

00382

6



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

CORRELACION Y TRANSPORTE DE
ELECTRONES EN SISTEMAS APERIODICOS

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO ACADÉMICO DE

DOCTOR EN CIENCIAS (FÍSICA)

P R E S E N T A :

R A U L O V I E D O R O A

288210

DIRECTOR DE TESIS: DR. CHUMIN WANG CHEN



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.

A mi esposa
Sonia Leticia

A mis padres
María de los Ángeles
Raúl

AGRADECIMIENTOS

Deseo agradecer el gran apoyo académico y personal que el Dr. Chumin Wang Chen me brindó constantemente a lo largo de mis estudios de posgrado, así como su dedicación al prepararme en la presentación de los exámenes generales para obtener el grado de maestría. Siempre estuvo al pendiente de los avances de la investigación doctoral, corrigiendo no pocas veces el curso de ellos. Tuve la suerte de aprender de él cómo puede aplicarse el método científico a todos los aspectos de nuestra vida diaria. Gracias Chumin.

Agradezco a la Dra. Julia Tagüeña Parga y al Dr. Rafael Barrio Paredes, miembros de mi Comité Tutorial, la crítica constructiva que hicieron a los reportes semestrales de mis estudios doctorales. Con sus comentarios y sugerencias, ellos realmente me alentaron a continuar en el difícil camino de la investigación. Gracias Julia y Rafael.

Agradezco a los integrantes de mi jurado, Dr. Gerardo García Naumis, Dr. Eleuterio Castaño Tostado, Dr. Luis Mochán Backal, Dr. Yuriy Rubo y Dr. Tatsuo Akachi Miyazaki, por su valioso tiempo dedicado a la revisión del borrador de la presente tesis y por sus importantes indicaciones que ayudaron a mejorar notablemente la presentación final de la misma.

Agradezco el apoyo moral de mis compañeros y amigos; ellos me alegraron a lo largo de los años que duró el desarrollo de los temas de la tesis: Luis Antonio P., Oracio N., Vicenta S., Miguel C., Elizabeth Ch. y Rocío N; especial gratitud les tengo a los tres primeros, quienes colaboraron en las investigaciones.

Agradezco al Instituto de Investigaciones en Materiales de la UNAM por permitirme utilizar un espacio en sus instalaciones, así como servicios bibliográficos y de computación.

Tengo un profundo cariño y respeto a la Universidad Nacional Autónoma de México por la formación que me ha dado continuamente a largo de la mayor parte de mi vida, desde la educación media hasta los estudios de doctorado.

Agradezco al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología y a la Dirección General de Asuntos de Personal Académico de la UNAM por las becas que me otorgaron para la realización de los estudios doctorales a través de los proyectos CONACyT-32148E y DGAPA-IN105999, respectivamente, así como a la Dirección General de Servicios de Cómputo Académico por permitir el acceso de la Supercomputadora Cray Y-MP4/432 mediante el proyecto UNAM-CRAY-SC008697. Asimismo, agradezco el apoyo PADEP-TESIS DOCTORAL, otorgado por la Coordinación General de Estudios de Posgrado de la UNAM, y la beca del Programa de Iniciación Temprana a la Investigación y a la Docencia, de la Fundación UNAM.

Especial gratitud le debo a mi familia, en particular a mi esposa, quien me apoyó incondicionalmente en todo momento. Lo hecho hasta ahora no hubiera sido posible sin la base que mis padres pusieron para mi superación personal.

Cd. Universitaria, a 22 de enero del 2001.

Resumen

En esta tesis se estudia el comportamiento electrónico en sistemas no periódicos dentro del modelo de Hubbard, particularmente la correlación electrónica, la localización y el transporte de los electrones en dichos sistemas. Hemos abordado el problema de dos electrones interactuantes, el cual puede mapearse a un problema de una sola partícula en un espacio de mayor dimensión, donde el desorden es tratado dentro de la aproximación del potencial coherente (*CPA*). Los resultados del *CPA* tienen una buena concordancia con los del promedio sobre el ensamble para sistemas finitos, y muestran un incremento de la energía de apareamiento conforme crece la diferencia de auto-energía en una aleación binaria desordenada. El diagrama de fase del estado base para el desorden en la interacción electrónica intra-atómica muestra regiones donde el apareamiento está prohibido para sistemas diatómicos ordenados pero no para el caso desordenado. Esto muestra que bajo ciertas circunstancias el desorden podría ayudar al apareamiento electrónico, y consecuentemente a la superconductividad. Por otro lado, hemos estudiado el transporte de electrones -íntimamente ligado a la correlación espacial de la función de onda de los mismos- en sistemas cuasiperiódicos, los cuales constituyen un caso particular del desorden estructurado en los sólidos. Este estudio se realiza dentro del modelo de amarre fuerte usando la fórmula de Kubo-Greenwood a temperatura cero. La conductividad *dc* obtenida se compara con la de Landauer. Hemos dedicado especial atención a los estados transparentes, cuya transmitancia es uno. La conductividad *ac* de estos estados, como una función de la frecuencia, presenta una mayor disminución que la de los sistemas periódicos, y ambas muestran mínimos. Asimismo, se demuestra que la conductividad *ac* es muy sensible a las condiciones de frontera del sistema. Finalmente, la localización de los estados cuánticos se analiza a través del exponente de Lyapunov y de la razón de participación. Se demuestra que esta última es una cantidad inapropiada para caracterizar los estados críticos en sistemas cuasiperiódicos.

Contenido

I	Introducción	3
II	Fundamentos	6
	II.1 Desorden en Sólidos	6
	II.2 Correlación Electrónica	10
	II.3 Modelo de Amarre Fuerte	12
	II.4 Función de Green	15
	II.5 Aproximación del Potencial Coherente (CPA)	17
	II.6 Fórmula de Kubo-Greenwood	25
III	Correlación Electrónica en Sistemas Desordenados	32
	III.1 Aleación Binaria Desordenada	33
	III.2 Espacio de Estados de Dos Partículas	35
	III.3 CPA y Promedio Configuracional.....	38
IV	Transporte Electrónico en Redes Cuasiperiódicas	43
	IV.1 Sistema de Fibonacci Mixto	44
	IV.2 Fórmula de Kubo en el Modelo de Amarre Fuerte	44
	IV.3 Conductividad dc.....	46
	IV.4 Localización Electrónica.....	47
	IV.5 Conductividad ac	50
V	Conclusiones	54
VI	Apéndice: Conductividad de una Cadena Periódica	56
	VI.1 Mínimos de la Conductividad ac	62
	VI.2 Aproximación para Frecuencias Pequeñas	63
	REFERENCIAS	65

I Introducción

A partir del surgimiento de la mecánica cuántica a principios del siglo XX, muchas propiedades físicas de los cristales se han estudiado en la aproximación del electrón independiente [1]. La presencia de la simetría traslacional conduce al llamado teorema de Bloch, el cual indica que la forma de la función de onda electrónica debe ser una onda plana modulada por una función periódica [2]. Cabe mencionar que estas funciones de ondas son coherentes con el potencial periódico, es decir, no son dispersadas por el mismo, por lo que la resistividad eléctrica se debe a las desviaciones de la red cristalina originadas por las vibraciones térmicas o la presencia de impurezas [3]. Asimismo, el potencial periódico conduce a la estructura de bandas y de ésta se ha podido explicar la diferencia de la conductividad eléctrica por más de treinta órdenes de magnitud entre un metal y un aislante [4].

En 1958, P.W. Anderson demostró que el desorden en el potencial electrostático puede conducir a la localización de los estados electrónicos dentro de la aproximación de electrones no interactuantes [5]. Esta predicción se ha confirmado mediante la teoría de escalamiento, donde Abrahams [6] encontró que en sistemas de una y dos dimensiones todos los estados están localizados independientemente del grado de desorden. Para sistemas tridimensionales existen bordes de movilidad que separan los estados localizados de los extendidos y la ubicación de estos bordes depende del grado de desorden. Por lo tanto, el comportamiento metálico o aislante de los materiales amorfos está gobernado por la posición del nivel de Fermi con respecto a dichos bordes.

En los últimos años, han habido evidencias de la existencia de estados metálicos en sistemas bidimensionales de baja densidad electrónica en varios dispositivos semiconductores. En particular, S.V. Kravchenko *et al.* [7] hallaron en un *MOSFET* (*metal-oxide-semiconductor field effect transistor*) de Si de alta movilidad que al aumentar la densidad de electrones, dR/dT -donde R es la resistencia eléctrica y T la temperatura- cambia de valores muy negativos a muy positivos, es decir, pasa del comportamiento aislante al metálico. Este hallazgo experimental ha renovado el interés en el estudio de la correlación electrónica en sistemas desordenados [8], ya que se cree que esta delocalización electrónica se debe a la correlación, la cual no fue considerada en la teoría de escalamiento de Abrahams.

Asimismo, se sabe que la superconductividad -fenómeno en el que los electrones están fuertemente correlacionados- es muy sensible al desorden [9]. En particular, en los superconductores de alta T_c , la baja dimensionalidad del sistema y la introducción aleatoria de impurezas o vacancias son elementos importantes que deben ser considerados. En general, la descripción teórica de lo que sucede cuando la correlación y el

I Introducción

desorden están presentes es un problema abierto de gran interés, ya que ambos de por sí no son fáciles de tratar por separado. En la presente tesis se estudia el apareamiento electrónico en sistemas desordenados dentro del modelo de Hubbard extendido, aplicando la aproximación del potencial coherente en el espacio de estados de dos partículas [10].

Recientemente, ha habido evidencia experimental [11] de la delocalización de electrones no interactuantes en superredes con desorden correlacionado de corto, así como de largo alcance [12]. Un caso particular de los sistemas aperiódicos con correlaciones de largo alcance lo constituyen los cuasicristales. Durante muchas décadas se creía que la simetría rotacional de orden cinco no es compatible con el orden de largo alcance. Sin embargo, en 1984, Shechtman, *et al.* [13] reportaron el primer patrón de difracción compuesto de puntos con simetría cinco en un compuesto de $AlMn$. A estos materiales que poseen un orden de largo alcance y una simetría rotacional puntual incompatible con la traslacional, se les conoce como *cuasicristales*.

La red de Fibonacci constituye un caso unidimensional típico de los cuasicristales. El estudio de la localización y transporte de electrones en dicha red ha sido de gran interés desde la obtención del cuasicristal de Fibonacci en aleaciones [14] y de las superredes de Fibonacci semiconductoras [15] y metálicas [16]. Se ha demostrado que los estados electrónicos en redes de Fibonacci no son extendidos ni localizados, sino *críticos*, es decir, cuyas funciones de onda son autosimilares en el espacio real -la autosimilaridad de una función se define como la invarianza de la misma ante el cambio de escala [17]-. Asimismo, el espectro de energía correspondiente es singularmente continuo [18] y constituye un conjunto de Cantor con medida de Lebesgue cero [17], es decir, el espectro está fragmentado en infinitas partes y su ancho total de banda es cero [19]. Por lo tanto, la conducción electrónica en estructuras cuasiperiódicas se espera que no sea balística como en las redes periódicas ni difusiva como en los sistemas desordenados [20]. Recientemente, se ha demostrado la existencia de estados transparentes con transmitancia *uno* en sistemas de Fibonacci mixtos [21], en los cuales tanto las autoenergías como las integrales de salto varían de acuerdo a la secuencia de Fibonacci. En esta tesis, se estudia el transporte de electrones en redes de Fibonacci a partir de la fórmula de Kubo-Greenwood a temperatura cero. Para el caso *dc*, hemos confirmado la existencia de los estados transparentes, así como de muchos estados con alta conductancia alrededor de los mismos. Para el caso *ac*, hemos encontrado que la conductividad de los estados transparentes, en función de la frecuencia, decae más rápidamente que la de los sistemas periódicos [22].

La presente tesis se organiza de la siguiente forma: en el capítulo II se hace una revisión de los conceptos y métodos empleados en el desarrollo de las investigaciones. En el capítulo III se estudia el problema de dos electrones en una aleación binaria aleatoria dentro del hamiltoniano de Hubbard extendido. El problema se aborda por

medio del promedio configuracional sobre cúmulos pequeños y los resultados se comparan con los obtenidos a partir de la aproximación del potencial coherente. En el capítulo IV, se analiza la localización y la conducción de los electrones en sistemas cuasiperiódicos. La localización se cuantifica mediante el coeficiente de Lyapunov y la inversa de la razón de participación. Asimismo, el transporte electrónico se investiga usando las fórmulas de Kubo-Greenwood y Landauer. Por último, en el capítulo V se da un resumen de los resultados y conclusiones principales de la tesis.

II Fundamentos

En este capítulo damos una descripción de los tipos de aperiodicidad que consideraremos a lo largo de la tesis. En particular, estamos interesados en sistemas con desorden sustitucional y en redes cuasiperiódicas. El comportamiento electrónico en estos sistemas se estudia, en primera aproximación, a través de un hamiltoniano de electrones independientes -el modelo de amarre fuerte- el cual se usa en esta tesis para el análisis de las propiedades de transporte y de localización. La correlación electrónica se investiga dentro del modelo de Hubbard usando la técnica de la función de Green y de la aproximación del potencial coherente. Con el fin de cimentar el trabajo de la presente tesis, en las siguientes secciones se discutirá en detalle cada uno de los conceptos mencionados.

II.1 Desorden en Sólidos

El desorden se define generalmente con respecto a cierto orden, es decir, se origina a partir del rompimiento del mismo. En los sólidos puede existir el orden traslacional, rotacional, de inversión, de espejo, de corto y largo alcance. En particular, un sistema puede no poseer uno o más de estos órdenes y conservar el resto. Por ejemplo, los cuasicristales tienen orden rotacional de *largo alcance*, el cual podría ser de simetría cinco, con ausencia de simetría traslacional. El arreglo atómico en los sólidos se investiga principalmente a través de experimentos de difracción, los cuales producen patrones de intensidad relacionados con la transformada de Fourier del arreglo atómico. El orden de largo alcance conlleva a un número finito -posiblemente muy grande- de componentes de Fourier, y, por lo tanto, a un patrón de difracción de puntos [23].

El mayor grado de orden espacial se encuentra en un *crystal*. Físicamente pensamos en una red de átomos o moléculas idénticos, empaquetados uniformemente en hileras y planos regulares que llenan el espacio disponible. Matemáticamente, nos referimos a la invarianza bajo las operaciones de traslación de una red; la situación física en algún punto \mathbf{r} del espacio se reproduce exactamente en cualquier otro punto del conjunto

$$\mathbf{r} + \mathbf{T} \equiv \mathbf{r} + n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3, \quad (1)$$

donde \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 y \mathbf{a}_3 son tres vectores no coplanares y n_1 , n_2 y n_3 son números enteros. En los cristales también se aplican las operaciones puntuales de grupo, tales como rotaciones alrededor de un eje, reflexiones o inversiones, las cuales transforman el sistema en sí mismo. En particular, en las redes cristalinas la simetría traslacional debe ser compatible con la simetría rotacional en cada punto de la red, lo cual conduce a las 14 *redes de Bravais* [1].

En general, en el estudio de los sistemas no cristalinos, tales como los sólidos amorfos y los cuasicristales, los teoremas que se demuestran para los cristales deben ser

II.1 Desorden en Sólidos

revisados y muchos de ellos ya no son válidos. Sin embargo, algunos rasgos de la red cristalina se pueden preservar. En una *aleación sustitucional aleatoria*, por ejemplo, ya no podemos asegurar que un tipo de átomo que se encuentra en r se encontrará en $r + 1$, a pesar de que la red puntual sigue siendo periódica.

A continuación describiremos las redes aperiódicas que son de interés en esta tesis para el estudio de sus propiedades electrónicas.

DESORDEN SUSTITUCIONAL

El tipo más simple de desorden es el de una aleación sustitucional aleatoria [24]. Frecuentemente es posible encontrar que un átomo A se reemplaza en un cristal perfecto por otro átomo B con una perturbación muy ligera en la red cristalina. Cuando los sitios sustituidos no forman una red regular tenemos un ejemplo de *desorden sustitucional*.

En general, los sólidos pueden considerarse como una red puntual más una base de átomos. Para el caso de la aleación sustitucional aleatoria, dicha red puntual es periódica y la decoración de cada punto (la base) puede variar de punto a punto con una determinada probabilidad; por ejemplo, en la aleación binaria $A_x B_{1-x}$ las probabilidades de encontrar los átomos A y B son x y $1 - x$, respectivamente, si suponemos que los átomos se distribuyen completamente al azar.

DESORDEN TOPOLÓGICO

En el *desorden topológico* se abordan sistemas donde la red de puntos no es un arreglo ordenado. Introducimos un conjunto de vectores $\{R_i\}$, donde R_i son las coordenadas del átomo i -ésimo en el espacio real. Por simplicidad supongamos que los átomos son químicamente idénticos. Los valores permitidos de las coordenadas atómicas están restringidos por la física de los átomos del sólido, es decir, el arreglo topológico del material depende fuertemente de la penetrabilidad y la isotropía de la interacción entre átomos vecinos.

Cadenas Lineales Desordenadas

Si el conjunto de cantidades escalares $\{R_i\}$ representa el arreglo de átomos a lo largo de una línea, tenemos una *cadena lineal*. Una cadena ordenada se define mediante el conjunto

$$R_l = la,$$

donde l es un entero y a es el parámetro de la red. Si las distancias R_i son variables aleatorias, tenemos un *sistema unidimensional desordenado topológicamente*.

El estudio de dicho sistema no es meramente un ejercicio académico. En el benzoato de cobre ($Cu(C_6H_5COO)_2 \cdot 3H_2O$), por ejemplo, el empaquetamiento de grandes

II Fundamentos

grupos planos de benzoato permite que los iones magnéticos de Cu^{++} estén dentro de la distancia de la interacción de intercambio a lo largo del eje c , y mantiene estas cadenas bien apartadas en las direcciones a y b de la red monoclinica [25]. Se dice que este material es un antiferromagneto lineal simple de Heisenberg. Un comportamiento similar se encuentra en el diclorato de dipiridina de cobre ($CuCl_2 \cdot 2NC_5H_5$), donde la interacción de intercambio pasa a través de los enlaces $Cu - Cl - Cu$ entre los iones de Cu^{++} en cadenas a lo largo del eje c . Se ha encontrado una clase de materiales inorgánicos con cadenas magnéticas con la fórmula general ($AlkMagHal_3$), en donde Alk representa un metal alcalino, Mag es un ión magnético de un metal de transición y Hal es un halógeno.

Un ejemplo de cadena electrónica lo constituye el polímero "inorgánico" de nitruro de azufre $(SN)_x$, el cual muestra conductividad metálica debido al transporte electrónico a lo largo de cadenas extendidas de enlaces químicamente no saturados [26]. El comportamiento metálico lineal también se observa en el grupo de tetracianoplatinatos [27]. Los metales lineales más interesantes son análogos a una sustancia nombrada, en forma abreviada, (NMP) ($TCNQ$), los cuales tienen la conductividad eléctrica más alta entre los sólidos puros orgánicos [28, 29].

CUASICRISTALES

El año de 1984 trajo una gran sorpresa en el campo de la cristalografía. Todos los grupos puntuales consistentes con la periodicidad habían sido listados desde el siglo XIX [30]. En particular, el grupo puntual icosaedral no está permitido. Sin embargo, se ha reportado un bello patrón de rayos-X con simetría icosaedral en compuestos de $AlMn$ preparados mediante enfriamiento rápido [13]. La teoría apropiada fue desarrollada independientemente por D. Levine y P. Steinhardt [31], quienes acuñaron las palabras *cuasicristal* y *cuasiperiódico*.

Los cuasicristales son una realización intermedia entre la red periódica y los sistemas desordenados. Se caracterizan por no tener periodicidad; sin embargo, el arreglo atómico no se distribuye al azar sino bajo ciertas reglas bien definidas y puede llenar el espacio. Por ejemplo, para el caso unidimensional, la llamada cadena de Fibonacci puede construirse empleando un proceso de inflación comenzando con dos segmentos de longitudes A y B [32]. Se adopta la regla $A \rightarrow AB$ y $B \rightarrow A$, la cual conduce a las secuencias consecutivas $S_0 = A$, $S_1 = AB$, $S_2 = ABA$, $S_3 = ABAAB$, $S_4 = ABAABABA$, $S_5 = ABAABABAABAAB$, etc. Esta secuencia está relacionada con los números de Fibonacci dados por

$$F_n = F_{n-1} + F_{n-2}, \text{ con } F_0 = 1 \text{ y } F_1 = 2.$$

Los números de Fibonacci satisfacen la siguiente relación:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{F_{n+1}}{F_n} = \tau \equiv \frac{(1 + \sqrt{5})}{2} = 1.61803398 \dots,$$

II.2 Correlación Electrónica

siendo τ la *razón dorada*.

Existen otros métodos para construir sistemas cuasiperiódicos, por ejemplo, el *método de corte y proyección* genera redes cuasiperiódicas en un espacio d -dimensional a partir de una estructura periódica en un espacio N -dimensional (con $N > d$) [32]. Definimos $f(x, y)$ como una función periódica en las direcciones x y y ; por lo tanto, la descomposición de Fourier de esta función lleva a

$$f(x, y) = \sum_{p, q} \alpha_{p, q} \exp(2i\pi(px + qy)).$$

La función cuasiperiódica $g(x) = f(x, y = x/\tau)$ en un espacio unidimensional es una restricción de una función periódica en el espacio bidimensional hacia una línea recta con pendiente irracional.

El método de corte y proyección se ilustra en la Fig. 2.1 para la construcción de la cadena de Fibonacci. Definimos una ventana de ancho B a lo largo de una línea \mathcal{D} de pendiente p . Los vértices de la red cuadrada en el espacio bidimensional que se encuentran en la ventana se proyectan perpendicularmente sobre \mathcal{D} . Estos puntos proyectados generan una secuencia de dos longitudes diferentes A y B , de modo que $A/B = p$. Cuando p es racional, la cadena es periódica, mientras que cuando es irracional, la cadena se hace cuasiperiódica. La cadena de Fibonacci corresponde a una pendiente $p = 1/\tau$.

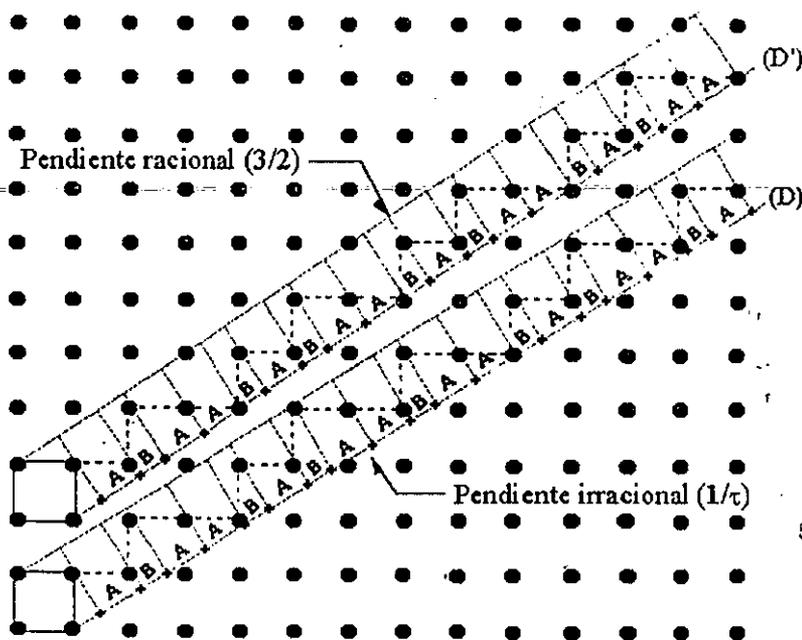


Fig. 2.1 Construcción de la cadena de Fibonacci y un aproximante a través del algoritmo de corte y proyección.

II Fundamentos

II.2 Correlación Electrónica

Una vez definido el arreglo atómico del sistema, requerimos introducir el hamiltoniano para estudiar sus propiedades electrónicas. Dentro de un sólido real los electrones se encuentran en constante interacción. Existen fenómenos, tales como la conductividad eléctrica y la capacidad calorífica, cuyos análisis pueden realizarse adecuadamente sin considerar explícitamente la interacción entre electrones sino como un apantallamiento estático de la red, es decir, en estos fenómenos es suficiente suponer una teoría de electrón independiente. Para otros fenómenos, como por ejemplo la superconductividad y el efecto Hall cuántico fraccionario, dicha teoría no es satisfactoria para describirlos: se requiere de un modelo que tome en cuenta las interacciones electrónicas en forma dinámica. En la presente tesis abordaremos ambos tipos de fenómenos. El objetivo de esta sección es introducir el hamiltoniano que requerimos para abordar el problema de la correlación electrónica, y en la sección II.3 definiremos un modelo de electrón independiente.

Una de las formas más generales y simples de incluir la interacción electrón-electrón es el modelo de Hubbard, el cual está expresado en el lenguaje de la segunda cuantización, es decir, es un escenario de muchas partículas; en la siguiente subsección detallaremos este lenguaje.

Formalismo de Segunda Cuantización

Una forma conveniente de escribir el hamiltoniano de muchas partículas es mediante el uso de los llamados *operadores de creación* (a_i^+) y *de aniquilación* (a_i) de excitaciones en el estado i -ésimo del sistema [33]. Cuando estas excitaciones son fermiones, que es el caso de los electrones, estos operadores obedecen las siguientes relaciones de anticonmutación:

$$\begin{cases} [a_i, a_j^+]_+ \equiv a_i a_j^+ + a_j^+ a_i = \delta_{ij}, \\ [a_i^+, a_j^+]_+ = [a_i, a_j]_+ = 0. \end{cases}$$

Los operadores a_i^+ y a_i actúan sobre funciones de onda en la *representación de números de ocupación*:

$$|\psi\rangle = |n_1, n_2, n_3, \dots, n_S\rangle,$$

donde n_i es el número de partículas que se encuentran en el estado i -ésimo, cuyos valores están limitados a 0 o 1 para el caso de los fermiones, y S es el número de estados que posee el sistema. Por ejemplo, $|1_1, 0_2, 1_3, 1_4\rangle \equiv a_1^+ a_3^+ a_4^+ |0\rangle$, donde $|0\rangle$ es el estado vacío para estas excitaciones. Definimos al operador a_i^+ que crea una partícula en el estado i -ésimo del siguiente modo [33, 34]:

$$a_i^+ |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_S\rangle = (-1)^{n(i)} \sqrt{1 - n_i} |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots, n_S\rangle, \quad (2)$$

II.2 Correlación Electrónica

donde

$$n(i) \equiv \sum_j^{i-1} n_j.$$

Análogamente, definimos el operador a_i que destruye una partícula en ese estado:

$$a_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_N\rangle = (-1)^{n(i)} \sqrt{n_i} |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots, n_N\rangle. \quad (3)$$

Podemos reescribir las Ecs. (2) y (3) en forma abreviada como:

$$a_i^+ |n_i\rangle = (-1)^{n(i)} \sqrt{1 - n_i} |n_i + 1\rangle, \quad a_i |n_i\rangle = (-1)^{n(i)} \sqrt{n_i} |n_i - 1\rangle.$$

entonces,

Es fácil convencerse que se cumplen las siguientes relaciones:

$$a_i^+ |1_i\rangle = 0 \text{ y } a_i |0_i\rangle = 0,$$

donde el símbolo 0 indica un estado con módulo cero. Asimismo

$$a_i^+ a_i |0_i\rangle = 0, \quad a_i^+ a_i |1_i\rangle = |1_i\rangle,$$

por lo que es evidente que el operador n_i , definido como

$$n_i \equiv a_i^+ a_i,$$

juega el papel del *operador de número de ocupación* del estado i -ésimo.

Hamiltoniano de Hubbard

El hamiltoniano que describe la correlación electrónica en sólidos expresado en la base de las funciones de Wannier, las cuales están centradas en los sitios atómicos y son ortogonales entre sí, se conoce como el *hamiltoniano de Hubbard*. En el modelo de una sola banda este hamiltoniano está dado por [35]

$$H = \sum_{i,\sigma} \varepsilon_i a_{i,\sigma}^+ a_{i,\sigma} + \sum_{i,j \neq i,\sigma} t_{ij} a_{i,\sigma}^+ a_{j,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \sum_{\sigma,\sigma'} (ij | \frac{1}{r} | kl) a_{i,\sigma}^+ a_{j,\sigma'}^+ a_{l,\sigma'} a_{k,\sigma}, \quad (4)$$

donde ε_i es la energía que cuesta colocar un electrón en el estado de Wannier asociado al sitio i -ésimo, (el cual supondremos que es de simetría s), t_{ij} es proporcional a la probabilidad de salto entre los sitios i y j , $\sigma = \uparrow, \downarrow$ es el espín de los electrones y $(ij | \frac{1}{r} | kl)$ es

$$(ij | \frac{1}{r} | kl) \equiv e^2 \int \int dr dr' \frac{\phi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_k) \phi^*(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_j) \phi(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_l)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (5)$$

siendo $\phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ la función de Wannier centrada en el sitio con vector de posición \mathbf{R}_i .

La mayoría de los fenómenos físicos ocurren alrededor del nivel de Fermi y, para ciertos casos, dichos fenómenos pueden describirse a partir del modelo de una sola banda con simetría s ; por ejemplo, en los superconductores de alta temperatura crítica existen tres bandas cercanas al nivel de Fermi y ellas se pueden representar razonablemente bien mediante modelos de una sola banda [36]. El término dominante en la Ec.

II Fundamentos

(5) es $U_i \equiv (ii|\frac{1}{r}|ii)$, el cual para los electrones 3d en metales de transición es del orden de $20eV$. El siguiente término en importancia es $V_{ij} \equiv (ij|\frac{1}{r}|ij)$, siendo i y j vecinos más cercanos; estas integrales son del orden de $6eV$ para los electrones 3d [35].

El principio de Pauli requiere que para las contribuciones U_i , $\sigma = -\sigma'$. Con estas consideraciones, obtenemos el llamado *hamiltoniano de Hubbard extendido* [37]:

$$H = \sum_{i,\sigma} \varepsilon_i a_{i,\sigma}^+ a_{i,\sigma} + \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} a_{i,\sigma}^+ a_{j,\sigma} + \sum_i U_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} + \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} V_{ij} n_i n_j, \quad (6)$$

donde $n_{i,\sigma} = a_{i,\sigma}^+ a_{i,\sigma}$ y la ocupación electrónica total en el sitio i es $n_i = n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}$. Los parámetros U_i y V_{ij} son las interacciones electrónicas intra-atómica en el sitio i e inter-atómica en los sitios vecinos i y j , respectivamente. Dicho hamiltoniano -Ec. (6)- lo emplearemos en esta tesis para analizar el problema de dos electrones interactuantes en redes desordenadas.

II.3 Modelo de Amarre Fuerte

En la presente sección nos restringiremos a discutir un modelo dentro de la aproximación de un solo electrón; este modelo nos permitirá analizar las propiedades de transporte y localización de electrones en redes cuasiperiódicas.

La ecuación de Schrödinger estacionaria para este caso puede escribirse como

$$H|\Psi\rangle = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] |\Psi\rangle = E|\Psi\rangle, \quad (7)$$

donde $|\Psi\rangle$ es la función de onda de un electrón sujeto al potencial $V(\mathbf{r})$ de los átomos del sólido, el cual para un cristal es una función periódica y consecuentemente $|\Psi\rangle$ puede ser una función de Bloch [1]. Un camino alternativo a la teoría de Bloch, la cual se aplica únicamente a redes periódicas, es expresar la función de onda $|\Psi\rangle$ como una combinación lineal de las funciones de Wannier; el hamiltoniano de electrones independientes escrito en esta base se conoce como el hamiltoniano de *amarre fuerte*. La *aproximación* de amarre fuerte consiste en sustituir las funciones de Wannier por orbitales atómicos, los cuales no son ortogonales entre sí. Esta aproximación es importante cuando se desea conocer la dependencia explícita de la función de onda en el espacio real. Por simplicidad, consideraremos sólo orbitales tipo s y omitiremos en la función de onda los índices de espín debido a que el hamiltoniano no depende de éste, es decir,

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^N c_i |i\rangle, \quad (8)$$

donde N es el número total de átomos del sistema, que en esta tesis tomaremos como

II.3 Modelo de Amarre Fuerte

una cantidad finita.

Sustituyendo la Ec. (8) en la Ec. (7) y multiplicando por la izquierda con el bra $\langle j|$, se tiene que

$$(\varepsilon_j - E) c_j + \sum_{i \neq j}^N t_{ji} c_i = 0. \quad (9)$$

donde

$$\varepsilon_j = \langle j| H |j\rangle \text{ y } t_{ji} \equiv \langle j| H |i\rangle \quad (10)$$

son los elementos diagonales y fuera de la diagonal, respectivamente, de la representación matricial del hamiltoniano $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r})$ en el espacio de las funciones de Wannier. De esta forma, las ecuaciones (9) pueden escribirse matricialmente como:

$$(\mathbf{H} - E\mathbf{1}) \mathbf{c} = \mathbf{0}, \quad (11)$$

donde $\mathbf{1}$ es la matriz identidad de tamaño $N \times N$ y \mathbf{H} es la matriz correspondiente al operador H , el cual en la notación de Dirac puede escribirse de la siguiente forma:

$$H = \sum_{j=1}^N \varepsilon_j |j\rangle \langle j| + \sum_{j=1}^N \sum_{i \neq j}^N t_{ji} |j\rangle \langle i|, \quad (12)$$

y \mathbf{c} es el vector columna cuyas componentes son los coeficientes c_i de la Ec. (8) :

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix}.$$

En general, el potencial $V(\mathbf{r})$ tiene contribuciones de las interacciones con todos los iones de la red y del apantallamiento debido a los demás electrones, por lo que los parámetros ε_j y t_{ji} son difíciles de calcular en forma analítica. En la práctica, estos parámetros se ajustan a partir de datos experimentales. Por lo tanto, el hamiltoniano de la Ec. (12) pertenece a los métodos semi-empíricos. El caso más sencillo dentro del modelo de amarre fuerte es considerar únicamente los saltos a primeros vecinos, es decir, $t_{ij} \neq 0$ sólo si i y j son vecinos más próximos; esto se conoce como la *aproximación de primeros vecinos*.

Hay diversas formas de resolver el problema descrito por el hamiltoniano de la Ec. (12); la más común consiste en diagonalizar directamente el hamiltoniano a partir de la ecuación matricial de valores propios -Ec. (11)-. Otras dos técnicas, que emplearemos en el desarrollo de la presente tesis, son: el empleo de las Funciones de Green y el método de la matriz de transferencia, las cuales discutiremos en las secciones II.4 y II.7, respectivamente.

II Fundamentos

Solución para Sistemas Ordenados

Como un ejemplo del camino a seguir para determinar las energías de un electrón y sus correspondientes funciones de onda en una red a partir de las ecuaciones (9), resolveremos el problema del arreglo monoatómico periódico. Dentro de la aproximación de primeros vecinos, los elementos diagonales y fuera de la diagonal son ε_0 y t , respectivamente. Debido a que el sistema es homogéneo, tenemos

$$H = \varepsilon_0 \sum_j |j\rangle \langle j| + t \sum_{\langle i,j \rangle} |j\rangle \langle i|, \quad (13)$$

donde $\langle i, j \rangle$ indica que los sitios i y j son vecinos más próximos. Las funciones de Bloch se relacionan con las de Wannier mediante la transformada de Fourier [38], es decir,

$$|\Psi_{\mathbf{k}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} |i\rangle. \quad (14)$$

Comparando la Ec. (14) con la Ec. (8), encontramos que

$$c_i = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i}. \quad (15)$$

Sustituyendo la Ec. (15) en la Ec. (9), obtenemos:

$$E_{\mathbf{k}} = \varepsilon_0 + t \sum_{\langle j,0 \rangle} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_0)}, \quad (16)$$

donde \mathbf{R}_0 es la coordenada de un sitio arbitrario de la red. Para redes cristalinas simples, tales como la cadena unidimensional, la red cuadrada y la red cúbica simple, la Ec. (16) da la siguiente relación de dispersión:

$$E_{\mathbf{k}} = \varepsilon_0 + 2t \sum_{i=1}^d \cos k_i a, \quad (17)$$

donde d y a son la dimensionalidad y el parámetro de la red, respectivamente, mientras que k_i es la componente del vector de onda \mathbf{k} sobre la dirección de los primeros átomos vecinos. Para los tres redes anteriores existe un intervalo de energías permitidas, llamado *banda de energía*, la cual es simétrica respecto a ε_0 y se extiende desde $\varepsilon_0 - Z|t|$ hasta $\varepsilon_0 + Z|t|$, donde Z es el número de vecinos más próximos. Por consiguiente, $2Z|t|$ es el ancho de la banda.

De la Ec.(16) podemos encontrar los límites de la banda de energía para redes cristalinas de cualquier dimensión (*Teorema de Perron y Frobenius*) [24]:

$$|E_{\mathbf{k}} - \varepsilon_0| = |t| \left| \sum_{l \neq 0} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l} \right| \leq |t| \sum_{l \neq 0} |e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l}| = Z|t|. \quad (18)$$

Cabe mencionar que este teorema *no* asegura que las bandas de energías sean simétri-

II.4 Función de Green

cas respecto a ε_0 . Hay redes cristalinas, tales como la red triangular o la *fcc*, que no tienen dicha simetría debido a la frustración de los estados antienlaces [39, 40], es decir, estas redes contienen anillos cuyos números de lados son impares, lo que implica la existencia de un enlace en el que el cambio de fase de la función de onda es cero [41].

II.4 Función de Green

Desde un punto de vista puramente matemático, el uso de la función de Green constituye un método auxiliar para la solución de ecuaciones diferenciales inhomogéneas, como por ejemplo, la Ec. (7). Sin embargo, desde la perspectiva de la física, la función de Green adquiere una importancia propia, ya que diversas propiedades de los sólidos medibles en el laboratorio, tales como la densidad de estados, la respuesta Raman e infrarrojo, así como el transporte, pueden calcularse a partir de ella [42]. La función de Green la emplearemos en esta tesis para determinar la estructura electrónica que genera el hamiltoniano de amarre fuerte. En la presente sección la introduciremos a partir de su significado físico, que está relacionado con la correlación espacial y temporal de una partícula en el sólido.

La función de Green retardada -la causal- para los operadores de creación y aniquilación se define como [43]

$$G_{ij}^R(t-t') \equiv \langle \langle a_i(t); a_j^+(t') \rangle \rangle_R \equiv \frac{2\pi}{i\hbar} \theta(t-t') \langle [a_i(t), a_j^+(t')]_+ \rangle, \quad (19)$$

donde

$$\theta(t) = \begin{cases} 1 & \text{si } t > 0 \\ 0 & \text{si } t < 0 \end{cases} \quad (20)$$

es la función escalón y $\langle \dots \rangle$ indica el promedio sobre un ensamble gran canónico. La ecuación de movimiento para la función de Green $G_{ij}^R(t)$ es:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \langle a_i(t); a_j^+(0) \rangle \rangle_R = 2\pi\delta(t) \langle [a_i(t), a_j^+(0)]_+ \rangle + \langle \langle [a_i(t), H]; a_j^+(0) \rangle \rangle_R, \quad (21)$$

donde H es el hamiltoniano del electrón independiente, Ec. (12), el cual podemos reescribir empleando los operadores de creación y aniquilación del siguiente modo:

$$H = \sum_i \varepsilon_i a_i^+ a_i + \sum_i \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} a_i^+ a_j. \quad (22)$$

Entonces las ecuaciones de movimiento de Heisenberg para dichos operadores están dadas por

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_i(t) = [a_i(t), H] = \varepsilon_i a_i(t) + \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} a_j(t). \quad (23)$$

II Fundamentos

Considerando la Ec. (23), se tiene de la Ec. (21):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G_{ij}^R(t) = 2\pi\delta(t) \left\langle [a_i(t), a_j^+(0)]_+ \right\rangle + \varepsilon_i G_{ij}^R(t) + \sum_{\ell} t_{i\ell} G_{\ell j}^R(t). \quad (24)$$

Introduciendo la transformada de Fourier de la función de Green como

$$G^R(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') G^R(t-t') \exp[iE(t-t')/\hbar]$$

de la Ec. (24), obtenemos la ecuación de movimiento de $[G(E)]_{ij} \equiv G_{ij}^R(E)$:

$$(E - H) G(E) = 1. \quad (25)$$

En esta ecuación la energía E debe ser reemplazada por una variable compleja $E + is$ con $s \rightarrow 0$ para evitar las divergencias de la función de Green; consecuentemente, $G(E) \equiv \lim_{s \rightarrow 0^+} G(E + is)$. En la notación de Dirac, la función de Green puede escribirse de la Ec. (25) como

$$G(E) = \sum_n \frac{|n\rangle \langle n|}{E - E_n}, \quad (26)$$

donde $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ y $\sum_n |n\rangle \langle n| = 1$.

Usando la identidad [44]

$$\lim_{y \rightarrow 0} \frac{1}{x \pm iy} = P\left(\frac{1}{x}\right) \mp i\pi\delta(x), \quad (27)$$

donde $P(z)$ es la parte principal de z , y de la Ec. (26), tenemos que:

$$G(E) = P\left(\sum_n \frac{|n\rangle \langle n|}{E - E_n}\right) - i\pi \sum_n \delta(E - E_n) |n\rangle \langle n|. \quad (28)$$

Evaluando la traza en cualquier representación completa:

$$\text{Tr}G(E) = P\left(\sum_n \frac{1}{E - E_n}\right) - i\pi \sum_n \delta(E - E_n). \quad (29)$$

La cantidad $\sum_n \delta(E - E_n)$ es la *densidad de estados (DOS)* en la energía E , es decir, $DOS(E) dE$ da el número de estados cuyas energías están en el intervalo $[E, E + dE]$. Entonces, de la Ec. (29) se obtiene

$$DOS(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \{ \text{Tr}G(E) \}, \quad (30)$$

ecuación que emplearemos en esta tesis para el cálculo de la densidad de estados en un sistema desordenado.

Cadena Monoatómica Periódica

En esta subsección discutiremos como un ejemplo el cálculo de la densidad de estados para la cadena monoatómica periódica en el modelo de amarre fuerte.

II.5 Aproximación del Potencial Coherente (CPA)

La relación de dispersión de la Ec. (17) en el caso unidimensional es

$$E_k = \varepsilon_0 + 2t \cos ka, \quad (31)$$

y las funciones de onda están dadas por la Ec. (14):

$$|\Psi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ikja} |j\rangle, \quad (32)$$

donde hemos considerado que $R_j = ja$. Los elementos de matriz de $G(E)$ se obtienen sustituyendo las Ecs. (31) y (32) en la Ec. (26):

$$\langle \ell | G(E) | m \rangle = \sum_k \frac{\langle \ell | \Psi_k \rangle \langle \Psi_k | m \rangle}{E - E_k} = \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk \frac{e^{ika(\ell-m)}}{E - \varepsilon_0 - 2t \cos ka}. \quad (33)$$

Evaluando esta integral y empleando la Ec. (30), encontramos la densidad de estados [45]:

$$DOS(E) = -\frac{N}{\pi} \text{Im} \{ \langle 0 | G(E) | 0 \rangle \} = \frac{N}{\pi} \frac{\theta(2t - |E - \varepsilon_0|)}{\sqrt{4t^2 - (E - \varepsilon_0)^2}},$$

donde $\theta(x)$ es la función escalón definida en la Ec. (20) y hemos tomado en cuenta que en este caso los elementos diagonales de $G(E)$ son iguales, digamos, al valor en el sitio $\ell = 0$.

II.5 Aproximación del Potencial Coherente (CPA)

Para un sistema desordenado existen muchas configuraciones microscópicas consistentes con los parámetros termodinámicos del sistema; el conjunto de tales configuraciones constituye un *ensamble*. En consecuencia, las cantidades físicas del sistema se deben promediar sobre dicho ensamble. Por ejemplo, definimos la densidad de estados de los sistemas desordenados como el promedio de la Ec. (30) sobre el ensamble de configuraciones:

$$DOS_P(E) = \left\langle -\frac{1}{\pi} \text{Im} \{ \text{Tr} G(E) \} \right\rangle = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \{ \text{Tr} \langle G(E) \rangle \}. \quad (34)$$

Es deseable tener una aproximación simple y moderadamente realista para calcular el promedio sobre el ensamble de la función de Green, $\langle G(E) \rangle$. Hacia el final de la década de los años sesenta se desarrollaron varias investigaciones diferentes entre sí cuyas conclusiones convergen a la *aproximación del potencial coherente (CPA)* [46, 47, 48, 49]. El concepto en sí no es original, en el sentido de que el CPA es un tipo de aproximación de campo medio, análogo a la teoría de campo molecular en magnetismo [50]. El método del CPA fue empleado en el estudio de las propiedades de excitaciones elementales individuales en aleaciones binarias desordenadas por Taylor [51] y Soven [52].

II Fundamentos

El CPA calcula $\langle G \rangle$ a través de un hamiltoniano efectivo H_{eff} de una red perfectamente periódica en el esquema de amarre fuerte,

$$H_{\text{eff}} = \sigma(E) \sum_j |j\rangle \langle j| + t \sum_j \sum_{\langle i,j \rangle} |j\rangle \langle i|,$$

el cual se caracteriza por tener una autoenergía (llamado potencial coherente) σ dependiente de la energía E , que generalmente es compleja. La función de Green de una configuración particular del ensamble, G , se expande en términos de la función de Green efectiva, la cual según la Ec. (25) puede escribirse como

$$G_{\text{eff}} \equiv (E - H_{\text{eff}})^{-1}, \quad (35)$$

y de la perturbación

$$W \equiv H - H_{\text{eff}}. \quad (36)$$

Consideraremos una aleación sustitucional en la que las autoenergías ε_i pueden tomar valores aleatorios. Por simplicidad, supondremos que las integrales de salto t_{ij} son iguales a t , independientemente de los tipos de átomos situados en i y j , es decir, la perturbación W mide en este caso la desviación de las autoenergías de la configuración respecto del potencial coherente (aún desconocido) de la red efectiva:

$$W = \sum_i W_i, \quad (37)$$

donde cada potencial dispersivo W_i es

$$W_i = [\varepsilon_i - \sigma(E)] |i\rangle \langle i| \equiv w_i |i\rangle \langle i|. \quad (38)$$

De las Ecs. (25), (35) y (36) tenemos

$$\begin{aligned} G &= (E - H_{\text{eff}} - W)^{-1} = \left\{ (E - H_{\text{eff}}) \left[1 - (E - H_{\text{eff}})^{-1} W \right] \right\}^{-1} \\ &= \left[1 - (E - H_{\text{eff}})^{-1} W \right]^{-1} (E - H_{\text{eff}})^{-1} = (1 - G_{\text{eff}} W)^{-1} G_{\text{eff}} \\ &= (1 + G_{\text{eff}} W + G_{\text{eff}} W G_{\text{eff}} W + G_{\text{eff}} W G_{\text{eff}} W G_{\text{eff}} W + \dots) G_{\text{eff}}. \end{aligned} \quad (39)$$

A partir de aquí, podemos continuar el desarrollo de la Ec. (39) de dos maneras equivalentes; una conduce a la llamada *Ecuación de Dyson*:

$$\begin{aligned} G &= G_{\text{eff}} + G_{\text{eff}} W (G_{\text{eff}} + G_{\text{eff}} W G_{\text{eff}} + G_{\text{eff}} W G_{\text{eff}} W G_{\text{eff}} + \dots) \\ &= G_{\text{eff}} + G_{\text{eff}} W G, \end{aligned} \quad (40)$$

de donde los elementos de matriz de G son

$$\begin{aligned} \langle m | G | n \rangle &= \langle m | G_{\text{eff}} | n \rangle + \sum_{\ell} \langle m | G_{\text{eff}} | \ell \rangle W_{\ell} \langle \ell | G_{\text{eff}} | m \rangle \\ &\quad + \sum_{\ell, \ell'} \langle m | G_{\text{eff}} | \ell \rangle W_{\ell} \langle \ell | G_{\text{eff}} | \ell' \rangle W_{\ell'} \langle \ell' | G_{\text{eff}} | m \rangle + \dots \end{aligned} \quad (41)$$

La Ec. (41) puede representarse gráficamente como indicamos en la Fig.2.2. El elemento de matriz $\langle m | G | n \rangle$ del sistema desordenado se representa con una doble raya

II.5 Aproximación del Potencial Coherente (CPA)

horizontal, mientras que el del medio efectivo (o no perturbado), $\langle m | G_{\text{eff}} | n \rangle$, con una raya simple horizontal. Las líneas verticales con un círculo representan las dispersiones W_ℓ producidas por las impurezas. El renglón superior de la Fig. 2.2 representa las dispersiones debidas a sitios diferentes, mientras que los siguientes renglones indican las dispersiones múltiples debidas a un mismo sitio. En cada término del diagrama, el número de líneas verticales indica el orden en W y el número de círculos da el número de dispersores diferentes. Por convención, el tiempo corre de izquierda a derecha. Al realizar la suma sobre sólo algunos tipos de términos obtenemos esquemas aproximados para el cálculo de $\langle G \rangle$, como veremos más adelante.

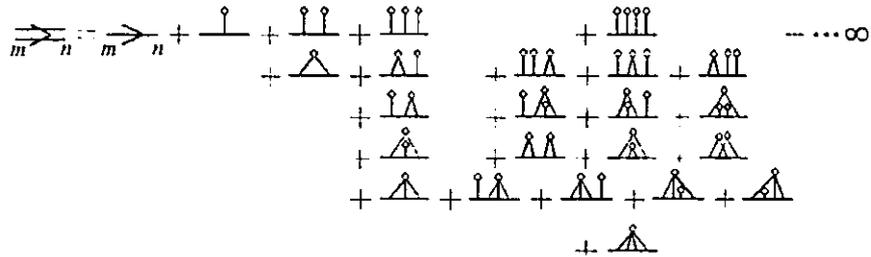


Fig. 2.2. Diagrama de la expansión en serie del elemento de matriz $\langle m | G | n \rangle$ de la función de Green de un sistema desordenado, Ec. (40).

La otra forma de escribir la Ec. (39) es mediante la definición de un operador de transición T [24]:

$$G = G_{\text{eff}} + G_{\text{eff}} T G_{\text{eff}}, \quad (42)$$

donde

$$\begin{aligned} T &= W + W G_{\text{eff}} W + W G_{\text{eff}} W G_{\text{eff}} W \dots \\ &= W (1 + G_{\text{eff}} W + G_{\text{eff}} W G_{\text{eff}} W + \dots). \end{aligned} \quad (43)$$

El promedio de la función de Green puede determinarse empleando cualquiera de las Ecs. (40) o (42); de la primera de estas se obtiene

$$\langle G \rangle = G_{\text{eff}} + G_{\text{eff}} \langle W G \rangle, \quad (44)$$

en donde hemos considerado que $\langle G_{\text{eff}} \rangle = G_{\text{eff}}$ porque el medio efectivo no depende de las variables estocásticas $\{\varepsilon_i\}$.

Usando la Ec. (42), el promedio de la función de Green se puede expresar alternativamente como

$$\langle G \rangle = G_{\text{eff}} + G_{\text{eff}} \langle T \rangle G_{\text{eff}}. \quad (45)$$

La suposición básica del CPA es hacer que

$$\langle G \rangle \approx G_{\text{eff}}, \quad (46)$$

condición que se cumple si

$$\langle T \rangle \approx 0. \quad (47)$$

Para encontrar las condiciones en las que se puede satisfacer la Ec. (47), es necesario conocer la estructura del operador T . A continuación, analizaremos dicho operador

II Fundamentos

para los casos de una y muchas impurezas.

Una Sola Impureza

Consideramos una red monoatómica periódica descrita por el hamiltoniano de la Ec. (13), que ahora denotaremos como el hamiltoniano no perturbado H_0 ,

$$H_0 = \varepsilon_0 \sum_l |l\rangle \langle l| + t \sum_{\langle l,l'\rangle} |l\rangle \langle l'|,$$

y una perturbación en el sitio ℓ , donde la autoenergía es $\varepsilon_\ell = \varepsilon_0 + w_\ell$. Deseamos encontrar la función de Green, G , para el sistema perturbado a partir de la correspondiente G_0 de la red sin impurezas; para ello, podemos aplicar el formalismo de las Ecs. (42) y (43) haciendo $W = W_\ell$, $T = T_\ell$ y $G_{\text{eff}} = G_0$, es decir,

$$G = G_0 + G_0 T_\ell G_0,$$

donde

$$T_\ell = W_\ell (1 + G_0 W_\ell + G_0 W_\ell G_0 W_\ell + \dots) = W_\ell (1 - G_0 W_\ell)^{-1}, \quad (48)$$

o bien, sustituyendo en esta ecuación a la Ec. (38):

$$\begin{aligned} T_\ell &= w_\ell |\ell\rangle \langle \ell| (1 + G_0 w_\ell |\ell\rangle \langle \ell| + G_0 w_\ell |\ell\rangle \langle \ell| G_0 w_\ell |\ell\rangle \langle \ell| + \dots) \\ &= w_\ell |\ell\rangle \langle \ell| + w_\ell |\ell\rangle \langle \ell| G_0 w_\ell |\ell\rangle \langle \ell| + w_\ell |\ell\rangle \langle \ell| G_0 w_\ell |\ell\rangle \langle \ell| G_0 w_\ell |\ell\rangle \langle \ell| + \dots, \end{aligned} \quad (49)$$

es decir,

$$T_\ell = \frac{w_\ell}{1 - w_\ell \langle \ell| G_0 |\ell\rangle} |\ell\rangle \langle \ell|. \quad (50)$$

Como referencia para la Ec. (55) que veremos más adelante, queremos hacer notar que la Ec. (49) también puede reescribirse como

$$\begin{aligned} T_\ell &= w_\ell |\ell\rangle \langle \ell| + w_\ell G_0 w_\ell |\ell\rangle \langle \ell| |\ell\rangle \langle \ell| + w_\ell G_0 w_\ell |\ell\rangle \langle \ell| G_0 w_\ell |\ell\rangle \langle \ell| |\ell\rangle \langle \ell| + \dots \\ &= (1 + G_0 W_\ell)^{-1} W_\ell. \end{aligned} \quad (51)$$

Obtenemos la función de Green G del sistema con una impureza inmediatamente sustituyendo la Ec. (50) en la Ec. (42):

$$G = G_0 + G_0 \frac{w_\ell}{1 - w_\ell \langle \ell| G_0 |\ell\rangle} |\ell\rangle \langle \ell| G_0.$$

Por lo tanto, los polos E_P de G producidos por la impureza W_ℓ se obtienen al resolver la ecuación

$$\langle \ell| G_0 (E_P) |\ell\rangle = \frac{1}{w_\ell}. \quad (52)$$

Este resultado nos muestra que E_P debe quedar afuera de la banda de la red perfecta porque w_ℓ es una cantidad real y, fuera de la banda, $\langle \ell| G_0 (E) |\ell\rangle$ tiene parte imaginaria cero [45].

II.5 Aproximación del Potencial Coherente (CPA)

Muchas Impurezas

Cuando existen muchas impurezas, el operador T se convierte en una función muy complicada del conjunto $\{T_\ell\}$ de las dispersiones producidas por las impurezas individuales. Este hecho tiene como consecuencia que el promedio de la serie resultante de la Ec. (43) en general no pueda ser resumida en forma exacta; por ello debemos recurrir a algún tipo de aproximación que permita evaluar $\langle T \rangle$, y eventualmente, $\langle G \rangle$.

De la definición de T , Ec. (43), tenemos

$$T = W [1 + G_{\text{eff}}(W + WG_{\text{eff}}W + \dots)] = W (1 + G_{\text{eff}}T)$$

y sustituyendo en ésta la Ec. (37)

$$T = \sum_{\ell} W_{\ell} (1 + G_{\text{eff}}T) \equiv \sum_{\ell} Q_{\ell}, \quad (53)$$

donde definimos el dispersor Q_{ℓ} del sitio ℓ por

$$Q_{\ell} \equiv W_{\ell} (1 + G_{\text{eff}}T). \quad (54)$$

Sustituyendo la Ec. (53) en la Ec. (54) obtenemos

$$Q_{\ell} = W_{\ell} \left(1 + G_{\text{eff}} \sum_m Q_m \right),$$

o bien,

$$Q_{\ell} = (1 - W_{\ell}G_{\text{eff}})^{-1} W_{\ell} \left(1 + G_{\text{eff}} \sum_{m \neq \ell} Q_m \right). \quad (55)$$

Sustituyendo la Ec. (51) -escribiendo G_{eff} en vez de G_0 - en la Ec. (55):

$$Q_{\ell} = T_{\ell} \left(1 + G_{\text{eff}} \sum_{m \neq \ell} Q_m \right); \quad (56)$$

iterando esta ecuación tenemos

$$Q_{\ell} = T_{\ell} \left(1 + \sum_{m \neq \ell} G_{\text{eff}} T_m + \sum_{m \neq \ell} \sum_{n \neq m} G_{\text{eff}} T_m G_{\text{eff}} T_n + \sum_{m \neq \ell} \sum_{n \neq m} \sum_{k \neq n} G_{\text{eff}} T_m G_{\text{eff}} T_n G_{\text{eff}} T_k + \dots \right), \quad (57)$$

donde podemos observar que el operador Q_{ℓ} contiene, aparte de la dispersión individual T_{ℓ} del sitio ℓ , el efecto de las dispersiones múltiples de dos, tres, cuatro, etc. sitios.

II Fundamentos

Sustituyendo la Ec. (57) en la Ec. (53):

$$\begin{aligned}
 T = & \sum_{\ell} T_{\ell} + \sum_{\ell} \sum_{m \neq \ell} T_{\ell} G_{\text{eff}} T_m + \sum_{\ell} \sum_{m \neq \ell} \sum_{n \neq m} T_{\ell} G_{\text{eff}} T_m G_{\text{eff}} T_n \\
 & + \sum_{\ell} \sum_{m \neq \ell} \sum_{n \neq m} \sum_{k \neq n} T_{\ell} G_{\text{eff}} T_m G_{\text{eff}} T_n G_{\text{eff}} T_k + \dots, \tag{58}
 \end{aligned}$$

o, en forma cerrada:

$$T = \sum_n T_n \left(1 + G_{\text{eff}} \sum_{m \neq n} Q_m \right)$$

Promediando sobre el ensamble de las posibles realizaciones del desorden:

$$\langle T \rangle = \sum_{\ell} \left\langle T_{\ell} \left(1 + G_{\text{eff}} \sum_{m \neq \ell} Q_m \right) \right\rangle.$$

Sumando y restando el término $G_{\text{eff}} \langle T_{\alpha} \rangle G_{\text{eff}} \sum_{\beta \neq \alpha} \langle Q_{\beta} \rangle G_{\text{eff}}$, obtenemos

$$\langle T \rangle = \sum_{\ell} \langle T_{\ell} \rangle \left(1 + G_{\text{eff}} \sum_{m \neq \ell} \langle Q_m \rangle \right) + \sum_{\ell} \left\langle T_{\ell} G_{\text{eff}} \sum_{m \neq \ell} (Q_m - \langle Q_m \rangle) \right\rangle \tag{59}$$

Hasta aquí hemos encontrado una relación entre $\langle T \rangle$ y $\langle T_{\ell} \rangle$ en forma exacta. El CPA hace la hipótesis de que

$$\langle T_{\ell} \rangle = 0, \tag{60}$$

y se ignoran las fluctuaciones dadas por el segundo término en la Ec. (59), es decir,

$$\left\langle T_n G_{\text{eff}} \sum_{m \neq n} (Q_m - \langle Q_m \rangle) \right\rangle \approx 0.$$

En resumen, el CPA introduce un medio efectivo a partir del cual el promedio sobre ensamble de la función de Green, $\langle G \rangle$, se aproxima por G_{eff} exigiendo que $\langle T_{\ell} \rangle = 0$. El error de dicha aproximación fue cuantificado por Soven [52], quien demostró que para una aleación binaria las correcciones de G_{eff} en la Ec. (46) son de orden mayor o igual al cuarto, esto es,

$$\langle G \rangle = G_{\text{eff}} + \sum_n \sum_{m \neq n} \sum_{l \neq m} \sum_{k \neq l} \langle G_{\text{eff}} T_n G_{\text{eff}} T_m G_{\text{eff}} T_l G_{\text{eff}} T_k G_{\text{eff}} \rangle + \dots.$$

Antes de la aparición del CPA se empleaban dos métodos, entre otros, para resolver el problema de las excitaciones en redes desordenadas: la *aproximación del cristal virtual (VCA)* [42] y la *aproximación del promedio de la matriz T (ATA)* [53]. La hipótesis del VCA consiste en hacer

$$\langle WG \rangle \approx \langle W \rangle \langle G \rangle,$$

II Fundamentos

(mostrado con líneas diagonales), en vez de un medio fijo no perturbado.

$$\Rightarrow = \Rightarrow + \begin{array}{c} \circ \\ | \\ \hline \end{array} + \begin{array}{c} \triangle \\ | \\ \hline \end{array} + \dots \infty$$

Fig. 2.5. Diagrama de la expansión en serie para la función de Green en el esquema del CPA.

Hoy en día se reconoce que el formalismo del CPA es la mejor aproximación de un solo sitio para los sistemas desordenados [42]; sus resultados son exactos en los límites de altas y bajas concentraciones e interpola adecuadamente entre estos casos extremos. La comparación del espectro de energías producido por el CPA se aproxima bastante al de los resultados obtenidos por métodos numéricos, excepto por los detalles complicados del DOS los cuales se pierden completamente en el CPA [24]. El DOS del CPA satisface la regla de la suma [54], la cual consiste en que el número total de estados disponibles en cada sub-banda correspondiente a cada componente del sistema desordenado es igual al número total de átomos constituyentes; dicha regla no es satisfecha por el VCA ni por el ATA.

Quizás el defecto más serio de la formulación del CPA es que la división de bandas en la aleación binaria aleatoriano, cuando la diferencia de autoenergías se hace muy grande, no es del todo correcto; los cálculos numéricos muestran que existe un estado en el centro del DOS [55], el cual está ausente en el espectro obtenido por el CPA [24].

Aleación Binaria.

Aplicaremos el CPA para la determinación de $\langle G \rangle$ en una aleación binaria desordenada $A_x B_{1-x}$. Supongamos que la distribución de átomos A y B es estadísticamente independiente y homogénea en el espacio, de tal modo que la probabilidad de encontrar un átomo A de energía ε_A en un sitio escogido al azar es x (concentración de átomos A) y la correspondiente a un átomo B con energía ε_B en el mismo sitio es $1 - x$ (concentración de átomos B).

El promedio de las dispersiones locales $\langle T_\ell \rangle$ es, por lo tanto,

$$\langle T_\ell \rangle = x T_\ell^A + (1 - x) T_\ell^B, \quad (61)$$

donde, de acuerdo a la Ec. (48),

$$T_\ell^i = \frac{W_\ell^i}{(1 - G_{\text{eff}} W_\ell^i)}, \quad i = A, B \quad (62)$$

y las perturbaciones W_ℓ^i son, de la Ec. (38):

$$W_\ell^i = [\varepsilon_i - \sigma(E)] |l\rangle \langle l|, \quad i = A, B.$$

Empleando las Ecs. (60), (61) y (62):

$$\langle T_\ell \rangle = x \frac{W_\ell^A}{(1 - G_{\text{eff}} W_\ell^A)} + (1 - x) \frac{W_\ell^B}{(1 - G_{\text{eff}} W_\ell^B)} = 0. \quad (63)$$

II.6 Fórmula de Kubo-Greenwood

Por otro lado, la ecuación de Dyson (40) correspondiente a la red efectiva con una sola impureza i ($i = A, B$) es:

$$G_i = G_{\text{eff}} + G_{\text{eff}} W_\ell^i G_i, \quad i = A, B. \quad (64)$$

Entonces,

$$\frac{1}{1 - G_{\text{eff}} W_\ell^i} = \frac{G_i}{G_{\text{eff}}}, \quad i = A, B. \quad (65)$$

Sustituyendo la Ec. (65) en la Ec. (63):

$$x W_\ell^A G_A + (1 - x) W_\ell^B G_B = 0., \quad (66)$$

Finalmente, despejando las W_ℓ^i de la Ec. (64) y sustituyéndolas en la Ec. (66), llegamos a

$$G_{\text{eff}} = x G_A + (1 - x) G_B.$$

En suma, el CPA determina un medio efectivo al hacer que el promedio de las dispersiones locales sea cero. En todos los sitios de la red, excepto uno, se coloca un átomo con un potencial coherente en función de la energía. Para una aleación binaria desordenada, el problema se reduce al de una sola impureza embebida en el medio efectivo (Fig. 2.6) y se resuelve en forma exacta una vez que se supone un potencial coherente $\sigma(E)$ para el sistema. La solución de dicho problema conduce a un nuevo potencial coherente. Este procedimiento se continúa hasta que dicho potencial inicial coincide con el proveniente de la solución del problema, es decir, se encuentra el potencial *coherente* para todo el sistema.

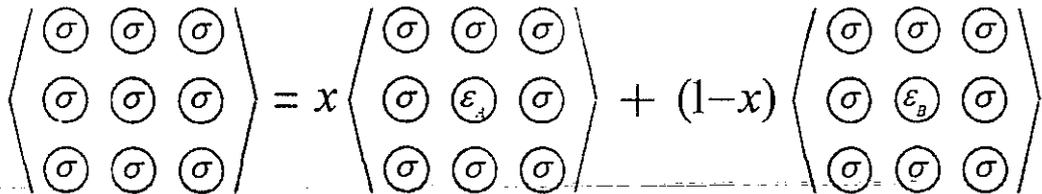


Fig. 2.6 Red efectiva determinada por la condición del CPA para una red binaria desordenada.

II.6 Fórmula de Kubo-Greenwood

En esta sección discutiremos la conductividad eléctrica en sólidos dentro del formalismo de Kubo, empleando la regla de oro de Fermi y la función de Green.

En general, la presencia de un campo eléctrico \mathcal{E} en un sistema induce una densidad de corriente j . La conductividad eléctrica se define como el coeficiente de la parte lineal (en \mathcal{E}) de j [45]:

$$j_\alpha(\mathbf{r}, t) = \int_0^\infty d\tau \int d\mathbf{r}' \sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) \mathcal{E}_\beta(\mathbf{r}', t - \tau),$$

donde los subíndices α y β denotan las coordenadas cartesianas y hay una suma implícita sobre los índices repetidos β . Para materiales isotrópicos supongamos que \mathcal{E} y j

II Fundamentos

están a lo largo del eje x , de modo que sólo consideraremos σ_{xx} ; por simplicidad omitiremos los subíndices. Generalmente \mathcal{E} y j varían lentamente en distancias del orden de ℓ_0 , donde ℓ_0 es la distancia de correlación espacial y se determina por la condición $\sigma \approx 0$ para $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \gg \ell_0$. En este caso se puede realizar la integración sobre \mathbf{r}' y el promedio sobre \mathbf{r} para obtener

$$j(t) = \int_0^\infty d\tau \sigma(\tau) \mathcal{E}(t - \tau), \quad (67)$$

donde

$$\sigma(\tau) = \frac{1}{\Omega} \int \int dr dr' \sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau),$$

siendo Ω el volumen del sistema. Consideremos la transformada de Fourier de $\sigma(\tau)$,

$$\sigma(\omega) = \int_0^\infty d\tau \sigma(\tau) e^{i\omega\tau}, \quad (68)$$

y si $\mathcal{E}(t)$ está dada por

$$\mathcal{E}(t) = F e^{-i\omega t} + F^* e^{i\omega t}, \quad (69)$$

tenemos que

$$j(t) = \sigma(\omega) F e^{-i\omega t} + \sigma(-\omega) F^* e^{i\omega t}. \quad (70)$$

El hecho de que j debe ser real requiere que $\sigma(-\omega) = \sigma^*(\omega)$, de donde se sigue que la parte real (imaginaria) σ_1 (σ_2) de σ es una función par (impar) de ω . Éstas son mutuamente dependientes a través de las relaciones del tipo Kramers-Kronig [45].

A continuación, procedamos a obtener una expresión cuántica general de la parte real de la conductividad, $\sigma_1(\omega)$. El promedio temporal de la potencia consumida por el sistema puede escribirse como

$$P = \frac{\Omega}{T} \int_0^T dt \mathcal{E}(t) j(t),$$

donde T es el período del campo eléctrico externo, $\mathcal{E}(t)$. Usando las Ecs. (69) y (70) tenemos que

$$P = \Omega |F|^2 [\sigma(\omega) + \sigma(-\omega)] = 2\Omega |F|^2 \sigma_1(\omega). \quad (71)$$

Por otro lado, la potencia promedio puede calcularse multiplicando la energía $\varepsilon_{\alpha\beta} \equiv \hbar\omega_{\alpha\beta} = E_\beta - E_\alpha > 0$, que absorbe el sistema durante la transición $|\alpha\rangle \rightarrow |\beta\rangle$, por la razón de transición $p_{\alpha\beta}$, y sumando sobre todas las posibilidades $|\alpha\rangle \neq |\beta\rangle$:

$$P = \sum_{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} p_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} (p_{\alpha\beta} - p_{\beta\alpha}). \quad (72)$$

La probabilidad por unidad de tiempo $p_{\alpha\beta}$ está dada por

$$p_{\alpha\beta} = f_\alpha (1 - f_\beta) W_{\alpha\beta}, \quad (73)$$

donde $f_\alpha \equiv f(E_\alpha)$ es la distribución de Fermi-Dirac y $W_{\alpha\beta}$ puede obtenerse por la

II.6 Fórmula de Kubo-Greenwood

regla de oro de Fermi [56, 57] considerando la perturbación $H' = e\mathcal{E}(t)x$ y la Ec. (69),

$$W_{\alpha\beta} = \frac{2\pi}{\hbar} e^2 |F|^2 |\langle \alpha | x | \beta \rangle|^2 \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_{\alpha\beta}). \quad (74)$$

Combinando las ecs. (72), (73), (74) y comparando con la Ec. (71) obtenemos que

$$\sigma_1(\omega) = \frac{2\pi e^2}{\Omega} \sum_{\alpha\beta} |\langle \alpha | x | \beta \rangle|^2 \omega_{\alpha\beta} (f_\alpha - f_\beta) \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_{\alpha\beta}), \quad (75)$$

donde hemos introducido explícitamente un factor de 2 para tomar en cuenta el espín de los electrones. La Ec. (75) se conoce como la *fórmula de Kubo-Greenwood* para la conductividad eléctrica [58, 59].

Podemos reescribir la expresión (75) en términos de los elementos de matriz del operador $p_x = im[Hx - xH]/\hbar$, es decir, $\langle \alpha | p_x | \beta \rangle = im\omega_{\alpha\beta} \langle \alpha | x | \beta \rangle$. Por lo tanto,

$$\sigma_1(\omega) = \frac{2\pi e^2}{\Omega m^2} \sum_{\alpha\beta} |\langle \alpha | p_x | \beta \rangle|^2 \frac{f_\alpha - f_\beta}{\omega_{\alpha\beta}} \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_{\alpha\beta}). \quad (76)$$

Con el fin de expresar la conductividad en términos de la función de Green, reescribamos la Ec. (76) como:

$$\begin{aligned} \sigma_1(\omega) &= \frac{2\pi\hbar e^2}{m^2\Omega} \frac{1}{\hbar\omega} \sum_{\alpha\beta} |\langle \alpha | p_x | \beta \rangle|^2 (f(E_\alpha) - f(E_\beta)) \delta(\hbar\omega - E_\beta + E_\alpha) \\ &= \frac{2\pi\hbar e^2}{m^2\Omega} \frac{1}{\hbar\omega} \int_{-\infty}^{\infty} dE \sum_{\alpha\beta} \langle \beta | p_x | \alpha \rangle \langle \alpha | p_x | \beta \rangle (f(E_\alpha) - f(E_\beta)) \\ &\quad \times \delta(E - E_\alpha) \delta(E + \hbar\omega - E_\beta), \end{aligned}$$

donde podemos escribir la suma del integrando como:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha\beta} [\dots] &= \sum_{\alpha\beta\gamma} \langle \beta | \gamma \rangle \langle \gamma | p_x | \alpha \rangle (f(E_\alpha) - f(E_\beta)) \\ &\quad \times \delta(E - E_\alpha) \langle \alpha | p_x | \beta \rangle \delta(E + \hbar\omega - E_\beta) \\ &= \sum_{\alpha\beta\gamma} (f(E_\alpha) - f(E_\beta)) \langle \gamma | p_x | \alpha \rangle \delta(E - E_\alpha) \\ &\quad \times \langle \alpha | p_x | \beta \rangle \delta(E + \hbar\omega - E_\beta) \langle \beta | \gamma \rangle. \end{aligned}$$

De la Ec. (28) tenemos la siguiente identidad:

$$\sum_{\alpha} \delta(E - E_\alpha) |\alpha\rangle \langle \alpha| = -\frac{1}{\pi} \text{Im } G(E),$$

la cual nos permite reescribir $\sigma_1(\omega)$ finalmente como

$$\sigma_1(\omega) = \frac{2\hbar e^2}{\pi m^2 \Omega \hbar \omega} \int_{-\infty}^{\infty} dE (f(E) - f(E + \hbar\omega)) \text{Tr}\{p_x \text{Im } G(E) p_x \text{Im } G(E + \hbar\omega)\},$$

II Fundamentos

relación que expresaremos en términos del modelo de amarre fuerte en la sección IV.2 y en el capítulo VI.

Criterios de Localización

La localización de excitaciones elementales en sistemas desordenados está relacionada con la extensión de la función de onda y con la capacidad de transporte. Entre los diversos parámetros que existen para cuantificar la localización, se encuentran la *trasmítancia*, el *coeficiente de Lyapunov* y la *razón de participación*. Los primeros dos parámetros hacen uso de la *matriz de transferencia*, la cual se aplica usualmente en redes de tipo unidimensional, tales como cadenas poliméricas, red de Bethe y superredes periódicas o cuasiperiódicas.

Matriz de Transferencia

Para sistemas unidimensionales la ecuación de Shrödinger estacionaria puede escribirse como [Ec. (9)]

$$(\varepsilon_i - E) c_i + t_{i,i+1} c_{i+1} + t_{i,i-1} c_{i-1} = 0,$$

las cuales se pueden representar matricialmente de la siguiente manera:

$$\mathbf{C}_{i+1} = \mathbf{T}_i \mathbf{C}_i, \quad (77)$$

donde \mathbf{T}_i es la *matriz de transferencia*

$$\mathbf{T}_i = \begin{pmatrix} \frac{E - \varepsilon_i}{t_{i,i+1}} & -\frac{t_{i,i-1}}{t_{i,i+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (78)$$

y el vector \mathbf{C}_i es

$$\mathbf{C}_i = \begin{pmatrix} c_i \\ c_{i-1} \end{pmatrix}.$$

Para una cadena no periódica existe una sucesión de matrices de transferencia, $[\mathbf{T}_1, \dots, \mathbf{T}_N]$, que sigue la secuencia del sistema y cuyo producto

$$\mathbf{T} = \prod_{i=1}^N \mathbf{T}_i = \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix}$$

describe la propagación de un electrón a lo largo de dicha cadena. La norma de la matriz \mathbf{T} se define como [18]

$$\|\mathbf{T}\| \equiv \sqrt{\tau_{11}^2 + \tau_{12}^2 + \tau_{21}^2 + \tau_{22}^2}.$$

Como un ejemplo, consideremos una cadena periódica monoatómica con un orbital s , la cual tiene la misma matriz de transferencia a lo largo del sistema:

$$\mathbf{T}_i = \mathbf{T}_0 \equiv \begin{pmatrix} \frac{E - \varepsilon_0}{t} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (79)$$

II.6 Fórmula de Kubo-Greenwood

Debido a que \mathbf{T}_0 es una matriz de 2×2 este operador tiene dos valores propios μ^+ y μ^- , con vectores propios \mathbf{W}^+ y \mathbf{W}^- , respectivamente. De la Ec. (79) verificamos fácilmente que

$$\mu^\pm = \frac{1}{2t} \left[(E - \varepsilon_0) \mp \sqrt{(E - \varepsilon_0)^2 - 4t^2} \right],$$

por lo que $\mu^+ = 1/\mu^-$. En particular, para los bordes de la banda se tienen $\mu^+ = \mu^-$ y $|\mu^\pm| = 1$, que corresponden a estados extendidos del tipo enlace y anti-enlace. Asimismo, para los estados dentro o fuera de la banda, $\mu^+ \neq \mu^-$, entonces \mathbf{W}^+ y \mathbf{W}^- son no colineales y forman una base. En general, los vectores \mathbf{C}_i pueden escribirse como una combinación lineal de ellos,

$$\mathbf{C}_i = c^+ \mathbf{W}^+ + c^- \mathbf{W}^-.$$

De la Ec. (77) se sigue que

$$\mathbf{C}_{i+1} = \mathbf{T}_0 \mathbf{C}_i = \mu^+ c^+ \mathbf{W}^+ + \mu^- c^- \mathbf{W}^-, \quad (80)$$

y suponiendo -sin pérdida de generalidad- que $|\mu^+| > |\mu^-|$, se tiene que

$$\mathbf{C}_N = (\mathbf{T}_0)^N \mathbf{C}_0 \approx (\mu^+)^N \mathbf{W}^+, \quad (81)$$

ya que $(\mu^+)^N \gg (\mu^-)^N$ sin importar la elección inicial de \mathbf{C}_0 (excepto el caso donde $\mathbf{C}_0 = \mathbf{W}^-$). Nótese que el mayor valor propio domina en la Ec. (81), es decir, \mathbf{C}_N tiende a la dirección de \mathbf{W}^+ y crece en amplitud exponencialmente a lo largo de la cadena, con coeficiente

$$\gamma = \ln |\mu^+|.$$

En el límite $N \rightarrow \infty$, la norma de la matriz $\mathbf{T} \equiv \mathbf{T}_0^N$ tiende a $|\mu^+|^N$, hecho que se emplea en la definición del coeficiente de Lyapunov.

Para $|E - \varepsilon_0| < 2|t|$, se tiene $|\mu^\pm| = 1$, es decir, $\gamma = 0$. Esto nos indica que todos los estados son extendidos dentro de la banda de energías permitida.

Coeficiente de Lyapunov

En 1960, Furstenberg y Kesten [60] introdujeron el *coeficiente de Lyapunov* (γ) para cuantificar la localización de electrones en sistemas desordenados, esto es, [18, 61]:

$$\gamma \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\ln \|\mathbf{T}\|}{N}. \quad (82)$$

En sistemas desordenados unidimensionales, c_i disminuye exponencialmente a grandes distancias desde su máximo ubicado, por ejemplo, en $i = 1$ [62], es decir,

$$\|\mathbf{C}_N\| \sim \|\mathbf{C}_1\| \exp(-N/\xi_0),$$

donde ξ_0 es la longitud de localización de la función de onda. Por otro lado, como $\|\mathbf{C}_1\| \sim 1$, entonces

$$\|\mathbf{C}_N\| = \|\mathbf{T}\mathbf{C}_1\| \sim \|\mathbf{T}\|.$$

Por lo tanto, en el contexto de la matriz de transferencia, la longitud de localización

II Fundamentos

está dada por

$$\xi_0 \sim |\gamma^{-1}|.$$

Cabe mencionar que existe actualmente discusión en la literatura sobre la aplicación adecuada de dicho coeficiente en su presente definición, ya que se requiere el conocimiento del centro de localización de la función de onda [63], es decir, de la ubicación donde ocurre el máximo de la función de onda.

Trasmitancia

En este apartado, discutiremos la dispersión de un electrón en una red finita unidimensional conectada en sus extremos por dos redes periódicas semi-infinitas. El electrón con energía E incide en uno de los extremos de la red caracterizada por una sucesión de auto-energías $\{\varepsilon_n\}$, $n = 1, \dots, N$, y el potencial fuera de la red es constante, es decir, $\varepsilon_n = \varepsilon_0$ si $n \leq 0$ o $n > N$.

El problema de la dispersión considera energías E que se encuentran dentro de la banda permitida de la red, ya que en el caso contrario no hay propagación del electrón. Las ondas planas afuera y en los extremos de la red tienen la forma [18]

$$\psi_k(n) = \begin{cases} Ae^{ikna} + Be^{-ikna}, & n \leq 1 \\ Ce^{ikna} + De^{-ikna}, & n \geq N \end{cases}. \quad (83)$$

Para el caso en el que el electrón incide sobre el extremo izquierdo ($n = 1$), tenemos que $k > 0$, $A = 1$, $B = r$, $C = \tau$ y $D = 0$, donde r y τ son respectivamente las amplitudes de reflectancia y transmitancia, y satisfacen la relación [18, 64]

$$|\tau|^2 + |r|^2 = 1.$$

Con el fin de expresar $|\tau|^2$ y $|r|^2$ en términos de los elementos τ_{11} , τ_{12} , τ_{21} y τ_{22} de la matriz de transferencia \mathbf{T} , la Ec. (83) puede reescribirse como

$$\begin{pmatrix} \tau e^{ik(N+1)a} \\ \tau e^{ikNa} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ika} + r e^{-ika} \\ 1 + r \end{pmatrix}.$$

Resolviendo esta ecuación matricial, encontramos [18, 64]

$$\tau = -\frac{2i(\sin ka)e^{-kNa}}{\tau_{11}e^{-ka} + \tau_{12} - e^{ika}(\tau_{21}e^{-ika} + \tau_{22})}, \quad (84)$$

y

$$r = -\frac{\tau_{11}e^{ka} + \tau_{12} - e^{ika}(\tau_{21}e^{ika} + \tau_{22})}{\tau_{11}e^{-ka} + \tau_{12} - e^{ika}(\tau_{21}e^{-ika} + \tau_{22})},$$

donde el vector de onda k se relaciona con E y ε_0 a través de la Ec. (31), $\cos ka = \frac{E - \varepsilon_0}{2t}$. Por lo tanto, la transmitancia (T) es,

$$T(E) \equiv |\tau|^2 = \frac{4 - (E/t)^2}{[\tau_{21} - \tau_{12} + (\tau_{22} - \tau_{11})E/2t]^2 + (\tau_{22} + \tau_{11})^2(1 - E^2/4t^2)},$$

la cual está relacionada con la conductancia de un sistema unidimensional [65].

II.6 Fórmula de Kubo-Greenwood

Razón de Participación

Una forma alternativa de cuantificar la localización de un estado electrónico, además del coeficiente de Lyapunov, es la *razón inversa de participación (IPR)* [66],

$$IPR \equiv \sum_n |c_n|^4,$$

donde los coeficientes c_n son las amplitudes locales de la función de onda normalizada $|\Psi\rangle$ [Ec. (8)], es decir, $\sum_n |c_n|^2 = 1$.

La razón de participación (PR) se define como

$$PR \equiv \left(\sum_n |c_n|^4 \right)^{-1}.$$

Para entender su significado, es instructivo considerar dos casos límites:

(a) *La función de onda está completamente localizada en un sitio.*

Aquí, $c_n = 0$ excepto en $n = \ell$, en donde $|c_\ell| = 1$. Por lo tanto,

$$IPR = 1 \text{ y } PR = 1.$$

(b) *La función de onda está completamente extendida.*

En este caso, $|c_n| = 1/\sqrt{N}$, $\forall n$. Por consiguiente,

$$IPR = 1/N \text{ y } PR = N.$$

De los casos (a) y (b) apreciamos que la razón de participación indica el número de sitios que contribuyen a la función de onda.

III Correlación Electrónica en Sistemas Desordenados

La materia condensada siempre presenta algún tipo de desorden. Es por lo tanto importante conocer las propiedades de las excitaciones elementales en presencia del desorden. En las últimas cinco décadas se han dedicado considerables esfuerzos al estudio de los semiconductores amorfos y materiales no cristalinos. La mayoría de las investigaciones teóricas se ha basado en el modelo de Anderson para partículas individuales [8]. En este modelo se considera un hamiltoniano de amarre fuerte -Ec. (12)- con autenergías aleatorias ε_i uniformemente distribuidas en el intervalo $[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}]$ e integrales de salto constantes, $t_{ij} = t$. Una de las propiedades que se deducen de este modelo es que cuando el parámetro de desorden, W , excede un cierto valor crítico, W_C , todos los estados se vuelven localizados. Este cambio de naturaleza de los estados corresponde a una transición metal-aislante (MIT). A partir de argumentos de escalamiento, se ha probado que para sistemas de una y dos dimensiones, $W_C = 0$ [6], y para tres dimensiones, $W_C \neq 0$. Sin embargo, las investigaciones sobre el silicio amorfo han indicado que el grado de desorden crítico para estos materiales es menor que el predicho por el modelo de Anderson [67]. En tal situación, se ha sugerido el concepto del *borde de movilidad* E_C el cual separa los estados localizados, situados en las colas de las bandas, de los estados extendidos en la mitad de la banda [68]. Por lo tanto, el comportamiento metálico y aislante de los materiales está gobernado por la posición del nivel de Fermi μ con respecto a E_C .

La hipótesis de partículas individuales que no interactúan entre sí no puede explicar hechos experimentales recientes: se han encontrado materiales desordenados con claras tendencias metálicas en dos dimensiones [7]; este comportamiento metálico parece estar conectado con las interacciones entre los portadores.

Por otro lado, ha existido un interés continuo en el estudio del sistema electrónico correlacionado en presencia de desorden. En particular, el modelo de Hubbard unidimensional (1D) constituye una prueba excelente para este problema por diversas razones. En primer término, se debe a la simplicidad topológica del sistema y consecuentemente existe solución exacta para el caso periódico [69, 70]. Asimismo, experimentalmente se han encontrado compuestos cuasi-1D de *tetracianoquinodimetanos* que se describen apropiadamente a través de un modelo de Hubbard 1D con desorden en sus parámetros [71].

El modelo de Hubbard tiene *per se* la ventaja de ser simple y general, ya que no depende explícitamente de la naturaleza de las interacciones entre electrones. En principio, las interacciones electrón-electrón intra-atómica (U_i) e inter-atómica (V_{ij}) son repulsivas porque ellas son integrales directas de Coulomb -ver Ec. (5)-. Sin embargo,

III.1 Aleación Binaria Desordenada

U_i y V_{ij} podrían ser negativas si se incluyen interacciones indirectas atractivas a través de fonones o de otras excitaciones bosónicas [72].

A pesar de la simplicidad del modelo de Hubbard, el problema de muchas partículas no tiene solución general, excepto para sistemas de una [69] e infinita dimensiones [73]. En particular, el problema de dos partículas se ha abordado dentro del modelo de Hubbard estándar [74, 75], extendido [76] y generalizado [77, 78] para redes periódicas. La topología espacial de las redes tiene efectos importantes en el apareamiento electrónico, por ejemplo, la frustración de los estados anti-enlaces en redes no bipartitas puede favorecer el apareamiento de huecos en comparación con el de los electrones [40]. Por otro lado, el problema de dos partículas interactuantes ha despertado un gran interés en los últimos años. En la literatura frecuentemente se reportan investigaciones sobre excitaciones compuestas de sólo dos partículas, tales como los excitones y los pares de Cooper [79]. Aún considerando una densidad finita de partículas interactuantes se ha observado que, en el estado base, generalmente no hay tendencia a la formación de cúmulos de más de dos partículas para ciertos sistemas [80].

El problema de dos partículas en sistemas desordenados se ha abordado a través de diversos métodos, tales como el método de la matriz de transferencia [81, 82, 83, 84, 85, 86, 87, 88], la evolución temporal de los paquetes de onda [81, 89, 90, 91], diagonalización exacta [92], estadística de niveles de energía [93, 94, 95], análisis multifractal [96, 97], función de Green [98, 99, 100, 101], métodos perturbativos [102, 103] y mapeos hacia modelos efectivos [104, 105, 106, 107, 108].

En la presente tesis, el problema de dos electrones interactuantes en presencia de desorden se aborda dentro de la aproximación del potencial coherente, la cual usualmente se emplea para estudiar el problema de un solo electrón en sistemas desordenados.

III.1 Aleación Binaria Desordenada

En esta investigación, nos hemos propuesto estudiar numéricamente los efectos del desorden sobre el apareamiento electrónico. Hemos elegido el problema de dos electrones en una aleación binaria desordenada unidimensional, suponiendo que el desorden ocurre sólo en las autoenergías ε_i , de modo que las integrales de salto son constantes, independientemente de la naturaleza de los átomos vecinos. Este problema se aborda mediante dos métodos: (a) a través de la diagonalización exacta y el cálculo del promedio sobre todas las configuraciones posibles de una red pequeña, y (b) la aplicación del CPA a la red de estados.

A continuación nos ocuparemos de la construcción de las configuraciones requeridas en la parte (a) para una concentración del 50% de átomos tipo A y B . Como ejemplo,

III Correlación Electrónica en Sistemas Desordenados

consideremos una red de 6 átomos. Una de sus configuraciones posibles es:

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_A, \varepsilon_2 = \varepsilon_A, \varepsilon_3 = \varepsilon_A, \varepsilon_4 = \varepsilon_B, \varepsilon_5 = \varepsilon_B \text{ y } \varepsilon_6 = \varepsilon_B,$$

la cual puede representarse sencillamente como (111000), donde los átomos de tipo A y B son representados por 1 y 0, respectivamente. En principio, el número total de configuraciones posibles es $C_3^6 = 20$:

$$\begin{aligned} &(111000), (110100), (110010), (110001), (101100), \\ &(101010), (101001), (100110), (100101), (100011), \\ &(011100), (011010), (011001), (010110), (010101), \\ &(010011), (001110), (001101), (001011) \text{ y } (000111). \end{aligned}$$

Sin embargo, considerando la simetría de inversión es obvio que algunas configuraciones son en realidad una sola, como ocurre con, por ejemplo, las configuraciones (111000) y (000111). Entonces el ensamble se reduce a las siguientes diez configuraciones:

$$\begin{aligned} &(111000), (110100), (110010), (110001), (101100), \\ &(101010), (101001), (100110), (011100) \text{ y } (011010). \end{aligned}$$

Si además imponemos condiciones cíclicas a la frontera, podemos seguir reduciendo el número de configuraciones; por ejemplo, las configuraciones (111000) y (011100) representan la misma configuración. Entonces, el nuevo ensamble a considerar es:

$$(111000), (110100), (110010) \text{ y } (101010).$$

Aún podemos eliminar algunas configuraciones más combinando las dos simetrías anteriores. Por ejemplo, (110100) y (110010) son equivalentes, ya que la segunda, por simetría de inversión, es igual a (010011) y ésta a su vez es igual a la primera debido a las condiciones cíclicas. Entonces, el ensamble con el menor número posible de configuraciones se compone de los siguientes tres miembros en vez de veinte:

$$(111000), (110100) \text{ y } (101010).$$

Este tipo de consideraciones nos permite construir ensambles de 8, 16 y 50 configuraciones para redes de 8, 10 y 12 átomos, respectivamente. Como veremos en la siguiente sección, el problema del apareamiento electrónico en una red unidimensional de tamaño N se transforma a un problema de una sola partícula en una red cuadrada de tamaño $N \times N$. En el caso de 12 átomos, por ejemplo, se tiene que calcular el promedio sobre las 50 configuraciones de las propiedades físicas a partir de un hamiltoniano de rango 144×144 . En general, el número de configuraciones del ensamble crece exponencialmente con el tamaño de la red. Por lo tanto, la evaluación numérica requiere grandes requerimientos de memoria y tiempos largos de cómputo. Por otro lado, mediante el empleo del CPA podemos estimar con buena precisión el resultado del promedio sobre el ensamble sin necesidad de considerar redes grandes. Sin embargo, hasta donde sabemos, en la literatura no han habido aplicaciones del CPA al problema de la correlación electrónica en redes desordenadas.

III.2 Espacio de Estados de Dos Partículas

El hamiltoniano de Hubbard *extendido* -Ec. (6)- no tiene hasta la fecha solución analítica, aún para el caso de redes periódicas. El problema se complica mucho si se desea tomar en cuenta el desorden. Sin embargo, si se considera un número finito de partículas, es posible mapear el problema hacia otro de amarre fuerte de una sola partícula en una red de mayor dimensión [76]. En esta tesis se aborda el problema de sólo dos partículas interactuantes dentro de una red desordenada. Por simplicidad, el desorden se considera únicamente en las autoenergías ε_i , mientras que las integrales de salto t_{ij} , las energías de interacción intra-atómica U_i y las energías de interacción inter-atómica V_{ij} son constantes e iguales a t , U y V , respectivamente. Por lo tanto, la Ec. (6) se reduce a

$$H = \sum_{i,\sigma} \varepsilon_i a_{i,\sigma}^+ a_{i,\sigma} + t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} a_{i,\sigma}^+ a_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} + \frac{1}{2} V \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j. \quad (85)$$

Como un ejemplo del mapeo mencionado anteriormente, consideremos el problema de dos electrones de espines antiparalelos en una red de tres átomos con condiciones a la frontera libre y autoenergías ε_1 , ε_2 y ε_3 . Para este caso, el hamiltoniano [Ec. (85)] puede escribirse explícitamente como

$$\begin{aligned} H = & \varepsilon_1 n_{1,\uparrow} + \varepsilon_1 n_{1,\downarrow} + \varepsilon_2 n_{2,\uparrow} + \varepsilon_2 n_{2,\downarrow} + \varepsilon_3 n_{3,\uparrow} + \varepsilon_3 n_{3,\downarrow} \\ & + t \left(a_{1,\uparrow}^+ a_{2,\uparrow} + a_{1,\downarrow}^+ a_{2,\downarrow} + a_{2,\uparrow}^+ a_{1,\uparrow} + a_{2,\downarrow}^+ a_{1,\downarrow} \right. \\ & \left. + a_{2,\uparrow}^+ a_{3,\uparrow} + a_{2,\downarrow}^+ a_{3,\downarrow} + a_{3,\uparrow}^- a_{2,\uparrow} + a_{3,\downarrow}^+ a_{2,\downarrow} \right) \\ & + U (n_{1,\uparrow} n_{1,\downarrow} + n_{2,\uparrow} n_{2,\downarrow} + n_{3,\uparrow} n_{3,\downarrow}) \\ & + V (n_1 n_2 + n_2 n_3). \end{aligned} \quad (86)$$

Las funciones de onda en la representación de números para dicha red tienen la forma siguiente:

$$| n_{1\uparrow} \ n_{1\downarrow} \ n_{2\uparrow} \ n_{2\downarrow} \ n_{3\uparrow} \ n_{3\downarrow} \rangle,$$

en donde $n_{i\sigma}$ representa el número de ocupación del estado en el que un electrón de espín σ se encuentra en el orbital atómico del sitio i . En el ejemplo de dos partículas, $\sum_{i,\sigma} n_{i\sigma} = 2$.

Las posibles realizaciones de las funciones de onda para este caso son:

$$\begin{aligned} |1\rangle &\equiv | 1_{1\uparrow} \ 1_{1\downarrow} \ 0_{2\uparrow} \ 0_{2\downarrow} \ 0_{3\uparrow} \ 0_{3\downarrow} \rangle, & |2\rangle &\equiv | 1_{1\uparrow} \ 0_{1\downarrow} \ 0_{2\uparrow} \ 1_{2\downarrow} \ 0_{3\uparrow} \ 0_{3\downarrow} \rangle, \\ |3\rangle &\equiv | 1_{1\uparrow} \ 0_{1\downarrow} \ 0_{2\uparrow} \ 0_{2\downarrow} \ 0_{3\uparrow} \ 1_{3\downarrow} \rangle, & |4\rangle &\equiv | 0_{1\uparrow} \ 1_{1\downarrow} \ 1_{2\uparrow} \ 0_{2\downarrow} \ 0_{3\uparrow} \ 0_{3\downarrow} \rangle, \\ |5\rangle &\equiv | 0_{1\uparrow} \ 0_{1\downarrow} \ 1_{2\uparrow} \ 1_{2\downarrow} \ 0_{3\uparrow} \ 0_{3\downarrow} \rangle, & |6\rangle &\equiv | 0_{1\uparrow} \ 0_{1\downarrow} \ 1_{2\uparrow} \ 0_{2\downarrow} \ 0_{3\uparrow} \ 1_{3\downarrow} \rangle, \\ |7\rangle &\equiv | 0_{1\uparrow} \ 1_{1\downarrow} \ 0_{2\uparrow} \ 0_{2\downarrow} \ 1_{3\uparrow} \ 0_{3\downarrow} \rangle, & |8\rangle &\equiv | 0_{1\uparrow} \ 0_{1\downarrow} \ 0_{2\uparrow} \ 1_{2\downarrow} \ 1_{3\uparrow} \ 0_{3\downarrow} \rangle \\ |9\rangle &\equiv | 0_{1\uparrow} \ 0_{1\downarrow} \ 0_{2\uparrow} \ 0_{2\downarrow} \ 1_{3\uparrow} \ 1_{3\downarrow} \rangle. \end{aligned}$$

Para simplificar la notación, las funciones de onda anteriores las podemos reescribir

III Correlación Electrónica en Sistemas Desordenados

del siguiente modo:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |1, 1\rangle, & |2\rangle &= |1, 2\rangle, & |3\rangle &= |1, 3\rangle, \\ |4\rangle &= |2, 1\rangle, & |5\rangle &= |2, 2\rangle, & |6\rangle &= |2, 3\rangle, \\ |7\rangle &= |3, 1\rangle, & |8\rangle &= |3, 2\rangle & \text{y} & |9\rangle = |3, 3\rangle, \end{aligned} \quad (87)$$

donde $|k\rangle = |\ell, m\rangle$ representa al estado k -ésimo cuyo electrón con espín hacia arriba (abajo) está en el sitio ℓ (m).

Los efectos de los operadores del hamiltoniano de la Ec. (86) sobre el estado $|1\rangle$, por ejemplo, se muestran a continuación:

$$\begin{aligned} n_{1,\uparrow} |1, 1\rangle &= |1, 1\rangle, \\ n_{1,\downarrow} |1, 1\rangle &= |1, 1\rangle, \\ n_{2,\uparrow} |1, 1\rangle &= 0, \\ n_{2,\downarrow} |1, 1\rangle &= 0, \\ n_{3,\uparrow} |1, 1\rangle &= 0, \\ n_{3,\downarrow} |1, 1\rangle &= 0, \\ a_{1,\uparrow}^+ a_{2,\uparrow} |1, 1\rangle &= a_{1,\uparrow}^+ (0) = 0, \\ a_{1,\downarrow}^+ a_{2,\downarrow} |1, 1\rangle &= a_{1,\downarrow}^+ (0) = 0, \\ a_{2,\uparrow}^+ a_{1,\uparrow} |1, 1\rangle &= a_{2,\uparrow}^+ |0_{1\uparrow} \ 1_{1\downarrow} \ 0_{2\uparrow} \ 0_{2\downarrow} \ 0_{3\uparrow} \ 0_{3\downarrow}\rangle = |2, 1\rangle, \\ a_{2,\downarrow}^+ a_{1,\downarrow} |1, 1\rangle &= a_{2,\downarrow}^+ |1_{1\uparrow} \ 0_{1\downarrow} \ 0_{2\uparrow} \ 0_{2\downarrow} \ 0_{3\uparrow} \ 0_{3\downarrow}\rangle = |1, 2\rangle, \\ a_{2,\uparrow}^+ a_{3,\uparrow} |1, 1\rangle &= a_{2,\uparrow}^+ (0) = 0, \\ a_{2,\downarrow}^+ a_{3,\downarrow} |1, 1\rangle &= a_{2,\downarrow}^+ (0) = 0, \\ a_{3,\uparrow}^+ a_{2,\uparrow} |1, 1\rangle &= a_{3,\uparrow}^+ (0) = 0, \\ a_{3,\downarrow}^+ a_{2,\downarrow} |1, 1\rangle &= a_{3,\downarrow}^+ (0) = 0, \\ n_{1,\uparrow} n_{1,\downarrow} |1, 1\rangle &= n_{1,\uparrow} |1, 1\rangle = |1, 1\rangle, \\ n_{2,\uparrow} n_{2,\downarrow} |1, 1\rangle &= n_{2,\uparrow} (0) = 0, \\ n_{3,\uparrow} n_{3,\downarrow} |1, 1\rangle &= n_{3,\uparrow} (0) = 0, \\ n_1 n_2 |1, 1\rangle &= (n_{1,\uparrow} + n_{1,\downarrow}) (n_{2,\uparrow} + n_{2,\downarrow}) |1, 1\rangle = (n_{1,\uparrow} + n_{1,\downarrow}) (0) = 0 \text{ y} \\ n_2 n_3 |1, 1\rangle &= (n_{2,\uparrow} + n_{2,\downarrow}) (n_{3,\uparrow} + n_{3,\downarrow}) |1, 1\rangle = (n_{2,\uparrow} + n_{2,\downarrow}) (0) = 0; \end{aligned}$$

entonces

$$H |1, 1\rangle = (2\varepsilon_1 + U) |1, 1\rangle + t(|1, 2\rangle + |2, 1\rangle).$$

Cálculos similares conducen a las siguientes igualdades:

$$\begin{aligned} H |1, 2\rangle &= (\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + V) |1, 2\rangle + t(|1, 1\rangle + |1, 3\rangle + |2, 2\rangle) \\ H |1, 3\rangle &= (\varepsilon_1 + \varepsilon_3) |1, 3\rangle + t(|1, 2\rangle + |2, 3\rangle) \end{aligned}$$

III.2 Espacio de Estados de Dos Partículas

$$\begin{aligned}
 H |2, 1\rangle &= (\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + V) |2, 1\rangle + t (|1, 1\rangle + |3, 1\rangle + |2, 2\rangle) \\
 H |2, 2\rangle &= (2\varepsilon_2 + U) |2, 2\rangle + t (|1, 2\rangle + |2, 3\rangle + |3, 2\rangle + |2, 1\rangle) \\
 H |2, 3\rangle &= (\varepsilon_2 + \varepsilon_3 + V) |2, 3\rangle + t (|1, 3\rangle + |3, 3\rangle + |2, 2\rangle) \\
 H |3, 1\rangle &= (\varepsilon_1 + \varepsilon_3) |3, 1\rangle + t (|2, 1\rangle + |3, 2\rangle) \\
 H |3, 2\rangle &= (\varepsilon_2 + \varepsilon_3 + V) |3, 2\rangle + t (|3, 1\rangle + |3, 3\rangle + |2, 2\rangle) \\
 H |3, 3\rangle &= (2\varepsilon_3 + U) |3, 3\rangle + t (|2, 3\rangle + |3, 2\rangle).
 \end{aligned}$$

En consecuencia, vemos que en la representación $|\ell, m\rangle$ de las funciones de onda de la Ec. (87), los elementos de matriz del hamiltoniano de la Ec. (86) son

$$\begin{aligned}
 \langle i, j | H | k, l \rangle &= [\varepsilon_i + \varepsilon_j + U\delta_{i,j} + V(\delta_{i,j+1} + \delta_{i,j-1})] \delta_{i,k} \delta_{j,l} \\
 &\quad + t(\delta_{i,k} \delta_{j,l-1} + \delta_{i,k+1} \delta_{j,l} + \delta_{i,k} \delta_{j,l-1} + \delta_{i,k-1} \delta_{j,l}),
 \end{aligned}$$

lo que equivale a escribir el hamiltoniano en la notación de Dirac de la siguiente forma

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{i,j} [\varepsilon_i + \varepsilon_j + U\delta_{i,j} + V(\delta_{i,j-1} + \delta_{i,j+1})] |i, j\rangle \langle i, j| \\
 &\quad + t \sum_{i,j} (|i, j\rangle \langle i, j-1| + |i, j\rangle \langle i-1, j| + |i, j\rangle \langle i, j+1| + |i, j\rangle \langle i+1, j|),
 \end{aligned}$$

el cual puede interpretarse como el hamiltoniano de una sola partícula que se encuentra en una red cuadrada (Fig. III.1). Esta red bidimensional se caracteriza por tener las mismas integrales de salto t que los electrones originales, y las energías de interacción U y V han pasado a formar parte de la autoenergía de los “sitios de impureza”, como se muestra en la Fig. III.1.

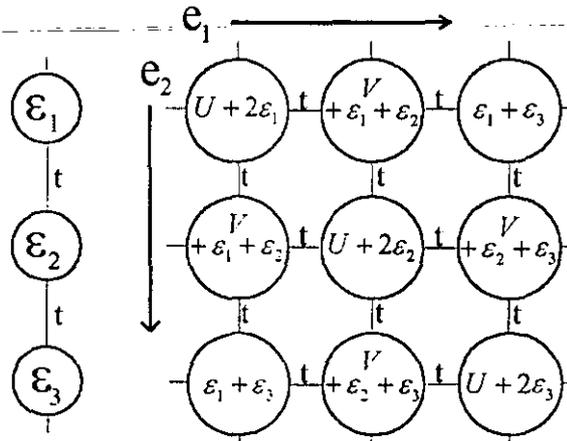


Fig. III.1 Red cuadrada para una cuasipartícula independiente, equivalente al problema de dos electrones e_1 y e_2 interaccionando en una red unidimensional, mostrada a la izquierda. Las flechas indican las direcciones en las que se toman las coordenadas del par de electrones.

En resumen, hemos encontrado una equivalencia entre el problema de dos partícu-

las en una red atómica unidimensional y el problema de una sola partícula en una red bidimensional de estados con impurezas. Los estados de las impurezas se encuentran generalmente fuera de la banda de energías permitida de la red cuadrada y corresponden a los estados apareados del problema original. En general, si n electrones se encuentran en una red d -dimensional, el problema de Hubbard se puede mapear al de una sola partícula en un hiper-espacio de nd -dimensiones [76].

III.3 CPA y Promedio Configuracional

En el estudio de la estructura de bandas de una sola partícula en materiales amorfos, una de las aproximaciones más exitosas ha sido el CPA. En contraste con muchas otras teorías, el CPA permite un estudio analítico sin pérdida de los aspectos físicos más importantes, y es capaz de interpolar correctamente entre los límites de bajo y fuerte desorden, así como bajas y altas concentraciones de impurezas [109]. El CPA es la mejor aproximación de un solo sitio para la función de Green promediada sobre el ensamble de una sola partícula [42].

Para analizar los efectos del desorden en el apareamiento electrónico aplicamos el CPA al hiper-espacio de estados, ya que en este espacio tenemos justamente un problema de amarre fuerte de una sola partícula. En la Figura III.2 la red en el hiper-espacio para un singulete en una cadena lineal se reemplaza por una red efectiva de CPA, donde ε_i es la autoenergía en el átomo i -ésimo del sistema original y σ es el potencial efectivo en el cual se considera un desorden diagonal dentro del CPA de un solo sitio.

Denotemos el hamiltoniano de amarre fuerte para la red del CPA por H_σ y la función de Green promediada sobre el ensamble (o la función de Green del CPA) por \bar{G} . Entonces $\bar{G} = (E - H_\sigma)^{-1}$. La autoconsistencia del CPA [52, 110], derivada a partir de la condición de la anulación del promedio de la matriz de dispersión en un solo sitio, requiere que

$$\bar{G}_{00} = x\bar{G}_{00}^A + (1 - x)\bar{G}_{00}^B, \quad (88)$$

donde \bar{G}_{00}^A y \bar{G}_{00}^B son las funciones de Green evaluadas en el sitio central de la red del hiper-espacio y son calculadas a partir de los hamiltonianos de tipo H_σ reemplazando los sitios centrales σ por los dos posibles $2\varepsilon_A$ y $2\varepsilon_B$, respectivamente. La ecuación (88) da una forma autoconsistente de calcular σ como una función de la energía de dos partículas (E). El cálculo autoconsistente numérico fue realizado en una red de 64 sitios efectivos con una condición a la frontera periódica. Este tamaño de la red se escogió como el tamaño mínimo tal que las cantidades físicas no tienen variaciones importantes con el tamaño.

III.3 CPA y Promedio Configuracional

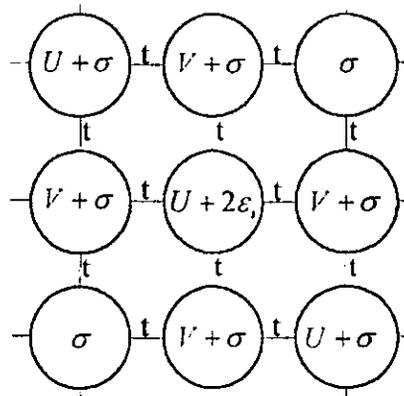


Fig. III.2. Red efectiva correspondiente a la red de estados de la Fig. III.1, para el caso en el que se realiza autoconsistencia sobre un sitio en la cadena de impurezas U . En este sitio la ϵ_i puede ser ϵ_A o ϵ_B .

Para los sitios que no se encuentran en la diagonal de la red en la que están las impurezas tipo U (Fig. III.3), la condición de autoconsistencia debe modificarse, ya que las auto-energías de estados $\epsilon_i + \epsilon_j$ pueden tomar tres valores posibles: $2\epsilon_A$, $\epsilon_A + \epsilon_B$ y $2\epsilon_B$. El promedio de la función de Green en este caso es una generalización de la Ec. (88),

$$\overline{G}_{11} = x^2 \overline{G}_{11}^{AA} + 2x(1-x) \overline{G}_{11}^{AB} + (1-x)^2 \overline{G}_{11}^{BB}, \quad (89)$$

donde el subíndice 11 indica que las funciones de Green se evalúan en un sitio fuera de la diagonal de la red que contiene a la impureza tipo U .

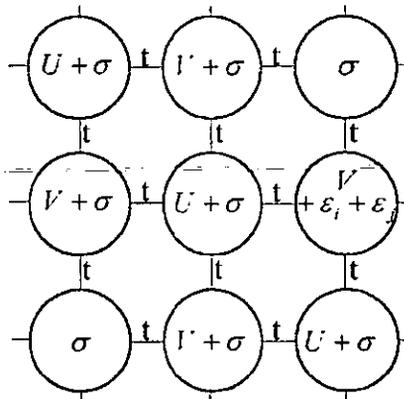


Fig. III.3. Red de estados efectiva si el sitio de autoconsistencia se selecciona sobre la cadena de impurezas V . La contribución $\epsilon_i + \epsilon_j$ a la autoenergía puede tomar tres valores diferentes (ver texto).

Considerando los dos tipos de sitios -los que tienen la autoenergía $2\epsilon_i$ y $\epsilon_i + \epsilon_j$ -, la densidad total de estados puede escribirse como

$$DOS(E) = -\frac{1}{N} \text{Im} \overline{G}_{00}(E) - \frac{N-1}{N} \text{Im} \overline{G}_{11}(E),$$

en donde los factores $\frac{1}{N}$ y $\frac{N-1}{N}$ son las fracciones del total de N^2 sitios que involucran dos y tres valores para $\epsilon_i + \epsilon_j$, respectivamente. En la Fig. III.4 se muestra el promedio

III Correlación Electrónica en Sistemas Desordenados

de la *DOS* para una cadena de 8 sitios, comparada con la del *CPA*. Obsérvese que hay una muy buena concordancia entre ambos resultados en cuanto a la ubicación y ancho de las bandas de energía permitidas, a pesar de que el *CPA* suaviza la estructura de bandas.

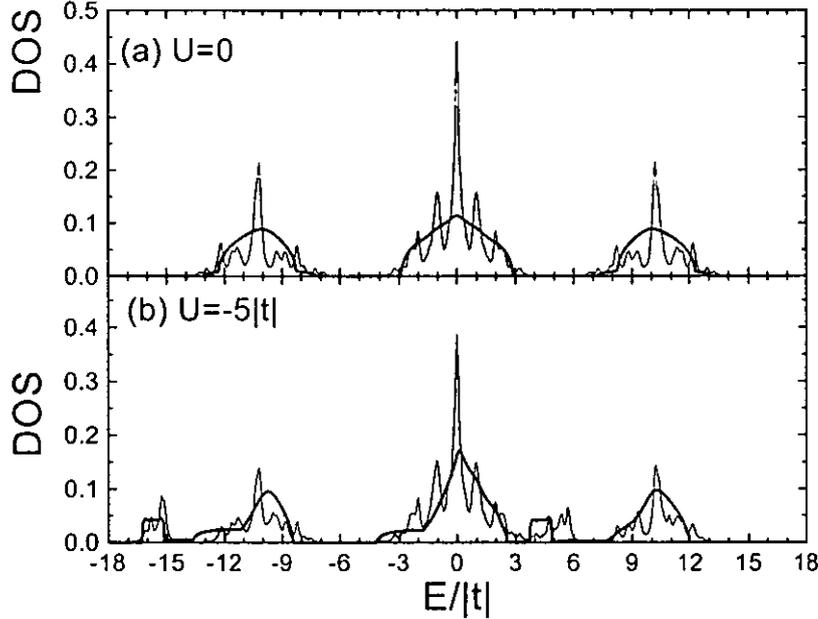


Fig. III.4. Densidad de estados (*DOS*) obtenida mediante el *CPA* (línea gruesa), comparada con el promedio sobre el ensamble para redes de 8 átomos: (a) electrones sin interacción y (b) electrones interactuando con $U = -5|t|$.

Uno de los parámetros importantes para caracterizar el apareamiento de electrones es la energía de amarre entre ellos, el cual puede definirse como

$$\Delta = E_{\min}^{(0)} - E_{\min}^{(U,V)},$$

donde $E_{\min}^{(0)}$ y $E_{\min}^{(U,V)}$ son las energías del estado base cuando las interacciones electrón-electrón están ausentes y presentes, respectivamente. Cuando las interacciones son atractivas, se tiene que $E_{\min}^{(U,V)} < E_{\min}^{(0)}$, es decir, hay formación del par de electrones.

Es conveniente definir un parámetro adimensional para el desorden en la auto-energía:

$$\delta = \frac{\epsilon_A - \epsilon_B}{|t|}.$$

Para $\delta = 0$ la aleación binaria se reduce al sistema periódico. En las figuras III.5a y III.5b las energías de amarre contra δ se muestran para las interacciones intra-atómicas e inter-atómicas, respectivamente, y se comparan los resultados del *CPA* con los obtenidos a partir del cálculo del promedio configuracional. Nótese que los resultados promediados sobre el ensamble se aproximan a los resultados del *CPA* cuando el sistema se hace suficientemente grande. Sin embargo, la forma de aproximación es completamente diferente, ya que la finitud del sistema es más notable en el cálculo del promedio

III.3 CPA y Promedio Configuracional

configuracional para el caso inter-atómico. Además, se observa un claro crecimiento de la energía de amarre conforme el desorden se incrementa, lo cual podría deberse a que el desorden reduce la energía cinética de cada electrón y a que bajo la misma interacción electrón-electrón el apareamiento es más intenso para estados localizados.

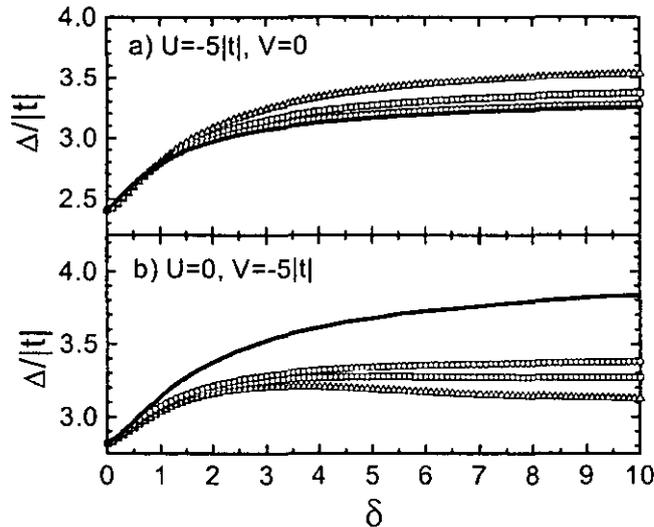


Fig. III.5. Energías de amarre contra δ . Los resultados del CPA (líneas sólidas) se comparan con los del promedio sobre el ensamble para 8 (triángulos), 10 (cuadrados) y 12 (círculos) átomos.

La Fig. III.6 muestra la energía de apareamiento -calculado mediante *CPA*- como una función de la concentración x para una aleación A_xB_{1-x} con $\delta = 5$. Nótese tres aspectos importantes de la figura: (i) el apareamiento electrónico es creciente con x , (ii) la gráfica es asimétrica con respecto a $x = 0.5$, y (iii) existe una discontinuidad en $x = 1$. La asimetría es debida al efecto de confinamiento, ya que $\epsilon_A > \epsilon_B$ y el confinamiento cuántico se incrementa cuando la concentración de átomos A crece. La discontinuidad se debe a que en $x = 1$ ocurre una transición entre una función de onda de una partícula localizada a una extendida.

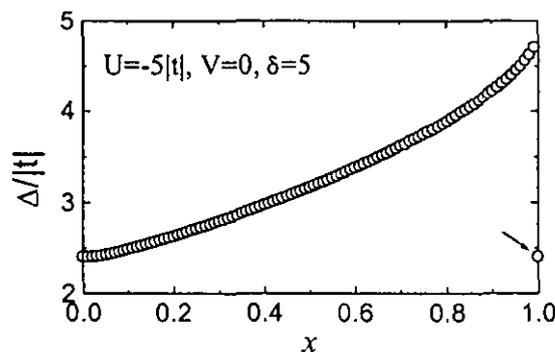


Fig. III.6. Energía de amarre como una función de x en una aleación binaria A_xB_{1-x} . La flecha indica una discontinuidad en $x = 1$.

Con el propósito de minimizar el efecto de confinamiento cuántico, hemos anali-

III Correlación Electrónica en Sistemas Desordenados

zado el caso de desorden en las interacciones intra-atómicas (U_A y U_B). La Fig. III.7 muestra el diagrama de fase del estado base de dos partículas para $U_A > 0$, $U_B < 0$ y $x = 0.5$, calculado por medio del CPA. En la figura la curva más baja indica la transición entre el apareamiento y no apareamiento, y la curva superior representa la misma transición obtenida para una cadena diatómica ordenada. Esta última curva coincide con la calculada por A.S. Alexandrov *et al* [111]. Nótese que hay una región intermedia donde el apareamiento está prohibido para el caso diatómico ordenado, pero no para los sistemas desordenados. Este necho se debe a que los estados apareados, o estados de impurezas, son propios sólo de los átomos B , y la extensión de los cúmulos de átomos B en el sistema podría ser esencial para la energía de amarre.

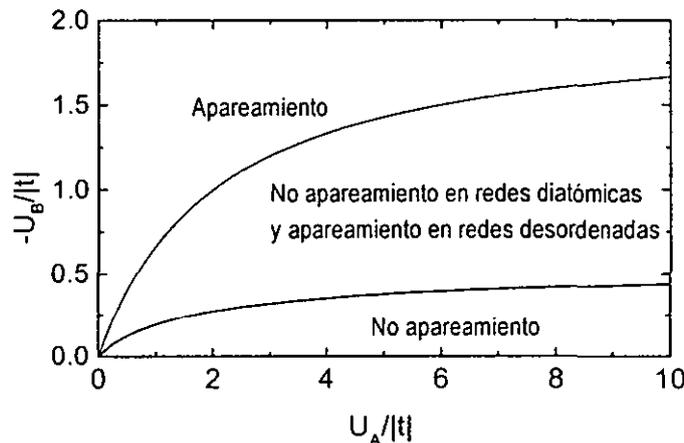


Fig. III.7. Diagrama de fase del estado base de dos electrones, analizada para las cadenas diatómicas ordenada y desordenada.

En suma, hemos estudiado el apareamiento de electrones singuletes en aleaciones sustitucionales binarias por medio de un hamiltoniano de Hubbard atractivo. El problema original de muchos cuerpos ha sido mapeado a un problema equivalente de amarre fuerte con impurezas en un hiperespacio. El desorden sustitucional aleatorio ha sido considerado en las autoenergías atómicas así como en las interacciones intra-atómica electrón-electrón. El análisis del desorden en la auto-energía sugiere que el apareamiento electrónico se incrementa por la localización de la función de onda de una sola partícula. Sin embargo, una energía de apareamiento grande no significa necesariamente una mayor temperatura crítica, ya que la condensación de Bose-Einstein podría ocurrir a una temperatura diferente de la del apareamiento [72]. El estudio realizado en una aleación metálica aleatoria indica que el valor de la temperatura crítica puede ser más alta o más baja que el de cualquiera de los constituyentes tomados por separado [112].

IV Transporte Electrónico en Redes Cuasiperiódicas

El transporte cuántico en sistemas aperiódicos es un problema abierto y de gran interés. En particular, la relación entre la localización de estados y los fenómenos de transporte no está bien entendida [18]. Desde el descubrimiento de los cuasicristales se han hecho esfuerzos considerables en el estudio de la localización de las excitaciones [23]. Se ha establecido que el espectro electrónico y fonónico de las cadenas de Fibonacci o superredes de Fibonacci [15, 113] son un conjunto de Cantor con medida de Lebesgue cero, y los correspondientes estados propios son críticos [114]. Por lo tanto, no se espera que la conducción electrónica en estructuras cuasiperiódicas sea balística como en una red periódica, ni difusiva como en una desordenada [115].

Sutherland *et al.* [116] y Roy *et al.* [117] desarrollaron métodos de matriz de transferencia para estudiar la resistencia de Landauer de la red de Fibonacci, y encontraron que la resistencia cambia con el tamaño del sistema y con la energía. Aldea *et al.* [118], Newman *et al.* [119] y Ding *et al.* [120], partiendo de la analogía con una red de resistencias que simula el flujo de corriente en sólidos, introducida por Miller y Abrahams [121], encontraron que la conductividad eléctrica a bajas frecuencias depende de la medida espectral del sistema, mientras que para altas frecuencias dicha conductividad es independiente de la secuencia específica de la red. Mayou *et al.* [122], suponiendo que la difusión cuántica sigue una ley de potencia, $L(t) \sim t^\beta$ -donde $L(t)$ mide la extensión del paquete de onda en el tiempo t -, encontraron un valor crítico, $\beta_c = \frac{1}{2}$, de modo que para $\beta > \beta_c$ la conductividad óptica de los cuasicristales crece con la frecuencia y para el caso contrario decrece. Stephen *et al.* [123] estudiaron las propiedades de transporte de un sistema inconmesurado partiendo de que la integral de salto asistida por fonones depende de la temperatura. Por último, Roche *et al.* [124] encontraron que la dependencia de la conductividad con la temperatura en cuasicristales sigue una ley de potencia a bajas temperaturas, la cual es consistente con resultados experimentales.

Recientemente, se ha reportado la existencia de estados transparentes con coeficientes de transmisión unitaria en sistemas de Fibonacci mixtos (MFS) de N átomos [21]. Sin embargo, la localización de dichos estados es aún controversial. Se ha encontrado que las funciones propias de estos estados transparentes, cuyas energías satisfacen

$$E = \alpha(1 + \gamma^2)/(1 - \gamma^2) \quad (90)$$

y

$$E^2 - \alpha^2 = 4t^2 \cos^2(K\pi/N), \quad (91)$$

son funciones de onda semejantes a las periódicas [125], donde $+\alpha$ ($-\alpha$) son las auto-

IV Transporte Electrónico en Redes Cuasiperiódicas

energías de los átomos A (B), $\gamma = t_{AA}/t_{AB}$ es la razón de los parámetros de salto, t es el parámetro de salto de los saturadores perfectos del *MFS*, K y N/K son números enteros. Por otro lado, la conductividad ac de los estados transparentes es un problema no estudiado. En general, la conductividad eléctrica ac a temperatura cero es una buena prueba de la naturaleza del espectro de los valores propios electrónicos y de la localización de las funciones de onda, ya que ella depende no sólo de los estados el nivel de Fermi, sino también de la estructura global del espectro.

Una expresión cuántica general, dentro de la aproximación de respuesta lineal, para calcular la parte real de la conductividad eléctrica para temperatura finita T y frecuencia ω está dada por la fórmula de Kubo-Greenwood [66]

$$\sigma(\mu, \omega, T) = \lim_{\Omega \rightarrow \infty} \frac{2e^2 \hbar}{\pi \Omega m^2} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{f(E) - f(E + \hbar\omega)}{\hbar\omega} \times \text{Tr} [p \text{Im} G^+(E + \hbar\omega) p \text{Im} G^+(E)] \quad (92)$$

donde Ω es el volumen del sistema d -dimensional ($d = 1, 2, 3$), p es la proyección del momento a lo largo de la dirección del campo eléctrico aplicado, $G^+(E)$ es la función de Green retardada de una partícula y $f(E)$ es la distribución de Fermi-Dirac con energía de Fermi μ y temperatura T . En este trabajo, la conductividad ac de los estados transparentes a temperatura cero se realiza evaluando la ecuación (92).

IV.1 Sistema de Fibonacci Mixto

Existen varias formas de construir una red de Fibonacci; por ejemplo, empleando dos integrales de salto (problema de enlaces) o dos tipos de átomos (problema de sitios). En esta tesis, consideremos un *MFS* en el que dos tipos de átomos, A y B , se acomodan siguiendo la secuencia de Fibonacci, es decir, si uno define la primera generación $F_1 = A$ y la segunda generación $F_2 = BA$, las siguientes generaciones están dadas por $F_n = F_{n-1} \oplus F_{n-2}$. Por ejemplo, $F_5 = BAABABAA$. En particular, esta secuencia se escoge para obtener los estados transparentes reportados en las referencias [21, 125]. En el *MFS*, las integrales de salto entre átomos depende de la naturaleza de ellos, contrario a las mismas integrales de salto en el problema de sitios, dando origen a la existencia de dos diferentes parámetros t_{AA} y $t_{AB} = t_{BA}$. Por simplicidad, consideremos una separación inter-atómica uniforme a .

IV.2 Fórmula de Kubo en el Modelo de Amarre Fuerte

Con el fin de aislar los efectos cuasicristalinos de las propiedades físicas del sistema, consideremos el hamiltoniano de amarre fuerte de banda s , el cual puede escribirse

IV.2 Fórmula de Kubo en el Modelo de Amarre Fuerte

como

$$H = \sum_j \{ \varepsilon_j |j\rangle \langle j| + t_{j,j+1} |j\rangle \langle j+1| + t_{j,j-1} |j\rangle \langle j-1| \}, \quad (93)$$

donde ε_i denota las energías de sitio ε_A o ε_B , y $t_{i,j}$ son los correspondientes parámetros de salto. Para evaluar la fórmula de Kubo-Greenwood, Ec. (92), se necesita la función de Green [45] y el operador de momento, p . Éste último puede determinarse usando las relaciones $p = (im/\hbar)[H, x]$ y $x = \sum_j ja |j\rangle \langle j|$. Entonces, en la representación de Wannier, tenemos

$$p = \frac{ima}{\hbar} \sum_j \{ t_{j,j+1} |j\rangle \langle j+1| - t_{j,j-1} |j\rangle \langle j-1| \}. \quad (94)$$

Por ejemplo, en el caso de una cadena lineal periódica infinita con energía de sitio ε_0 e integral de salto t , la función de Green retardada de una partícula está dada por [45]

$$G_{l,m}^+(E) = \frac{ie^{i\theta|l-m|}}{2|t|\sin\theta} \quad (95)$$

donde $\cos\theta = (E - \varepsilon_0)/2|t|$. Sustituyendo esta expresión en la Ec. (92) y definiendo $\cos\theta' = (E + \hbar\omega - \varepsilon_0)/2|t|$, $s(n) = \sin n\theta \sin n\theta'$ y $\nu(n) = 1 - \cos n\theta \cos n\theta'$, podemos escribir, como se muestra en el apéndice, la siguiente expresión general para un sistema de N sitios idénticos saturados con dos cadenas lineales periódicas semi-infinitas,

$$\begin{aligned} \sigma(\mu, \omega, T) &= \frac{8e^2 t^2 a}{\pi(N-1)\hbar^3 \omega^2} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{f(E) - f(E + \hbar\omega)}{\hbar\omega} \\ &\times \left\{ \frac{1}{2} \nu(N-1) \left(\frac{\nu^2(1)}{s(1)} + s(1) \right) - s(N-1) \nu(1) \right\}, \quad (96) \end{aligned}$$

donde hemos tomado la longitud del sistema como $\Omega = (N-1)a$. En el límite cuando T y $\omega \rightarrow 0$, el factor $[f(E) - f(E + \hbar\omega)]/\hbar\omega$ se convierte en $\delta(E - \mu)$, siendo μ la energía de Fermi. Por lo tanto, la conductividad dc de una cadena lineal periódica dentro de la banda de energía es

$$\sigma_p = \frac{e^2 a}{\pi \hbar} (N-1). \quad (97)$$

Nótese que esta conductividad no depende de la energía de Fermi. Además, en el límite termodinámico la conductividad dc de una cadena lineal periódica a temperatura cero diverge, debido a que en este caso la conductividad eléctrica es balística y entonces el camino libre medio es tan grande como el tamaño del sistema [126]. Sin embargo, para los sistemas cuasiperiódicos el camino libre medio está acotado, excepto para los estados transparentes, los cuales tienen un coeficiente de transmisión unitario

y su resistencia de dispersión de Landauer se hace cero [126]. En la sección siguiente, estudiamos comparativamente la localización y la conductividad eléctrica dc de estos estados transparentes.

IV.3 Conductividad dc

Consideremos un *MFS* finito, conectado a dos cadenas lineales periódicas semi-infinitas con integrales de salto t y energías de sitio nulas ($\varepsilon_0 = 0$). Su conductividad eléctrica puede estudiarse a través de la fórmula de Kubo-Greenwood, en la cual la función de Green se calcula con las condiciones de frontera mencionadas y la traza en la Ec. (92) se calcula sobre el sistema de Fibonacci. La Fig. IV.1(a) muestra la densidad de estados, en escala logarítmica, de un *MFS* de generación $n = 17$ con 2584 átomos, en el cual $\varepsilon_A = \varepsilon_B = 0$, $t_{AA} = (\sqrt{5} - 1)t/2$ y $t_{AB} = t_{BA} = t$. Obsérvese que este espectro muestra estructuras finas, debido a que contiene 100,000 datos y la parte imaginaria de la energía en la función de Green es $10^{-7} |t|$. La conductividad dc de Kubo a temperatura cero del mismo sistema de Fibonacci como en la Fig. IV.1(a), σ_F , se calcula por medio de la Ec. (92) y lo presentamos en la Fig. IV.1(b) en unidades de la correspondiente a una cadena lineal periódica, σ_P , dada por la Ec. (97). Nótese que hay muchos estados que tienen una conductividad eléctrica muy cercana a la del sistema periódico, y un análisis más detallado revela que la conductividad de Kubo normalizada, σ_F/σ_P , del estado en $\mu = 0$ es exactamente la unidad, lo que confirma que éste es un estado transparente como lo reportaron Maciá y Domínguez-Adame [21]. Cabe mencionar que los resultados numéricos en doble precisión no muestra ningún otro estado transparente, a pesar de que la conductividad de Kubo normalizada de muchos estados propios es mayor a 0.99999.

Por otro lado, como se había discutido en la sección II.7.3, la transmitancia (T) de un sistema unidimensional puede escribirse como [18, 64]

$$T(E) = \frac{4 - (E/t)^2}{[\tau_{21} - \tau_{12} + (\tau_{22} - \tau_{11})E/2t]^2 + (\tau_{22} + \tau_{11})^2(1 - E^2/4t^2)}, \quad (98)$$

en el que

$$\begin{pmatrix} c_{N+1} \\ c_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_0 \end{pmatrix} = \prod_{i=1}^N \begin{pmatrix} \frac{E - \varepsilon_i}{t_{i,i+1}} & -\frac{t_{i,i-1}}{t_{i,i+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_0 \end{pmatrix} \quad (99)$$

donde c_i son las amplitudes normalizadas de la función de onda Ψ , es decir, $\Psi = \sum_{i=1}^N c_i |i\rangle$ y $\sum_{i=1}^N |c_i|^2 = 1$. La Fig. IV.1(c) muestra la transmitancia T calculada para un *MFS* como en la Fig. IV.1(a). Obsérvese que hay una semejanza notable entre las figuras IV.1(b) y IV.1(c), ya que la conductividad eléctrica es proporcional al coeficiente de transmisión a través de la fórmula de Landauer [127]. La diferencia entre estos dos espectros parece que se origina por la pequeña parte imaginaria ($10^{-7} |t|$)

IV.4 Localización Electrónica

incluida en el cálculo de la conductividad de Kubo a través de la función de Green.

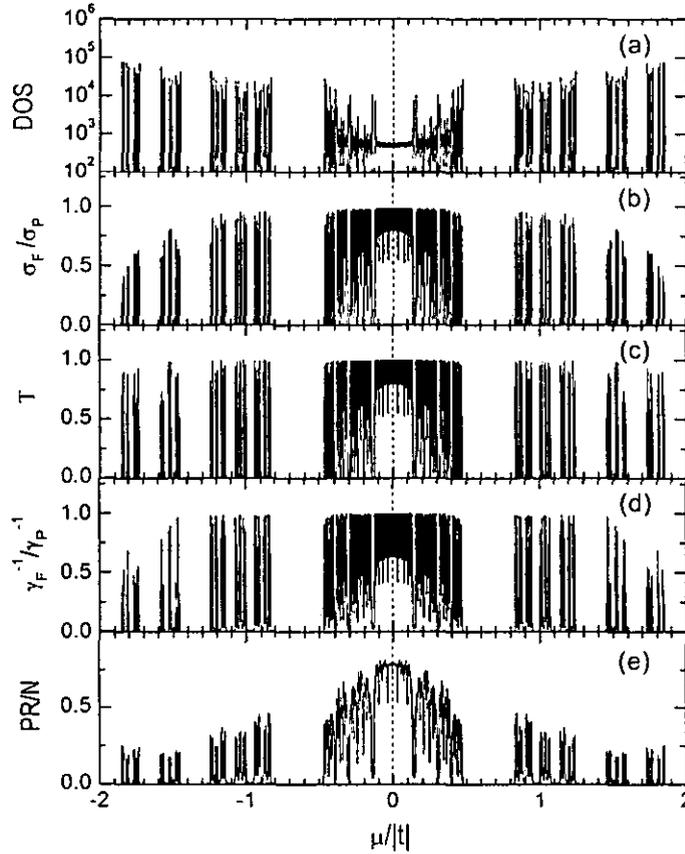


Fig. IV.1 (a) Densidad de Estados (DOS), (b) Conductividad de Kubo (σ_F), (c) Transmitancia (T), (d) Inversa del coeficiente de Lyapunov (γ_F^{-1}), y (e) Razón de Participación (PR) para un sistema de Fibonacci mixto de 2584 átomos con $\epsilon_A = \epsilon_B = 0$, $t_{AB} = t_{BA} = t$, y $t_{AA} = \frac{\sqrt{5}-1}{2}t$. El sistema está saturado por dos cadenas lineales periódicas semi-infinitas con $\epsilon = 0$ e integrales de salto t . σ_F y γ_F^{-1} están normalizadas por sus respectivos σ_P y γ_P^{-1} de una cadena periódica. El estado transparente ($\mu = 0$) se indica mediante una línea segmentada.

IV.4 Localización Electrónica

La localización de los estados propios se estudia a través del exponente de Lyapunov (γ) y la Razón de Participación (PR), los cuales pueden escribirse, como se discutió en las secciones II.7.2 y II.7.4,

$$\gamma = \frac{1}{N} \ln \sqrt{\tau_{11}^2 + \tau_{12}^2 + \tau_{21}^2 + \tau_{22}^2} \quad \text{y} \quad PR = \left(\sum_{i=1}^N |c_i|^4 \right)^{-1}. \quad (100)$$

La inversa del exponente de Lyapunov, calculada para un MFS como en la Fig. IV.1(a) y normalizada respecto al de la cadena periódica, se presenta en la Fig. IV.1(d).

IV Transporte Electrónico en Redes Cuasiperiódicas

Nótese su coincidencia remarcable con las figuras IV.1(b) y IV.1(c), la cual era de esperarse [62]. Sin embargo, la razón de participación para este sistema mostrado en la figura IV.1(e) difiere claramente del espectro IV.1(b)-IV.1(d), lo que indica que el PR no es una buena cantidad para caracterizar los estados críticos.

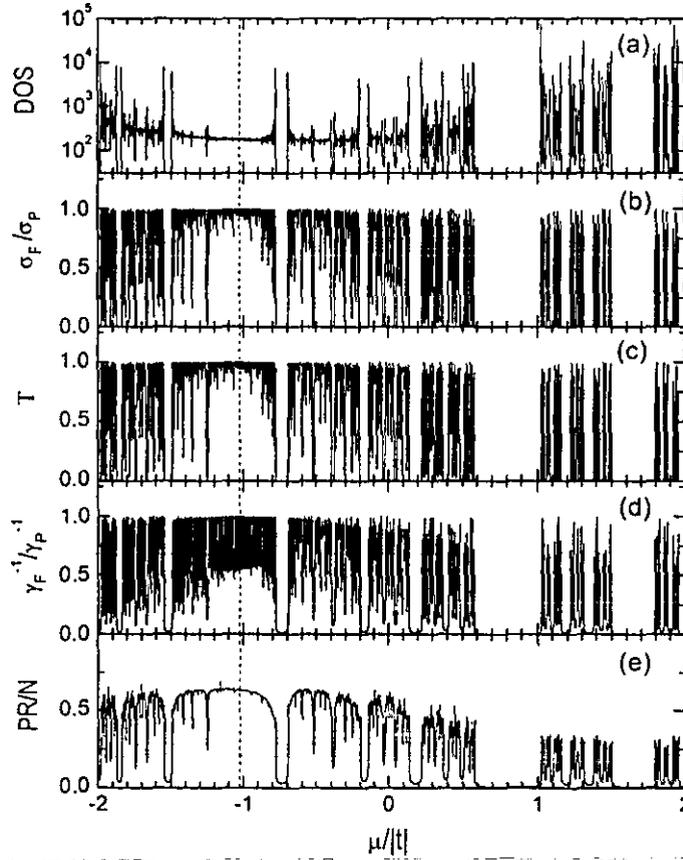


Fig. IV.2 (a) Densidad de Estados (DOS), (b) Conductividad de Kubo (σ_F), (c) Transmitancia (T), (d) Inversa del coeficiente de Lyapunov (γ_F^{-1}), y (e) Razón de Participación (PR) para un sistema de Fibonacci mixto de 987 átomos con $\epsilon_A = -\epsilon_B = 0.225|t|$, $t_{AA} = 1.25t$, y $t_{AB} = t_{BA} = t$. El sistema también está conectado a dos cadenas lineales periódicas semi-infinitas con $\epsilon = 0$ e integrales de salto t . En este caso, el estado transparente se localiza en $\mu = -1.025|t|$, el cual está indicado por una línea segmentada. σ_F y γ_F^{-1} están normalizadas por sus respectivos σ_P y γ_P^{-1} de una cadena periódica.

Finalmente, el mismo análisis que el de la Fig. IV.1 se aplica a otro MFS , en el que $\epsilon_A = 0.225|t|$, $\epsilon_B = -0.225|t|$, $t_{AA} = 1.25t$ y $t_{AB} = t_{BA} = t$. En este caso, el estado transparente se localiza en $\mu = -1.025|t|$ para generaciones $n = 4l + 3$, siendo l un entero positivo [125]. Los resultados del análisis se muestran en la Fig. IV.2 para un MFS de generación $n = 15$ con 987 átomos. En primer lugar, nótese que el espectro pierde la simetría con respecto a $\mu = 0$, ya que la red no es bipartita. Por otro lado, el comportamiento general observado en la Fig. IV.1 está también presente en la Fig.

IV.5 Conductividad ac

IV.2. En particular, la densidad de estados alrededor del estado transparente, indicada por la línea segmentada en las figuras, recuerda el de una cadena lineal periódica.

La Fig. IV.3 muestra la distribución de amplitudes para los estados (a) $\mu = -1.25|t|$, (b) $\mu = -1.23973|t|$ y (c) $\mu = -0.5418984|t|$ cuyos valores de la transmitancia (T) y de la razón de participación (PR) se indican entre paréntesis. Estas funciones de onda corresponden a un *MFS* de 987 átomos con parámetros son $\epsilon_A = 0.75|t|$, $\epsilon_B = -0.75|t|$, $t_{AA} = 2.0t$ y $t_{AB} = t_{BA} = t$. Para este sistema el estado transparente se ubica en $\mu = -1.25|t|$, el cual se obtiene de las Ecs. (90) y (91). Nótese que existe una clara estructura espacial marcadamente fluctuante, la cual es característica de las funciones de onda críticas de sistemas aperiódicos. Asimismo, las razones de participación normalizadas, PR/N , tienen valores menores al 50% aún para la función de onda transparente. En particular, la función de onda de la Fig. IV.3(c) tiene una alta transmitancia, a pesar de su localización espacial de amplitudes, hecho que podría deberse a la aparente autosimilaridad de la función de onda.

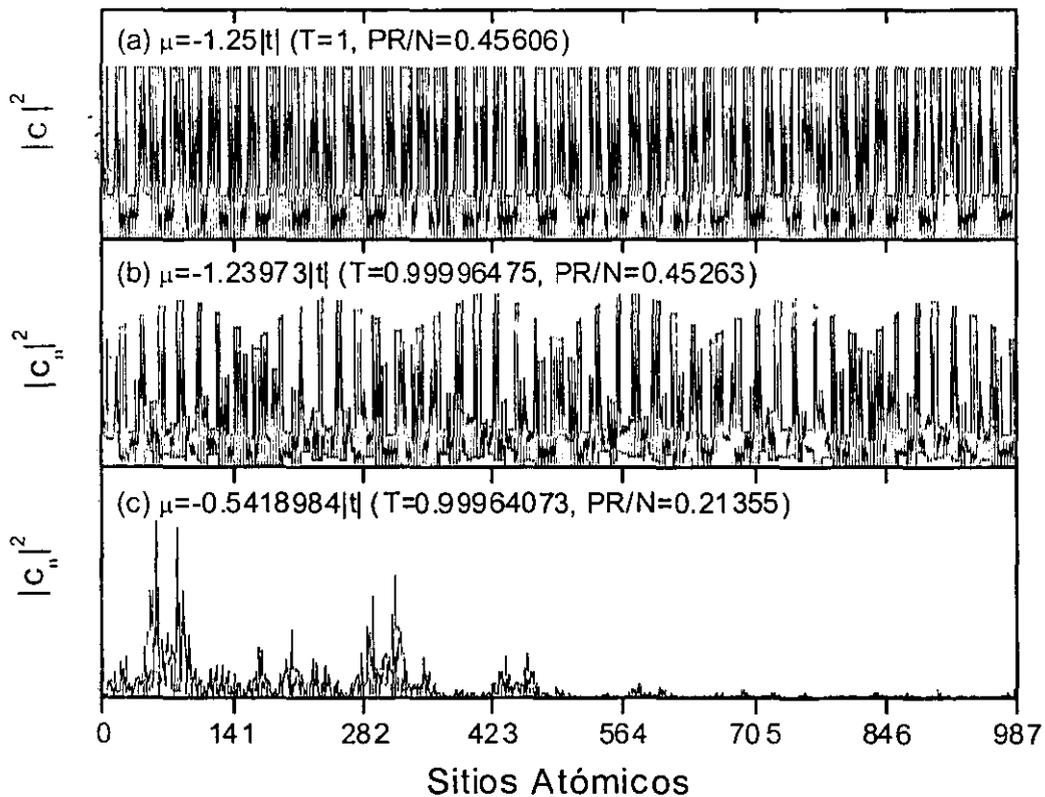


Fig.IV.3 Distribución de amplitudes para un *MFS* de 987 átomos con $\epsilon_A = 0.75|t|$, $\epsilon_B = -0.75|t|$, $t_{AA} = 2.0t$ y $t_{AB} = t_{BA} = t$, y niveles de Fermi (a) $\mu = -1.25|t|$, (b) $\mu = -1.23973|t|$ y (c) $\mu = -0.5418984|t|$. En cada caso se indica entre paréntesis la transmitancia y la razón de participación normalizada.

IV.5 Conductividad ac

Nos interesa estudiar el comportamiento de los estados transparentes bajo perturbaciones tales como la aplicación de los campos externos oscilantes, ya que la conductividad ac es muy sensible a la naturaleza de la distribución de los valores propios y a la localización de las funciones de onda cercanas a la energía de Fermi. En la Fig. IV.4 la conductividad ac de los mismos MFS que los de las figuras IV.1 y IV.2 para μ en las energías de los estados transparentes, se muestra en comparación con el espectro de la conductividad ac del caso periódico obtenida de la Ec. (96). Dicho espectro tiene un carácter *universal*, ya que permanece invariante para cualquier valor de N . Nótese primero que, en general, la conductividad disminuye conforme la frecuencia se incrementa, como lo reportaron Albers y Gubernatis [128] para los sistemas periódicos y desordenados. Además, se observan varios mínimos para la conductividad ac . Para el caso periódico, ellos se localizan en $(N - 1)\hbar\omega = 4n\pi|t|$, siendo n un número entero. Como se muestra en el apéndice, estas frecuencias pueden obtenerse de la solución analítica -Ec. (96)-, al considerar que $|E|/2|t| < \hbar\omega/2|t| \ll 1$ para $\mu = 0$ y conservando sólo los términos lineales en la expansión de Taylor, es decir,

$$\frac{1}{2}\nu(N - 1) \left(\frac{\nu^2(1)}{s(1)} + s(1) \right) - s(N - 1)\nu(1)$$

$$\cong 1 - \cos(N - 1)\phi \cos(N - 1)\phi' - \sin(N - 1)\phi \sin(N - 1)\phi' = 0$$

donde $\phi = E/2|t|$ y $\phi' = (E + \hbar\omega)/2|t|$. Por otro lado, en escala logarítmica, se observa que la disminución del caso cuasiperiódico es más rápido que el del periódico, un comportamiento que está directamente relacionado a la no transparencia de los estados alrededor de los estados transparentes. Además, encontramos una separación casi constante de los mínimos para el MFS , similar al caso periódico. Este hecho puede deberse a la densidad casi constante de los estados cercanos a los estados transparentes mostrados en las figuras IV.1(a) y IV.2(a).

En particular, para la región de baja frecuencia, la conductividad ac de la cadena lineal periódica puede obtenerse analíticamente de la Ec. (96) después de realizar una expansión de Taylor, como se muestra en el apéndice,

$$\sigma(\omega) = \sigma_p \left\{ 1 - \frac{1}{48} \left[\frac{(N - 1)\hbar\omega}{|t|} \right]^2 \right\}. \quad (101)$$

Para el caso cuasiperiódico, el exponente en la Ec. (101) permanece sin cambio, como se indica en el recuadro de la Fig. IV.3. Sin embargo, el MFS tiene curvaturas mayores, es decir, tiene coeficientes de 0.06025 y 0.03311 para los sistemas analizados en las figuras IV.1 y IV.2, respectivamente, en vez de $\frac{1}{48}$ para el caso periódico. Cabe mencionar que, para la región de baja frecuencia, es necesaria una parte imaginaria más pequeña ($10^{-10}|t|$) de la energía en la función de Green y un cálculo en cuadruple

IV.5 Conductividad ac

precisión. Por otro lado, para la región de alta frecuencia la conductividad ac de los sistemas periódicos y cuasiperiódicos disminuye rápidamente conforme la frecuencia aumenta en los tres casos, consistente con lo reportado por Aldea y Dulea [118].

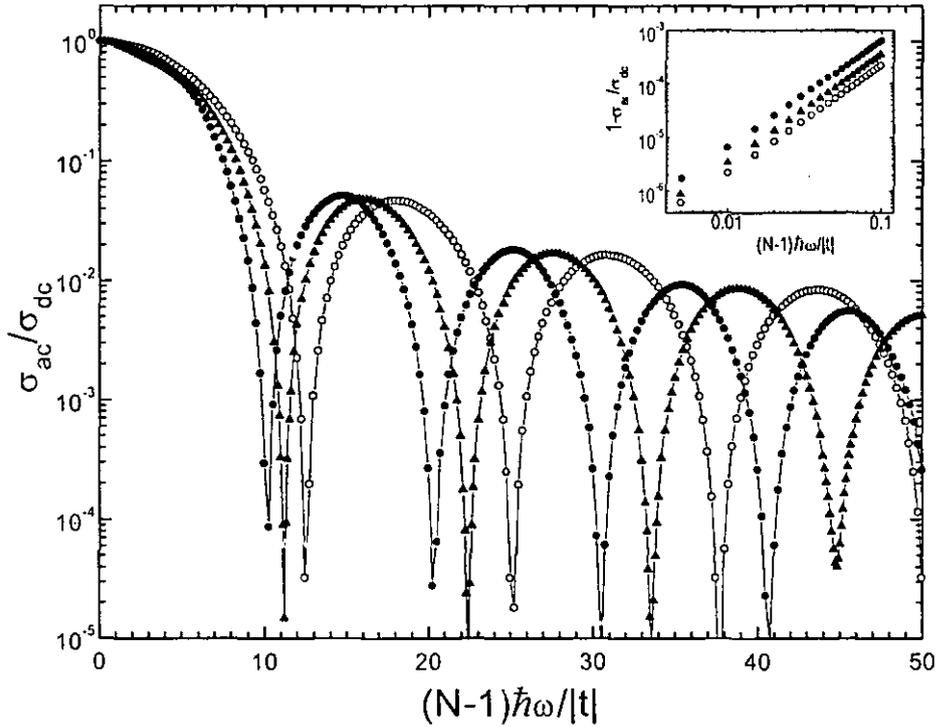
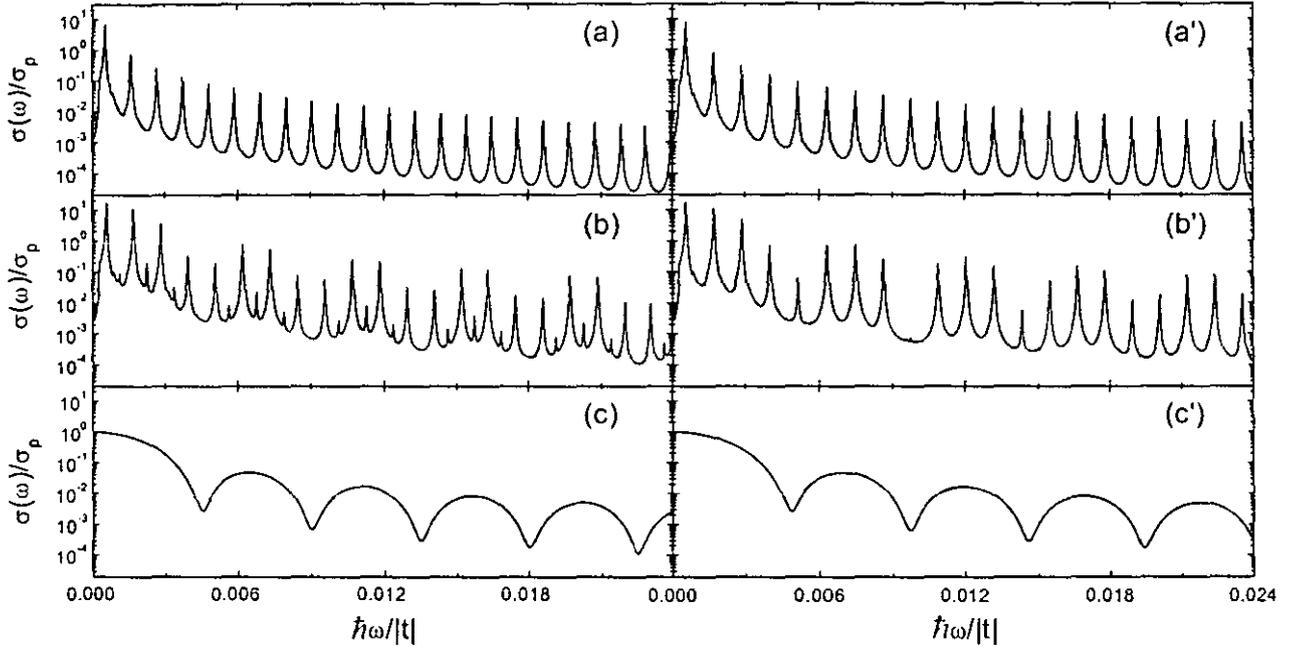


Fig. IV.4. Conductividad ac del estado transparente de una cadena periódica (círculos blancos) y de dos sistemas de Fibonacci mixtos (círculos negros y triángulos negros) con los mismos parámetros que los de las figuras IV.1 y IV.2, respectivamente. El recuadro interior se muestra una gráfica log-log de la región de baja frecuencia de la conductividad ac .

En la Fig. IV.5 mostramos la conductividad ac de Kubo con $\mu = 0$ para tres MFS con la misma auto-energía e integrales de salto que en la Fig. IV.1, pero con diferentes condiciones a la frontera, es decir, (a) 10946 átomos sin saturadores, (b) 2584 átomos con dos saturadores perfectos de 4181 átomos, y (c) 2584 átomos saturados con dos cadenas lineales perfectas semi-infinitas. Los correspondientes resultados calculados para sistemas perfectos se muestran comparativamente en las figuras IV.5(a'), IV.5(b') y IV.5(c'). En primer término, obsérvese que los picos de resonancia en las figuras IV.5(a') y IV.5(b') se localizan en las mismas frecuencias, ya que los sistemas tienen el mismo espectro de valores propios. Sin embargo, sus intensidades son muy diferentes puesto que la fórmula de Kubo se evalúa para diferentes longitudes de los sistemas. Comportamientos similares se encuentran para el caso cuasiperiódico, excepto que los picos de resonancia no se localizan exactamente en las mismas frecuencias, debido a que en estas figuras los segmentos de Fibonacci son diferentes a pesar de tener el mismo tamaño total de los sistemas. Por otro lado, los mínimos de las figuras IV.5(b)

IV Transporte Electrónico en Redes Cuasiperiódicas

y IV.5(c) están localizados en los mismos valores de la frecuencia, y se observa un comportamiento continuo en la Fig. IV.5(c) debido a los saturadores semi-infinitos. Por último, nótese que en las figuras IV.5(a) y IV.5(b) la conductividad ac excede σ_P para bajas frecuencias, ya que σ_P se calcula con saturadores semi-infinitos.



Figuras IV.5(a-c): Conductividad ac de tres MFS con diferentes condiciones de frontera, como se explica en el texto, comparada con la de los correspondientes casos perfectos mostrados en las figuras 2(a'-c'). Las auto-energías del MFS son $\varepsilon_A = \varepsilon_B = 0$, y las integrales de salto son $t_{AA} = 0.8t$ y $t_{AB} = t_{BA} = t$. La parte imaginaria del nivel de Fermi es $\text{Im}(\mu) = 10^{-5}|t|$.

En suma, hemos estudiado la conductividad ac de los estados transparentes en los MFS . A pesar de que tienen la misma conductividad que la red ordenada, los estados transparentes de los MFS no tienen el mismo comportamiento bajo un campo eléctrico oscilatorio, es decir, la conductividad ac disminuye más rápido que la del caso cristalino. Por otro lado, el análisis del transporte eléctrico dc muestra que la razón de participación no cuantifica con precisión la capacidad de transporte de los estados críticos localizados, ya que éste indica sólo la fracción de los sitios que contribuyen a la función de onda y no especifica la distribución espacial.

Para el caso ac , la disminución rápida de la conductividad del estado transparente es una característica general de los MFS , ya que ellos están aislados en el espectro [21], es decir, están siempre rodeados por estados no transparentes, y la conductividad ac involucra estados dentro de un intervalo de ancho $\hbar\omega$ alrededor de la energía de Fermi. Por otro lado, Sokoloff [129] ha encontrado que la conductividad depende oscilatoriamente del tamaño de la red para cadenas periódicas y cuasiperiódicas. Este hecho

IV.5 Conductividad ac

puede obtenerse de la Fig. IV.3 fijando una frecuencia y cambiando la longitud del sistema. Además, la conductividad ac casi nula observada a ciertas frecuencias en la Fig. IV.2 se espera que sea un comportamiento estrictamente unidimensional, ya que para los sistemas tridimensionales se requiere una integración sobre la primera zona de Brillouin del espacio k perpendicular al campo eléctrico aplicado. Además, si se consideran fluctuaciones tales como la distorsión de Peierls, la conductividad dc de los metales unidimensionales debe desvanecerse a $T = 0K$. Cabe mencionar que si se imponen condiciones libres a la frontera, es decir, sin saturadores, la conductividad ac se convierte en un espectro de picos [130], donde las resonancias [131] y las reglas de selección de la simetría de la función de onda están presentes. La conductividad ac muestra una disminución general conforme aumenta la frecuencia del campo eléctrico aplicado, comportamiento similar al observado en sistemas desordenados [132]. Sin embargo, ésta es altamente sensible a las condiciones de frontera: (1) para el caso sin saturadores, la conductividad ac disminuye monotónicamente; (2) con saturadores finitos se encuentra un comportamiento que disminuye oscilatoriamente; (3) cuando se introducen saturadores semi-infinitos, la conductividad ac se convierte en una función suave oscilatoria de la frecuencia.

V Conclusiones

En esta tesis hemos abordado el problema del apareamiento electrónico en una aleación binaria desordenada unidimensional $A_x B_{1-x}$. El problema original del hamiltoniano de Hubbard atractivo para dos partículas se ha mapeado a uno de tipo amarre fuerte en una red cuadrada, donde las energías de interacción intra- e inter-atómicas se convierten en contribuciones a las autoenergías de los sitios diagonales y adyacentes en dicha red cuadrada, respectivamente. Hemos aplicado la *aproximación del potencial coherente (CPA)* a esta red cuadrada de estados para estudiar los efectos de desorden en las propiedades electrónicas de dos partículas. Hemos calculado la densidad de estados (*DOS*) de dos electrones con espines antiparalelos a partir del promedio configuracional y del *CPA*, y hemos encontrado una buena concordancia entre ambos resultados. Además, hemos analizado la energía de apareamiento y el diagrama de fases del estado base.

Las conclusiones principales de esta parte de nuestra investigación son:

1. La aproximación del potencial coherente ha sido aplicado *por vez primera* al estudio de la correlación electrónica en sistemas desordenados.
2. Para el caso de dos partículas interactuantes, el *CPA* reproduce con buena precisión los cálculos exactos del promedio sobre el ensamble de cúmulos pequeños.
3. El apareamiento electrónico se refuerza al aumentar el desorden con el crecimiento de la diferencia de auto-energías (ϵ_i); este hecho podría deberse a la localización de los electrones independientes.
4. La energía de apareamiento, como una función de la concentración x de los átomos A con $\epsilon_A > \epsilon_B$, es asimétrica respecto a $x = 0.5$ y presenta una discontinuidad en $x = 1$. Esta asimetría se relaciona con el efecto de confinamiento, y la discontinuidad se debe al cambio de las funciones de onda desde el carácter localizado hacia el extendido.
5. El diagrama de fase para el caso del desorden en las interacciones electrón-electrón muestra la existencia de una región en la que el apareamiento electrónico está prohibido para el caso ordenado, pero no así para los sistemas desordenados. Esto se debe a que los estados apareados se localizan en los átomos donde la interacción intra-atómica es atractiva, y la extensión de los cúmulos formados por estos átomos es esencial para la energía de apareamiento.

Por otro lado, hemos estudiado el transporte de electrones independientes en sistemas de Fibonacci mixtos (*MFS*) saturados con redes periódicas semi-infinitas. Para el caso *dc* hemos calculado la conductividad eléctrica a partir de la fórmula de Landauer -a través de la transmitancia- y la de Kubo, donde hemos encontrado una concordancia casi perfecta. Como función de la frecuencia, hemos investigado la conductividad *ac* de los estados transparentes y comparado ésta con la de las redes periódicas. Los resultados muestran que:

1. A pesar de que los estados transparentes del *MFS* tienen la misma conductividad *dc* que la de la red ordenada, no tienen el mismo comportamiento bajo un campo eléctrico oscilatorio, es decir, su conductividad *ac* decrece más rápido que la del caso cristalino; esto se debe a que los estados transparentes están siempre rodeados de estados no transparentes, y la conductividad *ac* involucra estados dentro de un intervalo de ancho $\hbar\omega$ alrededor del nivel de Fermi.
2. La conductividad *ac* es altamente sensible a las condiciones de frontera del sistema, las cuales son importantes en la medición de la conductividad.
3. El análisis del transporte eléctrico *dc* muestra que la razón de participación (*PR*) no cuantifica correctamente la capacidad de transporte de los estados críticos, ya que el *PR* indica sólo la fracción de sitios que contribuyen a la función de onda y no su distribución espacial.

Cabe mencionar que la mayoría de los resultados obtenidos para el caso de dos partículas son válidos para el caso de densidades finitas de electrones, por ejemplo, recientemente se encontró la existencia del apareamiento de huecos con simetría *d* en el modelo de Hubbard generalizado, y posteriormente se confirma dentro del formalismo de la teoría *BCS* [133].

Por último, el presente trabajo de investigación sugiere una interesante extensión hacia el estudio de la localización y conductividad de dos partículas en redes desordenadas y cuasiperiódicas, el cual es de gran interés en la actualidad ya que se verificaría la conjetura de que la correlación electrónica podría ser la causante de la delocalización en sistemas aperiódicos [81].

VI Apéndice: Conductividad de una Cadena Periódica

En este apéndice calculamos la conductividad eléctrica de una red periódica unidimensional de N átomos conectada a dos redes periódicas semi-infinitas, a partir de la fórmula de Kubo-Greenwood:

$$\sigma(\mu, \omega, T) = \lim_{\Omega \rightarrow \infty} \frac{2e^2 \hbar}{\pi \Omega m^2} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{f(E) - f(E + \hbar\omega)}{\hbar\omega} \times \text{Tr} [p \text{Im} G(E + \hbar\omega) p \text{Im} G(E)]. \quad (102)$$

El operador de momento lineal, p , dado por la Ec. (94), en el caso periódico es

$$p = \frac{imat}{\hbar} \sum_i \{|i\rangle \langle i+1| - |i\rangle \langle i-1|\}.$$

La representación matricial de p es, por lo tanto,

$$p_{i,j} \equiv \langle i|p|j\rangle = \frac{imat}{\hbar} \{\delta_{i,j-1} - \delta_{i,j+1}\}.$$

Para simplificar la notación, definimos

$$g_{i,j} \equiv \text{Im} \langle i|G(E)|j\rangle, \quad g'_{i,j} \equiv \text{Im} \langle i|G(E + \hbar\omega)|j\rangle. \quad (103)$$

Con las consideraciones anteriores, tenemos que la traza en la Ec. (102) es

$$\begin{aligned} & \text{Tr} [p \text{Im} G(E + \hbar\omega) p \text{Im} G(E)] \\ &= -\frac{m^2 a^2 t^2}{\hbar^2} \sum_{i,j,k,l} (\delta_{i,j-1} - \delta_{i,j+1}) g'_{j,k} (\delta_{k,l-1} - \delta_{k,l+1}) g_{l,i} \\ &= -\frac{m^2 a^2 t^2}{\hbar^2} [S(1) - S(2) - S(3) + S(4)], \end{aligned} \quad (104)$$

donde las sumas $S(i)$ son

$$\begin{aligned} S(1) &\equiv \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} g_{i+1,j} g'_{j+1,i}, & S(2) &\equiv \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=2}^N g_{i+1,j} g'_{j-1,i}, \\ S(3) &\equiv \sum_{i=2}^N \sum_{j=1}^{N-1} g_{i-1,j} g'_{j+1,i} & \text{y } S(4) &\equiv \sum_{i=2}^N \sum_{j=2}^N g_{i-1,j} g'_{j-1,i}. \end{aligned} \quad (105)$$

La función de Green para la red periódica infinita unidimensional se determina de la Ec. (33) y puede escribirse como [44]:

$$G_{l,m} = -\frac{i}{2t\sqrt{1-x^2}} \left(x - i\sqrt{1-x^2}\right)^{|\ell-m|} = \frac{i}{2|t|\sin\theta} e^{i|\ell-m|\theta}, \quad (106)$$

donde

$$\cos \theta \equiv x \equiv \frac{E - \varepsilon_0}{2t}, \text{ y } \sin \theta \equiv -\sqrt{1 - x^2}. \quad (107)$$

Entonces, de las Ecs. (103), (105) y (106), tenemos que

$$S(1) = \frac{1}{4t^2 \sin \theta \sin \theta'} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} \cos(|i - j + 1| \theta) \cos(|j - i + 1| \theta'), \quad (108)$$

donde

$$\cos \theta' \equiv x' \equiv \frac{E + \hbar\omega - \varepsilon_0}{2t}, \text{ y } \sin \theta' \equiv -\sqrt{1 - (x')^2}. \quad (109)$$

Para evaluar la suma de la Ec. (108), es instructivo definir una matriz \mathbf{M}_1 de tamaño $(N-1) \times (N-1)$ cuyos elementos son

$$(\mathbf{M}_1)_{i,j} = (|i - j + 1|, |j - i + 1|),$$

es decir,

$$\mathbf{M}_1 = \begin{pmatrix} (1, 1) & (0, 2) & (1, 3) & (2, 4) & (3, 5) & \cdots \\ (2, 0) & (1, 1) & (0, 2) & (1, 3) & (2, 4) & \cdots \\ (3, 1) & (2, 0) & (1, 1) & (0, 2) & (1, 3) & \cdots \\ (4, 2) & (3, 1) & (2, 0) & (1, 1) & (0, 2) & \cdots \\ (5, 3) & (4, 2) & (3, 1) & (2, 0) & (1, 1) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}.$$

La suma del lado derecho de la Ec. (108) tiene tres tipos de contribuciones, S_d , S_{ti} y S_{ts} , las cuales se asocian con la parte diagonal, el triángulo inferior y el triángulo superior de la matriz \mathbf{M}_1 , respectivamente, es decir,

$$S(1) = \frac{1}{4t^2 \sin \theta \sin \theta'} (S_d + S_{ti} + S_{ts}), \quad (110)$$

donde

$$S_d \equiv \sum_{i=1}^{N-1} \cos \theta \cos \theta' = (N-1) \cos \theta \cos \theta', \quad (111)$$

$$S_{ti} \equiv \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j < i} \cos(|i - j + 1| \theta) \cos(|j - i + 1| \theta')$$

$$S_{ts} \equiv \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j > i} \cos(|i - j + 1| \theta) \cos(|j - i + 1| \theta').$$

En el álgebra que se describirá a lo largo de este apéndice es conveniente introducir unas variables γ_1 y γ_2 , definidas del siguiente modo:

$$\gamma_1 \equiv \theta + \theta', \quad \gamma_2 \equiv \theta - \theta'; \quad (112)$$

VI Apéndice: Conductividad de una Cadena Periódica

En términos de éstas, la Ec. (111) se expresa como

$$S_d = \frac{1}{2} (N - 1) (\cos \gamma_1 + \cos \gamma_2). \quad (113)$$

Del triángulo inferior de M_1 , es decir, donde $i > j$, encontramos que

$$\begin{aligned} & S_{ti}(\theta, \theta') \\ &= (N - 2) \cos(2\theta) + (N - 3) \cos(3\theta) \cos \theta' + (N - 4) \cos(4\theta) \cos(2\theta') \\ & \quad + \dots + [N - (N - 1)] \cos[(N - 1)\theta] \cos[(N - 3)\theta'] \\ &= \sum_{n=1}^{N-2} (N - 1 - n) \cos[(n + 1)\theta] \cos[(n - 1)\theta'] = \frac{1}{2} (S_{ti}^{1,2} + S_{ti}^{2,1}), \end{aligned} \quad (114)$$

donde

$$S_{ti}^{a,b} \equiv \sum_{n=1}^{N-2} (N - 1 - n) \cos(n\gamma_a + \gamma_b) = \text{Re} \left\{ \sum_{n=1}^{N-2} (N - 1 - n) e^{i(n\gamma_a + \gamma_b)} \right\}. \quad (115)$$

Las sumas de esta ecuación son del tipo de una serie geométrica y pueden escribirse como

$$\sum_{n=1}^{N-2} (N - 1) e^{i(n\gamma_a + \gamma_b)} = (N - 1) e^{i\gamma_b} \left[\frac{1 - e^{i(N-1)\gamma_a}}{1 - e^{i\gamma_a}} - 1 \right], \quad (116)$$

y

$$\sum_{n=1}^{N-2} n e^{i(n\gamma_a + \gamma_b)} = e^{i\gamma_b} \frac{-(N - 1) e^{i(N-1)\gamma_a} + (N - 2) e^{iN\gamma_a} + e^{i\gamma_a}}{(1 - e^{i\gamma_a})^2}. \quad (117)$$

Sustituyendo las Ecs. (116) y (117) en (115) tenemos que

$$\begin{aligned} S_{ti}^{a,b} &= \{ \cos(N\gamma_a) \cos \gamma_b - \sin(N\gamma_a) \sin \gamma_b + (3N - 1) \cos \gamma_b \\ & \quad - N \cos \gamma_a \cos \gamma_b + N \sin \gamma_a \sin \gamma_b - 2 \cos[(N - 1)\gamma_a] \cos \gamma_b \\ & \quad + 2 \sin[(N - 1)\gamma_a] \sin \gamma_b + (-3N + 2) [\cos \gamma_a \cos \gamma_b + \sin \gamma_a \sin \gamma_b] \\ & \quad + \cos[(N - 2)\gamma_a] \cos \gamma_b - \sin[(N - 2)\gamma_a] \sin \gamma_b \\ & \quad + (N - 1) [\cos(2\gamma_a) \cos \gamma_b + \sin(2\gamma_a) \sin \gamma_b] \} / \left[4(1 - \cos \gamma_a)^2 \right] \\ & \quad - (N - 1) \cos \gamma_b. \end{aligned} \quad (118)$$

Sustituyendo la Ec. (118) en la Ec. (114), obtenemos

$$\begin{aligned} S_{ti} &= \frac{1}{2} \{ \cos(N\gamma_1) \cos \gamma_2 - \sin(N\gamma_1) \sin \gamma_2 + (3N - 1) \cos \gamma_2 - N \cos \gamma_1 \cos \gamma_2 \\ & \quad + N \sin \gamma_1 \sin \gamma_2 - 2 \cos[(N - 1)\gamma_1] \cos \gamma_2 + 2 \sin[(N - 1)\gamma_1] \sin \gamma_2 \\ & \quad + (-3N + 2) [\cos \gamma_1 \cos \gamma_2 + \sin \gamma_1 \sin \gamma_2] + \cos[(N - 2)\gamma_1] \cos \gamma_2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\sin [(N-2)\gamma_1] \sin \gamma_2 + (N-1) [\cos (2\gamma_1) \cos \gamma_2 + \sin (2\gamma_1) \sin \gamma_2] \} \\
& / \left[4(1 - \cos \gamma_1)^2 \right] - \frac{1}{2} (N-1) \cos \gamma_2 \\
& + \frac{1}{2} \{ \cos (N\gamma_2) \cos \gamma_1 - \sin (N\gamma_2) \sin \gamma_1 + (3N-1) \cos \gamma_1 - N \cos \gamma_2 \cos \gamma_1 \\
& + N \sin \gamma_2 \sin \gamma_1 - 2 \cos [(N-1)\gamma_2] \cos \gamma_1 + 2 \sin [(N-1)\gamma_2] \sin \gamma_1 \\
& + (-3N+2) [\cos \gamma_2 \cos \gamma_1 + \sin \gamma_2 \sin \gamma_1] + \cos [(N-2)\gamma_2] \cos \gamma_1 \\
& - \sin [(N-2)\gamma_2] \sin \gamma_1 + (N-1) [\cos (2\gamma_2) \cos \gamma_1 + \sin (2\gamma_2) \sin \gamma_1] \} \\
& / \left[4(1 - \cos \gamma_2)^2 \right] - \frac{1}{2} (N-1) \cos \gamma_1. \tag{119}
\end{aligned}$$

En forma similar, para el triángulo superior de M_1 , es decir, donde $i < j$, tenemos que

$$S_{ts} = \sum_{n=1}^{N-2} (N-1-n) \cos (n-1) \theta \cos (n+1) \theta'. \tag{120}$$

Comparando las Ecs. (120) y (114), vemos que la suma $S_{ts}(\theta, \theta') = S_{ti}(\theta', \theta)$, es decir, en la Ec. (119) debemos realizar los siguientes reemplazos:

$$\begin{aligned}
\gamma_1 &= \theta + \theta' \rightarrow \theta' + \theta = \gamma_1, \text{ y} \\
\gamma_2 &= \theta - \theta' \rightarrow \theta' - \theta = -\gamma_2. \tag{121}
\end{aligned}$$

Por lo tanto, la suma S_{ts} se determina a partir de la Ec. (119) cambiando en ésta el signo a todos los términos del tipo $\sin(cte. \times \gamma_2)$. Entonces, al realizar la suma entre S_{ti} y S_{ts} , en la Ec. (110) sólo contribuirán los términos cosenoidales de la Ec. (119):

$$\begin{aligned}
& S_{ti}(\theta, \theta') + S_{ts}(\theta, \theta') = S_{ti}(\theta, \theta') + S_{ti}(\theta', \theta) \\
& = \cos \gamma_2 \{ \cos N\gamma_1 + (3N-1) - N \cos \gamma_1 - 2 \cos (N-1) \gamma_1 \\
& \quad + (-3N+2) \cos \gamma_1 + \cos (N-2) \gamma_1 + (N-1) \cos 2\gamma_1 \} \\
& \quad / \left[4(1 - \cos \gamma_1)^2 \right] - (N-1) \cos \gamma_2 \\
& \quad \cos \gamma_1 \{ \cos N\gamma_2 + (3N-1) - N \cos \gamma_2 - 2 \cos (N-1) \gamma_2 \\
& \quad + (-3N+2) \cos \gamma_2 + \cos (N-2) \gamma_2 + (N-1) \cos 2\gamma_2 \} \\
& \quad / \left[4(1 - \cos \gamma_2)^2 \right] - (N-1) \cos \gamma_1 \\
& = \cos \gamma_2 \{ -2(N-1) \cos^2 \gamma_1 + (4N-6) \cos \gamma_1 + (-2N+4) \\
& \quad + \cos N\gamma_1 + \cos (N-2) \gamma_1 - 2 \cos (N-1) \gamma_1 \} / 4(1 - \cos \gamma_1)^2 \\
& \quad + \cos \gamma_1 \{ -2(N-1) \cos^2 \gamma_2 + (4N-6) \cos \gamma_2 + (-2N+4) \\
& \quad + \cos N\gamma_2 + \cos (N-2) \gamma_2 - 2 \cos (N-1) \gamma_2 \} / 4(1 - \cos \gamma_1)^2. \tag{122}
\end{aligned}$$

VI Apéndice: Conductividad de una Cadena Periódica

De las Ecs. (113) y (122) encontramos:

$$\begin{aligned}
 S^d + S_{ti} + S_{ts} &= \cos \gamma_2 \{ -2 \cos \gamma_1 + 2 + \cos N\gamma_1 + \cos (N-2)\gamma_1 \\
 &\quad - 2 \cos (N-1)\gamma_1 \} / 4(1 - \cos \gamma_1)^2 \\
 &\quad + \cos \gamma_1 \{ -2 \cos \gamma_2 + 2 + \cos N\gamma_2 + \cos (N-2)\gamma_2 \\
 &\quad - 2 \cos (N-1)\gamma_2 \} / 4(1 - \cos \gamma_2)^2.
 \end{aligned} \tag{123}$$

Simplificando la Ec. (123) y sustituyéndola en la Ec. (110) obtenemos

$$S(1) = \frac{1}{4t^2 \sin \theta \sin \theta'} \left\{ \frac{\cos \gamma_2 [1 - \cos (N-1)\gamma_1]}{2(1 - \cos \gamma_1)} + \frac{\cos \gamma_1 [1 - \cos (N-1)\gamma_2]}{2(1 - \cos \gamma_2)} \right\} \tag{124}$$

Por otro lado,

$$\begin{aligned}
 S(2) &\equiv \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=2}^N g_{i+1,j} g'_{j-1,i} = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} g_{i+1,j+1} g'_{j,i} \\
 &= \frac{1}{4t^2 \sin \theta \sin \theta'} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} \cos |i-j|\theta \cos |j-i|\theta'.
 \end{aligned}$$

Para evaluar la suma $S(2)$ definimos, en forma análoga al caso de $S(1)$, la matriz de elementos $(M_2)_{i,j} \equiv (|i-j|, |j-i|)$:

$$M_2 = \begin{pmatrix} (0,0) & (1,1) & (2,2) & (3,3) & (4,4) & \dots \\ (1,1) & (0,0) & (1,1) & (2,2) & (3,3) & \dots \\ (2,2) & (1,1) & (0,0) & (1,1) & (2,2) & \dots \\ (3,3) & (2,2) & (1,1) & (0,0) & (1,1) & \dots \\ (4,4) & (3,3) & (2,2) & (1,1) & (0,0) & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}.$$

Auxiliándonos con M_2 podemos escribir

$$\begin{aligned}
 S(2) &= \frac{1}{4t^2 \sin \theta \sin \theta'} \left[(N-1) + 2 \sum_{n=1}^{N-2} (N-1-n) \cos n\theta \cos n\theta' \right] \\
 &= \frac{1}{4t^2 \sin \theta \sin \theta'} \left[(N-1) + \sum_{n=1}^{N-2} (N-1-n) (\cos n\gamma_1 + \cos n\gamma_2) \right]. \tag{125}
 \end{aligned}$$

Las sumas $\sum_{n=1}^{N-2} (N-1-n) \cos n\gamma_a$, siendo $a = 1, 2$, se determinan a partir de las Ecs. (115) y (118) haciendo $\gamma_b = 0$, es decir, $\cos \gamma_b = 1$ y $\sin \gamma_b = 0$. Por lo tanto,

$$\begin{aligned}
S(2) &= \frac{1}{4t^2 \sin \theta \sin \theta'} \left\{ (N-1) + \sum_{a=1}^2 [-2(N-1) \cos^2 \gamma_a + (4N-6) \cos \gamma_a \right. \\
&\quad \left. + (4-2N) \cos N\gamma_a + \cos(N-2)\gamma_a - 2 \cos(N-1)\gamma_a] / 4(1 - \cos \gamma_a)^2 \right\} \\
&= \frac{1}{4t^2 \sin \theta \sin \theta'} \left[\frac{1 - \cos(N-1)\gamma_1}{2(1 - \cos \gamma_1)} + \frac{1 - \cos(N-1)\gamma_2}{2(1 - \cos \gamma_2)} \right]. \quad (126)
\end{aligned}$$

La suma $S(3)$ se evalúa inmediatamente ya que tiene una estructura análoga a la definición de $S(2)$, Ec. (105):

$$S(3) \equiv \sum_{i=2}^N \sum_{j=1}^{N-1} g_{i-1,j} g'_{j+1,i} = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=2}^N g'_{i+1,j} g_{j-1,i};$$

el resultado de esta suma debe ser el mismo que el de $S(2)$, excepto por que hay un intercambio entre θ y θ' , es decir, $S(3)$ se obtiene de la Ec. (126) utilizando los reemplazos de la Ec. (121), los cuales no afectan la suma de la Ec. (126), por lo que

$$S(3) = S(2). \quad (127)$$

Finalmente, la suma $S(4)$ es

$$S(4) \equiv \sum_{i=2}^N \sum_{j=2}^N g_{i-1,j} g'_{j-1,i} = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} g_{i,j+1} g'_{j,i+1} = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} g_{j+1,i} g'_{i+1,j} = S(1). \quad (128)$$

donde hemos usado la igualdad $g_{i,j} = g_{j,i}$, la cual se sigue de las Ecs. (103) y (106).

De las Ecs. (104), (127) y (128), llegamos a que

$$\text{Tr} [p \text{Im} G^+(E + \hbar\omega) p \text{Im} G^+(E)] = -\frac{m^2 a^2 t^2}{\hbar^2} \times 2[S(1) - S(2)].$$

Sustituyendo aquí las Ecs. (124) y (126), tenemos que

$$\begin{aligned}
&\text{Tr} [p \text{Im} G^+(E + \hbar\omega) p \text{Im} G^+(E)] \\
&= -\frac{m^2 a^2 t^2}{\hbar^2} \times \frac{1}{4t^2 \sin \theta \sin \theta'} \\
&\quad \left\{ \frac{\cos \gamma_2 [1 - \cos(N-1)\gamma_1] - 1 + \cos(N-1)\gamma_1}{1 - \cos \gamma_1} \right. \\
&\quad \left. + \frac{\cos \gamma_1 [1 - \cos(N-1)\gamma_2] - 1 + \cos(N-1)\gamma_2}{1 - \cos \gamma_2} \right\} \\
&= -\frac{m^2 a^2 t^2}{\hbar^2} \times \frac{1}{4t^2 \sin \theta \sin \theta'} \times \left\{ -(1 - \cos \gamma_2)^2 [1 - \cos(N-1)\gamma_1] \right. \\
&\quad \left. - (1 - \cos \gamma_1)^2 [1 - \cos(N-1)\gamma_2] \right\} / (1 - \cos \gamma_1)(1 - \cos \gamma_2), \quad (129)
\end{aligned}$$

VI Apéndice: Conductividad de una Cadena Periódica

Usando la Ec. (112), el denominador de la Ec. (129) se simplifica a

$$(1 - \cos \gamma_1)(1 - \cos \gamma_2) = \left(\frac{\hbar\omega}{2t}\right)^2.$$

Asimismo, los términos contenidos en el paréntesis $\{\dots\}$ de la Ec. (129) son

$$\begin{aligned} & - (1 - \cos \gamma_2)^2 [1 - \cos (N-1) \gamma_1] - (1 - \cos \gamma_1)^2 [1 - \cos (N-1) \gamma_2] \\ & = -2 (1 - \cos (N-1) \theta \cos (N-1) \theta') \left[(1 - \cos \theta \cos \theta')^2 + \sin^2 \theta \sin^2 \theta' \right] \\ & \quad + 4 \sin \theta \sin \theta' \sin (N-1) \theta \sin (N-1) \theta' (1 - \cos \theta \cos \theta'). \end{aligned}$$

Por lo tanto,

$$\begin{aligned} \text{Tr} [p \text{Im} G^+(E + \hbar\omega) p \text{Im} G^+(E)] &= \frac{m^2 a^2 t^2}{\hbar^2} \times \frac{1}{\left(\frac{\hbar\omega}{2t}\right)^2} \times \frac{1}{t^2} \\ & \times \left\{ \frac{1}{2} \nu(N-1) \left(\frac{\nu^2(1)}{s(1)} + s(1) \right) - s(N-1) \nu(1) \right\}. \end{aligned} \quad (130)$$

donde $s(n) = \sin n\theta \sin n\theta'$ y $\nu(n) = 1 - \cos n\theta \cos n\theta'$.

Sustituyendo la Ec. (130) en la Ec. (102), y tomando en cuenta que el volumen en una unidimensión es $\Omega = (N-1)a$, tenemos finalmente:

$$\begin{aligned} \sigma(\mu, \omega, T) &= \frac{8e^2 t^2 a}{\pi(N-1)\hbar^3 \omega^2} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{f(E) - f(E + \hbar\omega)}{\hbar\omega} \\ & \times \left\{ \frac{1}{2} \nu(N-1) \left(\frac{\nu^2(1)}{s(1)} + s(1) \right) - s(N-1) \nu(1) \right\}, \end{aligned} \quad (131)$$

VI.1 Mínimos de la Conductividad ac

En esta sección analizaremos las frecuencias en las que existen mínimos de la conductividad. Por simplicidad, supongamos que $\varepsilon_0 = 0$ y $\mu = 0$. En este caso,

$$|E|/2|t| < \hbar\omega/2|t| \ll 1, \quad (132)$$

ya que consideramos únicamente campos eléctricos aplicados de baja frecuencia que no causan radiación, es decir, $\hbar\omega \ll |t| \sim 1\text{eV}$.

Con estas hipótesis, podemos evaluar los términos que están entre los paréntesis $\{\dots\}$ de la Ec. (131):

$$\frac{1}{2} \nu(N-1) \left(\frac{\nu^2(1)}{s(1)} + s(1) \right) - s(N-1) \nu(1)$$

VI.2 Aproximación para Frecuencias Pequeñas

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{2} [1 - \cos (N-1) \theta \cos (N-1) \theta'] \left[\frac{(1 - \cos \theta \cos \theta')^2}{\sin \theta \sin \theta'} + \sin \theta \sin \theta' \right] \\
 &\quad - (1 - \cos \theta \cos \theta') \sin (N-1) \theta \sin (N-1) \theta' \\
 &\approx \frac{1}{2} \left\{ 1 - \cos \left[(N-1) \left(\frac{\pi}{2} - x \right) \right] \cos \left[(N-1) \left(\frac{\pi}{2} - x' \right) \right] \right\} \\
 &\quad \left[\frac{(1 - x \cdot x')^2}{\sqrt{1-x^2} \sqrt{1-(x')^2}} + \sqrt{1-x^2} \sqrt{1-(x')^2} \right] \tag{133}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &\quad - (1 - x \cdot x') \sin \left[(N-1) \left(\frac{\pi}{2} - x \right) \right] \sin \left[(N-1) \left(\frac{\pi}{2} - x' \right) \right] \tag{134} \\
 &\approx \left\{ 1 - \cos \left[(N-1) \left(\frac{\pi}{2} - x \right) \right] \cos \left[(N-1) \left(\frac{\pi}{2} - x' \right) \right] \right\} \\
 &\quad - \sin \left[(N-1) \left(\frac{\pi}{2} - x \right) \right] \sin \left[(N-1) \left(\frac{\pi}{2} - x' \right) \right] \\
 &= 1 - \cos (N-1) x \cos (N-1) x' - \sin (N-1) x \sin (N-1) x' \\
 &= 1 - \cos [(N-1)(x-x')] = 1 - \cos \left((N-1) \frac{\hbar\omega}{2|t|} \right), \tag{135}
 \end{aligned}$$

donde hemos empleado las Ecs. (107) y (109), y hemos usado la expansión de Taylor a primer orden

$$\theta = \cos^{-1} x \approx \frac{\pi}{2} - x.$$

Para hallar los ceros en la conductividad, pedimos que la Ec. (135) se anule:

$$1 - \cos (N-1) \frac{\hbar\omega}{2|t|} = 0.$$

Así, las posiciones de los mínimos de la conductividad, para bajas frecuencias, satisfacen la ecuación $(N-1)\hbar\omega = 4n\pi|t|$.

VI.2 Aproximación para Frecuencias Pequeñas

En esta sección analizaremos el comportamiento de la conductividad ac para muy bajas frecuencias. Sabemos que, a temperatura cero, $f(E) - f(E + \hbar\omega) = \theta(E - \mu) - \theta(E + \hbar\omega - \mu)$; por lo tanto,

$$\begin{aligned}
 &\sigma(\mu, \omega, T=0) \\
 &= \frac{8e^2 t^2 a}{\pi(N-1)\hbar^4 \omega^3} \int_{\mu-\hbar\omega}^{\mu} dE \left\{ \frac{1}{2} \nu(N-1) \left(\frac{\nu^2(1)}{s(1)} + s(1) \right) - s(N-1) \nu(1) \right\}
 \end{aligned}$$

Los términos entre los paréntesis $\{\dots\}$ en la Ec. (135) se expanden hasta cuarto

VI Apéndice: Conductividad de una Cadena Periódica

orden con el fin de apreciar la dependencia con la frecuencia:

$$1 - \cos \left((N-1) \frac{\hbar\omega}{|t|} \right) \approx \frac{(N-1)^2}{2} \left(\frac{\hbar\omega}{2t} \right)^2 \left[1 - \frac{(N-1)^2}{12} \left(\frac{\hbar\omega}{2t} \right)^2 \right].$$

Entonces, la conductividad ac a muy bajas frecuencias con $\mu = 0$ es:

$$\begin{aligned} \sigma(\omega) &= \frac{8e^2 t^2 a}{\pi (N-1) \hbar^4 \omega^3} \int_{-\hbar\omega}^0 dE \frac{(N-1)^2 (\hbar\omega)^2}{2 \cdot 4t^2} \left[1 - \frac{(N-1)^2}{12} \left(\frac{\hbar\omega}{2t} \right)^2 \right] \\ &= \frac{e^2 a (N-1)}{\pi \hbar} \left[1 - \frac{(N-1)^2 (\hbar\omega)^2}{12 \cdot 4t^2} \right] = \sigma_{dc} \left\{ 1 - \frac{[(N-1) \hbar\omega]^2}{48t^2} \right\}, \end{aligned}$$

donde

$$\sigma_{dc} = \frac{e^2 a (N-1)}{\pi \hbar}$$

es la conductividad de corriente directa.

Referencias

- [1] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics* (John Wiley & Sons, 1996).
- [2] N.W. Ashcroft y N.D. Mermin, *Solid State Physics* (Holt, Rinehart and Wiston, 1976).
- [3] N. Mott, *Conduction in Non-Crystalline Materials* (Clarendon Press, 1987).
- [4] J.M. Ziman, *Principles of the Theory of Solids* (Cambridge University Press, London, 1972)
- [5] P.W. Anderson, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958).
- [6] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello y T.V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 673 (1979).
- [7] S.V. Kravchenko, D. Simonian, M.P. Sarachik, W. Mason y J.E. Furneaux, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4938 (1996).
- [8] E. Abrahams, *Ann. Phys. (Leipzig)* **8**, 539 (1999).
- [9] D. Belitz y T.R. Kirkpatrick, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 261 (1994).
- [10] R. Oviedo-Roa, C. Wang y O. Navarro, *J. of Low Temp. Phys.* **105**, 651 (1996).
- [11] V. Bellani, E. Diez, R. Hey, L. Toni, L. Tarricone, G.B. Parravicini, F. Dominguez-Adame y R. Gomez-Alcalá, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 2159 (1999).
- [12] F.M. Izrailev y A.A. Krokhin, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 4062 (1999).
- [13] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, y J.W. Cahn. *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1951 (1984).
- [14] L.X. He, X.Z. Li, Z. Zhang y K.H. Kuo, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 1116 (1988).
- [15] R. Merlin, K. Bajima, R. Charke, F.-Y. Juang y P.K. Bhattacharya, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 1768 (1985).
- [16] M.G. Karkut, J.-M. Triscone, D. Ariosa y O. Fischer, *Phys. Rev. B.* **34**, 4390 (1986).
- [17] M. Kohmoto y J.R. Banavar, *Phys. Rev. B.* **34**, 563 (1986).
- [18] A. Sütő, in *Beyond Quasicrystals*, edited by F. Axel y D. Gratias (Les Editions de Physique, France, 1994), p. 483.
- [19] M. Kohmoto, L.P. Kadanoff y C. Tang, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1870 (1983).
- [20] F. Piéchon, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4372 (1996).
- [21] E. Maciá y F. Domínguez-Adame, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 2957 (1996).
- [22] R. Oviedo-Roa, L.A. Pérez y C. Wang, *Phys. Rev. B* **62**, 13805 (2000).
- [23] C. Janot, *Quasicrystals* (Oxford University Press, New York, 1992).
- [24] J.M. Ziman, *Models of Disorder* (Cambridge University Press, London, 1979).
- [25] M. Steiner, J. Villain y C.G. Windsor, *Adv. in Phys.* **25**, 87 (1976).
- [26] V.V. Walatka, M.M. Labes y J.H. Perlstein, *Phys. Rev. Lett.* **31**, 1139 (1973).
- [27] D. Kuse y H.R. Zeller *Phys. Rev. Lett.* **27**, 1060 (1971)
- [28] L.R. Melby, *Can. J. Chem.* **43**, 1448 (1965).
- [29] O. Leblanc, *Physics and Chemistry of the Organic Solid State* Vol. **III** (New York: Interscience, Wiley, 1967).
- [30] M.J. Buerger, *Elementary Crystallography: An Introduction to the Fundamental Geometrical Features of Crystals* (John Wiley, 1956). 65

Referencias

- [31] D. Levine y P.J. Steinhardt, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2477 (1984).
- [32] S. Roche, G. Trambly de Laissardière y D. Mayou, *J. Math. Phys.* **38**, 1794 (1997).
- [33] J.M. Ziman, *Elements of Advanced Quantum Theory* (Cambridge University Press, 1969).
- [34] P.L. Taylor, *A Quantum Approach to the Solid State* (Prentice-Hall, 1970).
- [35] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc.* **A276**, 238 (1963).
- [36] H.-B. Schüttler y A.J. Fedro, *Phys. Rev. B* **45**, 7588 (1992).
- [37] M. Onozawa, Y. Fukumoto, A. Oguchi y Y. Mizuno, *Phys. Rev. B* **62**, 9648 (2000).
- [38] A.P. Sutton, *Electronic Structure of Materials* (Oxford Science Publications, 1993).
- [39] T. Horiguchi, *J. Math. Phys.* **13**, 1411 (1972).
- [40] L.A. Pérez, O. Navarro y C. Wang, *Phys. Rev. B* **53**, 15389 (1996).
- [41] G.G. Naumis, A.R. Barrio y C. Wang, *Phys. Rev. B* **50**, 9834 (1994).
- [42] R.J. Elliott, J.A. Krumhansl y P.L. Leath, *Rev. Mod. Phys.* **46**, 465 (1974).
- [43] D.N. Zubarev, *Sov. Phys. Usp.* **3**, 320 (1960).
- [44] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics* (John Wiley, 1970).
- [45] E.N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics*, (Springer Series in Solid State Sciences, Vol. 7, 1983).
- [46] Y. Onodera y Y. Toyozawa, *J. Phys. Soc. Japan* **24**, 341 (1968).
- [47] F. Yonezawa y T. Matsubara, *Prog. Theor. Phys.* **35**, 357 (1966); F. Yonezawa y T. Matsubara, *Prog. Theor. Phys.* **35**, 759 (1966).
- [48] F. Yonezawa, *Prog. Theor. Phys.* **39**, 1076 (1968); F. Yonezawa, *Prog. Theor. Phys.* **40**, 734 (1968).
- [49] P.L. Leath, *Phys. Rev.* **171**, 725 (1968).
- [50] H. Shiba, *Prog. Theor. Phys.* **46**, 77 (1971).
- [51] D.W. Taylor, *Phys. Rev.* **156**, 1017 (1967).
- [52] P. Soven, *Phys. Rev.* **156**, 809 (1967).
- [53] R.J. Elliot y D.W. Taylor, *Proc. R. Soc. Lond. A* **296**, 161 (1967).
- [54] F. Yonezawa y K. Morigaki, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **53**, 1 (1973).
- [55] S. Kirkpatrick y T.P. Eggarter, *Phys. Rev. B* **6**, 3598 (1972).
- [56] J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics* (Addison-Wesley Pub. Co., 1994), p. 332.
- [57] D.K. Ferry, *Semiconductors* (Maxwell Macmillan International Editions, 1991), p.210.
- [58] R. Kubo, *Can. J. Phys.* **34**, 1274 (1956); *J. Phys. Soc. Jpn.* **12**, 570 (1957)
- [59] A.D. Greenwood, *Proc. Phys. Soc.* **71**, 585 (1958).
- [60] H. Furstenberg y H. Kesten, *Ann. Math. Stat.* **31**, 457 (1960).
- [61] A. Crisanti, G. Paladin y A. Vulpiani, *Products of Random Matrices in Statistical Physics* (Springer-Verlag, 1993), p. 19.
- [62] K. Ishii, *Suppl. Prog. Theor. Phys.* **53**, 77 (1973).

- [63] G.G. Naumis, *Phys. Rev. B* **59**, 11315 (1999).
- [64] G.J. Jin y Z.D. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 5298 (1997).
- [65] Y. Imry, *Introduction to Mesoscopic Physics* (Oxford University Press, 1997)
- [66] B. Kramer y A. MacKinnon, *Rep. Prog. Phys.* **56**, 1469 (1993).
- [67] J.H. Davies, *Phil. Mag.* **B41**, 373 (1980).
- [68] N.F. Mott y E.A. Davis, *Electronic Processes in Non-Crystalline Materials* (Oxford University Press, 1979).
- [69] E. Lieb y F.Y. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **19**, 1315 (1967).
- [70] F.H.L. Essler, V.E. Korepin y K. Schoutens, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3848 (1991).
- [71] G. Theodorou, *Phys. Rev. B* **16**, 2273 (1977).
- [72] R. Micnas, J. Ranninger, y S. Robaszkiewicz, *Rev. Mod. Phys.* **62**, 113 (1990).
- [73] W. Metzner y D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 324 (1989).
- [74] L. Chen y C. Mei, *Phys. Rev. B* **39**, 9006 (1989).
- [75] M.W. Long y R. Fehrenbacher, *J. Phys.: Condens. Matter* **2**, 10343 (1990).
- [76] O. Navarro y C. Wang, *Solid State Comm.* **83**, 473 (1992).
- [77] F. Marsiglio y J.E. Hirsch, *Physica C* **171**, 554 (1990).
- [78] L.A. Pérez y C. Wang, *Solid State Comm.* **108**, 215 (1998).
- [79] D. C. Mattis, *Rev. Mod. Phys.* **58**, 361 (1986).
- [80] H.Q. Lin y J.E. Hirsch, *Phys. Rev. B.* **52**, 16155 (1995).
- [81] D.L. Shepelyansky, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 2607 (1994).
- [82] K. Frahm, A. Müller-Groeling, J.-L. Pichard y D. Weinmann, *Europhys. Lett.* **31**, 169 (1995).
- [83] R.A. Römer y M. Sreiber, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 515 (1997).
- [84] K. Frahm, Axel Müller-Groeling, Jean-Louis Pichard y Dietmar Weinmann, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4889 (1997).
- [85] R.A. Römer y M. Sreiber, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4890 (1997).
- [86] R.A. Römer y M. Sreiber, *Phys. Stat. Sol. (b)* **205**, 275 (1998).
- [87] O. Halfpap, A. MacKinnon y B. Kramer, *Sol. Stat. Comm.* **107**, 379 (1998).
- [88] O. Halfpap *et al.*, en *Proceedings of the 24th ICPS*, World Scientific, Singapore (1998).
- [89] F. Borgonovi y D.L. Shepelyansky, *Nonlinearity* **8**, 877 (1995).
- [90] F. Borgonovi y D.L. Shepelyansky, *Physica D* **109**, 24 (1997).
- [91] O. Halfpap, T. Kawarabayashi y B. Kramer, *Ann. Phys. (Leipzig)* **7**, 483 (1998).
- [92] D. Weinmann, A. Müller-Groeling, J.-L. Pichard y K. Frahm, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1598 (1995).
- [93] D. Weinmann y J.-L. Pichard, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 1556 (1996).
- [94] E. Akkermans y J.-L. Pichard, *Eur. Phys. J. B* **1**, 223 (1997).
- [95] O. Halfpapa *et al.*, *Ann. Phys. (Leipzig)* **7**, 503 (1998).

Referencias

- [96] X. Waintal, D. Weinmann y J.-L. Pichard, *Eur. Phys. J. B* **7**, 451 (1999).
- [97] X. Waintal y J.-L. Pichard, *Eur. Phys. J. B* **6**, 117 (1998).
- [98] F.v. Oppen, T. Wettig y J. Müller, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 491 (1996).
- [99] P.H. Song y D. Kim, *Phys. Rev. B* **56**, 12217 (1997).
- [100] P.H. Song y F.v. Oppen, cond-mat/9806303 (1998).
- [101] K. Frahm, cond-mat/9809188 (1998)
- [102] P. Jacquod y D.L. Shepelyansky, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3501 (1995).
- [103] P. Jacquod, D.L. Shepelyansky y O.P. Sushkov, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 923 (1997).
- [104] Y. Imry, *Europhys. Lett.* **30**, 405 (1995).
- [105] K. Frahm y A. Müller-Groeling, *Europhys. Lett.* **32**, 385 (1995).
- [106] K. Frahm, A. Müller-Groeling y J.-L. Pichard, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1509 (1996).
- [107] K. Frahm, A. Müller-Groeling y J.-L. Pichard, *Z. Phys. B* **102**, 261 (1997).
- [108] I.V. Ponomarev y P.G. Silvestrov, *Phys. Rev. B.* **56**, 3742 (1997).
- [109] F. Yonezawa y K. Morigaki, *Suppl. Prog. Theor. Phys.* **53**, 1 (1973).
- [110] P.N. Sen y F. Yndurain, *Phys. Rev. B* **13**, 4387 (1976).
- [111] A.S. Alexandrov, S.V. Traven y P.E. Kornilovich, *J. Phys.: Condens. Matter.* **4**, L89 (1992).
- [112] C.P. Poole Jr., H.A. Farach y R.J. Creswick, *Superconductivity*, Academic Press (1995) pág. 66.
- [113] C. Wang y R.A. Barrio, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 191 (1988).
- [114] M. Kohmoto, B. Sutherland, y C. Tang, *Phys. Rev. B* **35**, 1020 (1987).
- [115] F. Piéchon, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4372 (1996).
- [116] B. Sutherland y M. Kohmoto, *Phys. Rev. B* **36**, 5877 (1987).
- [117] C.L. Roy y A. Khan, *Phys. Rev. B* **49**, 14979 (1984).
- [118] A. Aldea y M. Dulea, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1672 (1988).
- [119] M.E.J. Newman y R.B. Stinchcombe, *Phys. Rev. B* **43**, 1183 (1991); M. Dulea y A. Aldea, *Phys. Rev. B* **46**, 8642 (1992).
- [120] J.W. Ding, X.H. Yan y X.C. Fang, *Chin. Phys. Lett.* **16**, 529 (1999).
- [121] A. Miller y E. Abrahams, *Phys. Rev.* **120**, 745 (1960).
- [122] D. Mayou, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 1290 (2000); S. Roche y D. Mayou, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 2518 (1997).
- [123] M.J. Stephen y E. Akkermans, *Phys. Rev. B* **33**, 3837 (1986).
- [124] S. Roche y T. Fujiwara, *Phys. Rev. B* **58**, 11338 (1998).
- [125] X. Huang y C. Gong, *Phys. Rev. B* **58**, 739 (1998).
- [126] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge University Press, New York, 1997), Chap. 2.
- [127] R. Landauer, *Phil. Mag.* **21**, 863 (1970); *Phys. Scripta* T**42**, 110 (1992).

- [128] R. Albers y J. E. Gubernatis, *Phys. Rev. B* **17**, 4487 (1978).
- [129] J.B. Sokoloff, *J. Phys. C* **17**, 1703 (1984).
- [130] C. Wang, R. Oviedo-Roa, L.A. Pérez, y V. Sánchez, en *Proceedings of the Aperiodic 2000 Conference*.
- [131] A. Lahiri, *Phys. Rev. B* **53**, 3702 (1996).
- [132] Zheng Zhao Bo, *Phys. Rev. B* **42**, 8923 (1990).
- [133] L.A. Pérez y C. Wang, *J. of Superconductivity* **13**, 925 (2000).