin embargo, aún en esos casos el ancho de banda permite obtener información útil de la localización. Como un ejemplo, podemos citar la reducción de casi todas las bandas en una cadena de Fibonacci con una impureza, debida a la aparición de muchos estados localizados dentro del espectro original [27, 28, 29].

Cuando el ancho de banda se reduce con el escalamiento por la apertura de nuevas brechas, existe una cascada de puntos  $E_i^n$  cuando el sistema crece, es decir, el número de pre-imágenes de  $\tau_n = \pm 2$  crece con  $n$ . Se observa que para tener este comportamiento, el mapeo de la traza

debe ser no-lineal, ya que esta es la única manera en que el número de pre-imagenes puede aumentar con el tamaño de la cadena. En tales mapeos, la órbita de la traza para los bordes de banda puede ser periódica o aperiódica [30].

Una estimación del escalamiento de la función de onda está dado por la Ec. (2.17) y una expansión en serie de Taylor alrededor del punto  $E_c$  dentro de la banda, con la propiedad de que la primera derivada del cuadrado de la traza es cero en este punto (entre los dos bordes de bandas está siempre un punto que satisface esta condición).

Según nuestra definición (2.17) el exponente de escalamiento es:

$$\beta(E) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\log \left| \left[ \frac{d^2 \tau_n^2}{dE^2} \right]_{E=E_c} \right|}{\log(n)}. \quad (2.22)$$

Antes de terminar esta sección, podríamos mencionar que la estabilidad de la traza puede ser útil para explicar algunas propiedades de las funciones de onda para una energía que no es un valor propio, donde los estados satisfacen que  $\|\tau_n(E)\| > 2$ . La conexión con la estabilidad se encuentra tomando la derivada de la Ec. (2.11) con respecto a la energía,

$$\gamma'_n(E) \equiv \frac{d\gamma_n(E)}{dE} = \frac{1}{n} \left[ \frac{\text{sgn}(\tau_n)}{\sqrt{\tau_n^2 - 4}} \right] \frac{d\tau_n}{dE}. \quad (2.23)$$

De esta última ecuación está claro que, siempre que la derivada del mapeo de la traza con respecto a la energía es cero, obtenemos un punto crítico para el exponente de Lyapunov. Denotaremos estos puntos críticos por  $E_i^*$ . La naturaleza de estos puntos es obtenida por el signo de la segunda derivada  $\gamma(E_i^*)$  es máximo (mínimo) cuando  $\text{sgn}(\tau_n) [d^2 \tau_n / d^2 E]_{E=E_i^*}$  es negativo (positivo). En ambos casos, el exponente de Lyapunov tiene una forma parabólica alrededor de estos puntos críticos,

$$\gamma(E) \simeq \gamma(E_i^*) + \frac{\gamma''(E_i^*)}{2} (E - E_i^*)^2. \quad (2.24)$$

Pero, si  $(d\tau_n/dE) = 0$ , entonces, para una perturbación pequeña  $\varepsilon$  alrededor del punto crítico  $E_i^*$ ,  $\tau_n(E_i^* + \varepsilon) \simeq \tau_n(E_i^*)$  y así el mapeo de la traza (Ec. (2.5)) debe ser casi insensible a las condiciones iniciales a  $E_i^*$ . En la ecuación de Harper, mostraremos un ejemplo donde los exponentes de Lyapunov de los estados de las brechas son parabólicos debido a esta propiedad.

Antes de empezar dicho estudio, mostraremos a continuación una aplicación sencilla de las ideas expuestas en este capítulo, que además nos permite apreciar las ventajas del método propuesto respecto a los utilizados en otros trabajos.

## 2.4 Cadena Periódica con una impureza

Para ilustrar el uso del método del escalamiento de bandas propuesto en este capítulo, en esta sección resolvemos el mismo problema considerado a propósito de la paradoja de Borland, es decir, el problema diagonal en una cadena periódica con una impureza; con el potencial de la forma:

$$V_n = \begin{cases} V_0 = \delta & n = 0 \\ V_n = 0 & n \neq 0 \end{cases}, \quad (2.25)$$

y usaremos la traza para calcular la longitud de localización. Como se vió anteriormente, si utilizamos el método de los coeficientes de Lyapunov, obtendríamos cero, a no ser que partiéramos la cadena en dos y estudiáramos los límites por la izquierda y la derecha.

Entonces la ecuación de amarre fuerte en su forma general para una impureza, está dada por,

$$\Psi_{n-1}t + \Psi_{n+1}t = (E - V_n) \Psi_n,$$

y la podemos escribir en forma de matricial,

$$\begin{pmatrix} \Psi_{n+1} \\ \Psi_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{E-V_n}{t} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_n \\ \Psi_{n-1} \end{pmatrix}.$$

Para los sitios en la cadena, con y sin impureza, la ecuación de amarre fuerte, para los sitios  $n = -1, 0$  y  $1$ , nos queda de la forma,

$$\begin{aligned} \text{Periódica} &\implies n = -1 & \Psi_0t + \Psi_2t &= (E) \Psi_1 \\ \text{Impureza} &\implies n = 0 & \Psi_{-1}t + \Psi_1t &= (E - \delta) \Psi_0 \\ \text{Periódica} &\implies n = 1 & \Psi_{-2}t + \Psi_0t &= (E) \Psi_{-1} \end{aligned}$$

En la forma matricial,  $M_n$  es la matriz del transferencia que corresponde a los sitios con

el potencial  $V_{n \neq 0} = 0$ . Para el sitio con la impureza, la matriz correspondiente al potencial  $V_{n=0} = \delta$ , es  $D_0$ . Estas matrices tienen la forma;

$$M_n = \begin{pmatrix} E & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad D_0 = \begin{pmatrix} E - \delta & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

donde consideramos por razones de simplicidad que la integral de salto vale  $t = 1$ .

Para determinar las funciones propias de  $M_n$ , tomamos la ecuación característica,

$$M_n \Psi^\pm - \lambda \Psi^\pm = 0, \quad (2.26)$$

donde las funciones propias están dadas por,

$$\Psi^+ = \begin{pmatrix} \varphi_x^+ \\ \varphi_y^+ \end{pmatrix}, \quad \Psi^- = \begin{pmatrix} \varphi_x^- \\ \varphi_y^- \end{pmatrix}.$$

Para calcular los valores propios usamos el determinante de la cadena periódica,

$$\begin{pmatrix} E & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_x^+ \\ \varphi_y^+ \end{pmatrix} - \lambda \begin{pmatrix} \varphi_x^+ \\ \varphi_y^+ \end{pmatrix} = 0,$$

$$\det(M - \lambda \mathbf{1}) = 0,$$

donde  $\lambda_\pm$  son los valores propios de  $M_n$ ,

$$\lambda_\pm(E) = \frac{E \pm \sqrt{E^2 - 4}}{2}. \quad (2.27)$$

Resolviendo para cada función de onda, encontramos las funciones propias,

$$\Psi^+ = \begin{pmatrix} \varphi_x^+ \\ \varphi_y^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_+ \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$\Psi^- = \begin{pmatrix} \varphi_x^- \\ \varphi_y^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_- \\ 1 \end{pmatrix},$$

y normalizando,

$$\begin{aligned} \widehat{\Psi}^+ &= \frac{\Psi^+}{|\Psi^+|} = \frac{1}{\sqrt{E}} \begin{pmatrix} \sqrt{\lambda_+} \\ \sqrt{\lambda_-} \end{pmatrix}, \\ \widehat{\Psi}^- &= \frac{\Psi^-}{|\Psi^-|} = \frac{1}{\sqrt{E}} \begin{pmatrix} \sqrt{\lambda_-} \\ \sqrt{\lambda_+} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.28)$$

formamos una matriz unitaria; que posteriormente servirá para cambiar de base,

$$U = \begin{pmatrix} \widehat{\Psi}^+ & \widehat{\Psi}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi_x^+ & \varphi_x^- \\ \varphi_y^+ & \varphi_y^- \end{pmatrix},$$

que en términos de los valores propios, nos queda de la siguiente forma:

$$U = \frac{1}{\sqrt{E}} \begin{pmatrix} \frac{E+\sqrt{E^2-4}}{2} & \frac{E-\sqrt{E^2-4}}{2} \\ \frac{E-\sqrt{E^2-4}}{2} & \frac{E+\sqrt{E^2-4}}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{E}} \begin{pmatrix} \sqrt{\lambda_+} & \sqrt{\lambda_-} \\ \sqrt{\lambda_-} & \sqrt{\lambda_+} \end{pmatrix}, \quad (2.29)$$

y su inversa es,

$$U^{-1} = \frac{\sqrt{E}}{\sqrt{E^2-4}} \begin{pmatrix} \frac{E+\sqrt{E^2-4}}{2} & \frac{E-\sqrt{E^2-4}}{2} \\ \frac{E-\sqrt{E^2-4}}{2} & \frac{E+\sqrt{E^2-4}}{2} \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{E}}{\lambda_+ - \lambda_-} \begin{pmatrix} \sqrt{\lambda_+} & -\sqrt{\lambda_-} \\ -\sqrt{\lambda_-} & \sqrt{\lambda_+} \end{pmatrix}. \quad (2.30)$$

Para este caso, la traza de la matriz de transferencia total  $\tau_{n+1}$ , para una cadena de  $n+1$  sitios (incluyendo el sitio con  $n=0$ ), está dada por:

$$\tau_{n+1} = \text{tr}(M^{n/2} D M^{n/2}) = \text{tr} \left( \begin{pmatrix} E & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^{n/2} \begin{pmatrix} E-\delta & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^{n/2} \right), \quad (2.31)$$

Esta expresión puede ser evaluada usando las propiedades cíclicas de la traza  $\tau_{n+1}$ , y la

matriz  $U$  que hace una transformación unitaria, la cual diagonaliza  $M_n$ . Nótese una particularidad muy importante de este método, dada la relación cíclica de la traza, la impureza puede estar en cualquier sitio de la cadena y el resultado no se altera.

La diagonalización de  $M$  es,

$$\begin{aligned} U^{-1}M_nU &= \frac{1}{\lambda_+ - \lambda_-} \begin{pmatrix} \sqrt{\lambda_+} & -\sqrt{\lambda_-} \\ -\sqrt{\lambda_-} & \sqrt{\lambda_+} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{\lambda_+} & \sqrt{\lambda_-} \\ \sqrt{\lambda_-} & \sqrt{\lambda_+} \end{pmatrix} \quad (2.32) \\ &= \begin{pmatrix} \lambda_+(E) & 0 \\ 0 & \lambda_-(E) \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

entonces para  $D_0$  tenemos,

$$\begin{aligned} U^{-1}D_0U &= \frac{1}{\lambda_+ - \lambda_-} \begin{pmatrix} \sqrt{\lambda_+} & -\sqrt{\lambda_-} \\ -\sqrt{\lambda_-} & \sqrt{\lambda_+} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E - \delta & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{\lambda_+} & \sqrt{\lambda_-} \\ \sqrt{\lambda_-} & \sqrt{\lambda_+} \end{pmatrix} \quad (2.33) \\ &= \frac{1}{\lambda_+ - \lambda_-} \begin{pmatrix} (E - \delta)\lambda_+(E) - 2 & (E - \delta) - \lambda_- - \lambda_+ \\ (E - \delta) + \lambda_- + \lambda_+ & -(E - \delta)\lambda_-(E) + 2 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

así que la traza de la cadena periódica con una impureza nos queda de la forma:

$$\tau_{n+1} = \text{tr} [(U^{-1}M_nU)^n U^{-1}D_0U], \quad (2.34)$$

$$(U^{-1}M_nU)^n U^{-1}D_0U = \frac{1}{\lambda_+ - \lambda_-} \begin{pmatrix} \lambda_+^N ((E - \delta)\lambda_+(E) - 2) & \lambda_+^N ((E - \delta) - \lambda_- - \lambda_+) \\ \lambda_-^N ((E - \delta) + \lambda_- + \lambda_+) & -\lambda_-^N ((E - \delta)\lambda_-(E) + 2) \end{pmatrix}.$$

Finalmente, la traza está dada por.

$$\tau_{n+1} = [\lambda_+(E)]^{n+1} \left(1 - \frac{\delta}{\sqrt{E^2 - 4}}\right) + [\lambda_-(E)]^{n+1} \left(1 + \frac{\delta}{\sqrt{E^2 - 4}}\right), \quad (2.35)$$

donde  $\lambda_+ - \lambda_- = \sqrt{E^2 - 4}$ .

El espectro es el conjunto para el cual  $|\tau_{n+1}| < 2$ , cuando  $n$  va a infinito. De la Ec. (2.35), esta condición es satisfecha cuando  $\lambda_{\pm}$  es un número complejo ( $r_{\pm}e^{\pm in\theta}$ ), y así el conjunto es el intervalo  $[-2, 2]$  que corresponde al espectro de una cadena periódica. Fuera de este conjunto,  $|\lambda_{+}(E)|^{n+1} \rightarrow \infty$  para  $E > 0$  cuando  $n \rightarrow \infty$ , dado que  $\lambda_{+}$  es real. Sin embargo, si  $\delta > 0$ , hay una energía para la cual,

$$\left(1 - \frac{\delta}{\sqrt{E^2 - 4}}\right) = 0, \quad (2.36)$$

y la traza es cero  $[\lambda_{-}(E)]^{n+1} \approx 0$  para  $E > 0$ , dado que  $\lambda_{-} = 1/\lambda_{+}$ . De la Ec. (2.36), esta energía corresponde exactamente al modo de impureza ( $E_c = \sqrt{4 + \delta^2}$ ). Observamos que para  $n$  finito, hay siempre una banda alrededor de este punto. Semejante banda es una consecuencia natural de la *continuidad* de  $\tau_{n+1}(E)$ . La existencia de una banda alrededor del modo de impureza para  $n$  finito es un punto muy importante, porque significa que para las redes finitas, el resultado no es igual que el obtenido de una diagonalización directa del hamiltoniano, en el que sólo un modo se encuentra [18].

Ahora sustituimos en la Ec. (2.20) y obtenemos,

$$\begin{aligned} \frac{d\tau_n}{dE} &= \frac{d}{dE} \left\{ \lambda_{+}^n(E) \left(1 - \frac{\delta}{\sqrt{E^2 - 4}}\right) \right\}, \\ \frac{d\tau_n}{dE} \Big|_{E_c = \sqrt{\delta^2 - 4}} &= \left[ n\lambda_{+}^{n-1}(E) \frac{d\lambda_{+}(E)}{dE} \left(1 - \frac{\delta}{\sqrt{E^2 - 4}}\right) + \lambda_{+}^n \left( \frac{\delta E}{(E^2 - 4)^{\frac{3}{2}}} \right) \right]_{E_c = \sqrt{\delta^2 - 4}} \\ &= n\lambda_{+}^{n-1}(E_c) \frac{d\lambda_{+}(E_c)}{dE} \left(1 - \frac{\delta}{\sqrt{\delta^2}}\right) + \lambda_{+}^n(E_c) \left( \frac{\delta \sqrt{\delta^2 - 4}}{(\sqrt{\delta^2 - 4} - 4)^{\frac{3}{2}}} \right) \\ &= \lambda_{+}^n(E_c) \left( \frac{\delta \sqrt{\delta^2 - 4}}{(\delta^2)^{\frac{3}{2}}} \right) = \lambda_{+}^n(E_c) \left( \frac{\sqrt{\delta^2 - 4}}{\delta^2} \right) = \lambda_{+}^n(E_c) \left( \frac{\sqrt{\delta^2 - 4}}{\delta^2} \right). \end{aligned}$$

Finalmente el recíproco de la longitud de localización del modo de impureza se encuentra usando la Ec. (2.20) y Ec. (2.35):

$$\gamma_{n+1}(E) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n+1} \log \left| \left[ \frac{d}{dE} \left( [\lambda_+(E)]^{n+1} \left( 1 - \frac{\delta}{\sqrt{E^2 - 4}} \right) \right) \right]_{E=E_c} \right| = \log \lambda_+(E_c). \quad (2.37)$$

Este resultado es el mismo que el obtenido de la Ec. (2.13), pero observamos que no fué necesario partir la cadena y considerar dos límites diferentes en el sitio de impureza, lo cual podría ser muy difícil de hacer en un sistema más complicado, tal como sucede en el sistema de Harper. En el siguiente capítulo, se aplicará el mismo método que se ha utilizado en esta sección, justamente para estudiar las propiedades de localización en el sistema de Harper.

## Capítulo 3

# Localización y espectro de la ecuación de Harper

### 3.1 Deducción de la ecuación de Harper

En este capítulo, se discutirán las propiedades de localización en la llamada ecuación de Harper. Antes de iniciar dicho estudio, conviene dar algunos antecedentes del origen y propiedades de dicha ecuación.

La ecuación de Harper en una dimensión aparece cuando se considera el problema electrónico cuántico en una red periódica sobre la que se aplica un campo magnético. Para entrar en materia, consideremos una red cuadrada con espaciamiento entre átomos dado por  $a$ , sometida a un campo magnético uniforme y constante  $H$  perpendicular a ella. La ecuación de Schrödinger en la aproximación de amarre fuerte correspondiente a la red sin campo, escrita en el espacio de momentos  $k$  está dada por,

$$E(\mathbf{k})\Psi(\mathbf{k}) = 2E_0(\cos K_x a + \cos K_y a)\Psi(\mathbf{k}). \quad (3.1)$$

Para introducir el campo magnético, debemos realizar el llamado acoplamiento mínimo, el cual consiste en sustituir el momento  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$  por el operador  $\mathbf{p} - (e\mathbf{A}/c)$ , donde  $\mathbf{A}$  es el vector potencial magnético que satisface,

$$\mathbf{H} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (3.2)$$

Al realizar esta sustitución en Eq. (3.1), el hamiltoniano efectivo contendrá términos con los operadores de translación  $\exp(ap_x/\hbar)$  y  $\exp(ap_y/\hbar)$ . Dependiendo de la norma del vector, estos términos podrán contener diversas fases. Una de las elecciones más simples de  $\mathbf{A}$  para un campo uniforme constante en la dirección  $z$ , consiste en escoger la llamada norma de Landau  $\mathbf{A} = (0, x, 0)$ , ya que así sólo aparecen fases en la dirección  $y$ .

Finalmente, al introducir esta norma en la ecuación de Schrödinger para una función de onda bidimensional, se obtiene la siguiente ecuación de valores propios,

$$E_0 \left( \Psi(x+a, y) + \Psi(x-a, y) + e^{-ieHax/\hbar c} \Psi(x, y+a) + e^{+ieHax/\hbar c} \Psi(x, y-a) \right) = E\Psi(x, y),$$

y que estamos considerando una red cuadrada,  $x = na$ ,  $y = ma$ . Además, definimos una nueva variable adimensional  $\epsilon = E/E_0$ , y proponemos una solución del tipo

$$\Psi(na, ma) = e^{i\nu m} \psi(n). \quad (3.3)$$

Finalmente, introduciremos un parámetro adimensional dado por,

$$\alpha = a^2 H / 2\pi(\hbar c/e), \quad (3.4)$$

que corresponde a la razón que existe entre el flujo magnético que pasa en una celda respecto del flujo cuántico.

Al realizar todas estas sustituciones, la ecuación de Schrödinger que habíamos considerado se transforma en una ecuación unidimensional, llamada de Harper [38],

$$\psi(n+1) + \psi(n-1) + 2\cos(2\pi n\alpha - \nu)\psi(n) = \epsilon\psi(n). \quad (3.5)$$

Aún mas, si se introduce un parámetro de acoplamiento  $\lambda$  para el campo magnético, se llega a la ecuación generalizada de Harper,

$$\psi(n+1) + \psi(n-1) + 2\lambda \cos(2\pi n\alpha - \nu)\psi(n) = \epsilon\psi(n), \quad (3.6)$$

la cual será la ecuación a estudiar en el resto de la presente tesis.

## 3.2 Cálculo del espectro

Debido a su carácter unidimensional, el espectro de la ecuación de Harper puede encontrarse mediante la técnica de las matrices de transferencia, como se vio en capítulos anteriores. En el presente caso se tiene,

$$M(n) = \begin{pmatrix} \epsilon - 2\lambda \cos(2\pi n\alpha - \nu) & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Una vez mas, la matriz de transferencia total es la multiplicación de cada matriz en cada paso. Si existe una periodicidad en el sistema, la matriz  $M(n)$  se repetiría cada  $q$  pasos, es decir, el producto de matrices consiste en una repetición de bloques de tamaño  $q$ . Esto impone una condición sobre el entero  $\alpha$ , el cual debe satisfacer lo siguiente para algún entero  $p$ ,

$$2\pi(n + q)\alpha - \nu = 2\pi n\alpha - \nu + 2\pi p. \quad (3.7)$$

Esta condición equivale a pedir que  $\alpha$  sea de la forma,

$$\alpha = p/q, \quad (3.8)$$

es decir,  $\alpha$  debe ser un número racional para que el sistema presente periodicidad. De aquí que el parametro  $\alpha$  tenga un papel primordial sobre la naturaleza del espectro; si  $\alpha$  es racional, podemos decir que las funciones de onda corresponderan a ondas planas de Bloch, de carácter no-localizado. Para valores de  $\alpha$  irracional, la naturaleza del espectro es mucho más compleja.

En la Fig. 3-1, mostramos las bandas permitidas de energía para diferentes valores de  $\alpha$ . Este esquema tiene una estructura fractal, y se le ha llamado “Mariposa de Hofstadter” [36].

El otro parámetro que juega un papel clave dentro de la naturaleza del espectro es  $\lambda$ . Esto puede verse de manera simple al considerar una propiedad muy interesante, la cual es obtenida al realizar una transformación al espacio de Fourier, mediante la siguiente sustitución en la ecuación de Harper [37],

$$\psi(n) = e^{ikn} \sum_{l=-\infty}^{l=\infty} f(l) e^{il(2\pi\alpha n + \nu)}. \quad (3.9)$$

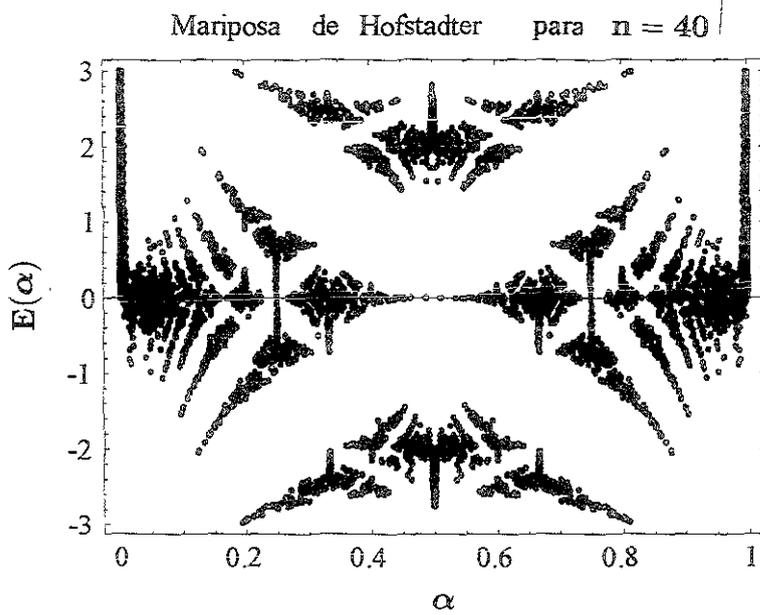


Figura 3-1: *Mariposa de Hofstadter. Espectro de energías permitidas en función de la parte fraccionaria de  $\alpha$  que varía entre cero y uno para  $\lambda = 1$ .*

Esta transformación nos conduce a una ecuación en el espacio recíproco, donde los coeficientes  $f(l)$  de cada armónico de Fourier están dados por,

$$f(m+1) + f(m-1) + \frac{1}{\lambda} \cos(2\pi\alpha m + k) f(m) = \frac{2E}{\lambda} f(m). \quad (3.10)$$

la cual corresponde a la ecuación de Harper original, con unos nuevos parámetros definidos del siguiente modo,

$$\lambda^* = \frac{1}{\lambda}, \quad \nu^* = -k, \quad \epsilon^* = \frac{2E}{\lambda}. \quad (3.11)$$

Esta propiedad se conoce como autodualidad, y permite dar algunas características cualitativas del espectro y la localización de los estados propios. Ahora bien, si encontramos una solución localizada en el espacio recíproco de manera que se cumpla,

$$\sum_m |f(m)|^2 < \infty, \quad (3.12)$$

entonces, la función de onda en el espacio real será de naturaleza extendida, ya que

$$\sum_n |\psi(n)|^2 = \infty,$$

de acuerdo al bien conocido principio de incertidumbre de Heisenberg. Si en la ecuación de Harper el parámetro  $\lambda$  tiende a cero, entonces las soluciones serán muy parecidas a las observadas en un cristal, es decir, son extendidas y por lo tanto en el espacio de Fourier las soluciones están localizadas. Pero esto justamente significa que las soluciones de la ecuación de Harper en el espacio real, con un parámetro  $\lambda^*$  que tiende a cero están localizadas, ya que la forma de la ecuación es idéntica. De aquí se sigue que al estudiar el comportamiento ante variaciones de  $\lambda$ , bastaría barrer entre 0 y 1. El comportamiento para  $\lambda$  mayores podría obtenerse al usar la propiedad de autodualidad. Un punto importante lo constituye el valor  $\lambda^* = 1/\lambda^*$ , el cual se satisface cuando  $\lambda = 1$ . En este valor, las ecuaciones en el espacio real y recíproco son exactamente iguales, y poco puede decirse mediante este argumento. Así, puede pensarse en que cuando  $\lambda = 1$ , ocurre una transición en el tipo de localización; para  $\lambda < 1$ , son extendidas y para  $\lambda > 1$  están localizadas. Si  $\lambda = 1$ , se cree que el espectro es de tipo fractal, con funciones de onda autosimilares [37].

### 3.3 Estabilidad en la ecuación de Harper

En esta sección utilizaremos la técnica de estabilidad de la traza para estudiar las propiedades de localización de la ecuación de Harper. En particular, nos interesa observar la transición entre un espectro con estados extendidos a localizados a medida que variamos el parámetro  $\lambda$ , considerando que el parámetro  $\alpha$  es un número irracional. Así mismo, tendremos la ocasión de utilizar esta técnica para estudiar los estados críticos o fractales, los cuales no han podido ser caracterizados adecuadamente.

Empezaremos por calcular los coeficientes de Lyapunov de la función de onda, tal y como se definen usualmente. En las Figs. 3-2 y 3-3 se aprecia dicho cálculo para dos cadenas de 2000 sitios, una con  $\lambda = 1$  y la otra con  $\lambda = 2$ . En líneas negras se indican las energías que corresponden a los estados propios. Primero, podemos comprobar lo dicho previamente en capítulos anteriores; los coeficientes de Lyapunov definidos en la manera usual, tienden a

cero para las energías propias, por lo cual no pueden utilizarse para investigar propiedades de localización. Este es un hecho importante que debe tenerse en cuenta al realizar afirmaciones concernientes sobre localización.

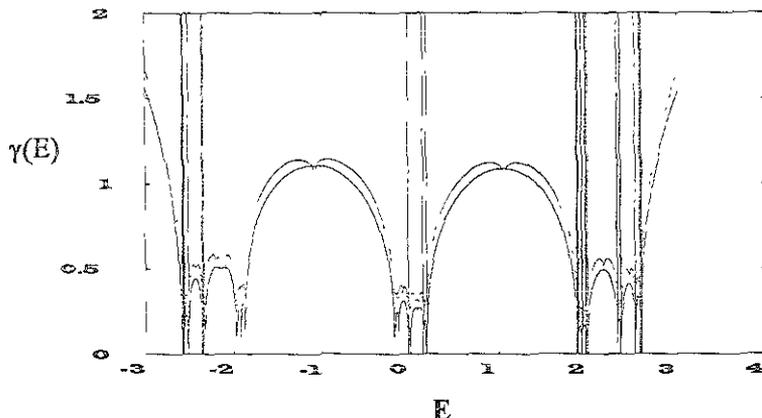


Figura 3-2: La curva sólida corresponde al coeficiente de Lyapunov de la función de onda para  $\lambda = 1$  con  $\alpha = (\sqrt{5} - 1)/2$ . La curva punteada es el coeficiente de Lyapunov de la traza usado en el sentido de la teoría de estabilidad.

En segundo lugar, observamos un comportamiento parabólico en las energías que corresponden a las brechas. De acuerdo a lo expuesto en el capítulo 2, esto puede deberse a la existencia de un punto estable en el mapeo de la traza. Para comprobar este hecho, en la Fig. 3-3, hemos incluido el coeficiente de Lyapunov de la traza de la matriz de transferencia, pero usado en el sentido de la teoría del caos [38]. Se puede observar que los máximos de las parábolas corresponden exactamente con los mínimos de los coeficientes de Lyapunov. Esta Fig. 3-3 también ilustra un punto muy importante, la diferencia entre los coeficientes de Lyapunov definidos para la función de onda, y los definidos en términos de la estabilidad de la traza.

Debido a que los coeficientes de Lyapunov definidos en el sentido usual dan poca información acerca de las propiedades de localización, podemos utilizar el escalamiento de bandas para evaluar dichas propiedades. Para empezar, podemos darnos cuenta de que la relación entre

localización y el ancho de bandas es válida, si graficamos las bandas permitidas en función del parámetro  $\lambda$ , tal como se muestra en la Fig. 3-4, donde ilustramos regiones para  $\lambda < 1$  y  $\lambda > 1$ , que corresponden a regiones donde se encuentran estados propios que son extendidos, críticos y localizados respectivamente, como lo probaremos más adelante.

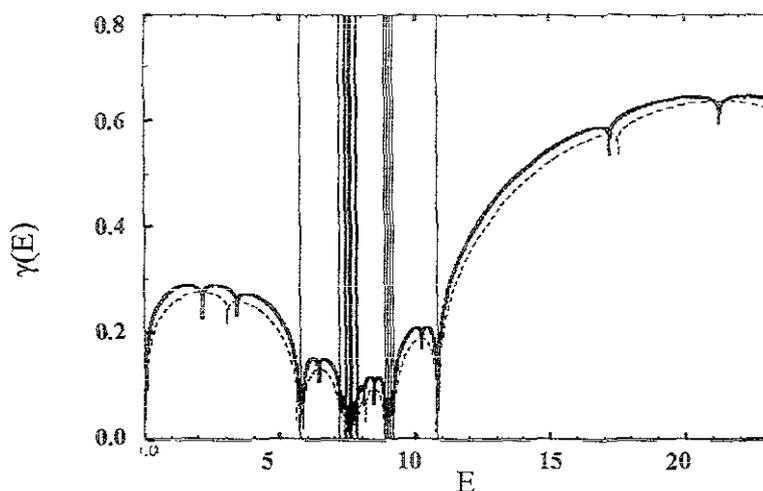


Figura 3-3: La curva punteada muestra el coeficientes de Lyapunov de la traza de la matriz de transferencia para la ecuación de Harper, mientras que la curva sólida muestra los coeficientes de Lyapunov de la función de onda para  $\lambda = 2$ . Las bandas verticales indican las energía permitidas.

Para estudiar la localización, utilizaremos las técnicas expuesta en el capítulo 2. Para ello se desarrollaron programas en Matemática y Fortran, que permiten obtener la longitud de localización para una cadena de Harper. Estos programas han sido incluidos en los apéndices de esta tesis para su consulta.

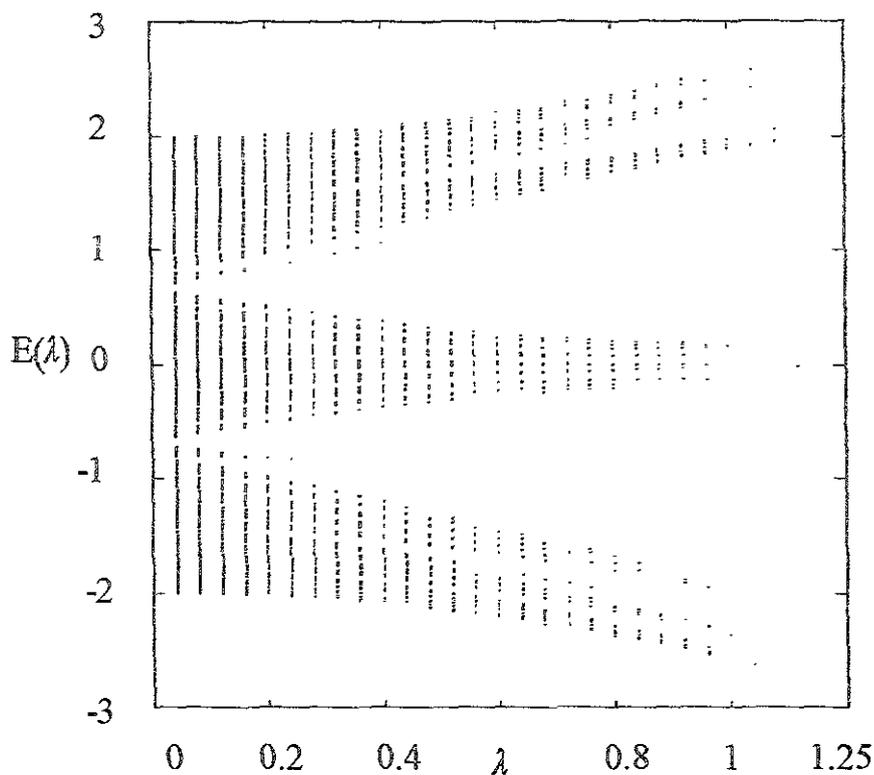


Figura 3-4: Espectro de energías  $E$  en función de  $\lambda$  para  $\alpha = (\sqrt{5} - 1)/2$ . Observamos que cuando  $\lambda$  aumenta es más difícil encontrar energías o estados propios.

Dicha longitud de localización, fue obtenida mediante la fórmula (2.16), es decir, se calculó el ancho de las bandas del espectro de Harper, el cual se obtiene al encontrar los puntos en los cuales el cuadrado de la traza de la matriz de transferencia es cuatro, tal y como se explicó en la sección (2.3.2). A estos coeficientes, los hemos denotado por  $\sigma(E)$ , en lugar de  $\gamma(E)$ , debido a que como se demostró en dicha sección, los coeficientes obtenidos mediante el escalamiento de bandas, coinciden con la definición de los coeficiente de Lyapunov usados en el sentido usado en teoría del caos y sistemas no-lineales.

En las Figs. 3-5, 3-6, 3-7, 3-8, 3-9, 3-12, 3-13 presentamos los coeficientes  $\sigma(E)$  pero calculados según la fórmula 2.21, es decir, evaluando el logaritmo del ancho de banda dividido por el número de sitios. Hemos escogido tres valores característicos de  $\lambda = 0.5, 1.0, 1.25$ , para redes de diferentes tamaños ( $n$ ). Estos valores corresponden a espectros con estados extendidos, críticos y localizados respectivamente, y por esta razón los hemos escogido.

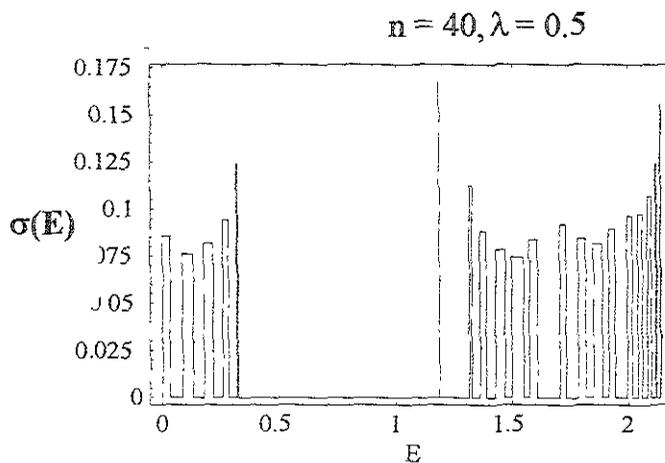


Figura 3-5: El coeficiente  $\sigma(E)$  para  $\lambda = 0.5$ , y 40 sitios.

En las Figs. 3-5, 3-6, 3-7 presentamos  $\sigma(E)$  cuando  $\lambda = 0.5$ , pero para tres tamaños de cadena,  $n = 20, 40$  y 200 sitios. Obsérvese que los valores de  $\sigma(E)$  son cada vez más pequeños, lo cual indica que los estados son extendidos, ya que la banda no decrece a la misma velocidad que aquella con la cual crece el número de sitios.

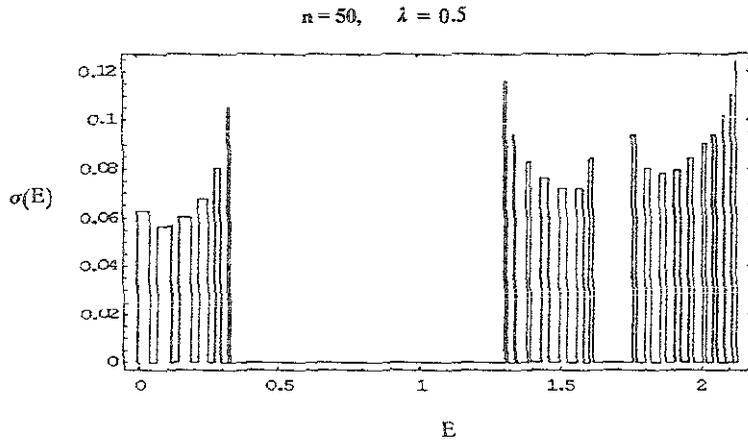


Figura 3-6: Coeficiente  $\sigma(E)$  para  $\lambda = 0.5$  y 50 sitios

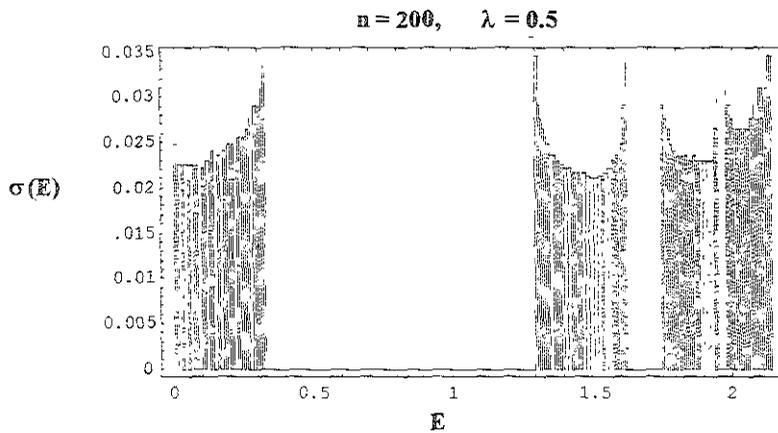


Figura 3-7: Coeficiente  $\sigma(E)$  para  $\lambda = 0.5$  y 200 sitios

La forma es la misma que la anterior (Fig 3-6), se ve con más detalle debido a que el ancho de bandas es muy pequeño, pero el coeficiente  $\sigma$  es mucho más pequeño. Estos resultados coinciden con aquellos propuestos por Aubry [36], ya que los estados están extendidos.

Ahora presentamos un par de gráficas (3-8, 3-9) para  $\lambda = 1$  con  $n = 40$  y  $n = 50$  sitios. Puede observarse que  $\sigma(E)$  es más pequeño cuando la cadena tiene más sitios, por lo cual no podrían calificarse como estados localizados, sino que puede ser considerados como estados extendidos. Sin embargo, este valor de  $\lambda$  corresponde a estados críticos porque el espectro es fractal para  $\lambda = 1$ .

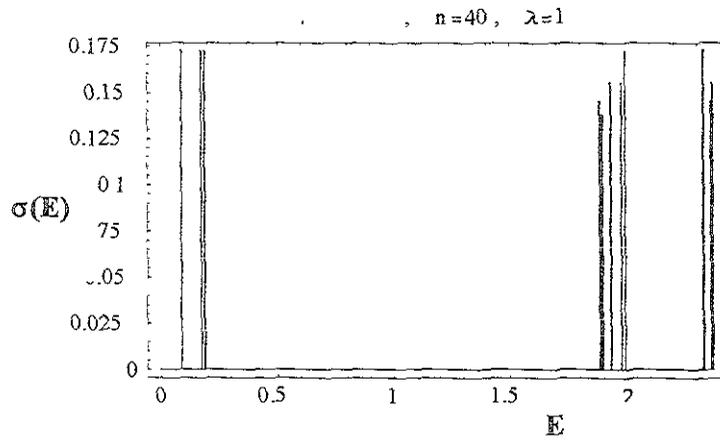


Figura 3-8:  $\sigma(E)$  para una cadena con  $\lambda = 1$  y 40 sitios.

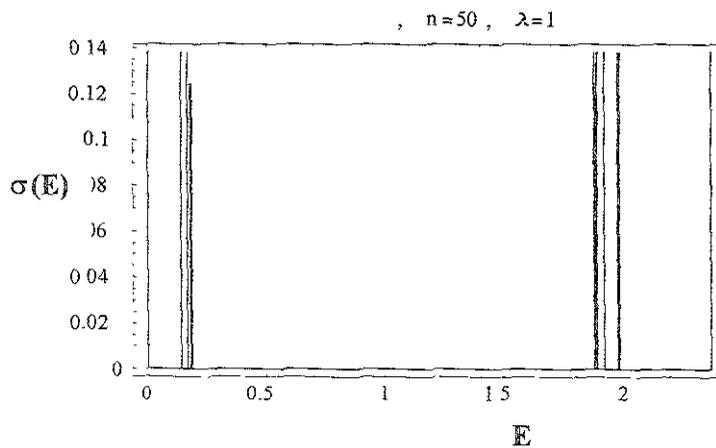


Figura 3-9: Conforme los sitios aumentan  $n = 50$ , el coeficiente  $\sigma$  tiende a cero (con  $\lambda = 1$ ).

Sin embargo, para caracterizar mejor la función de onda, podemos utilizar la versión modificada de  $\sigma(E)$  que permite sacar los exponentes característicos de la función de onda en el caso de que la función de onda siga una ley de potencias.

Para ello, utilizamos la expresión,

$$\beta(E) = \frac{\ln W_i}{\ln n},$$

que tiende un valor finito cuando  $n$  tiende a infinito si los estados son críticos. Las figuras 3-10 y 3-11, muestran la evolución de estos valores para una red con  $n = 30$  y  $n = 50$  respectivamente, para  $\lambda = 1$ .

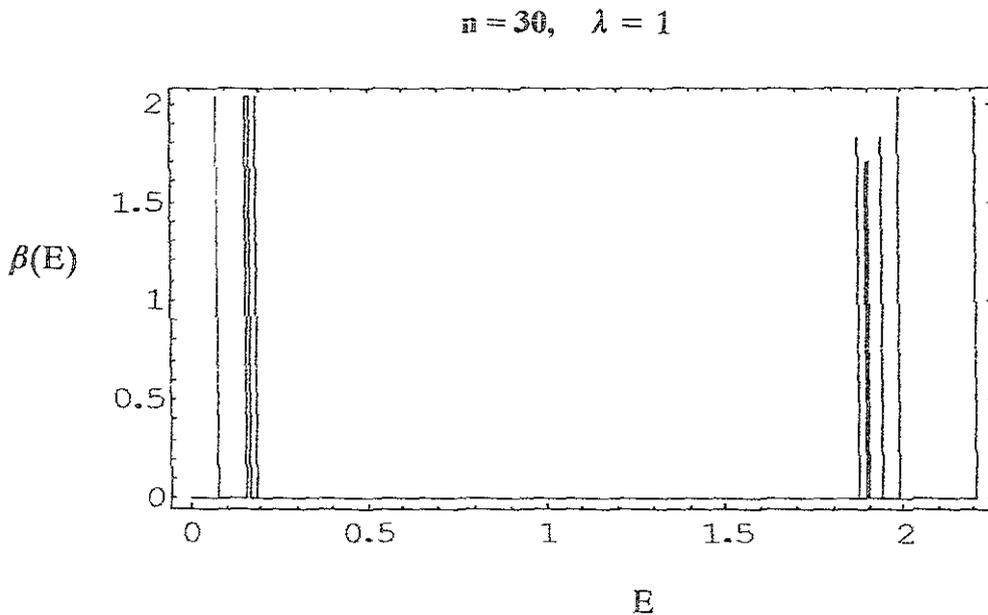


Figura 3-10: Coeficiente  $\beta$  de una cadena con 30 sitios. Si se compara con la figura [3.11], puede observarse que los valores casi no varían, lo cual indica la existencia de estados críticos.

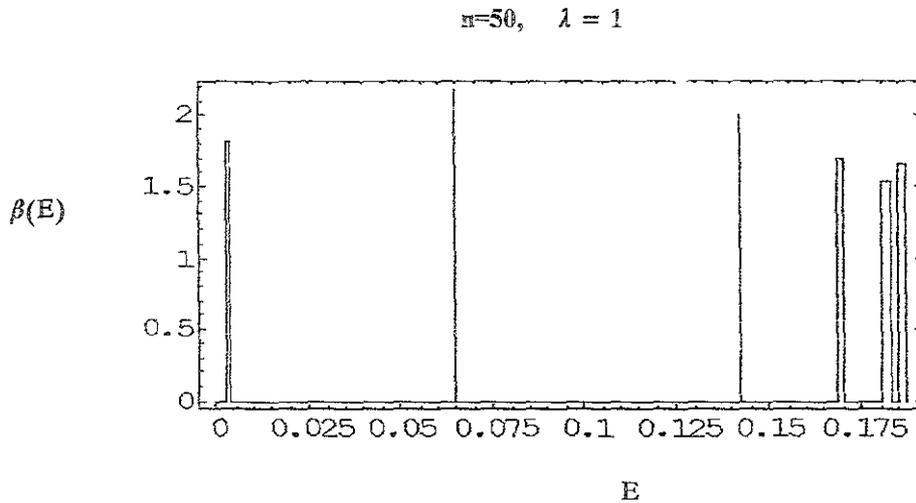


Figura 3-11: Coeficiente  $\beta(E)$  para  $\lambda = 1$  para una cadena de 50 sitios.

Nótese que en la gráfica 3-11 para  $n = 50$ , aparece una amplificación de sólo una zona del espectro, la razón de esto es que al volverse mas finas las bandas, es mas difícil encontrar energías permitidas debido a la naturaleza fractal del espectro. Por ejemplo, debe escogerse un estado en particular y estudiar su evolución. Puede observarse que el coeficiente  $\beta(E)$  de  $E = 0.065$  no decrece con el tamaño de la red, lo cual es indicativo de estado críticos, lo cual confirmaría la hipótesis de Aubry [37] de que la transición de estados localizados a extendidos pasa por una región de estados críticos cuando  $\lambda = 1$ .

En las figuras 3-12 y 3-13 se presentan los resultados para  $\lambda = 1.25$  con  $n = 20$  y  $n = 27$  respectivamente. En este caso, presentamos el seguimiento de algunas bandas a medida que crece el sistema, ya que el decaimiento exponencial del ancho de las bandas hace muy difícil encontrar estados localizados a medida que crece el tamaño de la red.

Sin embargo, los valores de  $\sigma(E)$  no se reducen con el tamaño de la red, lo cual indica que los estados no son extendidos, sino localizados.

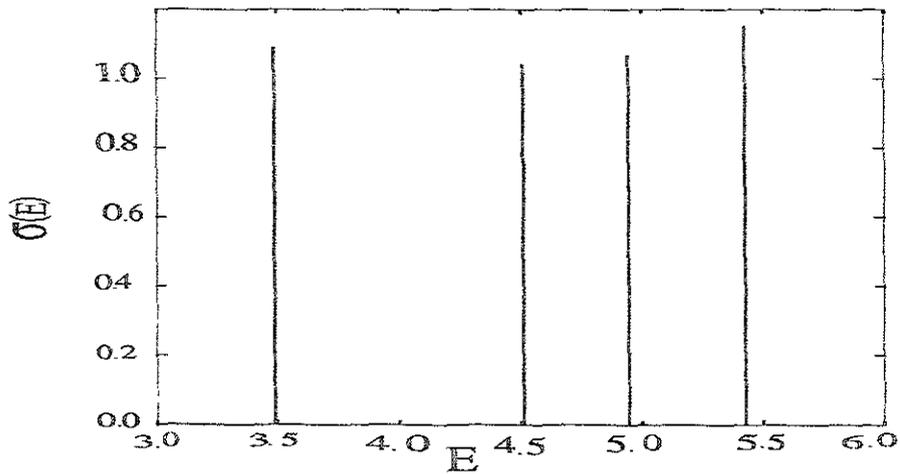


Figura 3-12: Se seleccionan las 3 primeras banda del espectro para una cadena de 20 sitios y lo amplificamos, para  $\lambda = 1.25$  y comparar su magnitud  $\sigma \sim 0.1$ , con otra cadena con más sitios,

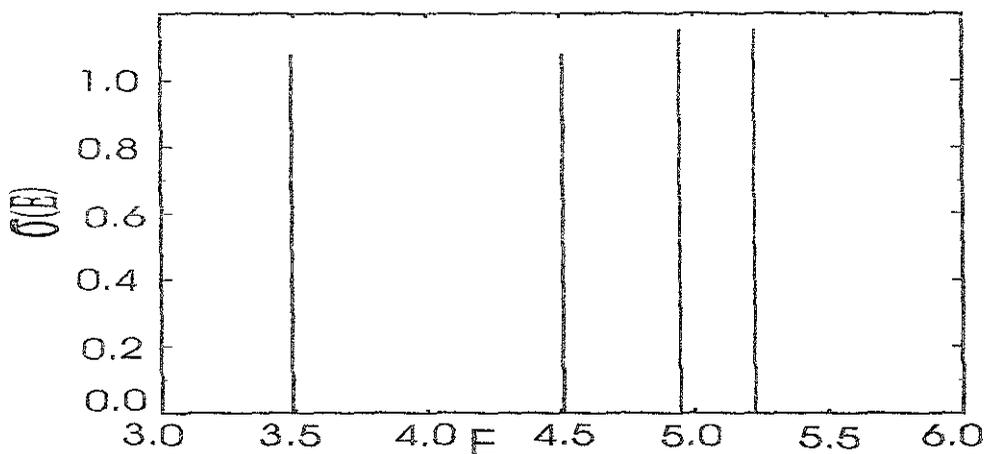


Figura 3-13: Aquí vemos las 3 primeras bandas amplificadas para una cadena de 27 sitios con  $\lambda = 1$ . Observamos que la magnitud del coeficiente no decae ( $\sigma \sim 0.1$ ), conforme aumentamos los sitios, lo que indica la existencia de estados localizados.

La existencia de estados localizados, detectados mediante el método expuesto en la presente tesis, puede compararse con el método usual de los coeficientes de Lyapunov calculados mediante la norma de la matriz de transferencia. En la Fig. 3-14, presentamos dicho coeficiente para dos redes de tamaño  $n = 20$  y  $n = 27$  sitios y  $\lambda = 1.25$ . Puede verse claramente que para los estados permitidos, los coeficientes se van a cero cuando variamos el tamaño de la red, por lo cual no puede hablarse de una convergencia hacia un valor dado. De este modo, se confirma una vez más lo expuesto en el capítulo 2, es decir, que los coeficientes de Lyapunov usuales se van a cero siempre que exista un estado permitido.

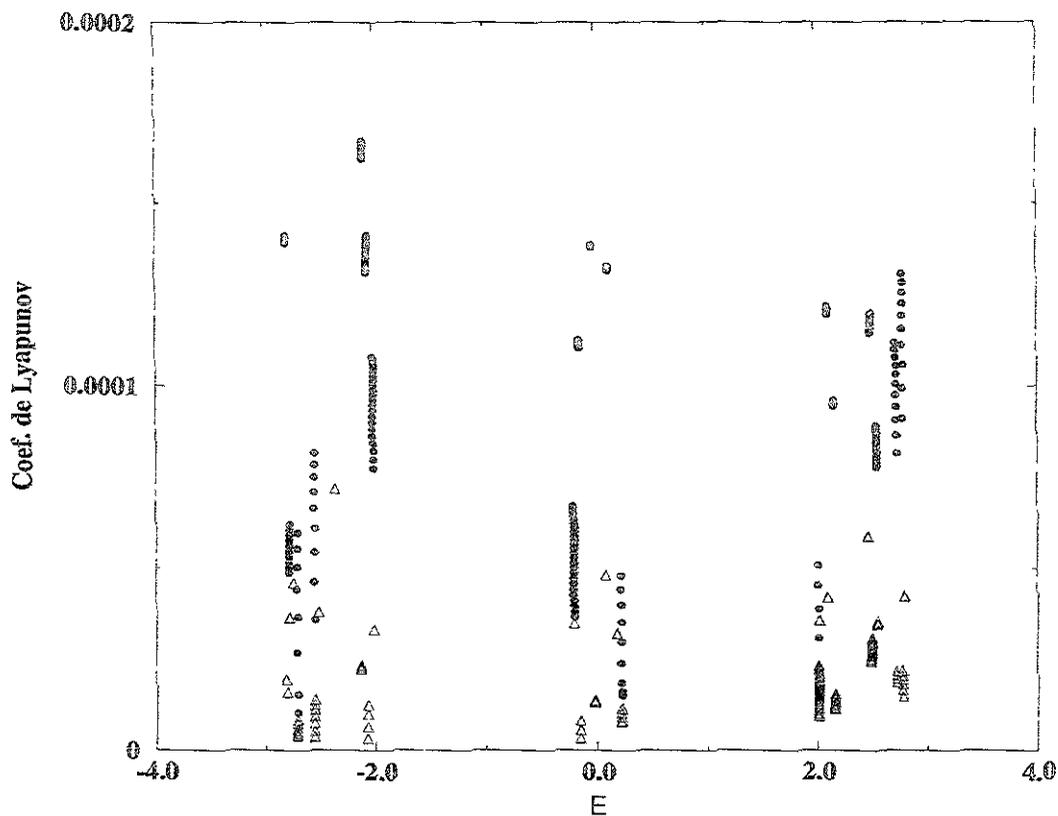


Figura 3-14: Los (●) círculos representan el coeficiente de Liapunov de los estados permitidos de la cadena de 20 sitios y los (△) triángulos representan la cadena de 27 sitios. Notamos que este coeficiente decrece cuando el número de sitios aumen

Como se pudo ver en este capítulo, la ecuación de Harper es rica en cuanto a sus propiedades de localización, por lo cual resulta útil para verificar el método del escalamiento de bandas para medir localización. Aquí surge de manera natural, la pregunta de si estos comportamientos permanecen al considerar defectos, los cuales siempre existen en cualquier sistema. En el próximo capítulo se aborda dicho problema, y como se verá, los resultados resultan ser muy interesantes.

## Capítulo 4

# Defectos en la cadena de Harper

### 4.1 Defectos

Otra manera de probar la teoría del escalamiento para estudiar la localización, consiste en introducir defectos en la cadena de Harper; ya que pueden producirse estados localizados, tal como se verá en el transcurso del presente capítulo, aún más, el presente estudio nos permite discutir los efectos de impurezas en espectros fractales, los cuales se ha sugerido que son inestables aún con muy poco desorden [39].

Para entender el origen de esta inestabilidad, así como la aparición de estados localizados, debe utilizarse una técnica perturbativa para las funciones de Green. En este capítulo se estudiarán dichas funciones y la técnica de perturbaciones mencionada. Esto nos permitirá entender los resultados que se presenten al final del capítulo para la cadena de Harper.

### 4.2 Funciones de Green

En física, es muy común tener que resolver problemas que satisfacen una ecuación diferencial del tipo,

$$\hat{L}(\mathbf{r})\phi_n(\mathbf{r}) = \lambda_n\phi_n(\mathbf{r}), \quad (4.1)$$

donde  $\widehat{L}(\mathbf{r})$ , es un operador diferencial lineal y  $\phi_n(\mathbf{r})$  es una función propia que es ortonormal, es decir, si  $\phi_m(\mathbf{r})$  es también función propia se cumple que,

$$\int \phi_n^*(\mathbf{r})\phi_m(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} = \delta_{nm},$$

y además el conjunto de  $\{\phi_n(\mathbf{r})\}$  sigue la relación de completitud,

$$\sum_n \phi_n(\mathbf{r})\phi_n^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

Este tipo de ecuación aparece por ejemplo en la electrodinámica al tratar de resolver la ecuación de Poisson, o en la mecánica cuántica bajo la forma de la ecuación de Schrödinger. El carácter lineal del operador  $\widehat{L}(\mathbf{r})$  nos indica que cualquier función que sea una suma de soluciones será también una solución, y de igual manera, si consideramos que la ecuación diferencial contiene un término que sea una fuente (por ejemplo, en el caso de la ecuación de Poisson la fuente es una densidad de carga en el espacio), podemos considerarla como una superposición de fuentes puntuales. De este modo, si resolvemos la ecuación para una fuente puntual, la solución para una fuente en general consistirá en la superposición de la solución puntual. Por lo tanto, la solución puntual tiene un carácter fundamental, porque contiene toda la información relevante sobre el comportamiento del sistema, y se le conoce como función de Green. Más concretamente, la función de Green se define como la solución de la siguiente ecuación diferencial inhomogénea,

$$\left(z - \widehat{L}(\mathbf{r})\right) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (4.2)$$

donde  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z)$  satisface ciertas condiciones si  $\mathbf{r}$  y  $\mathbf{r}'$  están en una superficie de frontera  $s$ . La variable  $z$ , que aparece en la ecuación anterior es una variable compleja, donde definiremos  $\lambda \equiv \text{Re}(z)$ , y  $s \equiv \text{Im}(z)$ . Una manera particularmente útil de trabajar con la función de Green, consiste en introducir un espacio vectorial abstracto, utilizando el formalismo de Dirac de *ket* y *bra* de la mecánica cuántica, esto nos permite escribir las siguientes convenciones.

$$\begin{aligned} \phi_n(\mathbf{r}) &\equiv \langle \mathbf{r} | \phi_n \rangle, \\ \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\widehat{L}(\mathbf{r}) &\equiv \langle \mathbf{r} | \widehat{L} | \phi_n \rangle. \end{aligned}$$

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) \equiv \langle \mathbf{r} | G(z) | \phi_n \rangle,$$

donde en esta nueva notación la función de Green satisface la siguiente ecuación de operadores,

$$[z - \widehat{L}]G(z) = 1,$$

formalmente, esta ecuación se resuelve despejando  $G(z)$ ,

$$G(z) = \frac{1}{z - \widehat{L}}.$$

Utilizando la relación de completitud de las funciones de onda se llega a,

$$G(z) = \frac{1}{z - \widehat{L}} \sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = \sum_n \frac{1}{z - \widehat{L}} |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = \sum_n \frac{|\phi_n\rangle \langle \phi_n|}{z - \lambda_n}, \quad (4.3)$$

que en la representación  $r$  queda como,

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) = \sum_n \frac{\phi_n(\mathbf{r}) \phi_n^*(\mathbf{r}')}{z - \lambda_n}. \quad (4.4)$$

Debido a que  $\widehat{L}$  es en general un operador hermitiano, sus valores propios  $\lambda_n$  serán reales, lo cual significa que de la Ec.(4.3),  $G(z)$  es una función analítica en todo el plano complejo  $z$ , excepto en el eje real, donde los polos de la función de Green corresponden justamente a los valores propios de  $\widehat{L}$ . La existencia de estos polos, sugiere el uso de un procedimiento de límite para estudiar el comportamiento de la función cerca de un polo. Siguiendo esta idea, definimos dos funciones de Green del siguiente modo,

$$\begin{aligned} G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) &= \lim_{s \rightarrow 0^+} G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \lambda + is). \\ G^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) &= \lim_{s \rightarrow 0^+} G^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \lambda - is). \end{aligned}$$

Estas dos ecuaciones pueden reescribirse del siguiente modo,

$$G^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) = P \sum_n \frac{\phi(\mathbf{r}), \phi^*(\mathbf{r}')}{\lambda - \lambda_n} \mp i\pi \sum \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \phi(\mathbf{r}) \cdot \phi^*(\mathbf{r}'). \quad (4.5)$$

donde fue usada la igualdad,

$$\lim_{y \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm iy} = P \frac{1}{x} \mp i\pi \delta(x),$$

y  $P$  denota la parte principal de la función, tal como se define en la teoría de las variables complejas [40]. Si en la Ec. (4.5), integramos sobre  $r$ , llegamos a

$$\text{Tr}G^\pm(\lambda) = P \sum_n \frac{1}{\lambda - \lambda_n} \mp i\pi \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n).$$

En la formula anterior,  $\eta = \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n)$ , es justamente la densidad de estados, es decir, la cantidad de estados en que hay en el intervalo  $[\lambda, \lambda + d\lambda]$ , esto nos permite llegar a una fórmula que resulta ser extremadamente útil, ya que relaciona la función de Green con la densidad de estados  $\eta$ ,

$$\eta = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im}[\text{Tr}G^\pm(\lambda)]. \quad (4.6)$$

La teoría anterior puede ser aplicada inmediatamente al hamiltoniano de enlace fuerte, donde el operador  $\hat{L}(\mathbf{r})$  debe ser sustituido por  $H$ , de donde la función de Green queda escrita como,

$$G(E \pm is) = \frac{1}{E \pm is - H}.$$

A manera de ejemplo, podemos encontrar la función de Green de una cadena periódica, lo cual posteriormente nos servirá para comparar los efectos de introducir impurezas en sistemas no periódicos. En este caso, el hamiltoniano está dado por,

$$H = \sum_l t (|l\rangle \langle l+1| + |l\rangle \langle l-1|),$$

las funciones de onda propias son del tipo de Bloch, y vienen dadas por,

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{ikz} |i\rangle,$$

siendo las energías correspondientes de cada estado con vector de onda  $k$ ,

$$E(k) = 2 \cos(ka),$$

y  $a$  es la separación entre sitios. Sustituyendo estas expresiones en la Ec.(4.4), llegamos a que la función de Green, es un operador cuyos elementos  $l$  y  $m$  son,

$$G_{lm}(E) = \langle l | G(E) | m \rangle = \frac{e^{i\theta|l-m|}}{2t\sqrt{x^2-1}}, \quad (4.7)$$

definiéndose a  $x$  como,

$$x = \frac{E + i\epsilon}{2t},$$

siendo  $\theta$ ,

$$\theta = \tan^{-1} \frac{\sqrt{1-x^2}}{x}.$$

La densidad de estados se obtiene al aplicar la Ec.(4.6),

$$\eta(E) = \frac{1}{\pi\sqrt{4t^2 - E^2}},$$

si  $E$  esta ente  $-2$  y  $2$ .

### 4.3 Sistemas con impurezas

En esta sección consideraremos el problema de una impureza substitucional, en una cadena. En el capítulo 2, se había estudiado de manera particular el problema de una impureza en una cadena perfecta; sin embargo, en esta sección se estudiará el problema desde el punto de vista más general que nos permitira además comprobar los resultados obtenidos previamente. Para entrar en materia, consideramos un hamiltoniano del sistema sin impurezas, que denotaremos por  $H_0$ , el cual en general tiene la forma,

$$H_0 = \sum_n (V_n |n\rangle \langle n| + t|n\rangle \langle n+1| + t|n\rangle \langle n-1|).$$

La impureza substitucional tiene el efecto de cambiar la auto energía en el sitio donde susti-

tuye a uno de los átomos que estaban ahí previamente. Esto puede verse como una perturbación al hamiltoniano  $H_0$ , de modo que el hamiltoniano del sistema con una impureza puede escribirse de la siguiente manera,

$$H = H_0 + H_1,$$

siendo  $H_1$  la perturbación debida a la impureza susbtitucional en el sitio  $l$ ,

$$H_1 = |l\rangle \delta \langle l|.$$

El problema a resolver consite en encontrar cómo se modifica el espectro y las propiedades de localización debido a la perturbación. El método más conveniente para atacar este problema es el cálculo de la función de Green del sistema perturbado ( $G$ ). Para ello, calcularemos esta función en términos de la función de Green del sistema no perturbado ( $G_0$ ) y  $H_1$ . Empezamos por escribir a  $G$  de acuerdo a su definición,

$$G = \frac{1}{E - H} = \frac{1}{E - (H_0 + H_1)},$$

pero de la definición de  $G_0$ , la ecuación anterior puede escribirse como,

$$G = \frac{G_0}{1 - G_0 H_1},$$

y si desarrollamos al operador  $(1 - G_0 H_1)^{-1}$  en serie de potencias llegamos a,

$$G = G_0(1 + H_1 G_0 + H_1 G_0 H_1 G_0 + \dots), \tag{4.8}$$

lo que a su vez puede reescribirse de una manera más compacta, llamada ecuación de Dyson,

$$G = G_0 + G_0 H_1 (G_0 + H_1 G_0 H_1 G_0 + \dots) = G_0 + G_0 H_1 G.$$

En el caso de una sola impureza, la serie perturbativa que aparece en la Ec.(4.8), toma una forma particularmente simple,

$$G = G_0 + \delta G_0 |l\rangle (1 + \delta \langle l| G_0 |l\rangle + \delta^2 (\langle l| G_0 |l\rangle)^2 + \dots) \langle l| G_0,$$

de donde finalmente llegamos a la expresión para la función de Green perturbada,

$$G = G_0 + \frac{\delta G_0 |l\rangle \langle l| G_0}{(1 - \delta \langle l| G_0 |l\rangle)}.$$

La densidad de estados del sistema con la impureza se obtiene inmediatamente al considerar la parte imaginaria de la traza  $G$ , de donde,

$$\eta(E) = \eta_0(E) - \frac{\delta}{\pi} \text{Im} \left[ \sum_n \frac{\langle n| G_0 |l\rangle \langle l| G_0 |n\rangle}{1 - \delta \langle l| G_0 |l\rangle} \right].$$

La ecuación anterior indica que la función de Green tiene nuevos polos, que corresponden a los modos de impureza. Estos nuevos polos, corresponden a las energías que satisfacen,

$$\langle l| G_0(E_c) |l\rangle = \frac{1}{\delta}. \quad (4.9)$$

Esta ecuación nos da una información muy importante, ya que sólo puede llevarse a cabo cuando la parte imaginaria de  $\langle l| G_0(E_c) |l\rangle = 0$ , debido a que  $1/\delta$  es real. Esto sólo puede cumplirse en una brecha energética del espectro sin perturbar, dado que la parte imaginaria de la función de Green es proporcional a la densidad de estados en una energía dada.

Por ejemplo, en el problema estudiado en el capítulo 2 (una cadena lineal con una impureza), se encontró que el modo de impureza aparecía fuera del espectro, aún más, podemos comprobar el resultado obtenido previamente usando la técnica de la función de Green. Usando la Ec.(4.9) y sustituyendo la expresión (4.7), llegamos a,

$$\frac{1}{\sqrt{E^2 - 2t^2}} = \frac{1}{\delta},$$

que es exactamente la misma condición encontrada en el capítulo 2, mediante el método de la traza.

Así, al introducir una impureza en una cadena periódica, aparecen un estado fuera de la banda. En un espectro con una distribución fractal de brechas energéticas (por ejemplo, en la ecuación de Harper cuando  $\lambda = 1$ ), esperamos que aparezca un estado localizado en la impureza para cada brecha energética. Entonces, podemos esperar que un espectro fractal sea inestable

ante perturbaciones muy pequeñas, ya que la aparición de una infinidad de modos de impureza en cada brecha energética siempre está acompañada de una reducción del ancho de las bandas del espectro original. En la siguiente sección estudiaremos el efecto de una impureza en la ecuación de Harper.

#### 4.4 Inestabilidad en la ecuación de Harper debido a Impurezas

Para estudiar los efectos de las impurezas en la ecuación de Harper, consideraremos como el hamiltoniano no perturbado al hamiltoniano dado por la Ec. 3.6, y la perturbación será una impureza con autoenergía  $E = \sqrt{4 - \delta^2}$ , situada a la mitad de la cadena. En la Fig. (4-1), aparece el espectro de energías permitidas en función de  $\lambda$ . Puede observarse que el efecto es muy grande aún para  $\lambda$  muy pequeña; en particular se observa la aparición de nuevas brechas energéticas. Un examen cuidadoso del espectro en esta región nos permitió observar que esto se debe a que las bandas reducen su tamaño, lo cual puede ser explicado en términos de la discusión presentada en la sección anterior.

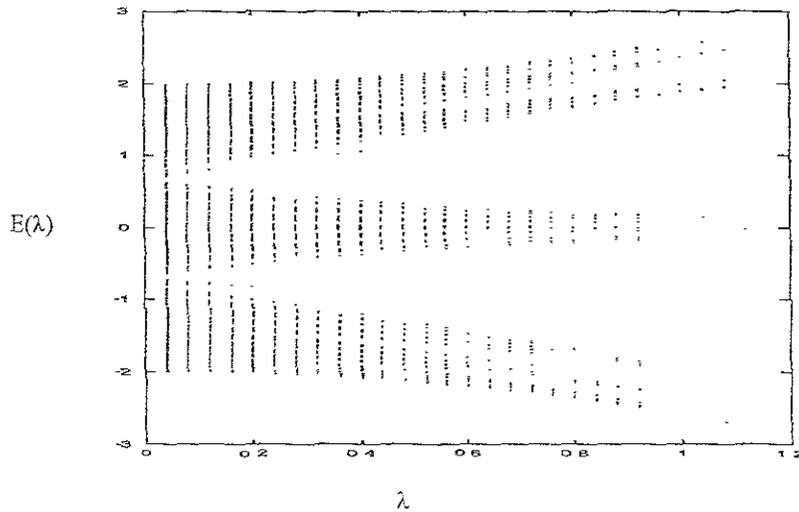


Figura 4-1: *El espectro de energías de una cadena de Harper con impurezas. Cada banda reduce su tamaño; aparecen estados localizados entre cada banda.*

Aún más, el hecho de que las bandas disminuyan su tamaño significa que los estados tienden

a ser más localizados, aunque de por sí aparecen modos localizados en las brechas del espectro original. Esto puede comprobarse mediante la técnica del escalamiento de bandas, tal como se muestra en la Fig. 4-2, comparandola con la Fig.3-5

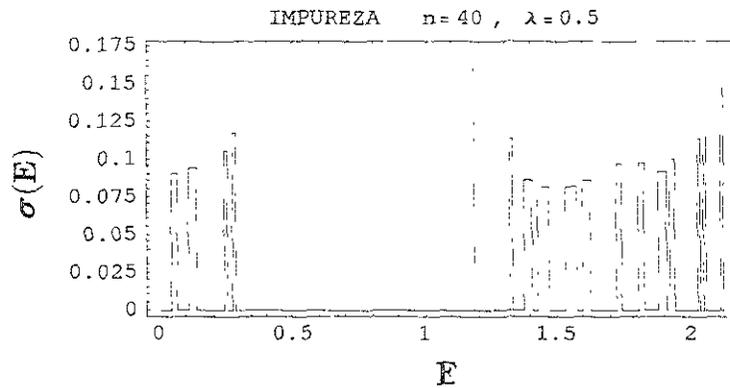


Figura 4-2: El ancho de bandas se reduce en comparación con la cadena sin impureza (Fig. 3.5).

Finalmente, en la Fig. 4-3, se muestra el efecto de la impureza sobre la mariposa de Hofstadter, comparándola con la de la Fig. 3-1, se observa que el número de puntos disminuye y aparecen puntos donde antes no habían.

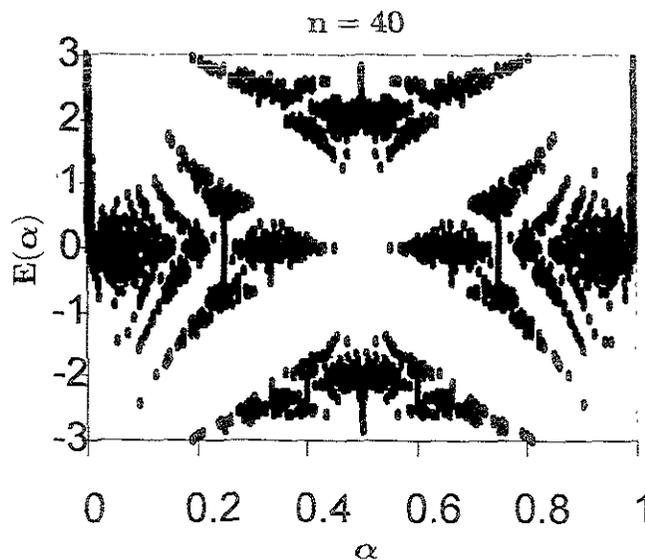


Figura 4-3: Mariposa de Hofstadter, con una impureza a la mitad de la cadena

## Capítulo 5

# Conclusiones

En esta sección, se darán las conclusiones finales del trabajo realizado, el cual, según se dijo al principio de la tesis, planteó la evaluación de las propiedades de localización en sistemas unidimensionales. Así, en el capítulo dos se discutió de manera amplia como evaluar dichas propiedades. Las conclusiones de las investigaciones realizadas son:

- 1. Las técnicas que usualmente son utilizadas para determinar el tipo de localización, tales como los coeficientes de Lyapunov, revelan que existen diversos problemas, entre ellos el más importante es la necesidad de conocer previamente donde se encuentra el sitio con mayor amplitud de la función de onda, lo cual es difícil de conocer en muchos casos. Si no se conoce su ubicación, el valor de este coeficiente tiende a cero independientemente del tipo de la función de onda, por lo cual no es confiable como herramienta para determinar la localización. En particular, se analizó el caso del modo localizado en una cadena periódica con una impureza, y se comprobó de manera numérica lo dicho anteriormente.*
- 2. Para evitar los problemas de los coeficientes de Lyapunov usuales, se desarrolló un método original para estudiar propiedades de localización. Este método está basado en el escalamiento de las bandas con el tamaño del sistema, las cuales se escalan según el traslape de las funciones de onda.*
- 3. Se encontró que este método proporciona una conexión natural entre las propiedades de localización y la estabilidad de la traza. En particular, se demostró que los estados lo-*

*calizados, corresponden a puntos fijos inestables de la traza, mientras que los estados extendidos corresponden a puntos sillas. Los estados críticos aparecen en mapeos de la traza no-lineales.*

4. *Mediante nuestro método, se determinó que la longitud de localización está dada por el coeficiente de Lyapunov de la traza, pero tomado en el sentido de estabilidad usado en la teoría del caos y sistemas no-lineales.*
5. *Para comprobar esta técnica en un caso sencillo, se resolvió analíticamente el problema de una cadena lineal con una impureza. El resultado coincide con los obtenidos por otros métodos.*

A continuación se estudiaron las propiedades de localización en la ecuación de Harper. Este sistema fue elegido porque variando un sólo parámetro, pueden obtenerse estados críticos, localizados y extendidos. De este modo, resultó ser un sistema muy útil para probar la técnica desarrollada. Las conclusiones muestran que:

6. *Se desarrolló un algoritmo original para implementar el método del escalamiento en sistemas unidimensionales. El algoritmo fué aplicado en diversos programas de computadora.*
7. *Nuestra técnica permite discernir entre los diferentes tipos de localización y evaluar las longitudes características o los coeficientes de escalamiento en el caso de estados críticos.*
8. *Se utilizó la técnica de los coeficientes de Lyapunov de la función de onda, y se comprobó que esta técnica no produce resultados confiables, aunque se uso está muy extendido en la literatura sobre el tema.*

Finalmente, se utilizó la misma técnica de escalamiento para estudiar las propiedades de localización en la ecuación de Harper con una sola impureza. Los resultados indican que:

9. *Los estados se vuelven más localizados y que aparecen muchos modos de impureza en las brechas del espectro de Harper sin perturbar. De hecho, se encontró que el espectro es altamente inestable ante una perturbación, ya que una impureza en un sólo sitio produce muchos modos localizados, a diferencia de una cadena lineal, en la cual aparece sólo uno.*

10. *Las bandas reducen drásticamente su ancho, de acuerdo a lo esperado si es que aparecen muchos modos de impureza.*
11. *La razón de este fenómeno fue entendida mediante el uso de una técnica perturbativa para las Funciones de Green.*

El presente trabajo abre nuevas interrogantes sobre diversos puntos, tales como la evaluación de la dimensión fractal del espectro de Harper con impurezas y su relación con los parámetros de localización de la función de onda. En particular, creemos que el uso de la teoría de la estabilidad para estudiar propiedades de localización será de mucha utilidad en trabajos futuros.

# Apéndice

Programas en matemática y fortran.

(\*Programa que calcula el espectro de energías  $E_n$ ,  
para una cadena de n sitios en la ecuación de Harper\*)

```

N = 40; (* Número de sitios *)
Δ = 0.001; (* partición *)
λ := 1.0;
u := 0; (* contador 1 *)
α := 0.0 (* energía inicial *)
energ := 2.5; (* energía final *)
β := ((energ - α) * (1/Δ)) - 1; (* contador 2*)
σ := Evaluate[(1.0 + √5.0) / 2.0]; (* sensibilidad *)
(* programa para calcular el producto de matrices
y calcular la traza de la matriz de transferencia *)
For[e = α, e <= energ,
  {u = u + 1, A = {{e - 2 * λ, -1}, {1, 0}},
  For[x = 1, x <= K,
    {mx = {{e - 2 * λ * Cos[2 * π * x * σ], -1}, {1, 0}},
    B = mx . A,
    A = B,
    }; x++],
  Cu = Abs[Sum[B[[i, i]], {i, 2}]],
  Tu := If[Cu <= 2, Q = 1, Q = 0],
  }; e += Δ]

```

```

(* Grafica el espectro de energías para el que
   la traza de la matriz de transferencia es menor que dos *)
(* Construye una tabla de las energías
   para las cuales la traza es menor que dos
   y el logaritmo del ancho de banda entre
   el número de sitios y los grafica *)
Ha := Table[{ $\alpha + (u - 1) * \Delta$ ,  $C_u$ }, {u, 1,  $\beta$ , 1}]
Harper := Table[{ $\alpha + (u - 1) * \Delta$ ,  $T_u$ }, {u, 1,  $\beta$ , 1}]
Aux = Extract[Harper, {1, 2}]
(*Print[" $\Delta =$ ",  $\Delta$ , " $, \alpha =$ ",  $\alpha$ , " $, \beta =$ ",  $\beta$ , " $, sitio K =$ ", K] *)
Cont2 = 0;
U = List[{ $\alpha$ , 0.0}];
For[u = 1, u <=  $\beta - 1$ ,
  {TU = Aux, TU1 = Extract[Harper, {u, 2}]},
  Aux = TU1,
  If[TU == 0, Contador = 0,
    {Contador = Contador + 1,
     If[TU1 == 0,
      {w =  $\Delta * Contador$ ,
       Cont2 = Cont2 + 1,
       L = Abs[Log[w] / K],
       xm =  $\alpha + (u * \Delta) - (w / 2)$ ,
       U = AppendTo[U, {xm - (w / 2), 0.0}],
       U = AppendTo[U, {xm - (w / 2), L}],
       U = AppendTo[U, {xm + (w / 2), L}],
       U = AppendTo[U, {xm + (w / 2), 0.0}],
       (*Print["xm = ", xm - (w / 2), ", U = ", U] *)
      }, P = 0]}}]; u++ ]
ListPlot[U, Frame -> True, PlotJoined -> True,
  FrameLabel -> {"E", " $\sigma(E)$ "}, PlotLabel -> "n=50,  $\lambda=1.15$ "]
(* guarda la gráfica en un archivo *)
Display["hn40L1.wmf", &, "Metafile"]

```

```

double precision E,de,T12,T11,T21,T22,M11,M12,M21,M22,TRA
ZA
double precision R11,R22,R12,R21,RD11,RD22,RD12,RD21,sca,A
UX
C*****
****
C Calcula el espectro usando la matriz de transferencia para una
C cadena de Harper
C*****
****
      TAU=(1.0+SQRT(5.0))/2.0
      PI=4.0*ATAN(1.0)
C      M= CADENA, N=numero de intervalos en energia,
C      MLAMB=LAMBDA
C      M1,2,3,5,8,13,21,34,55,89,144, 233, 377,610
C      987, 1597,2584, 4181, 6765, 10946
      M=40
      N=3000
      MLAMB=10
      de=(6.0/REAL(N))
      RLAMB DAMAX=1.2
      dlambda=(0.1/REAL(MLAMB))
      RO=0.5/TAU
      SHIFT=-3.0
      rlambda=1.5
      sca=1.0/1.5
      LO2=LOG(2.0)
      LOSCAM=LOG(SCA)*REAL(M)

      OPEN(4, FILE='c:\sts\lambdaxx.dat', STATUS='UNKNOWN')
C      OPEN(8, FILE='prueba1.dat', STATUS='UNKNOWN')

      DO 280 ilambda=1,MLAMB
      rlambda=0.3+(REAL(ilambda)-1.0)*(dlambda)
C      write(*,*) rlambda
      DO 270 ie=1,N
      E=(REAL(ie*de))+SHIFT
      M11=(E-2.0*rlambda)
      M12=-1.0
      M21=1.0
      M22=0.0
      DO 130 I=1,M
      T11=(E-2.0*rlambda*cos(2.0*pi*tau*I))
C      if (I.EQ.20) then
C      T11=E-1.5
C      endif
      T12=-1.0
      T21=1.0
      T22=0.0
      R11=T11*M11+T12*M21
      R12=T11*M12+T12*M22

```

```
R21=T21*M11+T22*M21
R22=T21*M12+T22*M22
M11=R11
M12=R12
M21=R21
M22=R22
```

130

```
CONTINUE
RTR=(M11+M22)
RTT=ABS(RTR)
if (RTT.LE.2.0) then
  write(4,*) rlambda,E
else
  write(4,*) 0,0
endif
```

C

```
C*****
C Guarda el valor no actualizado de KGAP para usarse
C en el calculo del tamaño del gap
C*****
```

270

```
CONTINUE
```

280

```
CONTINUE
CLOSE(4)
write(*,*) 'Fin del calculo, GAPS HARPER'
STOP
END
```

# Bibliografía

- [1] J.M. Ziman, *Models of disorder*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1979)
- [2] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics* (John Wiley & Sons, 1976).
- [3] J. P. McKelvey, *Física del del estado sólido y de semiconductores*, (Limusa, 1989).
- [4] Anderson, P. W., 1958, *Phys. Rev.* **109**. 1492.
- [5] Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello y T. V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 673 (1979).
- [6] R. Zallen, *The Physics of Amorphous Solids*, (Cambridge, University Press, London, 1998).
- [7] R. Landauer, J. C. Helland: *J. Chem. Phys.* **22**, 1655, (1954).
- [8] N. F. Mott, W. D. Twose: *Adv. Phys.* **22**, 1655 (1954).
- [9] R. E. Borland, *Proc. Phys. Soc.* **77** (1973).
- [10] F. J. Wegner, *Phys.* **B22**, 273, (1975).
- [11] B. I. Halperin, *Adv. Chem. Phys.* **13**. 123. (1967).
- [12] J. Hori, *Spectral Properties of Disordered Chains and Lattices* (Pergamon, London 1968).
- [13] E. H. Lieb, D. C. Mattis, *Mathematical Physics in One Dimension* (Academic, New York 1966).
- [14] D. Shechtman, D. Blech, D. Gratias, J. W. Cahn, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1951 (1984).
- [15] J. M. Models of Disorder (Cambridge, University Press, London, 1979).

- [16] T. Klein, C. Berger, D. Mayou, F. Cyrot-Lackman, *Phy. Rev. Lett.* **66**, 2907(1991).
- [17] S. J. Poon, *Adv. Phys.* **4**, 303(1992).
- [18] A. Sütő, in *Beyond Quasicrystals*, edited by F. Axel and D. Gratias, (Les Editions de Physique, France, 1994), p.483.
- [19] A. Cristiani, G. Paladin, A. Vulpiani, *Products of Random Matrices*, Vol. 104 of Springer Series in Solid State Physics, (Springer, Berlin, 1993).
- [20] Economou, *Green's Functions in Quantum Physics*, 2nd ed., Vol. 7 of Springer Series in Solid State Sciences (Springer, Berlin, 1983).
- [21] M. Kohmoto, *Phys. Rev.* **A37**, 1345 (1988).
- [22] T. Fujiwara, M. Kohmoto, T. Tokihiro, *Phys. Rev.* **B40**, 7413 (1989).
- [23] H. Tsunetsugu, T. Fujiwara, K. Ueda, T. Tokihiro, *Phys. Rev.* **B 43**, 8878 (1991).
- [24] M. Severin, R. Riklund *Phys. Rev.* **B39**, 10 362 (1989).
- [25] A. Sánchez, E. Maciá, F. Domínguez-Adame, *Phys. Rev.* **B49**, 147 (1994).
- [26] G. Nicolis, *Introduction to nonlinear science*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).
- [27] G.G. Naumis, J.L. Aragón, *Phys. Rev.* **B 54**, 15 079 (1996).
- [28] G.G. Naumis, J.L. Aragón, *Phys. Lett. A* **244**, 133 (1998).
- [29] E. Maciá, F. Domínguez-Adame, *Semicond. Sci. Technol.* **11**, 1041 (1996).
- [30] M. Kohmoto, L.P. Kadanoff, Ch. Tao, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 540 (1983).
- [31] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958).
- [32] C. Sire, in *Proc. of the 5th. International Conference on Quasicrystals*, edited by Ch. Janot and R. Mosseri, (World Scientific, Singapore, 1995), p. 415.
- [33] R.J. Elliott, A. Krumhansl, P.L. Leath, *Rev. Mod. Phys.* **56**, 514 (1974).

- [34] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, J.W. Cahn, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1951 (1988).
- [35] D.J. Thouless, *Phys. Rev. B* **28**, 4272 (1983).
- [36] Hofstadter D.R., *Phys. Rev. B* **14**, 2239 (1976).
- [37] Aubry S., en *The physics of Quasicrystals*, ed. por P. Steinhardt, P. Ostlund, World Scientific, Singapour, 1987, p. 554.
- [38] Harper, P.G., *Proc. Phys. Soc. Lond.* **A68** , 874 (1955).
- [39] G. G. Naumis, J. L Aragòn, *Phys. Rev. B* **54**, 15079 (1996).
- [40] R. V. Churchill, J. W. Brown, *Variables Complejas y sus aplicaciones*, 2°Ed. (Mc. Graw Hill, 1974)