

~~T. PROV. 21/40~~  
T 9/120

UNIVERSIDAD DE GRANADA  
FACULTAD DE CIENCIAS

BIBLIOTECA UNIVERSITARIA  
GRANADA  
N.º Documento 615062223  
N.º Copta 216309157



UNIVERSIDAD DE GRANADA  
Facultad de Ciencias  
Fecha 16-7-97  
ENTRADA NUM. 2146

Departamento de Electrónica y Tecnología de  
Computadores

ANÁLISIS DE HETEROESTRUCTURAS  
PERIÓDICAS Y CUASIPERIÓDICAS CON EL  
MÉTODO DEL DETERMINANTE  
CARACTERÍSTICO. EFECTOS DEL CAMPO  
ELÉCTRICO

TESIS DOCTORAL

Pedro Juan Carpena Sánchez

1997

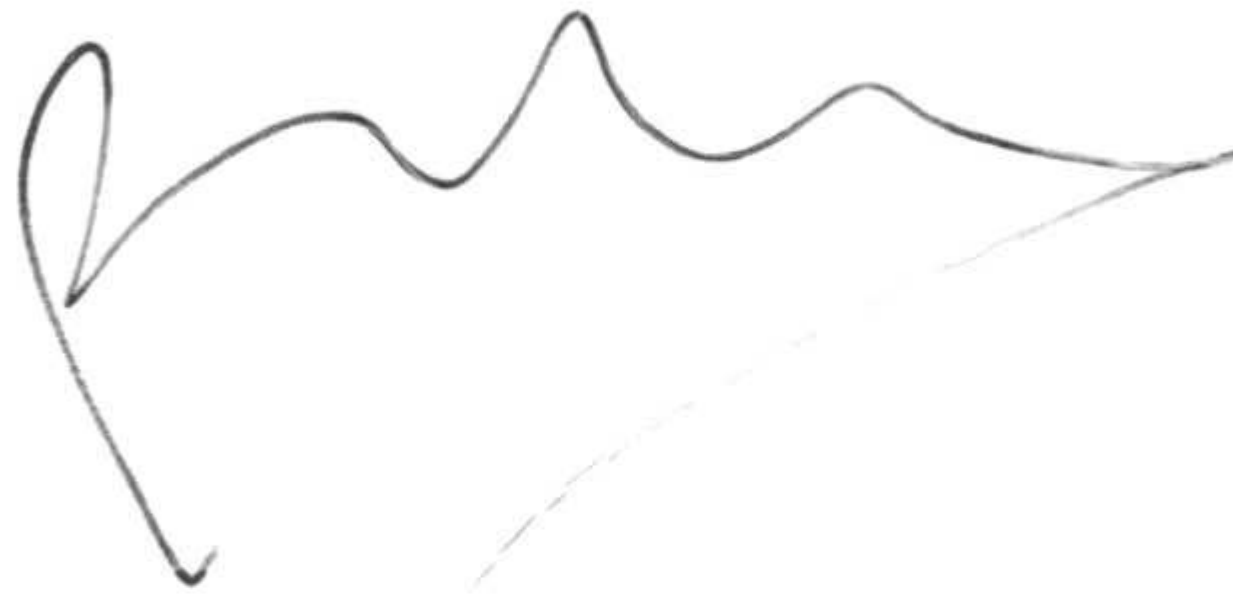
UNIVERSIDAD DE GRANADA  
3 JUL 1997  
COMISION DE GRADO

L. Puentes

V. Gasparian

Miguel C. M.

M. Ochoaño



PEDRO J. CARPENA

# Agradecimientos

Quisiera expresar mi agradecimiento:

Al profesor Miguel Ortuño. Él me abrió las puertas del fascinante mundo de la investigación científica, y ha tenido la paciencia suficiente como para realizar un constante seguimiento de mi trabajo. Sin su apoyo y orientación, esta memoria nunca se hubiera escrito.

Al profesor Vladimir Gasparian. A pesar de mi torpeza, consiguió enseñarme el método del determinante característico, que es la base de esta memoria. Su intuición despejó muchas incógnitas.

A los miembros del Departamento de Electrónica y Tecnología de Computadores de la Universidad de Granada, y en especial, al profesor Juan Antonio López Villanueva. Sus preguntas motivaron una parte de esta memoria, y además su ayuda inestimable ha hecho posible la presentación de este trabajo en la Universidad de Granada.

A los miembros del Departamento de Física de la Universidad de Murcia por su calurosa acogida, y en especial, a Jesús Ruiz, Emilio Cuevas y Rafael García Molina.

A mis compañeros del Departamento de Física Aplicada II de la Universidad de Málaga, y en especial a Pedro Bernaola por las enriquecedoras discusiones científicas que hemos mantenido, y al profesor Cristóbal Carnero, por su constante apoyo durante la realización de este trabajo.

# Índice

<b>Introducción</b>	<b>5</b>
<b>1 Generalidades</b>	<b>8</b>
1.1 Introducción . . . . .	8
1.2 Sistemas periódicos . . . . .	10
1.2.1 El modelo de fuerte ligadura . . . . .	12
1.2.2 El modelo de funciones $\delta$ . . . . .	17
1.3 Sistemas desordenados . . . . .	20
1.3.1 Localización . . . . .	22
1.3.2 Medida de la localización. . . . .	25
1.3.3 Matrices aleatorias y estadística de niveles. . . . .	27
1.4 Sistemas cuasiperiódicos. . . . .	30
1.4.1 La secuencia de Fibonacci. . . . .	31
1.4.2 La secuencia de Thue-Morse . . . . .	34
1.5 Heteroestructuras y superredes . . . . .	36
1.6 Efectos del campo eléctrico en un sistema periódico . . . . .	40
1.6.1 El campo eléctrico en superredes . . . . .	44
<b>2 El determinante característico</b>	<b>47</b>
2.1 Introducción . . . . .	47
2.2 El determinante para funciones $\delta$ . . . . .	48
2.2.1 Efecto de la primera función $\delta$ . . . . .	49

---

2.2.2	Efecto de la segunda función $\delta$ . . . . .	50
2.2.3	Generalización a $N$ barreras $\delta$ . . . . .	51
2.2.4	Relación de recurrencia . . . . .	51
2.3	Sentido físico del determinante . . . . .	54
2.3.1	Sistema con una barrera $\delta$ . . . . .	55
2.3.2	Sistema con dos barreras $\delta$ . . . . .	56
2.3.3	Generalización: Sistema con $N$ barreras $\delta$ . . . . .	58
2.4	El determinante para el modelo de fuerte ligadura . . . . .	58
2.5	El determinante para sistemas multicapa . . . . .	60
2.5.1	Ejemplo: una única intercara . . . . .	61
2.5.2	Efecto de dos intercaras, generalización y relación de recurrencia . . . . .	63
2.5.3	Sistemas multicapa de potencial constante . . . . .	66
2.6	Comentario . . . . .	67
<b>3</b>	<b>El espectro energético</b> . . . . .	<b>68</b>
3.1	Introducción . . . . .	68
3.2	Relación del espectro con el determinante característico . . . . .	71
3.3	El espectro en potenciales tipo $\delta$ . . . . .	73
3.3.1	Sistema con un solo pozo $\delta$ . . . . .	74
3.3.2	Sistema con dos pozos $\delta$ . . . . .	75
3.3.3	Sistema con $N$ pozos $\delta$ . . . . .	80
3.3.4	Densidad de estados . . . . .	87
3.4	Espectro en el modelo de fuerte ligadura . . . . .	88
3.4.1	Sistemas periódicos . . . . .	89
3.4.2	Sistemas cuasiperiódicos . . . . .	92
3.5	La dimensión fractal . . . . .	98
3.6	Estadística de niveles . . . . .	103
3.6.1	Sistemas desordenados . . . . .	103

---

3.6.2	Sistemas cuasiperiódicos . . . . .	105
3.7	El efecto del campo eléctrico sobre el espectro discreto . . . . .	108
3.7.1	Solución exacta. Modelo de funciones $\delta$ . . . . .	109
3.7.2	Sistemas con dos tipos de pozos . . . . .	123
3.7.3	La solución aproximada. El modelo multicapa . . . . .	128
3.7.4	Densidades integradas de estados (DIE). . . . .	130
3.7.5	La dimensión fractal y el campo eléctrico . . . . .	134
3.7.6	Estadística de niveles . . . . .	137
<b>4</b>	<b>La transmisión electrónica y la densidad de estados</b>	<b>140</b>
4.1	Introducción . . . . .	140
4.2	Comportamiento de $T$ . . . . .	141
4.2.1	$T$ en sistemas periódicos . . . . .	141
4.3	$T$ en sistemas cuasiperiódicos . . . . .	149
4.3.1	Dependencia de $T$ con la energía . . . . .	149
4.3.2	Dependencia de $T$ con la longitud . . . . .	152
4.4	Densidad de estados . . . . .	157
4.4.1	Relación entre $g(E)$ y el determinante característico. . . . .	158
4.4.2	Sistemas periódicos . . . . .	159
4.4.3	Sistemas cuasiperiódicos . . . . .	161
4.4.4	Relación de $g(E)$ con el coeficiente de transmisión. . . . .	164
4.5	Efectos del campo eléctrico . . . . .	165
<b>5</b>	<b>El problema de la localización</b>	<b>167</b>
5.1	Introducción . . . . .	167
5.2	Procedimiento de cálculo . . . . .	170
5.3	Localización en sistemas cuasiperiódicos . . . . .	173
5.3.1	Fibonacci . . . . .	174
5.3.2	Thue-Morse . . . . .	179
5.4	Efectos del campo eléctrico en la localización . . . . .	180

---

5.4.1	Localización en sistemas periódicos . . . . .	182
5.4.2	Localización en sistemas cuasiperiódicos . . . . .	186
5.4.3	Generalización . . . . .	194
5.5	Comparación de las secuencias de Fibonacci y Thue-Morse . . . . .	195
<b>6</b>	<b>La masa efectiva en la función envolvente.</b>	<b>198</b>
6.1	Introducción . . . . .	198
6.2	El método de la función envolvente . . . . .	199
6.2.1	La aproximación de masa efectiva . . . . .	203
6.3	Superredes y la función envolvente . . . . .	204
6.3.1	El problema de la transmisión. La doble barrera . . . . .	206
6.4	Cristal real. Procedimiento de cálculo . . . . .	209
6.4.1	Método de ajuste . . . . .	212
6.4.2	La transmisión en modelos multicapa . . . . .	214
6.4.3	Condiciones de contorno . . . . .	215
6.5	Resultados . . . . .	216
6.5.1	Masa efectiva del material $A$ . . . . .	217
6.5.2	Masa efectiva del material $B$ . . . . .	220
6.5.3	Coherencia de los resultados . . . . .	223
6.6	Efectos del campo eléctrico . . . . .	225
6.6.1	Resultados . . . . .	226
	<b>Conclusiones</b>	<b>229</b>
	<b>Referencias</b>	<b>232</b>

# Introducción

El trabajo que se presenta en esta memoria pretende ser una muestra de las potencialidades del método del determinante característico. Dicho método, que hace uso del formalismo de las funciones de Green, es una herramienta muy poderosa para el estudio de magnitudes físicas de interés dentro del riquísimo campo de la materia condensada. En esta memoria, estudiaremos las propiedades de estas magnitudes, calculadas tanto en sistemas periódicos, como en sistemas cuasiperiódicos. Éstos últimos están recibiendo una atención creciente por parte de los investigadores desde hace aproximadamente 12 años, principalmente desde el descubrimiento de Shechtman *et al.* en 1984 de las propiedades cuasicristalinas del material  $\text{Al}_{0.86}\text{Mn}_{0.14}$ . Hasta ese momento, los sólidos estudiados se podían dividir, a grandes rasgos, en materiales periódicos, con los que nació la teoría del estado sólido, y en materiales desordenados, cuya comprensión se hallaba en una fase de profundo desarrollo. A partir de entonces, los sistemas cuasiperiódicos han sido estudiados desde diversos puntos de vista, tanto teórica como experimentalmente, y se han encontrado en ellos propiedades exóticas que no aparecen ni en los sólidos periódicos ni en los materiales desordenados, muchas de ellas relacionadas con la geometría fractal.

Debido a la dificultad que presenta el estudio de los cuasicristales, es usual utilizar modelos unidimensionales como punto de partida para la comprensión de sus propiedades. Entre ellos, el interés se ha centrado de forma unánime en las secuencias de Fibonacci y de Thue-Morse, que serán las que utilizaremos también en esta memoria como representantes de los sistemas cuasiperiódicos.



Estudiaremos aquí algunas de las magnitudes físicas que es posible obtener directa o indirectamente a partir del determinante característico. Entre las primeras, cabe citar el coeficiente de transmisión, el espectro discreto y la densidad de estados. Entre las segundas, abordaremos el problema de la localización electrónica. Todas estas magnitudes serán analizadas mediante técnicas de simulación numérica, para las que el determinante característico es especialmente adecuado, si bien en algunos casos será posible realizar cálculos analíticos. El estudio se realizará principalmente en sistemas periódicos y cuasiperiódicos. Una caracterización completa de éstos últimos con respecto a las magnitudes anteriores constituye uno de los objetivos primordiales de esta memoria.

Otro objetivo fundamental de esta memoria radica en el análisis de los efectos que la aplicación de un campo eléctrico uniforme produce en las magnitudes físicas citadas anteriormente tanto en sistemas periódicos como en cuasiperiódicos. Así, estudiaremos la formación de la escalera de Wannier-Stark, la localización de Stark, el estudio de los cuasiestados o la modificación que introduce el campo eléctrico en las características fractales del espectro.

Como una cuestión ligeramente independiente del resto de la memoria, pero como una aplicación adicional del método del determinante característico, también analizaremos el comportamiento de la masa efectiva cuando se utiliza el método de la función envolvente en el estudio de pozos o barreras cuánticas, cuyo acoplamiento produce las superredes.

La organización de los contenidos de esta memoria es la siguiente:

En el **capítulo 1** se describen algunas propiedades generales de los sólidos periódicos, así como también de los materiales desordenados y de los cuasiperiódicos. Además, se hace un breve resumen de los efectos que un campo eléctrico produce sobre un sólido periódico, y se realiza una pequeña introducción a las superredes, que constituyen el vehículo apropiado de experimentación para la observación de muchas de las propiedades estudiadas en este trabajo.

En el **capítulo 2** se explica el formalismo del método del determinante carac-

terístico. Se presenta su forma explícita para los diferentes modelos que se usan en esta memoria y se obtiene una relación de recurrencia que permite calcularlo fácilmente y lo hace muy útil para propósitos numéricos.

En el **capítulo 3** se analizan las propiedades del espectro discreto y de la densidad de estados para sistemas periódicos y cuasiperiódicos. En el caso periódico, se presentan cálculos analíticos que proporcionan condiciones que limitan el número de estados ligados presentes en el sistema. En el caso cuasiperiódico, se estudian las propiedades fractales del espectro, y la estadística de niveles del mismo. Además, se estudia el efecto que el campo eléctrico produce sobre el espectro en ambos tipos de sistemas.

En el **capítulo 4** se estudian las propiedades del coeficiente de transmisión en secuencias periódicas y cuasiperiódicas. Dicho estudio se realiza básicamente en función de la energía del electrón incidente y de la longitud del sistema. Además, también se analizan las propiedades de la densidad de estados.

En el **capítulo 5** se dedica en primer lugar al estudio de la localización electrónica en sistemas periódicos y cuasiperiódicos en ausencia de campo eléctrico. Posteriormente, se estudian las propiedades de la localización inducida por el campo (localización de Stark), desvelando las características especiales que presenta en los sistemas cuasiperiódicos.

Finalmente, en el **capítulo 6** analizamos las propiedades de la masa efectiva, utilizada en el conocido método de la función envolvente. Dicho método, que se usa habitualmente para el estudio de las superredes, necesita para el estudio de cierto tipo de problemas el valor de la masa efectiva de un material en el gap del mismo. Habitualmente se utilizan unas aproximaciones para este valor que parecen no ser correctas en vista de nuestros resultados.

# Capítulo 1

## Generalidades

### 1.1 Introducción

El objetivo de esta memoria es la aplicación del método del determinante característico, que será descrito en el capítulo 2, al estudio de algunas propiedades electrónicas de materiales periódicos y cuasiperiódicos unidimensionales. Entre ellas caben destacar la transmisión electrónica, el espectro energético, tanto continuo como discreto, y la localización de las funciones de onda electrónicas.

La mayoría de las propiedades de los sólidos cristalinos perfectos son sobradamente conocidas, pues constituyen la base de la física del estado sólido tradicional. En esta memoria, incluiremos el estudio de algunas de ellas, que, o bien no son tan conocidas, o bien nos serán de utilidad para diferenciar claramente entre los diferentes tipos de sistemas. Muchas veces, el estudio de dichas propiedades se realiza en el límite termodinámico de sistemas macroscópicos, porque ello simplifica el tratamiento matemático. Sin embargo, algunas de las propiedades se ven modificadas al considerar un tamaño finito, intermedio entre la escala atómica (o microscópica) y la macroscópica. A dichos sistemas, cuyo tamaño es del orden de unos cuantos periodos (entendiendo como tal alguna dimensión característica del sistema) se les conoce como sistemas mesoscópicos. En la mayoría de los casos, nuestro estudio se realizará en este tipo de sistemas.

Por otra parte, también abordaremos el estudio de las propiedades electrónicas

de sistemas cuasiperiódicos, que es uno de los objetivos primordiales de este trabajo. Estos sistemas, cuyo estudio se ha desarrollado enormemente en los últimos 12 años, constituyen un caso intermedio entre los sólidos cristalinos perfectos y los materiales desordenados. Para obtener una caracterización completa de estos materiales, es conveniente por tanto conocer primero el comportamiento de la magnitud correspondiente en los sólidos periódicos y en los desordenados. Ello permitirá, no sólo averiguar si cierta magnitud de un sistema cuasiperiódico se comporta de forma similar a como lo haría en un sistema periódico o en uno desordenado, sino también identificar los comportamientos propios de los sistemas cuasiperiódicos, y que no aparecen en los otros sistemas. Por eso, algunas de las principales propiedades de los materiales periódicos y desordenados también se describen en este capítulo.

Por último, en esta memoria también estudiaremos el efecto que el campo eléctrico produce sobre las magnitudes electrónicas de interés en los diferentes tipos de sistemas. En este capítulo, introduciremos las propiedades del espectro electrónico de un sólido periódico al que se le aplica un campo eléctrico uniforme. Desde el punto de vista teórico, los efectos que produce un campo eléctrico aplicado a un sólido periódico se conocen desde hace décadas. Sin embargo, dichos efectos han suscitado una gran controversia durante todo ese tiempo, principalmente debido a la dificultad que presenta la observación experimental de muchos de los fenómenos predichos al ser estudiados en redes cristalinas naturales. Esta dificultad se ha soslayado en tiempos recientes con la aparición de las superredes, que también serán introducidas en el presente capítulo, y que utilizaremos conceptualmente a lo largo de esta memoria, y especialmente al abordar el problema de la masa efectiva, al que está dedicado el capítulo 6 del presente trabajo.

En la sección 2 de este capítulo, describimos las propiedades fundamentales de los sólidos periódicos. En la sección número 3, comentamos las características más importantes de los materiales desordenados. Los materiales cuasiperiódicos se describen en la sección número 4. La sección 5 se dedica a introducir brevemente

los conceptos de heteroestructura y de superred. Finalmente, los efectos de un campo eléctrico aplicado en un sólido periódico se describen en la sección número 6.

## 1.2 Sistemas periódicos

Los sistemas periódicos constituyen la base y la fundamentación de la Física del Estado Sólido. Son casos ideales en los que se supone una red cristalina regular subyacente. Si despreciamos el movimiento de los iones y la interacción entre los electrones, aproximación que es frecuente y que se denomina de electrones independientes, vemos que un electrón se encuentran sometido a un potencial periódico. La ecuación de Schrödinger para un electrón toma la forma:

$$H\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right) = \epsilon\psi \quad (1.1)$$

donde  $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})$  para todo vector  $\mathbf{R}$  pertenecientes a una red cristalina regular (de Bravais). El Hamiltoniano, por lo tanto, posee simetría traslacional bajo los vectores de la red. Los hamiltonianos periódicos son de central importancia en el entendimiento de los sólidos cristalinos reales. Las características generales de dichos hamiltonianos son las siguientes:

- Poseen espectros continuos (en el límite macroscópico) formando una serie de bandas de energía. Estas presentan no sólo un límite inferior, como en el caso de la partícula libre, sino un límite superior también.
- Las autofunciones de estos hamiltonianos son funciones de Bloch, es decir, ondas planas moduladas por un factor periódico  $U_{nk}(\mathbf{r})$  (teorema de Bloch):

$$\Psi_{nk}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}U_{nk}(\mathbf{r}) \quad (1.2)$$

en donde:

$$U_{nk}(\mathbf{r}) = U_{nk}(\mathbf{r} + \mathbf{R}). \quad (1.3)$$

- El número cuántico  $\mathbf{k}$  determina cuanto cambia la fase si nos trasladamos un vector de la red  $\mathbf{l}$ :

$$\Psi_{nk}(\mathbf{r} + \mathbf{l}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}}\Psi_{nk}(\mathbf{r}). \quad (1.4)$$

- El vector  $\mathbf{k}$  se puede restringir a una región finita del  $k$ -espacio llamada primera zona de Brillouin. El otro número cuántico  $n$ , que se denomina índice de banda, toma valores enteros.
- Las funciones de onda, al ser funciones de Bloch, se extienden a todo el sistema. Su módulo presenta una periodicidad igual a la de la red.
- Es importante destacar que las autofunciones de Bloch, extendidas a todo el sistema, implican una propagación sin resistencia como en el caso de la partícula libre.

La periodicidad tiene profundos efectos en el espectro de energía que consiste en bandas continuas separadas por regiones prohibidas llamadas *gaps*. Las autoenergías  $E_n(\mathbf{k})$  son funciones continuas de  $\mathbf{k}$  dentro de cada banda  $n$ . Los límites de la banda corresponden a los máximos y mínimos absolutos de  $E$  frente a  $\mathbf{k}$  para un  $n$  dado. La relación que liga a  $E$  con  $\mathbf{k}$  se conoce habitualmente como relación de dispersión, y es la mejor forma de determinar la estructura de las bandas energéticas.

Las propiedades que acabamos de comentar son completamente generales, y se deducen únicamente mediante la inclusión de un potencial periódico en la ecuación de Schrödinger. A la hora de realizar estudios cuantitativos de un determinado sistema, existen varias formas de abordar el problema, que se traducen en el uso de diferentes modelos.

Los dos tipos de modelos más frecuentemente usados en la bibliografía, al menos desde un punto de vista fundamental, para el estudio de sistemas periódicos, y que también pueden generalizarse a sólidos desordenados o cuasiperiódicos, son el

modelo de fuerte ligadura (o *tight-binding* en inglés) y el modelo de Kronig-Penney. Ambos modelos se describen a continuación.

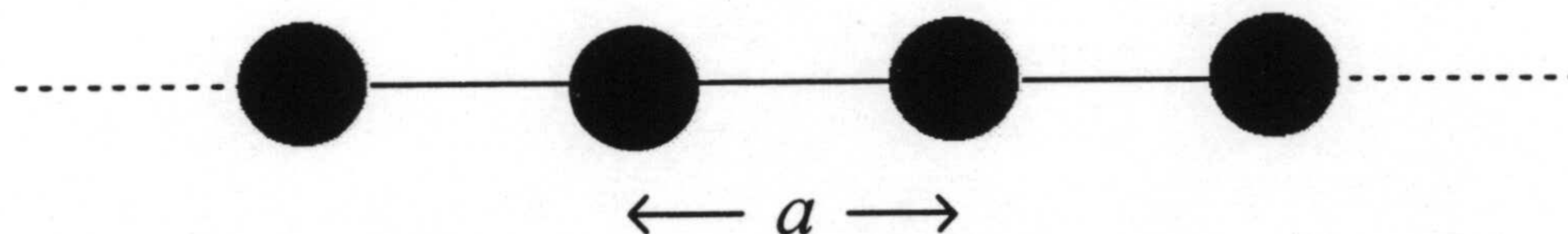
### 1.2.1 El modelo de fuerte ligadura

El modelo de fuerte ligadura es un caso límite en el que se considera que las funciones de onda en el cristal no difieren mucho de las funciones de onda electrónicas para el átomo aislado, por lo que se busca una solución que sea combinación lineal de éstas. Además se considera a la diferencia entre el potencial electrónico en el átomo aislado y el potencial en la red cristalina como un término perturbativo del hamiltoniano del átomo aislado:

$$W = V_{\text{cristal}} - V_{\text{atómico}}$$

$$H_{\text{total}} = H_{\text{atómico}} + W. \quad (1.5)$$

Para ilustrar los resultados de este modelo, vamos a considerar una cadena unidimensional de átomos idénticos, separados por una distancia interatómica constante  $a$ , como en la figura 1.1.



**Figura 1.1:** Representación esquemática de una cadena lineal monoatómica con distancia de red  $a$  constante.

Por simplicidad, vamos a suponer que existe un sólo orbital por átomo, lo que conduce a un espectro energético formado por una sola banda. Tras resolver adecuadamente la ecuación de Schrodinger, se llega a una ecuación de valores propios como la siguiente (Ashcroft & Mermin, 1976):

$$E = E_a + \frac{\sum_n V(n - n') e^{ik(n-n')a}}{\sum_n S(n - n') e^{ik(n-n')a}} \quad (1.6)$$

donde  $a$  es la constante de la red cristalina unidimensional y en donde las coordenadas de los átomos en la cadena vienen dadas por  $ma$ , con  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ .  $E_a$  es la energía correspondiente al electrón en el átomo aislado y  $V(n - n')$  viene definido por:

$$V(n - n') = \int_L \psi_n(x) W(x) \psi_{n'}^*(x) dx \quad (1.7)$$

siendo  $W(x)$  el término perturbativo del hamiltoniano, definido anteriormente, y  $\psi_m$ , con  $m$  entero, la función de onda atómica centrada en el átomo cuya coordenada es  $ma$ . La función  $S(n - n')$  es el solapamiento de las funciones atómicas correspondientes centradas en los átomos  $n$  y  $n'$ , y está definida por:

$$S(n - n') = \int_L \psi_n(x) \psi_{n'}^*(x) dx. \quad (1.8)$$

Por lo tanto, la energía del electrón en el cristal se compone de su energía en el correspondiente nivel del átomo aislado,  $E_a$ , mas un término suplementario que es función de  $k$ . En lugar de un nivel atómico tenemos una banda de energía cuyos límites vienen determinados por los máximos y mínimos en  $k$  de la parte fraccionaria de la ecuación (1.6). Por lo que respecta al denominador de la ecuación (1.6), se puede demostrar (Ashcroft & Mermin, 1976) que siempre es posible considerar que  $S_{nn'} = \delta_{nn'}$  e incluir los efectos de  $S_{nn'}$  en  $V_{nn'}$ . En cuanto al valor del numerador de la fracción en la ecuación de los niveles energéticos, consideramos en primera aproximación, los sumandos para los vecinos más próximos  $n - n' = \pm 1$ . Esta es una aproximación coherente con las hipótesis del modelo, porque, al suponer que las funciones de onda del electrón en el cristal no difieren mucho de las del átomo aislado, parece razonable concluir que sólo se producirá interacción con funciones de onda centradas en átomos cercanos, y en particular, con los vecinos más próximos. De esta forma, el numerador puede escribirse del



modo siguiente:

$$\sum_n V(n)e^{ikna} = V(0) + V(a)e^{ika} + V(-a)e^{-ika}. \quad (1.9)$$

El primer término de la suma es igual a:

$$V(0) = \int_L \psi_0(x)W(x)\psi_0^*(x) dx = \int_L |\psi_0(x)|^2 W(x) dx = C. \quad (1.10)$$

Este término es constante e independiente de  $k$ . El valor de las integrales  $V(\pm a)$  depende del grado de superposición de las funciones de onda de los átomos adyacentes, lo que determina la energía de interacción entre ellos. Sin embargo, dada la simetría de traslación del hamiltoniano, ha de ocurrir que estos términos sean iguales, puesto que la diferencia que existe entre ellos es únicamente una traslación por un vector de la red cristalina de valor  $2a$ :

$$V(+a) = V(-a) \equiv V. \quad (1.11)$$

Con las suposiciones realizadas, la energía del electrón en una red periódica unidimensional formada por átomos idénticos es:

$$E(k) = E_a + C + 2V \cos ka = \epsilon_0 + 2V \cos ka \quad (1.12)$$

es decir, obtenemos una banda de anchura  $4V$ , donde  $V$  es la energía de transferencia entre vecinos más próximos definida en (1.11). Encontramos una única banda porque suponemos la existencia de un único orbital por átomo y un único átomo en la base que se utiliza para construir el sistema periódico. Si supusiéramos  $n$  orbitales por átomo, obtendríamos una estructura con  $n$  bandas, donde ahora  $n$  sería un número cuántico adicional, que indicaría la banda energética, como se comentó más arriba.

Aunque aquí hemos calculado el espectro el caso de una cadena unidimensional, el método es aplicable a estructuras cristalinas tridimensionales. La generalización tridimensional más sencilla del resultado dado en (1.12) es la correspondiente a una red cúbica simple (SC). El método de fuerte ligadura, que nosotros hemos usado

aquí en el caso más sencillo, es uno de los más utilizados para la determinación de la estructura energética de bandas en materiales reales. En algunos casos, sobre todos para propósitos numéricos, es conveniente utilizar la versión del modelo de fuerte ligadura escrito mediante el formalismo de bra-kets introducido por Dirac.

Utilizando dicho formalismo de bra-kets, podemos reescribir el hamiltoniano en la forma:

$$H = \sum_n |n\rangle \epsilon_n \langle n| + \sum_{n,l} |n\rangle V_{nl} \langle l| \quad (1.13)$$

donde  $|j\rangle$  es la autofunción de onda del átomo  $j$  y  $\epsilon_n$  es la energía atómica, que puede ser elegida arbitrariamente, pero que en el caso que estamos considerando de una cadena unidimensional de átomos idénticos, resulta ser igual a  $\epsilon_0$  para todos los átomos del sistema. Si consideramos la aproximación de vecinos más próximos, los términos no diagonales  $V_{nl}$  vienen dados por:

$$V_{nl} = \begin{cases} V & \text{si } n, l \text{ vecinos más próximos} \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (1.14)$$

Observando la disposición del hamiltoniano dado por las dos ecuaciones anteriores, podemos expresarlo matricialmente de la siguiente manera:

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon_0 & V & 0 & \cdot & 0 \\ V & \epsilon_0 & V & \cdot & \cdot \\ 0 & V & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & V \\ 0 & \cdot & 0 & V & \epsilon_0 \end{pmatrix} \quad (1.15)$$

es decir, forma una matriz tridiagonal y simétrica. Esta versión del modelo de fuerte ligadura, aunque posee algunas limitaciones debido a que estamos considerando un hamiltoniano discreto, presenta varias ventajas. La primera, y más evidente, es que al venir dado el hamiltoniano en forma de matriz tridiagonal y simétrica, la obtención numérica de las autoenergías y las autofunciones de onda puede hacerse con gran facilidad, dada la abundancia y precisión de las rutinas de cálculo existentes para este tipo de matrices. Otra ventaja que presenta este

modelo es la facilidad para construir con él los diferentes tipos de sistemas. Si disponemos las energías diagonales con arreglo a una secuencia periódica, tendremos un sistema periódico. Si la secuencia es aleatoria, el sistema será desordenado. Y si la secuencia es cuasiperiódica, obtenemos un sistema cuasiperiódico, como veremos posteriormente.

### Estructura energética

Para calcular el número de estados en un banda, hay que tener en cuenta las condiciones de contorno impuestas a la ecuación de Schrödinger para el electrón. Estas condiciones no influyen sensiblemente en el interior de la cadena si suponemos que es suficientemente grande. Utilizamos las condiciones de contorno cíclicas de Born-Von Karman, que imponen que la función de onda valga lo mismo en ambos extremos de la cadena,  $\Psi(L) = \Psi(0)$ . La longitud de la cadena,  $L$ , viene dada por  $L = aN$ , donde  $N$  es el número total de átomos.

Teniendo en cuenta el teorema de Bloch ha de ocurrir que  $\Psi(L) = e^{ikL}\Psi(0)$ . Por lo tanto  $e^{ikL} = 1$ , lo que se cumple si  $kL = 2\pi n$  con  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . Los valores de  $k$  permitidos son:

$$k = \frac{2\pi}{L}n, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (1.16)$$

Concluimos que, para todo sistema finito,  $k$  no varía continuamente, sino de forma discreta y por lo tanto también serán discretos los valores de energía dentro de la banda. Con los valores de  $k$  permitidos observamos que  $\Psi_N = \Psi_0$ ,  $\Psi_{N+1} = \Psi_1$ , ... y por lo tanto sólo existen  $N$  funciones de onda diferentes con  $0 \leq n < N$ , o por conveniencia  $-\frac{N}{2} \leq n < \frac{N}{2}$ . De esta forma y sin tener en cuenta el espín electrónico, habrá  $N$  valores diferentes de energía por cada banda. Los límites de variación de  $k$ , que constituyen la primera zona de Brillouin son:

$$-\frac{\pi}{a} \leq k < \frac{\pi}{a}. \quad (1.17)$$

En un sistema macroscópico, donde  $N \sim 10^{22}$ , podemos considerar la banda de energía como continua.

Quizá la propiedad energética más interesante del modelo de fuerte ligadura para sistemas periódicos es la densidad de estados dentro de la banda resultante, que puede ser calculada a partir de la expresión de  $E(k)$  y viene dada por (Economou, 1983):

$$g(E) = \frac{\Theta(2V - |E - \epsilon_0|)}{\pi\sqrt{4V^2 - (E - \epsilon_0)^2}} \quad (1.18)$$

donde  $\Theta(x)$  es la función escalón definida por:

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \geq 0 \\ 0 & \text{si } x < 0 \end{cases} \quad (1.19)$$

Definimos el polinomio característico del modelo de fuerte ligadura como el determinante siguiente:

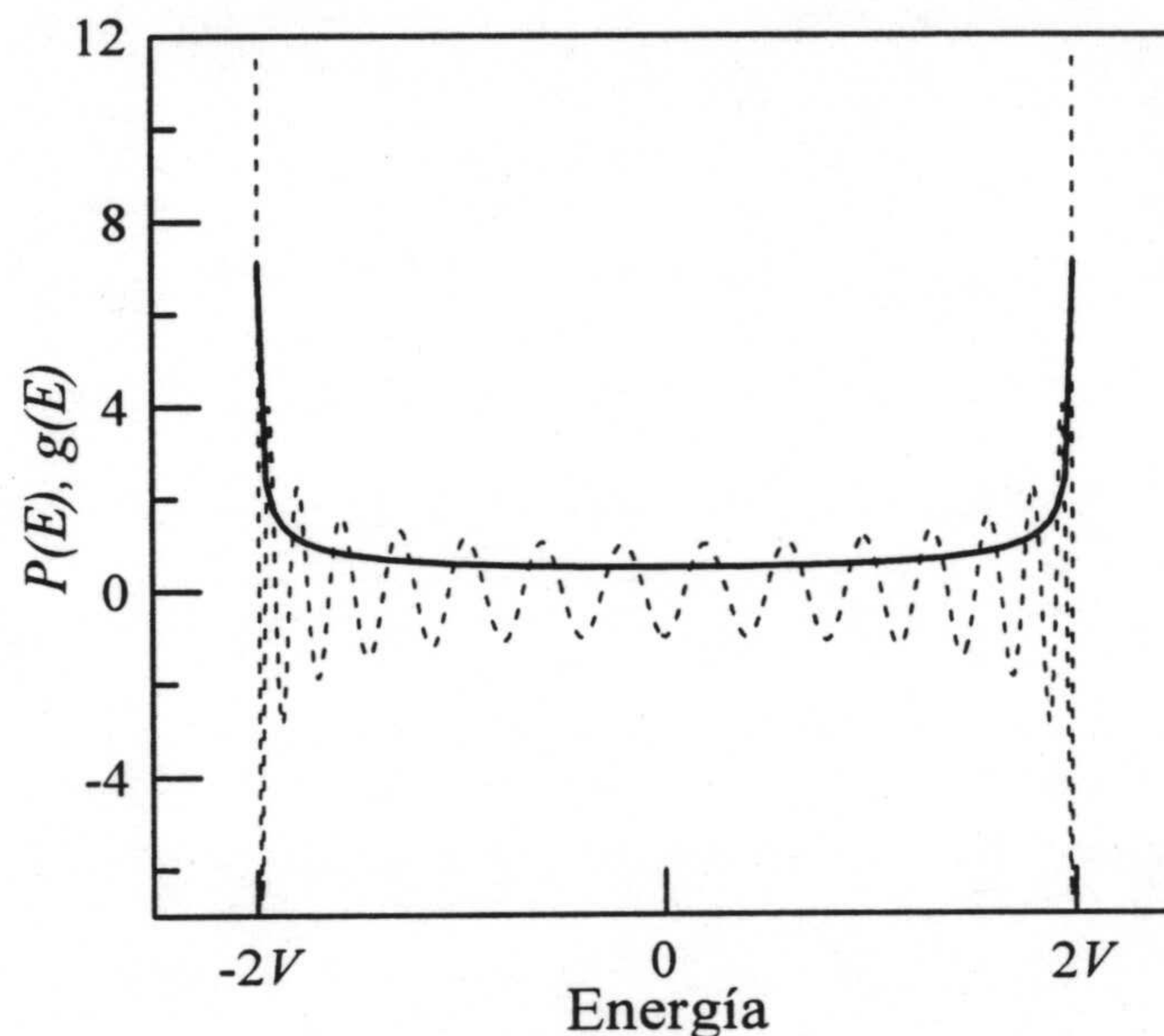
$$P(E) = |H - IE| = \begin{vmatrix} \epsilon_0 - E & V & 0 & \cdot & 0 \\ V & \epsilon_0 - E & V & \cdot & \cdot \\ 0 & V & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & V \\ 0 & \cdot & 0 & V & \epsilon_0 - E \end{vmatrix} \quad (1.20)$$

Los autovalores del espectro vienen dados por los ceros de  $P(E)$ . En la figura 1.2 representamos en función de la energía la densidad de estados analítica  $g(E)$ , dada por la ecuación (1.18) y correspondiente al sistema infinito, junto con el polinomio característico para un sistema finito formado por 20 estados. En ambos casos, hemos considerado  $V = 1$ . Los ceros del polinomio definido en (1.20) coinciden con los autovalores del hamiltoniano (1.15) y forman el espectro energético del sistema. Aunque estamos considerando un hamiltoniano discreto, y por lo tanto también será discreto el espectro obtenido, se puede observar que los autovalores de dicho espectro se distribuyen según la densidad de estados del sistema infinito.

### 1.2.2 El modelo de funciones $\delta$

El otro tipo de modelo que utilizaremos es el de Kronig-Penney, presentado por primera vez poco después de la aparición de la mecánica cuántica. En dicho

modelo, el potencial periódico (aunque se puede generar directamente a los casos desordenado y cuasiperiódico) se construye a través de una sucesión de pozos y



**Figura 1.2:** El polinomio característico  $P(E)$  (línea discontinua) y la densidad de estados  $g(E)$  (línea continua) frente a la energía. La anchura de la banda es  $4V$ , desde  $E = -2V$  hasta  $E = 2V$ .

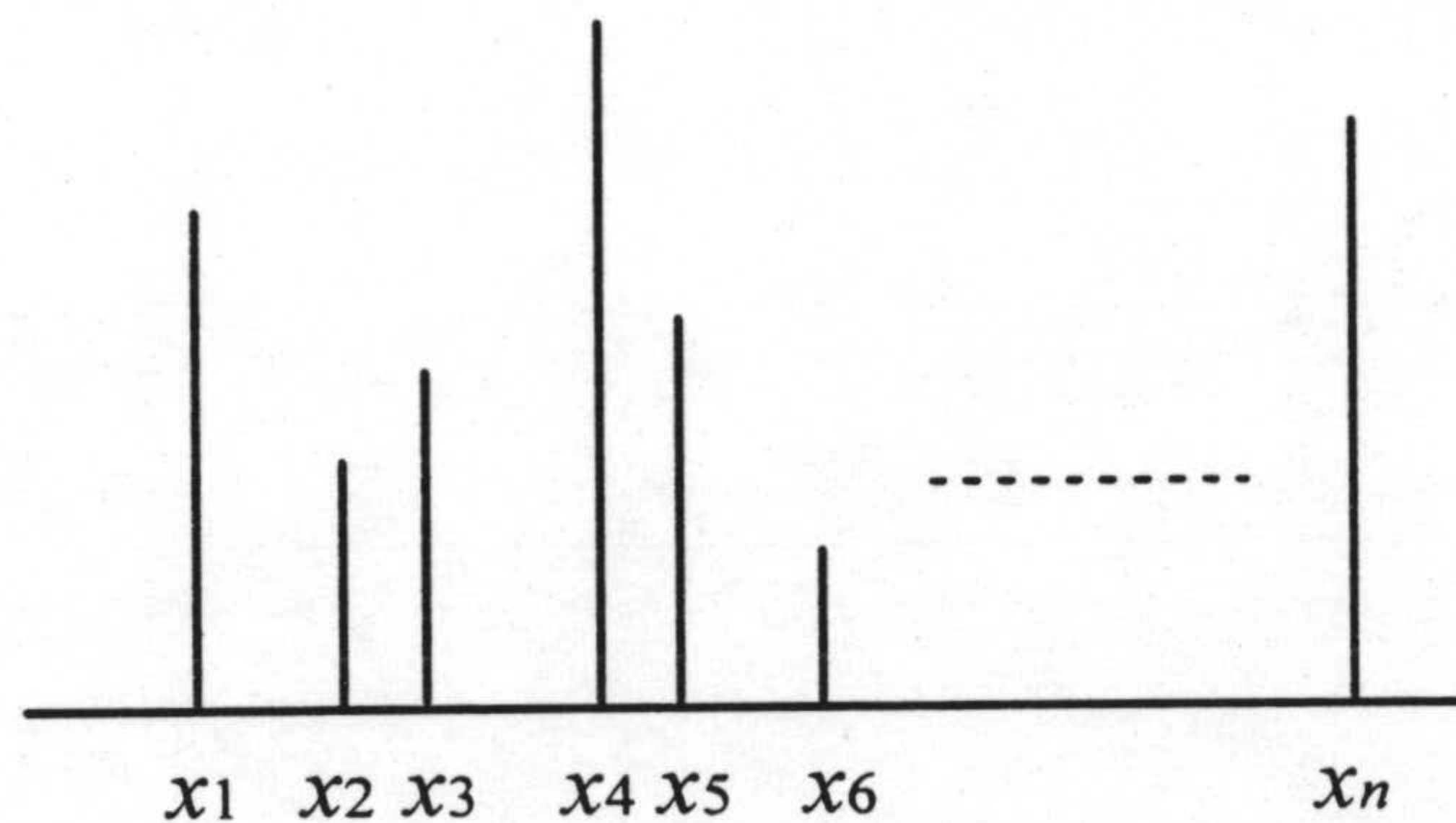
barreras cuánticos de forma rectangular dispuestos periódicamente. Los pozos corresponden a los átomos de la cadena, que poseen un potencial atractivo, y las barreras, a las regiones interatómicas. La ventaja de dicho modelo es que, a la vez que ilustra las propiedades generales de los sólidos periódicos, puede solucionarse analíticamente (en el caso periódico). El resultado del cálculo conduce a la relación de dispersión, que nos liga el momento con la energía, y proporciona la estructura de bandas característica de los sistemas periódicos. Sin embargo, aunque resoluble analíticamente, en el caso general en el que se usan pozos y barreras cuadradas, la relación de dispersión final es todavía bastante complicada.

Una forma de simplificar dicha relación de dispersión, sin perder las propiedades del modelo, es considerar, por ejemplo, que la anchura de las barreras tiende a cero,

y la altura de las mismas a infinito, pero manteniendo constante el producto de la anchura por la altura (área de la barrera). Dicho límite conduce a que las barreras se transforman en funciones tipo  $\delta$ , la famosa función generalizada o distribución introducida en la física por Dirac. Cada función  $\delta$  está caracterizada por su posición y por su amplitud, que equivale al producto constante de la anchura por la altura de la barrera. La expresión analítica de dicho potencial es :

$$V(x) = \sum_{i=1}^n V_i \delta(x - x_i) \quad (1.21)$$

donde los  $V_i$  son las amplitudes, en principio arbitrarias, de las funciones  $\delta$ . Si se quiere que la secuencia sea periódica, basta con considerar amplitudes  $V_i$  idénticas, y distancia inter-delta,  $a$ , constante, lo que se consigue haciendo  $x_i = ia$ . Este potencial (generalizado) se representa en la figura 1.3. Si en lugar de realizar el paso al límite con las barreras, se hace con la profundidad y la anchura de los pozos, se obtiene un modelo de Kronig-Penney de pozos  $\delta$ , que equivale a considerar amplitudes negativas en la ecuación (1.21).



**Figura 1.3:** Representación esquemática de un potencial formado por barreras  $\delta$ . En este caso, no es constante ni la amplitud de las barreras ni la distancia entre las mismas.

En capítulos posteriores obtendremos analíticamente la relación de dispersión en el modelo de funciones  $\delta$ , porque nos permitirá estudiar algunas de las propiedades del espectro.

De la misma forma que en el caso de fuerte ligadura, tendremos sistemas periódicos, desordenados o cuasiperiódicos. dependiendo de como construyamos las secuencias de los  $V_i$ . Mientras que el cálculo numérico del espectro para los modelos de fuerte ligadura se realiza fácilmente por diagonalización directa de la matriz del hamiltoniano, independientemente del tipo de sistema que se considere, en el modelo de Kronig-Penney de funciones  $\delta$  este cálculo es más complejo y para ello utilizaremos el método en el que se basa principalmente esta memoria, el método del determinante característico que veremos en el capítulo 2 y que nos proporciona una información muy completa del sistema.

### 1.3 Sistemas desordenados

La física de la materia condensada ha dirigido últimamente gran parte de su interés hacia un nuevo tipo de problemas, el de los materiales desordenados. En los últimos veinte años ha habido un desarrollo notable en el estudio de la física de los materiales desordenados, la cual se encuentra en un proceso de rápido crecimiento y de consolidación de conceptos. Actualmente, una parte significativa de la actividad de numerosos equipos teóricos y laboratorios realiza investigaciones fundamentales en la física de los sistemas desordenados. Esta investigación no es puramente académica, ya que las fases desordenadas de la materia condensada son más abundantes y de similar valor tecnológico potencial que los cristales de la física del estado sólido.

El teorema de Bloch, que gobierna la física de los sistemas cristalinos, no es apropiado para el estudio de los sistemas desordenados, de manera que han tenido que ir apareciendo nuevas ideas, a veces revolucionarias, para explicar los fenómenos no usuales que ocurren en dichos sistemas.

En 1958, Anderson propuso que en un sistema desordenado las funciones de onda electrónicas están espacialmente localizadas para grados de desorden suficientemente altos, como consecuencia de la pérdida de la simetría traslacional de

la red. Este resultado contrasta fuertemente con las funciones de onda de tipo Bloch, extendidas en todo el sólido cristalino. Hoy en día, sabemos con seguridad la validez de la idea de Anderson, que constituye el resultado más importante de la física de los sistemas desordenados. Un desorden grande, sea cual sea su origen y naturaleza, conlleva la localización de los estados electrónicos.

En realidad los sistemas ordenados son ideales y no existen en la naturaleza. Siempre hay distorsiones del orden perfecto debido a la presencia de impurezas, dislocaciones, huecos en la red y otros defectos que originan varios tipos de desorden (Madelung, 1978), tal como se representa en la figura 1.4. Así, v.g., las impurezas de un semiconductor dopado están distribuidas aleatoriamente y dan lugar al denominado desorden estructural. En los semiconductores amorfos, los átomos forman una red covalente en la que se modifica la topología de los enlaces, lo que da lugar al desorden topológico. En las aleaciones los átomos ocupan los lugares de una red de manera desordenada, ocasionando lo que se conoce como desorden composicional, etc...

Un modelo simple para los sistemas con desorden estructural, como metales amorfos, vidrios metálicos y semiconductores fuertemente dopados viene dado por el hamiltoniano de fuerte ligadura visto anteriormente, considerando un único electrón por átomo; dicho hamiltoniano se escribe como:

$$H = \sum_n |n\rangle \epsilon_n \langle n| + \sum_{n,l} |n\rangle V_{nl} \langle l| \quad (1.22)$$

donde  $\epsilon_n$  es la energía asociada al átomo  $n$  de la red y los elementos no diagonales  $V_{n,l}$  denotan los elementos de matriz entre los estados. La diferencia con respecto al caso periódico radica en que ahora,  $\epsilon_n$  no es igual para todos los átomos de la secuencia, sino que seguirá una distribución de probabilidad. También aquí consideraremos únicamente energías de transferencia entre vecinos más próximos. Podemos introducir el desorden en este modelo tomando las energías de sitio y/o transferencia al azar, asumiendo alguna distribución de probabilidad para ellas, lo que da lugar a dos tipos de desorden, diagonal y/o no diagonal, respectivamente.



En esta memoria nos restringiremos al caso de desorden diagonal y utilizaremos una distribución para las energías de sitio del tipo:

$$P(\epsilon_n) = \frac{1}{W} \Theta \left( \frac{W}{2} - |\epsilon_n| \right) \quad (1.23)$$

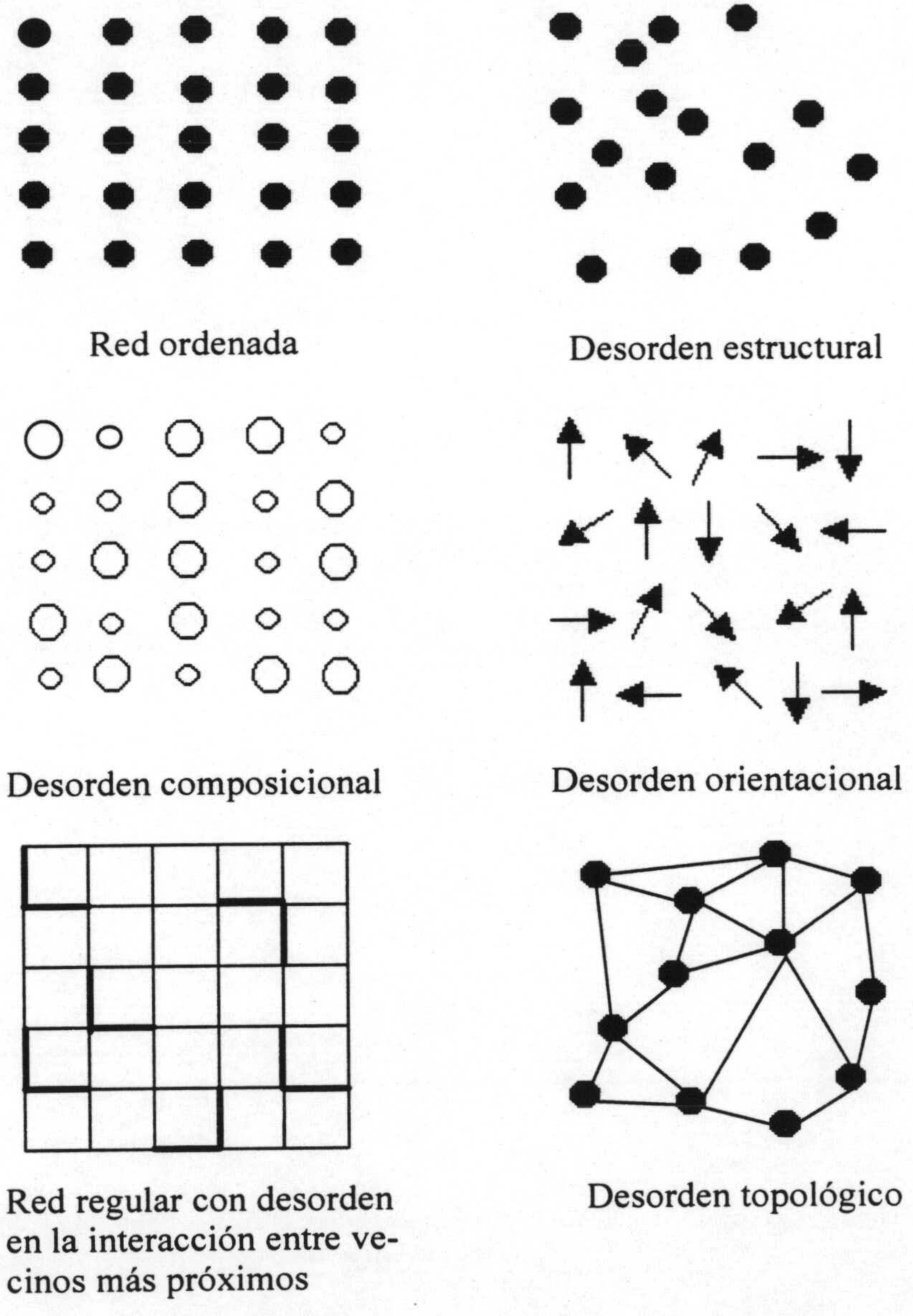
donde de nuevo  $\Theta$  es la función escalón. Esta distribución corresponde a una caja centrada en el 0 de anchura  $W$  en el que todas las energías son equiprobables. Al parámetro  $W$  se le llama desorden del sistema. Al modelo de fuerte ligadura anterior cuando describe un sistema desordenado se le llama modelo de Anderson (Anderson, 1969 y 1978). La matriz hamiltoniana en el modelo de Anderson con desorden diagonal es de la forma:

$$\begin{pmatrix} \epsilon_1 & V & 0 & \cdot & 0 \\ V & \epsilon_2 & V & \cdot & \cdot \\ 0 & V & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & V \\ 0 & \cdot & 0 & V & \epsilon_n \end{pmatrix}. \quad (1.24)$$

De la misma forma, estudiaremos sistemas desordenados con el modelo de funciones  $\delta$  en el que utilizaremos la distribución de probabilidad anterior, pero en este caso para las amplitudes de las barreras de potencial.

### 1.3.1 Localización

Quizá el resultado más interesante que se deriva del comportamiento de los sistemas desordenados es la aparición de estados localizados. Podemos definir intuitivamente un estado localizado como aquel cuya función de onda está confinada en una zona del sistema. La probabilidad de encontrar al electrón fuera de esta zona es nula. En una argumentación clásica, Mott (Mott, 1968) demostró que, en un sistema desordenado tridimensional, existen dos energías dentro de la banda, llamadas límites de movilidad, que separan los estados localizados, en los extremos de la banda, de los extendidos, que se encuentran en el centro de la misma. Los límites de movilidad dependen del desorden. Si éste aumenta, ambos límites se acercan al centro de la banda, hasta llegar a un cierto desorden crítico en el que



**Figura 1.4:** Representación esquemática de sistemas bidimensionales con diferentes tipos de desorden.

coinciden. En este punto todos los estados se localizan y el sistema se convierte en un aislante. Este fenómeno se conoce como transición de Anderson (Economou *et al.*, 1984), y es una de las múltiples transiciones metal-aislante. En el caso general, la transición se produce cuando el límite de movilidad atraviesa el nivel de Fermi.

El fenómeno de la localización depende fuertemente de la dimensionalidad del sistema. Para sistemas tridimensionales existe una transición metal-aislante para un cierto desorden crítico a partir del cual todos los estados están localizados. Sin embargo,  $d = 2$  es la dimensión crítica por debajo de la cual todos los estados están localizados, por pequeño que sea el desorden (Mott & Twose, 1960; Ziman, 1979).

Para entender el mecanismo físico que produce la localización de los estados cuánticos en potenciales aleatorios podemos empezar considerando una partícula clásica moviéndose en un potencial aleatorio  $V(x)$  que consideraremos acotado por  $E_0$ . Si la energía total  $E$  es menor que  $E_0$ , la partícula estará confinada en intervalos finitos, dentro de los pozos de potencial accidentales. Si  $E$  es mayor que  $E_0$ , la partícula podrá moverse sin restricciones a través de todo el eje  $x$ .

Para una partícula cuántica, es más complicado distinguir el carácter de los estados. Por un lado, las barreras de potencial no pueden confinar del todo a la partícula en un determinado pozo debido al efecto túnel. Por otro lado, las dispersiones repetidas debido a las fluctuaciones de potencial pueden generar eventualmente una superposición de interferencias destructivas de forma que una partícula clásicamente extendida se transforma en localizada. El estado será localizado o no dependiendo de si es superior la interferencia o el efecto túnel respectivamente (Kramer y MacKinnon, 1993).

En el caso de los sistemas unidimensionales en los que centraremos nuestro estudio, la localización se produce debido a la interferencia cuántica.

### 1.3.2 Medida de la localización.

Para cuantificar si un estado está localizado o no, y como medir esta localización, podemos definir dos parámetros, que son los usados preferentemente en la bibliografía, el comportamiento asintótico de las funciones de onda y la razón inversa de participación.

#### Comportamiento asintótico de las funciones de onda.

El comportamiento asintótico de un estado localizado es descrito usualmente por  $\lambda$ , la caída exponencial de su envolvente, conocida como la **longitud de localización**. En este caso se supone que las funciones de onda son aproximadamente de la forma:

$$\Psi(r) = f(r)e^{-\frac{r}{\lambda}} \quad (1.25)$$

donde  $f(r)$  es una función aleatoria. Por supuesto, el caso  $\lambda \rightarrow \infty$  corresponde a un estado extendido. La longitud de localización es una magnitud muy importante, y ha sido estudiada desde diferentes puntos de vista, principalmente relacionados con los fenómenos de transporte (Czycholl *et al.*, 1981; MacKinnon & Kramer, 1981; Pichard & Sarma, 1981). Incluso se definen magnitudes similares asociadas con ella, como la longitud de información (Casati *et al.*, 1992), que es una magnitud similar a  $\lambda$ , pero referida a la información en lugar de la función de onda, en el marco de la teoría de la información de Shannon. La longitud de localización, como cabe esperar, depende de la energía del estado correspondiente y del desorden introducido en el sistema. Bajo ciertas consideraciones, se han dado expresiones analíticas de esta magnitud. Por ejemplo, para un modelo de fuerte ligadura en el límite de desorden débil, es posible obtener:

$$\lambda(E) = \frac{24(4V^2 - E^2)}{W^2} \quad (1.26)$$

donde  $V$  es la energía de transferencia entre vecinos más próximos, y  $W$  es el desorden.

### La razón inversa de participación

Para decidir si un estado es o no localizado es con frecuencia suficiente considerar el segundo momento de la densidad de probabilidad (Wegner, 1980):

$$P^{-1} = \sum_r |\Psi(r)|^4, \quad \|\Psi\| = 1. \quad (1.27)$$

Este parámetro se denomina número o razón inversa de participación. Es una medida de la porción del espacio donde la amplitud de la función de onda difiere sustancialmente de cero. También puede considerarse como una forma de medir el diámetro medio del estado,  $D$ , a través de  $D = P^{1/d}$ , donde  $d$  es la dimensión del sistema. Es fácil comprender su significado si lo evaluamos en dos casos extremos:

- Supongamos un estado totalmente extendido en un sistema con  $L$  átomos. El módulo de la función de onda para cada átomo del sistema es  $1/\sqrt{L}$ , como se obtiene de la condición de normalización. La función inversa de participación resulta entonces igual a:

$$P^{-1} = \sum_{i=1}^L (1/\sqrt{L})^4 = L^{-1}. \quad (1.28)$$

Por lo tanto,  $P = L$  y el diámetro del estado será igual al del sistema completo.

- Si por el contrario suponemos el estado completamente localizado en un átomo particular  $j$ , ha de ocurrir que  $\Psi(j) = \pm 1$ ,  $\Psi(i) = 0$ ,  $i \neq j$ . En este caso será  $P^{-1} = \sum_{i=1}^L |\Psi(i)|^4 = 1$  y por lo tanto  $P = 1$ .

Existen estudios sobre las propiedades estadísticas de esta magnitud y sus fluctuaciones con el desorden (Fyodorov & Mirlin, 1993).

La razón inversa de participación será utilizada preferentemente en este trabajo para el estudio de la localización, debido a la facilidad con que puede ser interpretada y calculada en los sistemas objetos de estudio. Además, en la mayoría de los casos de interés, la información que proporciona equivale a la obtenida a través de

la longitud de localización, magnitud mucho más difícil de calcular como puede apreciarse a partir de la falta de utilidad práctica de su definición.

### 1.3.3 Matrices aleatorias y estadística de niveles.

Además de la localización electrónica, la inclusión de desorden en un sistema produce profundos efectos en su espectro electrónico. Dichas modificaciones aparecen muy bien reflejadas al estudiar estadísticamente el espaciamiento energético entre autoenergías adyacentes. Para caracterizar las propiedades estadísticas de dicho espaciamiento se suelen utilizar unas distribuciones de probabilidad que nacieron con el estudio de las propiedades de las matrices aleatorias.

La teoría de matrices aleatorias fue desarrollada por varios autores (Wigner, 1952; Dyson, 1962a y 1962b; Mehta, 1967). En 1955 Wigner argumentó que las propiedades estadísticas del espectro de hamiltonianos complicados coinciden con las de los operadores hamiltonianos aleatorios. La idea del método consiste en sustituir hamiltonianos matriciales demasiado complicados como para realizar un cálculo directo por hamiltonianos matriciales aleatorios, con los que es posible obtener una aproximación de tipo estadístico al caso exacto. Para que ello sea posible, estas matrices deberán de poseer las mismas simetrías que el hamiltoniano exacto, y así es posible obtener una descripción estadística sencilla de sistemas complicados. Las matrices aleatorias han sido aplicadas a sistemas tan diversos como núcleos excitados (Brody *et al.*, 1981), átomos (Rosenzweig & Porter, 1960), moléculas (Zimmermann *et al.*, 1988), y conductores desordenados (Evangelou, 1989; Stone *et al.*, 1991; Muttalib *et al.*, 1993), así como a fenómenos de transporte (Sivan & Imry, 1987; Akkermans & Montanboux, 1992; Chen *et al.*, 1992 y 1993) y a sistemas caóticos (Bohigas *et al.*, 1986).

Generalmente, la distribución de los elementos de las matrices aleatorias se considera gaussiana. Las matrices aleatorias gaussianas se dividen en tres conjuntos diferentes atendiendo a la simetría que poseen. Hamiltonianos sin ninguna simetría son matrices simplécticas que pertenecen al conjunto simpléctico gaus-

siano (CSG). Si el sistema no es invariante bajo inversión temporal, pero sí que posee invarianza rotacional, el hamiltoniano es una matriz unitaria, que pertenece al conjunto unitario gaussiano (CUG). Si el sistema presenta inversión temporal e invarianza rotacional, la matriz es real y simétrica, como el hamiltoniano de fuerte ligadura, y al conjunto correspondiente se le denomina ortogonal gaussiano (COG). Generalmente, a la hora de realizar estadísticas espectrales es conveniente realizar en primer lugar un proceso de 'folding' que consiste en eliminar las desviaciones sistemáticas del espectro para obtener sólo las características fundamentales. En particular, para el conjunto COG, Wigner encontró que la distribución del espaciado entre niveles adyacentes viene dada aproximadamente por:

$$P(S) = \frac{\pi S}{2D^2} \exp\left(-\frac{\pi S^2}{4D^2}\right), \quad S \geq 0 \quad (1.29)$$

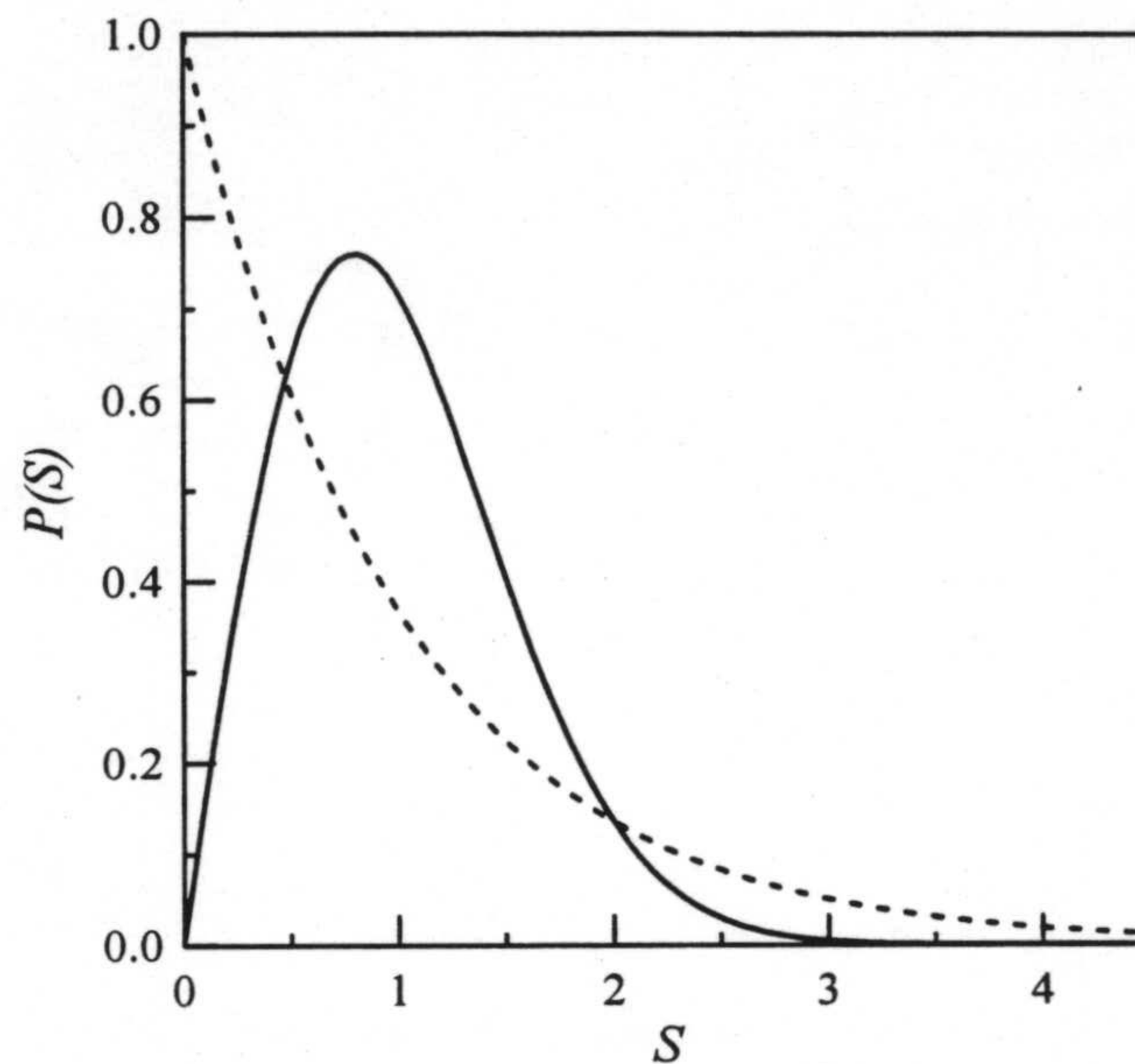
donde  $D$  denota el espaciado medio entre niveles. El crecimiento lineal de la curva para pequeños espaciamientos describe el efecto de la repulsión de niveles: la probabilidad de encontrar dos niveles muy próximos es muy pequeña por lo que existe una correlación muy grande entre niveles.

Si las energías no están correlacionadas, la distribución  $P(S)$  sigue la estadística de Poisson:

$$P(S) = \left(\frac{1}{D}\right) \exp\left(-\frac{S}{D}\right). \quad (1.30)$$

En la figura 1.5 se representan ambas distribuciones teóricas, que más adelante usaremos para caracterizar el espectro de los sistemas cuasiperiódicos.

Desde el punto de vista de los sistemas desordenados, las dos funciones de distribución permiten concluir si un sistema está muy desordenado o no. Si el grado de desorden es pequeño, los niveles siguen estando correlacionados, con lo que habrá todavía una repulsión entre niveles adyacentes. Esto se traduce en que la distribución será aproximadamente igual a la dada por la ecuación (1.29), y el sistema será de tipo Wigner. Sin embargo, si el desorden introducido es muy grande, tendremos que éste domina sobre cualquier otro efecto, lo que provocará la falta total de correlación entre niveles energéticos y la ausencia de repulsión



**Figura 1.5:** Representación de las funciones de distribución del espaciado energético de Wigner (línea continua) y Poisson (línea discontinua), en función del espaciado  $S$  medido en unidades del espaciado medio.

entre niveles adyacentes. En este caso, la distribución será parecida a la dada en (1.30), y el sistema será de tipo Poisson. Este hecho nos permitirá reconocer cuando un sistema está más ordenado (Wigner), o cuando se comporta como muy desordenado (Poisson) (Wischmann & Müller-Hartman, 1990). Generalmente, se utiliza un único parámetro para caracterizar el grado de Wigner-Poisson de un espectro. Es común utilizar la desviación estándar del espectro, o bien la integral de la distribución entre  $2D$  y  $+\infty$ , porque las distribuciones de Wigner y Poisson se cortan precisamente en ese punto. Así, a través del espaciamiento entre niveles adyacentes podemos saber el grado de desorden de un sistema. De forma similar, también aplicaremos estos criterios a los sistemas cuasiperiódicos, lo que nos permitirá atribuirles un grado de desorden, y comprobar qué causas modifican este desorden intrínseco de las secuencias.



## 1.4 Sistemas cuasiperiódicos.

Hasta hace aproximadamente 15 años, la física del estado sólido estudiaba básicamente dos tipos estructurales de materiales. Los sólidos cristalinos perfectos, con los que nació la teoría, y los materiales desordenados. Sin embargo, desde el descubrimiento de Shechtman *et al.* en 1984 de la estructura cristalina no periódica (cuasicristalina) en el aislante Al-Mn, que posee simetría icosaédrica tridimensional, el interés por los cuasicristales se ha desarrollado enormemente. Generalmente, los cuasicristales exhiben propiedades intermedias entre los sólidos cristalinos y las fases desordenadas de la materia condensada, e incluso presentan propiedades exóticas que no aparecen en ninguno de los dos tipos de sistemas anteriores. Los cuasicristales, debido a su compleja estructura, presentan generalmente dentro del cristal una dirección periódica y una no periódica (cuasiperiódica) pero que no es desordenada, lo que produce una gran anisotropía en sus propiedades electrónicas (Fujiwara *et al.*, 1996). El estudio de cuasicristales reales es enormemente complejo, por lo que habitualmente se estudian a través de modelos unidimensionales, que permiten comprender mejor sus extrañas propiedades. Dichos modelos unidimensionales se conocen generalmente como sistemas cuasiperiódicos, y son los que consideraremos a lo largo de esta memoria.

La propiedad fundamental de las secuencias cuasiperiódicas es que carecen de escala característica y privilegiada, a parte del espaciado interatómico. En un sistema periódico, en el que los electrones están extendidos, la escala característica viene dada por el tamaño total del sistema, o por el periodo de la red. Si se estudia la conductividad, en la que han de tenerse en cuenta los choques del electrón con las impurezas de la red, existen otras escalas como el conocido camino libre medio y magnitudes relacionadas. Cuando se consideran sistemas desordenados, la escala privilegiada puede venir dada por la longitud de localización, o por la razón inversa de participación, definidas anteriormente. Sin embargo, para las secuencias cuasiperiódicas, no existe esa escala natural que caracteriza al sistema.

Una forma equivalente de decir eso mismo es que, puesto que no existe esa escala natural, la mayoría de sus propiedades son invariantes frente a cambios de escala. Esta propiedad es característica de las magnitudes autosimilares, directamente relacionadas con la geometría fractal. Por ello no resulta extraño que las secuencias cuasiperiódicas presenten un rico abanico de propiedades con comportamiento fractal, como el espectro y las funciones de onda. En capítulos posteriores, estudiaremos estas propiedades, e incluso introduciremos un nuevo comportamiento de tipo fractal cuando estudiemos la localización inducida por el campo eléctrico en estos sistemas.

Definir un sistema cuasiperiódico de manera rigurosa puede convertirse en una tarea ardua, aunque es fácil hacerlo de forma intuitiva. Podemos considerar que son secuencias no periódicas, puesto que no existe una repetición de una cierta subestructura más o menos complicada (periodo) a lo largo de la secuencia, pero tampoco son aleatorias en el sentido de no saber cual es el elemento siguiente de la secuencia. Podemos decir que son secuencias predecibles, porque, aunque no se repite nada a lo largo de la misma, existe un algoritmo determinista que proporciona el siguiente elemento de la secuencia. Otros autores los definen como sistemas no periódicos en los que existen correlaciones de largo alcance, de la que carecen los sistemas desordenados. Tradicionalmente, en la infinita gama de secuencias de este tipo que son generables de manera algorítmica, ha habido dos tipos de secuencias privilegiadas para el estudio de sistemas cuasiperiódicos unidimensionales: las secuencias de Fibonacci y las de Thue-Morse. Aunque son secuencias artificiales no existentes en la naturaleza, su comprensión es tan importante para el estudio de los cuasicristales, que han sido construidas de manera artificial mediante superredes, de las cuales haremos en breve una pequeña introducción.

### 1.4.1 La secuencia de Fibonacci.

Las secuencias de Fibonacci han pasado a ser el estándar dentro de los sistemas cuasiperiódicos. Como hemos comentado, han llegado a ser construidas experi-

mentalmente en superredes de GaAs-AlAs (Merlin *et al.*, 1985) para el estudio del espectro. También se han construido superredes de Fibonacci en sistemas multicapas de SiO<sub>2</sub>-TiO<sub>2</sub> para estudiar sus propiedades como red fotónica (Hattori *et al.*, 1994), porque presentan algunas ventajas con respecto a las superredes electrónicas, al no existir apenas scattering con la red, y ser la interacción entre fotones nula.

El interés por las secuencias de Fibonacci aumentó considerablemente cuando ya en 1983, Kohmoto, Kadanoff y Tang descubrieron que el espectro y las funciones de onda de dichas secuencias poseían comportamientos fractales. Trabajos posteriores que hacían uso de grupos de renormalización (Niu & Nori, 1986; Piéchon *et al.*, 1995) revelaron que la estructura fractal del espectro se forma a partir de una organización jerárquica en forma de árbol, cuyas ramas duplican o triplican su periodo al incrementarse el tamaño de la secuencia. El espectro resultante forma un conjunto discreto con medida de Lebesgue nula. Nosotros caracterizaremos estas propiedades del espectro a través de la dimensión fractal en capítulos posteriores, y utilizaremos magnitudes, como la densidad integrada de estados, que permitirá apreciar intuitivamente las propiedades fractales del espectro. Otros trabajos han estudiado la conductancia y otras propiedades de transporte de dichas secuencias (Goda, 1987; Gumbs *et al.*, 1995).

Aunque existen en la bibliografía generalizaciones ternarias (secuencias formadas por tres bloques básicos) (Tong, 1996), la secuencia de Fibonacci más ampliamente utilizada es binaria, es decir, generada a partir de dos bloques básicos. A continuación describimos la estructura de estas secuencias.

### Estructura de la secuencia

Podemos definir las secuencias de Fibonacci utilizando un algoritmo recursivo. Partimos de dos bloques básicos  $A$  y  $B$  que corresponderán posteriormente a dos valores diferentes de las energías diagonales en el modelo de fuerte ligadura o a dos valores de las funciones  $\delta$  en el otro modelo. La secuencia  $n$ -ésima queda definida

recursivamente por:

$$S_n = S_{n-1}S_{n-2} \quad (1.31)$$

con condiciones iniciales

$$S_1 = A, S_2 = B. \quad (1.32)$$

Las primeras secuencias pueden verse en la siguiente tabla:

$$S_3 = BA$$

$$S_4 = BAB$$

$$S_5 = BABBA$$

$$S_6 = BABBABAB$$

$$S_7 = BABBABABBABBA$$

$$S_8 = BABBABABBABABBABAB$$

$$S_9 = BABBABABBABABBABABBABABBABABBABBA$$

El número total de bloques de las sucesivas secuencias es siempre un número de Fibonacci, así como también son números de Fibonacci el número de bloques  $A$  (o  $B$ ) en cada secuencia. Los números de Fibonacci (1, 2, 3, 5, 8, 13, ...) son los que forman la famosa sucesión del mismo nombre, que puede ser definida de la siguiente manera:

$$F_n = F_{n-1} + F_{n-2}, F_1 = 1, F_2 = 1. \quad (1.33)$$

Es una sucesión 'clásica' y es fácil demostrar que si definimos otra sucesión como el cociente de dos términos sucesivos de Fibonacci, la sucesión cociente converge al llamado número de oro o sección áurea, de valor  $(1 + \sqrt{5})/2$ . Este número ya era conocido por los griegos y fue y sigue siendo ampliamente utilizado en arte, v.g., el cociente entre el lado del cuadrado y el radio del círculo que aparecen en el 'hombre ideal' de Leonardo da Vinci es el número de oro, así como también lo es el cociente entre la altura y la anchura del famoso 'Cristo' de Salvador Dalí (Santaló, 1994). Hay que destacar, por tanto, que en una secuencia infinita, el cociente del número total de bloques  $A$  y  $B$  tiende al número de oro.

A veces, también aparecen en la bibliografía generalizaciones binarias de las secuencias de Fibonacci. Para generar recursivamente dichas secuencias, se utiliza la relación:

$$S_n = S_{n-1}^i S_{n-2}^j \quad (1.34)$$

donde los exponentes  $i$  y  $j$  son números enteros. Si  $i = j = 1$ , obtenemos la secuencia de Fibonacci estándar que hemos definido más arriba. Como hemos comentado, dicha secuencia estándar está caracterizada por el número de oro, o sección áurea. Sin embargo, también se utilizan (Gumbs *et al.*, 1995) exponentes de valores  $i = 2$  y  $j = 1$ , o  $i = 1$  y  $j = 2$ . En el primer caso, el cociente entre dos términos sucesivos tiende al valor conocido como número de plata, que vale  $\sqrt{2} + 1$ . En el segundo caso, el límite del cociente entre dos términos sucesivos tiende a 2, y este valor se conoce como número de cobre. Sin embargo, para el estudio de las propiedades cuasicristalinas es suficiente considerar el caso estándar ( $i = 1, j = 1$ ), y será el que utilizaremos en esta memoria.

#### 1.4.2 La secuencia de Thue-Morse

Las secuencias de Thue-Morse constituyen sistemas cuasiperiódicos con una clase de aperiodicidad diferente a la de los sistemas de Fibonacci. Aunque los sistemas de Thue-Morse se utilizan fundamentalmente en la física de la materia condensada, han sido también utilizados para el estudio de sistemas biológicos, en particular para la secuencia de ADN (Li, 1992). Dicha secuencia posee una estructura de bases púricas y pirimidínicas que se modela con la secuencia de Thue-Morse, debido a que la forma de generar la secuencia, recuerda a las propiedades de duplicación e inversión que aparecen en el ADN.

Las secuencias de Thue-Morse también han sido objeto de amplios estudios en la bibliografía (Gumbs & Ali, 1988; Zhong *et al.*, 1991; Ryu *et al.*, 1993; Chakrabarti *et al.*, 1995). Existe una controversia en torno a la regularidad relativa de los sistemas de Thue-Morse con respecto a los de Fibonacci. Ciertos autores concluyen que son más irregulares que los de Fibonacci (Kolar *et al.*, 1991) y otros

lo contrario (Rikiund *et al.*, 1987). Nosotros trataremos de llegar a un resultado a través del coeficiente de transmisión de ambos sistemas, como veremos en el capítulo 3, así como de la dimensión fractal en el capítulo 4, y de la localización de las funciones de onda en el capítulo 5.

### Estructura de la secuencia

El algoritmo recursivo de construcción de la secuencia a partir de los dos bloques básicos  $A$  y  $B$  es el siguiente:

$$S_n = S_{n-1} \overline{S_{n-1}} \quad (1.35)$$

con condición inicial

$$S_1 = AB \quad (1.36)$$

donde llamamos  $\overline{S}_i$  a la estructura que se obtiene a partir de  $S_i$  intercambiando el bloque  $A$  por el  $B$  y viceversa. Las primeras secuencias pueden verse en la siguiente tabla:

$$S_2 = ABBA$$

$$S_3 = ABBABAAB$$

$$S_4 = ABBABAABBAABABBA$$

$$S_5 = ABBABAABBAABABBABAABBAABBABAAB$$

En este caso, y teniendo en cuenta su estructura, la cadena  $S_n$  tendrá un número total de bloques básicos dado por  $2^n$ . El número total de bloques básicos  $A$  y  $B$  será igual en la cadena y vendrá dado para la secuencia  $n$  por  $2^{n-1}$ . Como en el caso de las secuencias de Fibonacci, en lo sucesivo utilizaremos la secuencia de Thue-Morse para generar o bien las energías diagonales para el modelo de fuerte ligadura o bien la amplitud de las funciones  $\delta$  en el otro modelo.

## 1.5 Heteroestructuras y superredes

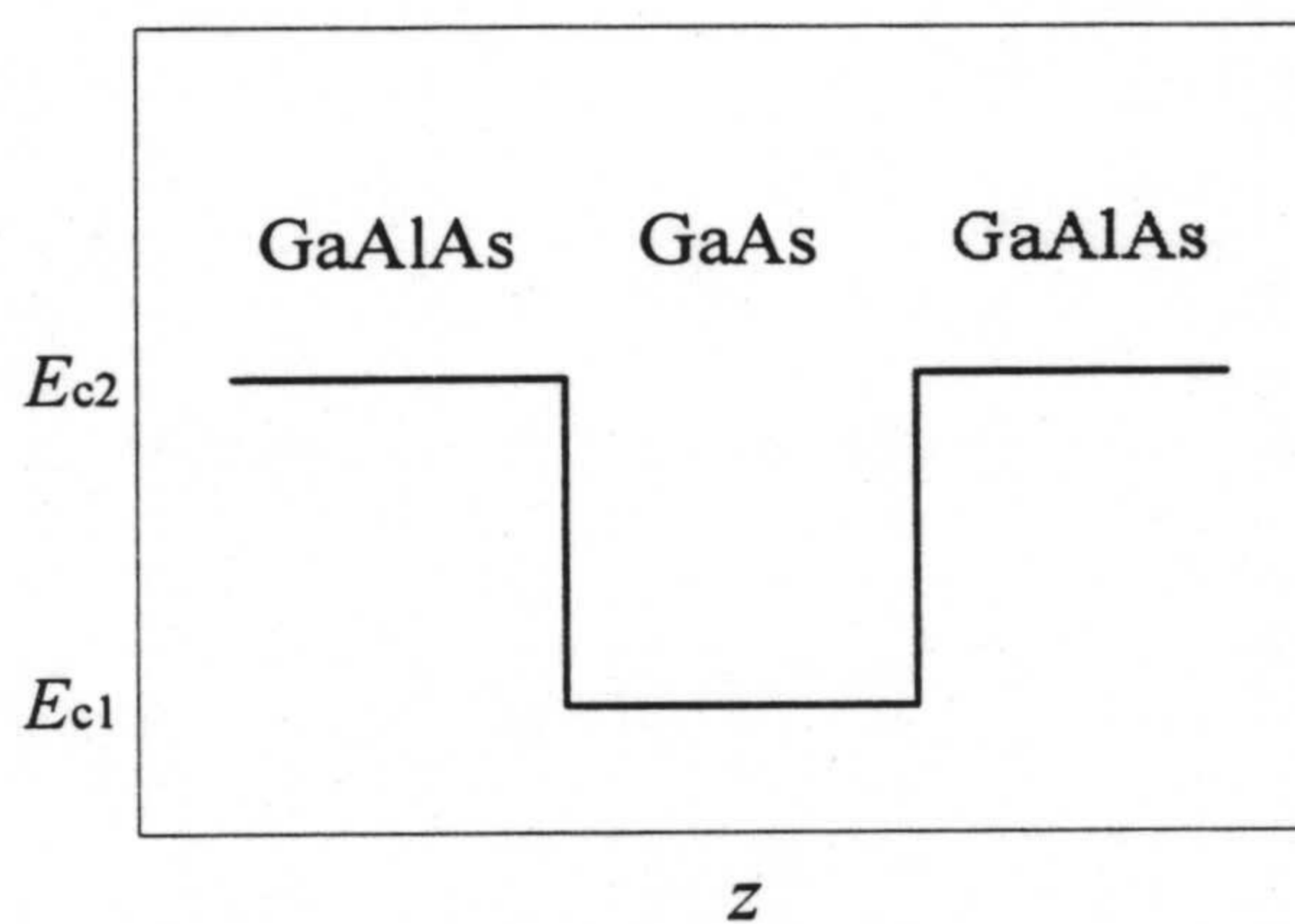
Hasta la década de los 60, la física del estado sólido había estado casi exclusivamente restringida al estudio de sólidos inorgánicos naturales, que, por supuesto, eran materiales no controlables de manera artificial. La mecánica cuántica predecía que la aplicación de un campo eléctrico uniforme sobre un sólido periódico producía unos efectos en las propiedades electrónicas que no eran observables experimentalmente. La principal dificultad experimental radicaba en que la anchura de las bandas permitidas era excesivamente grande como para poner de manifiesto los efectos predichos, los cuales sólo aparecían para valores del campo eléctrico aplicado enormemente grandes ( $\mathcal{E} > 10^6$  V/cm), y no disponibles tecnológicamente. La gran anchura energética de las bandas permitidas se debe a la pequeñez de la constante de red en los sólidos cristalinos naturales. En un trabajo pionero y revolucionario, en 1970 Esaki y Tsu propusieron el concepto de superred., basado en heteroestructuras de semiconductores.

La idea básica es simple, aunque ha tenido una gran repercusión posterior. Si se dispone de la tecnología necesaria, se puede construir una secuencia formada por capas del espesor que se desee dispuestas alternadamente, donde cada una de las capas alternadas está compuesta por un semiconductor diferente (heteroestructura), que aquí vamos a llamar material *A* y material *B*.

Aunque al principio la idea de superred era una especulación puramente teórica, los increíbles avances tecnológicos en el campo del crecimiento de materiales hicieron posible que pasaran a convertirse en una realidad. El desarrollo de tecnologías como el crecimiento epitaxial por haces moleculares o la deposición por vapor químico metal-orgánico dieron lugar a que se pudieran construir materiales formados por capas alternadas de semiconductores diferentes con una precisión casi increíble, llegándose a controlar espesores del orden de una sola capa atómica.

La anchura de cada capa se controla a voluntad, y puede incluir el número de periodos de los materiales *A* y *B* que se deseen. Si se escogen dos materiales

adecuados (los materiales de uso más frecuente son GaAs y GaAlAs), de manera que por ejemplo exista una diferencia energética entre el fondo de la banda de conducción del material  $A$  y el del material  $B$ , es posible conseguir un perfil energético controlable a voluntad. El caso de heteroestructura más simple es el pozo cuántico, que describimos a continuación.



**Figura 1.6:** Esquema de un pozo cuántico creado mediante una heteroestructura de GaAs y GaAlAs.

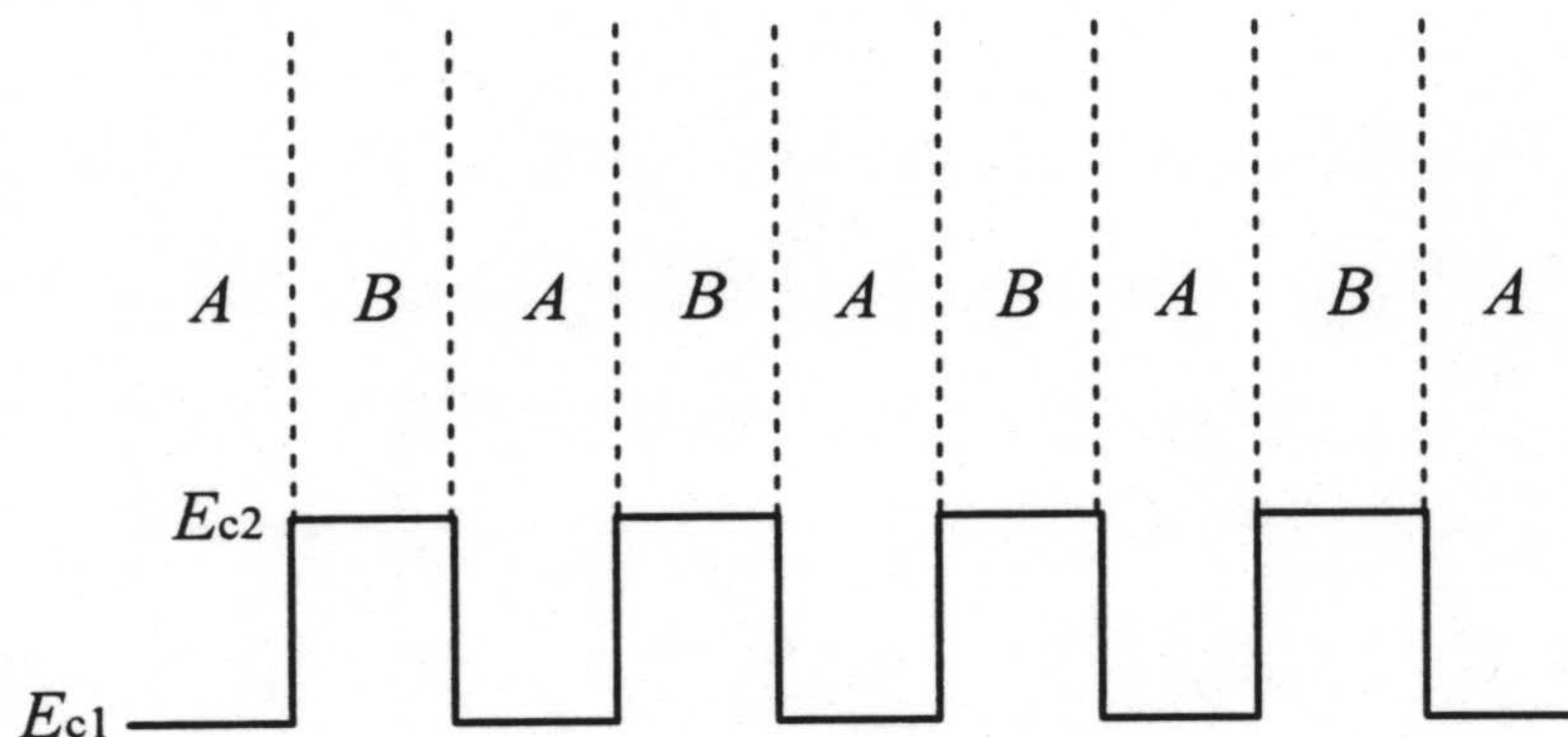
Supongamos que el fondo de la banda de conducción del material  $A$  (normalmente GaAs), y que llamamos  $E_{c1}$  en la figura 1.6 es ligeramente menos energético que el fondo de la misma banda del material  $B$  (usualmente GaAlAs), llamado  $E_{c2}$  en 1.6. Si se hace crecer la secuencia  $BAB$ , donde suponemos que el grosor de las capas  $B$  laterales es mucho más grande que la capa central  $A$ , en la dirección de crecimiento de la secuencia habremos conseguido un perfil energético como el que se muestra en la figura 1.6. Dicho perfil corresponde a un pozo cuántico. La existencia del pozo conduce a una cuantización energética en la componente del momento paralela a la dirección de crecimiento de la secuencia, que dará lugar a la aparición de estados ligados en esa dirección, y que estarán confinados dentro del pozo (dentro del GaAs). El número de estados ligados existentes se controla a través de la profundidad (que variará si se cambia de material) y la anchura del



pozo (que se fija mediante un riguroso control del espesor de las capas de cada material).

De la misma forma que podemos construir un pozo cuántico, también podemos formar una barrera de potencial mediante la secuencia  $ABA$ , cuya anchura y altura de nuevo es controlable a voluntad.

El paso siguiente es construir un sistema con doble pozo cuántico o una doble barrera, y así sucesivamente. La generalización es obvia. Si se hace crecer la secuencia periódica  $ABABABAB\dots$ , el perfil energético resultante presenta la forma de la figura 1.7, en la que también aparece un esquema de la disposición física de los materiales en la heteroestructura.



**Figura 1.7:** Esquema de una superred periódica. Junto al perfil energético, aparece también la disposición alternada de los dos materiales  $A$  y  $B$  que forman la heteroestructura-

De esta forma, hemos construido a voluntad un sólido periódico cuasiunidimensional y prácticamente libre de imperfecciones, cuyo periodo es controlable por el diseñador. Si en las capas de material  $A$  o  $B$  se colocan bastantes capas atómicas de cada material, se puede conseguir un periodo para la red resultante de incluso varios ordenes de magnitud mayor que los periodos de las redes cristalinas naturales. A la disposición de capas semiconductoras alternadas y controlables en anchura, con un perfil de potencial también controlable y superpuesto al potencial

cristalino natural se le llama superred.

Las propiedades del espectro energético de la superred pueden deducirse a partir del espectro de un único pozo cuántico. El pozo presenta una serie de estados ligados discretos. Si sucesivamente vamos acoplando pozos al sistema y formando la superred, los estados ligados de cada pozo, idénticos cuando los pozos están infinitamente separados, interaccionarán y darán lugar a bandas energéticas, una por cada estado ligado de un pozo individual. La anchura de las bandas es muy pequeña, debido al gran periodo de la superred, y por eso se conocen con el nombre de minibandas. Las funciones de onda, debido al acoplamiento constructivo de los pozos sucesivos (si la superred es periódica) estarán completamente deslocalizadas y extendidas a lo largo de toda la superred, y mostrarán las características de las funciones de onda en sistemas periódicos comentadas anteriormente en este capítulo.

Las ventajas tecnológicas en la física de dispositivos electrónicos de las heteroestructuras, o de las superredes en general, son evidentes porque las propiedades electrónicas son casi controlables a voluntad. Los ejemplos de uso práctico son muy numerosos, y pueden verse, por ejemplo, en el review de Thornton de 1994. Los láseres de pozo cuántico se basan en un pozo construido a partir de una heteroestructura, y son muy efectivos debido a que los estados ligados del pozo son prácticamente monocromáticos. La estructura de doble barrera, que utilizaremos posteriormente en esta memoria, presenta valores energéticos para los cuales la transmisión alcanza la unidad (túnel resonante), y constituyen el fundamento del diodo túnel, y de los dispositivos electrónicos derivados de él. Las memorias electrónicamente programables se construyen también a partir de heteroestructuras periódicas. Debido a que los tamaños de estos dispositivos basados en heteroestructuras tienen dimensiones características por encima del periodo de la red cristalina subyacente, pero no son de tamaño macroscópico, constituyen un caso particular de los llamados dispositivos mesoscópicos, ya comentados anteriormente.

El advenimiento de las superredes ha hecho que proliferara el estudio de los sis-

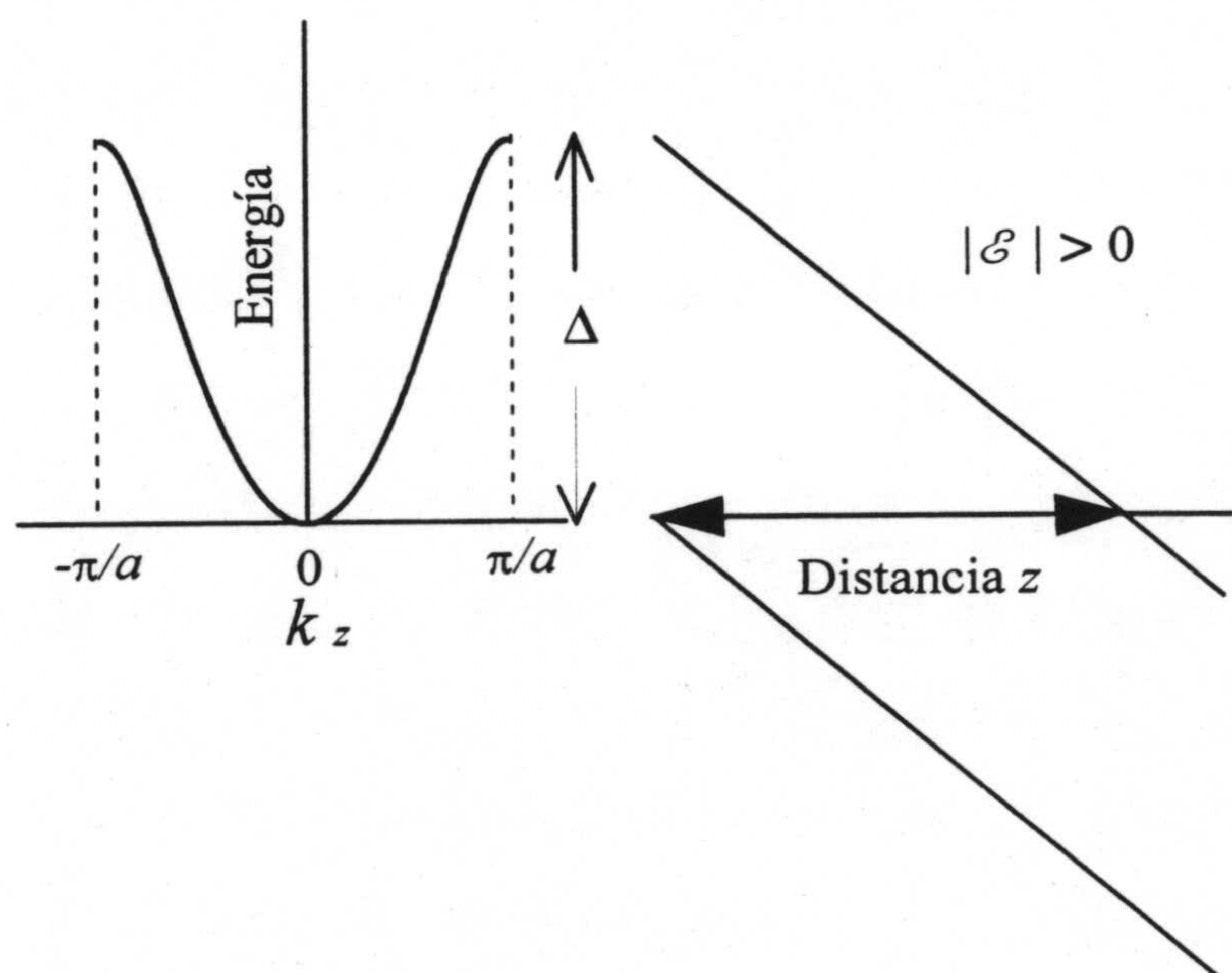
temas cuasiperiódicos artificiales. En efecto, aunque hasta ahora hemos hablado de superredes periódicas, es posible diseñar una alternancia de capas sucesivas en la superred que forme una secuencia cuasiperiódica, que además se comportará, de acuerdo al perfil energético mostrado en la figura 1.7 como un sistema de Kronig-Penney cuasiunidimensional en la dirección de crecimiento de la superred. De hecho, todos los resultados experimentales que aparecen en la bibliografía se extraen del estudio de secuencias cuasiperiódicas construidas en superredes, ya sean estas electrónicas o fotónicas.

Por último, nos gustaría destacar aquí que el trabajo que se presenta en esta memoria, aunque a partir de ahora no se diga explícitamente, corresponde a analizar las propiedades electrónicas de superredes, ya sean periódicas o cuasiperiódicas. En efecto, los modelos que usaremos aquí, siempre unidimensionales, y casi siempre finitos, son directamente aplicables a las superredes. Por ejemplo, el modelo de funciones  $\delta$  corresponde a una superred en la que la anchura de los pozos (o las barreras) es mucho más pequeña que la de las barreras circundantes (o los pozos). Además, posteriormente introduciremos los modelos multicapas, que también modelan el potencial de las superredes. También usaremos explícitamente superredes cuando estudiemos la transmisión en heteroestructuras para dilucidar el comportamiento de la masa efectiva en el capítulo 6. En dicho capítulo se comentarán con más detalle algunas propiedades de las superredes para introducir el método de la función envolvente, que hace uso de la masa efectiva, y que se utiliza universalmente para estudiar las propiedades de transporte de las superredes.

## 1.6 Efectos del campo eléctrico en un sistema periódico

El efecto que produce la aplicación de un campo eléctrico homogéneo (constante) sobre un sólido periódico constituye un problema que fue abordado prácticamente desde el nacimiento de la teoría cuántica.

A la izquierda de la figura 1.8 se muestra un esquema de la relación de dispersión  $E(k)$  en una banda cristalina sin campo eléctrico aplicado, y a la izquierda, el perfil energético resultante cuando se aplica un campo eléctrico uniforme  $\mathcal{E}$ , en función de la distancia.



**Figura 1.8:** Representación esquemática de la relación de dispersión  $E(k)$  en una banda (parte izquierda) y del perfil energético de dicha banda en función de la distancia  $z$  cuando se aplica un campo eléctrico uniforme  $\mathcal{E}$ . Conviene notar como un electrón con un valor determinado de energía se localiza en una región finita. En la figura, se muestra la localización de un electrón situado en el fono de la banda.

Existe una clara diferencia entre lo que le ocurre a un electrón libre y a uno en un cristal con campo eléctrico aplicado. En este último caso, desde un punto de vista cuasiclásico (Méndez & Bastard, 1993), para un valor energético constante el electrón primero es acelerado y luego frenado hasta que alcanza el borde de la banda. En este punto, el portador invierte el sentido de su movimiento, hasta alcanzar el borde opuesto de la banda. En el espacio real, el electrón se movería adelante y atrás desde su posición inicial entre dos puntos de retorno, por lo

que estará localizado en una región determinada del cristal, cuya dimensión será directamente proporcional al ancho de banda,  $\Delta$ , pero inversamente proporcional al campo eléctrico aplicado  $\mathcal{E}$ , ya que este 'inclina' más la banda energética, como puede deducirse del esquema de la parte derecha de la figura 1.8. El movimiento descrito se repetiría indefinidamente con una frecuencia  $\nu_B$  denominada frecuencia de Bloch, que es proporcional al campo y al periodo del potencial,  $a$ . El aumento del campo aplicado hace que disminuya el camino recorrido, y por tanto, que aumente la frecuencia. De la misma forma, una constante de red  $a$  grande produce bandas energéticas estrechas (pequeño  $\Delta$ ), y por lo tanto hace que la oscilación sea más rápida y se incremente la frecuencia. La expresión de la frecuencia de Bloch es:

$$\nu_B = \frac{e\mathcal{E}a}{h} \quad (1.37)$$

donde  $e$  es la carga del protón, y  $h$  es la constante de Planck.

Las oscilaciones de carga producirían una emisión de radiación dipolar electromagnética cuya frecuencia sería la de Bloch. A un hipotético dispositivo que haga uso de este efecto de emisión de radiación se le llama oscilador de Bloch.

En este caso idealizado, en el que el electrón está libre de choques con la red y el potencial es perfectamente periódico, incluso un campo eléctrico infinitesimalmente pequeño produciría oscilaciones de Bloch. Para un semiconductor típico, cuya constante de red es del orden de  $5 \text{ \AA}$ , y cuya banda de conducción tiene una anchura del orden de  $1 \text{ eV}$ , un campo moderado de  $100 \text{ V/cm}$  localizaría al electrón en una región de aproximadamente  $100 \text{ micras}$  de diámetro, y lo haría oscilar con una frecuencia aproximada de  $1 \text{ GHz}$ . Sin embargo, en una situación más realista, en la que los procesos de scattering han de tenerse en cuenta, se requiere un valor mínimo del campo eléctrico aplicado para que el electrón alcance la cima de la banda de energía. Este campo mínimo, que es inversamente proporcional al tiempo de scattering y al periodo de la red, es del orden de  $10^6 \text{ V/cm}$ . Dicho valor del campo eléctrico es enormemente grande, y por lo tanto la aproximación cuasiclásica seguida para deducirlo, es, al menos, de dudosa aplicación.

En 1949, Hubert James conjeturó que la presencia de un campo eléctrico haría que el espectro continuo de las bandas energéticas se dividiera en una serie de niveles discretos cuya separación energética debería ser proporcional al campo. Diez años después, Wannier estudió de manera sistemática el movimiento de los electrones en un potencial periódico con un campo eléctrico uniforme aplicado, y encontró que el significado de la frecuencia de Bloch (1.37) en términos cuánticos era una división energética dentro de cada banda, y la llamó *división de Stark*.

Más concretamente, Wannier demostró (Wannier, 1959) que si  $\psi(z)$  es una solución de la ecuación de Schrödinger correspondiente a una energía de valor  $E_0$ , entonces  $\psi(z - na)$  también es solución de la ecuación de Schrödinger, cuya energía es  $E_0 + ne\mathcal{E}a$ . El conjunto de dichas soluciones constituyen lo que se conoce como *escalera de Wannier-Stark*, formada por niveles discretos de energía separados por un valor de energía constante. Dicha separación, dada por  $\Delta E = e\mathcal{E}a$ , puede escribirse en términos de la frecuencia de Bloch como

$$\Delta E = \hbar\omega_B \quad (1.38)$$

donde  $\omega_B = 2\pi\nu_B$ . La función de onda  $\psi(z)$  se extiende a lo largo de todo el sólido en ausencia de campo eléctrico. Pero cuando existe un campo eléctrico aplicado, dicha función se localiza en una región cuyo tamaño (como en la aproximación cuasiclásica) es inversamente proporcional al campo. Dicho fenómeno es llamado actualmente localización de Stark. En el límite de alto campo eléctrico, la localización es extrema y el electrón llega a estar confinado en un único átomo. En esta situación, las oscilaciones de Bloch en el dominio temporal equivalen a la escalera de Wannier-Stark en el dominio energético.

Como se puede apreciar del desarrollo anterior, el efecto de un campo eléctrico aplicado en un sólido periódico guarda muchas similitudes con lo que ocurre al aplicar un campo magnético. En este último caso, también aparecen niveles discretos de energía (niveles de Landau), cuya separación es proporcional a la magnitud del campo. La condición para la cuantización (1.38) es idéntica en ambos casos,

si se reemplaza la frecuencia de Bloch por la frecuencia ciclotrón.

Sin embargo, la existencia de la escalera de Wannier-Stark ha sido muy controvertida durante largo tiempo, incluso conceptualmente, debido a que el tratamiento original se basaba en la existencia de un única banda de conducción, con lo que no tenía en cuenta la posibilidad de transmisión entre bandas por efecto túnel. Estudios teóricos más recientes (Nenciu, 1991) han concluido que los niveles de Wannier-Stark pueden verse como autoenergías aproximadas, o cuasienergías, que nosotros estudiaremos detalladamente en capítulos posteriores.

En las décadas de los 60 y los 70, se llevaron a cabo experimentos ópticos y de transporte cuyos resultados fueron explicados en términos de la escalera de Wannier-Stark. Sin embargo, los resultados de dichos experimentos no eran concluyentes debido a la extrema pequeñez de los efectos medidos. Como hemos comentado, la separación entre niveles de la escalera depende del periodo de la red cristalina. En un semiconductor típico, cuya constante de red  $a$  es de unos 5 Å, el espaciado entre niveles consecutivos de la escalera es de unos pocos meV para un campo de 100 kV/cm. Por contra, en una superred, cuyo periodo típico es del orden de 50-100 Å, el espaciado es, al menos, un orden de magnitud mayor. Este incremento en el espaciado ha sido suficiente para la observación experimental de la escalera de Wannier-Stark (Méndez *et al.*, 1988), incluso a temperatura ambiente.

Así, no resulta sorprendente que las superredes, introducidas anteriormente, se hayan convertido en el medio experimental universal para la observación de todos los fenómenos asociados a la aplicación de un campo eléctrico uniforme a una estructura periódica.

### 1.6.1 El campo eléctrico en superredes

En esta breve sección, vamos a describir los mecanismos por los que aparecen los efectos del campo eléctrico aplicado, comentados más arriba, cuando dicho campo se aplica a una superred. El caso más sencillo es considerar primero los efectos

del campo eléctrico sobre una estructura más simple, como por ejemplo un doble pozo cuántico.

Cuando en un doble pozo cuántico consideramos que la barrera que separa a los dos pozos es suficientemente estrecha, los estados cuánticos de los pozos individuales se hibridarán fuertemente y darán lugar a niveles dobles de energía. Así, las correspondientes funciones de onda se acoplarán por efecto túnel, y estarán extendidas a ambos pozos. Sin embargo, al aplicar un campo eléctrico uniforme, el cambio diferente en energía potencial que ocurre en cada pozo, hace que los niveles energéticos dobles se separen. Este cambio relativo de energía reduce el acoplamiento por túnel comentado y lo transforma desde una situación resonante ( $\mathcal{E} = 0$ ) hasta una no resonante ( $\mathcal{E} \neq 0$ ). Las funciones de onda, ya desacopladas, se irán localizando en cada pozo individual al incrementar el campo, y la separación entre los niveles energéticos se incrementará linealmente con el campo (Ferreira & Bastard, 1997). Estos efectos modificarán drásticamente las propiedades espectrales de absorción y emisión de la heteroestructura.

Cuando la estructura de doble pozo se repite iterativamente, se forma una superred. Si se consigue la suficiente perfección estructural a la hora de crecer la secuencia, para evitar los efectos de interferencia destructiva producidos por las imperfecciones, las impurezas y la rugosidad en las intercaras, las funciones de onda electrónicas, debido al perfecto acoplamiento de todos los pozos, será espacialmente coherente a lo largo de la superred. Es decir, se producirá una interferencia constructiva que provoca que la función de onda esté extendida. Los niveles energéticos individuales de cada pozo se habrán hibridado como ocurría en el doble pozo, y habrán dado lugar a las ya conocidas minibandas.

De la misma forma que en el caso de un doble pozo, cuando introducimos un campo eléctrico uniforme, podemos conseguir una localización espacial controlada de las funciones de onda electrónicas (localización de Stark). El campo desplaza cada periodo de la superred con respecto a su periodo vecino una energía dada por  $e\mathcal{E}a$ . El desacoplo parcial entre los pozos consecutivos producido por el campo





reduce la coherencia espacial de las funciones de onda. Además, como ya sabemos, el espectro cuasicontinuo que formaba la minibanda en ausencia de campo, se divide en un conjunto de niveles discretos separados por una energía también igual a  $e\mathcal{E}a$ . Cuando  $e\mathcal{E}a$  es comparable a la anchura  $\Delta$  de la minibanda primitiva, la coherencia espacial está limitada a unos pocos pozos, y eventualmente, para valores muy altos del campo eléctrico, se reducirá a un único pozo. En este caso, los pozos se comportan como si estuvieran completamente aislados, y la localización es completa.

Los efectos comentados han sido observados experimentalmente en superredes periódicas múltiples veces. La forma más conveniente de observación es a través de las propiedades del espectro de absorción y emisión de las superredes con un campo eléctrico aplicado, porque pone de manifiesto la separación entre niveles controlada por el campo. Desde el primer trabajo en el que se detectó claramente de manera experimental la existencia de la escalera de Wannier-Stark y la localización de Stark (Méndez *et al.*, 1988), los trabajos experimentales en este campo han proliferado mucho (Voisin *et al.*, 1988; Yamaguchi *et al.*, 1994; Morifuji *et al.*, 1994; Nagasawa *et al.*, 1996), y todos los efectos comentados aquí han sido establecidos de forma definitiva.

Sin embargo, los estudios de superredes con campo eléctrico aplicado han estado restringidos básicamente a secuencias periódicas, y los escasos trabajos realizados con sistemas cuasiperiódicos son poco concluyentes (Laruelle *et al.*, 1990). Por eso, uno de los propósitos fundamentales de este trabajo es extender los fenómenos asociados al campo eléctrico a las secuencias cuasiperiódicas. En capítulos posteriores, junto con las propiedades para  $\mathcal{E} = 0$ , estudiaremos por ejemplo la aparición de la escalera de Wannier-Stark o el comportamiento de la localización de Stark en dichos sistemas.

## Capítulo 2

# El determinante característico

### 2.1 Introducción

En esta memoria vamos a realizar un estudio de varios tipos de sistemas unidimensionales, centrándonos en algunas de sus más importantes características, tales como su espectro energético (discreto o ligado, continuo y, como veremos, cuasi-ligado), la densidad de estados y el coeficiente de transmisión. Dichas magnitudes pueden obtenerse de forma muy efectiva a través del llamado determinante característico, cuya potencia y versatilidad está fundamentada en su conexión directa con la función de Green del sistema total, como veremos más adelante. En este capítulo obtendremos dicho determinante, desarrollado a partir de su formulación más general, y lo particularizaremos para los tres modelos considerados aquí, es decir, potenciales  $\delta$ , modelo de fuerte ligadura y sistemas de tipo multicapa. Como la formulación para estos tres modelos se hará de forma genérica, se podrán construir y estudiar a voluntad sistemas periódicos y cuasiperiódicos escogiendo simplemente una ordenación adecuada de funciones  $\delta$ , de sus energías diagonales, y de la longitud y la energía característica de cada capa, que son las magnitudes que definen cada uno de los tres modelos respectivamente.

En la sección número dos, se describe la estructura del determinante característico, y como calcularlo, para el modelo de Kronig-Penney de funciones  $\delta$ . En la sección número tres, se adelanta, para el modelo de funciones  $\delta$ , parte del sentido

físico que posee el determinante característico, y que se verá con mayor profundidad en capítulos posteriores. En las secciones cuatro y cinco, se define y se calcula el determinante característico para el modelo de fuerte ligadura y el modelo de sistemas multicapa, respectivamente. Así, tendremos definido el determinante en todos los modelos que usaremos a lo largo de esta memoria.

## 2.2 El determinante para funciones $\delta$

Vamos a empezar obteniendo el determinante característico para un conjunto arbitrario de potenciales tipo  $\delta$ , que usaremos con frecuencia en capítulos posteriores. Supongamos un medio homogéneo unidimensional, con un potencial constituido por  $N$  funciones  $\delta$  de valor arbitrario  $V_i$ , y situadas en los puntos  $x_1, \dots, x_N$ , con  $x_1 < x_2 < \dots < x_N$ :

$$V(x) = \sum_{i=1}^N V_i \delta(x - x_i). \quad (2.1)$$

La función de Green para el electrón ha de verificar la ecuación de Schrödinger:

$$\left\{ -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) + \sum_{i=1}^N V_i \delta(x - x_i) - k^2 \right\} G(x, x'; k) = \delta(x - x') \quad (2.2)$$

ecuación en la que  $U(x)$  representa un potencial adicional al de las funciones  $\delta$  (campo eléctrico, campo magnético, potencial constante, etc) y donde hemos supuesto  $\hbar = 2m = 1$ , por lo que la energía será  $E = k^2$ . Este convenio en cuanto al valor de las constantes facilita la escritura de las expresiones, y, adicionalmente, también es conveniente para propósitos numéricos; debido a ello, lo mantendremos a lo largo de esta memoria. También de ahora en adelante omitiremos la dependencia explícita de la función de Green (FG) con respecto a la energía (o, equivalentemente, de  $k$ ), y escribiremos  $G(x, x')$  en lugar de  $G(x, x'; k)$ .

La FG solución de la ecuación (2.2) satisface la denominada ecuación de Dyson:

$$G(x, x') + \int dx'' G_0(x, x'') V(x'') G(x'', x') = G_0(x, x') \quad (2.3)$$

donde el rango de la integral se extiende a todo el espacio. En esta ecuación,  $G_0(x, x')$  es la FG del electrón en el potencial  $U(x)$ , es decir, en el potencial sin considerar las funciones tipo  $\delta$ . En general, se supone que esa función  $G_0(x, x')$ , que llamamos FG del medio sin perturbar, es conocida, y lo que queremos calcular es la FG del sistema total,  $G(x, x')$ . En el caso más simple, podríamos considerar que  $U(x) = 0$ , y por lo tanto  $G_0(x, x')$  no sería más que la FG para la partícula libre. Haciendo uso de las dos ecuaciones anteriores, vamos a deducir la expresión del determinante característico y su relación con la FG del sistema total. Para ello, empecemos por el caso más simple que consiste en calcular el caso de una única función  $\delta$ .

### 2.2.1 Efecto de la primera función $\delta$

Si aislamos el primer potencial  $\delta$ ,  $V_1\delta(x - x_1)$ , del resto del sistema, y no consideramos el efecto de los  $N - 1$  potenciales restantes en la ecuación (2.3), podemos reescribir ésta como:

$$G_1(x, x') + \int dx'' G_0(x, x'') V_1 \delta(x'' - x_1) G_1(x'', x') = G_0(x, x') \quad (2.4)$$

donde  $G_1(x, x')$  es la FG que recoge el efecto de la primera función  $\delta$ . La ecuación (2.4) se puede integrar fácilmente, y el resultado es:

$$G_1(x, x') + G(x, x_1) V_1 G_1(x_1, x') = G_0(x, x'). \quad (2.5)$$

Para determinar  $G_1(x, x')$  en función de  $G_0(x, x')$ , que es conocida, hemos de determinar primero  $G_1(x_1, x')$ . Para ello, no hay más que hacer  $x = x_1$  en la ecuación anterior y despejar:

$$G_1(x_1, x') = \frac{G_0(x_1, x')}{1 + V_1 G_0(x_1, x_1)}. \quad (2.6)$$

Sustituyendo  $G_1(x_1, x')$  en la ecuación (2.5), obtenemos  $G_1(x, x')$ :

$$G_1(x, x') = G_0(x, x') - \frac{V_1 G_0(x_1, x_1)}{1 + V_1 G_0(x_1, x_1)} \frac{G_0(x, x_1) G_0(x_1, x')}{G_0(x_1, x_1)} \quad (2.7)$$

que nos da la FG que contiene la información de la primera función  $\delta$ .

### 2.2.2 Efecto de la segunda función $\delta$

Continuando con el procedimiento expuesto en el caso anterior, vamos a introducir ahora los efectos de una segunda función  $\delta$ . Para ello, el papel que anteriormente realizaba  $G_0(x, x')$  ahora es desempeñado por  $G_1(x, x')$ , que incorpora la información de la primera  $\delta$ . Por lo tanto, la ecuación de Dyson podrá escribirse ahora como:

$$G_2(x, x') + \int dx'' G_1(x, x'') V_2 \delta(x'' - x_2) G_2(x'', x') = G_1(x, x') \quad (2.8)$$

ecuación que es fácilmente integrable y cuyo resultado es:

$$G_2(x, x') + G_1(x, x_2) V_2 G_2(x_2, x') = G_1(x, x'). \quad (2.9)$$

Si ahora en la ecuación anterior hacemos  $x = x_2$ , podemos calcular  $G_2(x_2, x')$  y sustituirla en la propia ecuación (2.9) para obtener lo que nos interesa,  $G_2(x, x')$ :

$$G_2(x, x') = G_1(x, x') - \frac{V_2 G_1(x_2, x_2)}{1 + V_2 G_1(x_2, x_2)} \frac{G_1(x, x_2) G_1(x_2, x')}{G_1(x_2, x_2)} \quad (2.10)$$

donde ahora  $G_2(x, x')$  es la FG que incorpora los efectos de las dos primeras funciones  $\delta$ . A través de la ecuación (2.7), es posible expresar  $G_2(x, x')$  como función de  $G_0(x, x')$ , que es la función inicialmente conocida. En particular, vamos a expresar el denominador  $1 + V_2 G_1(x_1, x_1)$  que aparece en (2.10) como función de  $G_0(x, x')$ :

$$\begin{aligned} 1 + V_2 G_1(x_2, x_2) &= 1 + V_2 \left[ G_0(x_2, x_2) - \frac{V_1 G_0(x_1, x_1)}{1 + V_1 G_0(x_1, x_1)} \frac{G_0(x_2, x_1) G_0(x_1, x_2)}{G_0(x_1, x_1)} \right] \\ &= (1 + V_1 G_0(x_1, x_1)) (1 + V_2 G_0(x_2, x_2)) - V_1 G_0(x_1, x_2) V_2 G_0(x_2, x_1). \end{aligned} \quad (2.11)$$

Esta expresión puede escribirse en forma de determinante:

$$\begin{vmatrix} 1 + V_1 G_0(x_1, x_1) & V_2 G_0(x_2, x_1) \\ V_1 G_0(x_1, x_2) & 1 + V_2 G_0(x_2, x_2) \end{vmatrix}. \quad (2.12)$$

### 2.2.3 Generalización a $N$ barreras $\delta$

Podemos continuar integrando la ecuación (2.8) para la tercera barrera de potencial, usando ahora  $G_2$  como la FG de partida. Repitiendo iterativamente este proceso, podemos incluir en la función de Green el efecto de las  $N$  barreras  $\delta$  de potencial, con lo que dispondríamos de la FG del sistema completo y de toda la información física que ella proporciona. El resultado final del proceso iterativo es una ecuación equivalente a (2.7) o (2.10), pero con  $G_N(x, x')$  en función de  $G_{N-1}(x, x')$ :

$$G_N(x, x') = G_{N-1}(x, x') - \frac{V_N G_{N-1}(x_N, x_N)}{1 + V_N G_{N-1}(x_N, x_N)} \frac{G_{N-1}(x, x_N) G_{N-1}(x_N, x')}{G_{N-1}(x_N, x_N)}. \quad (2.13)$$

Si ahora expresamos el denominador  $1 + V_N G_{N-1}(x_N, x_N)$  de (2.13) en función de  $G_0$ , la FG inicial conocida, es posible demostrar (Gasparian *et al.*, 1988; Gasparian, 1989), generalizando la ecuación (2.12), que puede escribirse en forma de determinante de una matriz que llamamos  $D_{ij}$ :

$$1 + V_N G_{N-1}(x_N, x_N) = \det(D_{ij}) \quad (2.14)$$

donde

$$D_{ij} = \delta_{ij} + V_i G_0(x_i, x_j) \quad (2.15)$$

ecuación en la que los índices  $i$  y  $j$  varían desde 1 hasta  $N$ , el número total de funciones tipo  $\delta$  del potencial.  $V_i$  es la amplitud de la  $i$ -ésima función  $\delta$  y  $x_i$  y  $x_j$  son los puntos donde están colocadas las  $i$ -ésima y  $j$ -ésima funciones  $\delta$  respectivamente. A la expresión  $D_N \equiv \det(D_{ij})$  se le conoce como determinante característico del sistema, en este caso para potenciales tipo  $\delta$ . Su significado físico e importancia práctica se verán en los capítulos siguientes.

### 2.2.4 Relación de recurrencia

A continuación vamos a deducir una forma sencilla de calcular el determinante característico a través de una relación de recurrencia, lo que facilitará enormemente

la computación numérica de esta magnitud, como veremos en capítulos posteriores. Dentro del modelo de funciones  $\delta$  que estamos considerando, la función de Green retardada del medio sin perturbar si consideramos  $U(x) = 0$  será la de la partícula libre (Economou, 1983):

$$G_0(x, x') = \frac{i}{2k} e^{ik|x-x'|}. \quad (2.16)$$

Podemos definir unas funciones auxiliares a partir de la ecuación anterior:

$$\lambda_n \equiv \exp\left(-\int_{x_n}^{x_{n+1}} \frac{dx}{G_0(x, x)}\right) = e^{2ik(x_{n+1}-x_n)}. \quad (2.17)$$

La forma de obtener la relación de recurrencia consiste en transformar la matriz  $(D_{ij})$  en tridiagonal. Si definimos  $G_0 \equiv G_0(x, x) = i/2k$  y  $\lambda_n^{1/2} = e^{ik(x_{n+1}-x_n)}$ , y tenemos en cuenta (2.16), podemos escribir las funciones  $G_0(x_i, x_j)$  que aparecen en  $D_{ij}$  en la forma:

$$G_0(x_i, x_j) = G_0 \prod_{l=i}^{j-1} \lambda_l^{1/2}. \quad (2.18)$$

Esto hace que la matriz  $(D_{ij})$  pueda escribirse como:

$$D_{ij} = \begin{cases} V_j G_0 \prod_{l=i}^{j-1} \lambda_l^{1/2} & j > i \\ V_j G_0 \prod_{l=j}^{i-1} \lambda_l^{1/2} & i > j \\ 1 + V_j G_0 & i = j \end{cases}. \quad (2.19)$$

Y por lo tanto, si escribimos explícitamente el determinante  $D_N$  tendremos:

$$\begin{vmatrix} 1 + V_1 G_0 & V_2 G_0 \lambda_1^{1/2} & \cdot & \cdot & V_N G_0 (\lambda_1 \dots \lambda_{N-1})^{1/2} \\ V_1 G_0 \lambda_1^{1/2} & 1 + V_2 G_0 & \cdot & \cdot & V_N G_0 (\lambda_2 \dots \lambda_{N-1})^{1/2} \\ V_1 G_0 (\lambda_1 \lambda_2)^{1/2} & V_2 G_0 \lambda_2^{1/2} & \cdot & \cdot & V_N G_0 (\lambda_3 \dots \lambda_{N-1})^{1/2} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ V_1 G_0 (\lambda_1 \dots \lambda_{N-1})^{1/2} & V_2 G_0 (\lambda_2 \dots \lambda_{N-1})^{1/2} & \cdot & \cdot & 1 + V_N G_0 \end{vmatrix}. \quad (2.20)$$

Observando la disposición de las filas concluimos que, con objeto de hacer nula la parte del determinante por debajo de la subdiagonal principal, conviene restar

a la fila  $n$ -ésima (a partir de  $n = 2$ ) la fila anterior multiplicada por  $\lambda_{n-1}^{1/2}$ . El resultado de esta primera operación queda de la siguiente forma:

$$\begin{vmatrix} 1 + V_1 G_0 & V_2 G_0 \lambda_1^{1/2} & \cdot & \cdot & V_N G_0 (\lambda_1 \dots \lambda_{N-1})^{1/2} \\ -\lambda_1^{1/2} & 1 + V_2 G_0 (1 - \lambda_1) & \cdot & \cdot & V_N G_0 (\lambda_2 \dots \lambda_{N-1})^{1/2} (1 - \lambda_1) \\ 0 & -\lambda_2^{1/2} & \cdot & \cdot & V_N G_0 (\lambda_3 \dots \lambda_{N-1})^{1/2} (1 - \lambda_2) \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & 1 + V_N G_0 (1 - \lambda_{N-1}) \end{vmatrix}. \quad (2.21)$$

Si ahora procedemos de forma parecida con las columnas, restando a la columna  $n$ -ésima la anterior multiplicada por  $(V_n/V_{n-1})\lambda_{n-1}^{1/2}$ , obtenemos definitivamente la matriz en forma tridiagonal.:

$$\begin{vmatrix} 1 + V_1 G_0 & -\frac{V_1}{V_2} \lambda_1^{1/2} & \cdot & \cdot & 0 \\ -\lambda_1^{1/2} & 1 + V_2 G_0 (1 - \lambda_1) + \lambda_1 \frac{V_2}{V_1} & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & -\lambda_2^{1/2} & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & -\frac{V_N}{V_{N-1}} \lambda_{N-1}^{1/2} \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & 1 + V_N G_0 (1 - \lambda_{N-1}) + \frac{\lambda_{N-1} V_N}{V_{N-1}} \end{vmatrix}. \quad (2.22)$$

Una vez conseguida la forma tridiagonal, es fácil la obtención de la relación de recurrencia. Si desarrollamos el determinante a partir de la última fila (o columna) obtenemos:

$$D_N = A_N D_{N-1} - B_N D_{N-2} \quad (2.23)$$

donde

$$B_N = \frac{V_N}{V_{N-1}} \lambda_{N-1} \quad (2.24)$$

$$A_N = 1 + V_N G_0 (1 - \lambda_{N-1}) + B_N, \quad n > 1 \quad (2.25)$$

con las siguientes condiciones iniciales:

$$D_{-1} = 0$$

$$D_0 = 1$$



$$A_1 = 1 + V_1 G_0. \quad (2.26)$$

Como puede verse, el determinante al final estará dado únicamente en función de  $G_0$  y los  $V_i$  y  $\lambda_i$ . Aunque estamos considerando que la función de Green del medio sin perturbar,  $G_0(x, x')$ , es la de la partícula libre ( $U(x) = 0$ ), en la expresión final del determinante no hemos utilizado este hecho para nada. Esto indica que el método se puede generalizar a cualquier potencial  $U(x) \neq 0$  sin más que conocer la  $G_0(x, x')$  para ese potencial. Como veremos en capítulos posteriores, esta propiedad nos permitirá introducir el campo eléctrico en el determinante característico. Si escribimos explícitamente el caso  $U(x) = 0$ , las ecuaciones (2.24) y (2.25) quedan de la siguiente manera:

$$B_N = \frac{V_N}{V_{N-1}} e^{2ik(x_N - x_{N-1})}$$

$$A_N = 1 + \frac{iV_N}{2k} (1 - e^{2ik(x_N - x_{N-1})}) + B_N. \quad (2.27)$$

### 2.3 Sentido físico del determinante

Como ya hemos adelantado en la introducción del presente capítulo, el método del determinante característico es muy valioso porque permite obtener muchas propiedades electrónicas relevantes del sistema correspondiente. En esta sección, vamos a adelantar parte del sentido físico del determinante, restringiéndonos al caso de funciones  $\delta$ . En concreto, y centrándonos en este modelo, vamos a estudiar como obtener el coeficiente de transmisión  $T$  a partir del determinante. Para ello, consideraremos el caso de una y dos barreras  $\delta$ , para después generalizar los resultados a sistemas con un número arbitrario  $N$  de barreras. En los dos primeros casos, calcularemos en primer lugar el coeficiente de transmisión mediante cálculo estándar de mecánica cuántica, y relacionaremos los resultados obtenidos a través de dicho cálculo con el determinante característico definido en la sección anterior, lo que nos permitirá generalizar la obtención de  $T$  a sistemas arbitrarios.

considerado onda transmitida. Aplicando la continuidad de la función de onda en  $x = 0$  y la discontinuidad de la primera derivada, dada por (2.29), obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones:

$$1 + r = t \quad (2.32)$$

$$ik(t + r - 1) = V_1 t. \quad (2.33)$$

Tras un pequeño cálculo, llegamos a:

$$t = \frac{1}{1 + i\frac{V}{2k}} \quad (2.34)$$

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V^2}{4k^2}} \quad (2.35)$$

$$r = -\frac{i\frac{V}{2k}}{1 + i\frac{V}{2k}} \quad (2.36)$$

$$R = \frac{\frac{V^2}{4k^2}}{1 + \frac{V^2}{4k^2}} \quad (2.37)$$

ecuaciones que nos proporcionan las amplitudes y coeficientes de transmisión y reflexión. La relación con el determinante característico, que en este caso es un determinante  $1 \times 1$  al tener una única función  $\delta$ , es clara. Basta con recordar del capítulo 2 que:

$$D_1 = 1 + VG_0 = 1 + (iV/2k) \quad (2.38)$$

para concluir directamente que

$$T = |D_1|^{-2}; \quad R = 1 - |D_1|^{-2}. \quad (2.39)$$

### 2.3.2 Sistema con dos barreras $\delta$

Para poder generalizar a un sistema con  $N$  barreras  $\delta$  de potencial, vamos a calcular ahora el coeficiente de transmisión de un sistema formado por dos barreras, y a relacionarlo con el determinante característico de orden 2,  $D_2$ .

Consideraremos ahora un potencial de la forma  $V(x) = V_1\delta(x) + V_2\delta(x - l)$ , es decir, dos barreras centradas en  $x = 0$  y  $x = l$ , respectivamente. Ahora, podremos considerar al eje real dividido en tres regiones, en las que la función de onda tomará la forma siguiente:

$$\Psi_1(x) = e^{ikx} + re^{-ikx}, \quad x < 0 \quad (2.40)$$

$$\Psi_2(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad 0 < x < l \quad (2.41)$$

$$\Psi_3(x) = te^{ikx}, \quad l < x \quad (2.42)$$

donde, como antes, hemos supuesto que el electrón incide por la izquierda, y que en la región de la derecha sólo existe onda transmitida, al no existir ninguna otra barrera a la derecha de  $x = l$ . Imponiendo de nuevo la continuidad de la función de onda en  $x = 0$  y  $x = l$ , y la discontinuidad de la primera derivada, dada por (2.29), en los mismos puntos, llegamos a:

$$1 + r = A + B \quad (2.43)$$

$$Ae^{ikl} + Be^{-ikl} = te^{ikl} \quad (2.44)$$

$$ik(A + r - B - 1) = V_1(A + B) \quad (2.45)$$

$$ik(te^{ikl} - Ae^{ikl} + Be^{-ikl}) = V_2te^{ikl}. \quad (2.46)$$

Tras un cálculo fácil pero algo laborioso, podemos resolver el sistema de ecuaciones para encontrar el valor de la amplitud de transmisión  $t$ , que al final es igual a:

$$t = \left( 1 + i\frac{V_1 + V_2}{2k} + \frac{V_1V_2}{4k^2} (e^{2ikl} - 1) \right)^{-1} \quad (2.47)$$

El valor de  $t$  dado por la ecuación anterior se puede escribir en forma de determinante. Si consideramos que la distancia entre las dos barreras,  $l$ , viene dada en general por  $l = (x_2 - x_1)$ , donde  $x_i$  es el punto donde está colocada la barrera de amplitud  $V_i$ , este determinante resulta ser el determinante característico de orden dos:

$$t = \left| \begin{array}{cc} 1 + i\frac{V_1}{2k} & i\frac{V_2}{2k}e^{ik(x_2-x_1)} \\ i\frac{V_1}{2k}e^{ik(x_2-x_1)} & 1 + i\frac{V_2}{2k} \end{array} \right|^{-1} = D_2^{-1} \quad (2.48)$$

Consideraremos ahora un potencial de la forma  $V(x) = V_1\delta(x) + V_2\delta(x - l)$ , es decir, dos barreras centradas en  $x = 0$  y  $x = l$ , respectivamente. Ahora, podremos considerar al eje real dividido en tres regiones, en las que la función de onda tomará la forma siguiente:

$$\Psi_1(x) = e^{ikx} + re^{-ikx}, \quad x < 0 \quad (2.40)$$

$$\Psi_2(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad 0 < x < l \quad (2.41)$$

$$\Psi_3(x) = te^{ikx}, \quad l < x \quad (2.42)$$

donde, como antes, hemos supuesto que el electrón incide por la izquierda, y que en la región de la derecha sólo existe onda transmitida, al no existir ninguna otra barrera a la derecha de  $x = l$ . Imponiendo de nuevo la continuidad de la función de onda en  $x = 0$  y  $x = l$ , y la discontinuidad de la primera derivada, dada por (2.29), en los mismos puntos, llegamos a:

$$1 + r = A + B \quad (2.43)$$

$$Ae^{ikl} + Be^{-ikl} = te^{ikl} \quad (2.44)$$

$$ik(A + r - B - 1) = V_1(A + B) \quad (2.45)$$

$$ik(te^{ikl} - Ae^{ikl} + Be^{-ikl}) = V_2te^{ikl}. \quad (2.46)$$

Tras un cálculo fácil pero algo laborioso, podemos resolver el sistema de ecuaciones para encontrar el valor de la amplitud de transmisión  $t$ , que al final es igual a:

$$t = \left(1 + i\frac{V_1 + V_2}{2k} + \frac{V_1V_2}{4k^2} (e^{2ikl} - 1)\right)^{-1} \quad (2.47)$$

El valor de  $t$  dado por la ecuación anterior se puede escribir en forma de determinante. Si consideramos que la distancia entre las dos barreras,  $l$ , viene dada en general por  $l = (x_2 - x_1)$ , donde  $x_i$  es el punto donde está colocada la barrera de amplitud  $V_i$ , este determinante resulta ser el determinante característico de orden dos:

$$t = \left| \begin{array}{cc} 1 + i\frac{V_1}{2k} & i\frac{V_2}{2k}e^{ik(x_2-x_1)} \\ i\frac{V_1}{2k}e^{ik(x_2-x_1)} & 1 + i\frac{V_2}{2k} \end{array} \right|^{-1} = D_2^{-1} \quad (2.48)$$

Por lo tanto, es evidente que los coeficientes de reflexión y transmisión para dos barreras  $\delta$  vienen dados por

$$T_2 = |t|^2 = |D_2|^{-2}, \quad R_2 = 1 - |D_2|^{-2}. \quad (2.49)$$

### 2.3.3 Generalización: Sistema con $N$ barreras $\delta$

Una demostración rigurosa de la ecuación (2.49) para un sistema de  $N$  barreras  $\delta$  es demasiado engorrosa como para ser incluida aquí (Gasparian *et al.*, 1988; Gasparian, 1989; Aronov, Gasparian & Gummich, 1991). Resulta posible generalizar los valores de los coeficientes de reflexión y transmisión dados de forma tan compacta por las ecuaciones (2.39) y (2.49). De hecho, si se observa la manera en la que se obtuvo el determinante característico en el capítulo 2 utilizando el formalismo de las funciones de Green, se puede concluir, como generalización a los dos casos simples previos, que en general para un sistema con  $N$  barreras  $\delta$  tenemos que:

$$T_N = |D_N|^{-2}, \quad R_N = 1 - |D_N|^{-2}. \quad (2.50)$$

Aunque en esta breve sección nos hemos limitado a adelantar parte del sentido físico del determinante característico, centrándonos en el coeficiente de transmisión  $T$ , veremos en capítulos posteriores como también es posible obtener el espectro discreto, la densidad de estados, estudiar la localización, e incluir el efecto del campo eléctrico.

## 2.4 El determinante para el modelo de fuerte ligadura

El modelo de fuerte ligadura es físicamente equivalente al modelo de Kronig-Penney de funciones  $\delta$ , porque el papel de la energías diagonales en este modelo es idéntico al de la amplitud de las funciones  $\delta$ , y el parámetro de interacción entre vecinos más próximos actúa de la misma forma que la distancia entre barreras  $\delta$ .

Por lo tanto, el cálculo detallado visto anteriormente es extensible sin problemas a este caso, y también será posible obtener una relación de recurrencia para el cálculo del determinante. La diferencia entre ambos casos radica en que la función de Green del medio sin perturbar es diferente. En el modelo de fuerte ligadura, el medio sin perturbar consiste en considerar constantes las energías de la diagonal y también constantes las energías de transferencia entre vecinos más próximos en una cadena infinita. La perturbación viene dada por la variación de un número finito de energías diagonales con respecto al valor constante de la energía diagonal del medio sin perturbar. La función de Green del medio sin perturbar para este modelo resulta ser, en el caso unidimensional que estamos considerando, (Economou, 1983) igual a:

$$G_0(x_n, x_m) = \frac{\mp i}{\sqrt{4V^2 - (E - \varepsilon_0)^2}} \left[ \frac{E - \varepsilon_0}{2V} \mp i \sqrt{1 - \left( \frac{E - \varepsilon_0}{2V} \right)^2} \right]^{|x_n - x_m|} \quad (2.51)$$

donde  $V$  es el término de transferencia entre vecinos más próximos,  $\varepsilon_0$  es el valor de las energías diagonales (todas iguales en el sistema infinito) y  $E$  es la energía, que en este modelo verifica la siguiente ecuación:

$$\varepsilon_0 - 2V \leq E \leq \varepsilon_0 + 2V. \quad (2.52)$$

En este caso, la relación de recurrencia es formalmente igual a (2.23), si bien  $A_N$  y  $B_N$  están ahora definidos de la siguiente forma:

$$B_N = \frac{\varepsilon_N}{\varepsilon_{N-1}} \left( x \mp i \sqrt{1 - x^2} \right)^2$$

$$A_N = 1 - \varepsilon_N G_0 \left[ 1 - \left( x \mp i \sqrt{1 - x^2} \right)^2 \right] + B_N, \quad n > 1 \quad (2.53)$$

y donde  $x = (E - \varepsilon_0)/2V$  y  $G_0 \equiv G_0(x, x) = \mp i / \sqrt{4V^2 - (E - \varepsilon_0)^2}$ . Las condiciones iniciales son las siguientes:

$$D_{-1} = 0$$

$$D_0 = 1$$

$$A_1 = 1 - \varepsilon_1 G_0. \quad (2.54)$$

Como ocurría en el caso de funciones tipo  $\delta$ ,  $\varepsilon_i$  es la  $i$ -ésima energía del conjunto total finito formado por  $N$  energías, que reemplaza a  $\varepsilon_0$  como energía diagonal en el modelo.

## 2.5 El determinante para sistemas multicapa

Consideremos que nuestro sistema puede ser dividido en  $N - 1$  capas numeradas  $n = 1, \dots, N - 1$ , colocadas entre dos medios semiinfinitos. El significado de la palabra 'capa', en el caso pseudounidimensional que nos ocupa, ha de ser entendido en forma general como un segmento de propiedades homogéneas, limitado por dos puntos que actúan como contornos y límites entre capas. Los límites de la capa  $n$ -ésima están dados por los puntos  $x_n$  y  $x_{n+1}$ , respectivamente. Supongamos que conocemos la función de Green (FG) de cada capa, es decir, la FG del medio que constituye, por ejemplo, la capa  $n$ -ésima, pero en el caso en que este medio es único e infinito. Llamemos a esa FG  $G_n^{(0)}(x, x')$ . El objetivo es calcular la FG final que incorpora los efectos de las múltiples reflexiones y transmisiones entre capas. Para este propósito, usamos un método matemático exacto y no perturbativo, basado originalmente en el método de la FG superficial, propuesto por García-Moliner y Rubio en 1969 y por Velycký y Bartôs en 1971 para estudiar el espectro energético de electrones en sistemas formados por muchas intercaras entre diferentes cristales. A partir de estos trabajos, se formalizó completamente el método de la función de Green superficial (SFGM), tanto para sistemas discretos (García-Moliner & Velasco, 1986) como para sistemas continuos (García-Moliner & Velasco, 1987). El método SFGM puede verse detalladamente en el texto de García-Moliner y Velasco de 1992. El método del determinante característico, sin embargo, utiliza un formalismo ligeramente diferente al método SFGM, que detallamos a continuación para sistemas multicapa.

El caso de los sistemas multicapa puede ser entendido como el más general

posible, porque en él, se admite la existencia en nuestro sistema de un determinado número de medios o capas diferentes separados por discontinuidades que actúan de intercaras. Los medios a ambos lados de ese límite pueden ser totalmente diferentes y vendrán caracterizados por su FG, como explicamos a continuación. Puede verse que es una generalización del caso de funciones  $\delta$ , porque si bien la función  $\delta$  ocasiona una discontinuidad en el potencial (que en el caso que nos ocupa equivale a la intercara entre dos medios), a ambos lados de la función  $\delta$  teníamos el mismo medio, que estaba caracterizado por  $G_0$ . En este caso, a ambos lados de la intercara podemos tener medios completamente distintos.

La idea general del método consiste, de manera muy parecida a como hicimos con funciones tipo  $\delta$ , en evaluar en primer lugar el efecto de una única discontinuidad entre dos medios. Posteriormente se resuelve el caso de dos intercaras usando la FG calculada anteriormente para una única intercara. El problema se resuelve iterativamente para  $n + 1$  intercaras, considerando que se conoce la solución para  $n$ . La expresión final para la FG y sus integrales fue obtenida en 1991 por Aronov, Gasparian y Gummich en términos de un determinante característico,  $D_N$ , correspondiente a una matriz  $N \times N$ , cuyos elementos dependen de las  $N$  FG conocidas de cada una de las capas,  $G_n^{(0)}(x, x')$ . A continuación vamos a detallar cómo se calcularía el caso más simple en el que sólo hay dos capas semiinfinitas, y por lo tanto, una única discontinuidad.

### 2.5.1 Ejemplo: una única intercara

Consideremos dos medios semiinfinitos cuyo contacto está en el punto  $x_1$ . A la izquierda del contacto ( $x < x_1$ ), la energía potencial del electrón está dada por  $V_0(x)$ , y a la derecha ( $x > x_1$ ), por  $V_1(x)$ . Supongamos, como dijimos anteriormente, que la función de Green unidimensional del electrón en cada uno de los dos medios cuando estos son infinitos es conocida, y viene dada por  $G_n^{(0)}(x, x'; E)$ . El subíndice  $n$  en este caso indica  $n = 0, 1$ , y se ha escrito explícitamente la dependencia de la FG con la energía,  $E$ . El superíndice (en el caso anterior, es 0) indica



con cuantas discontinuidades está calculada la FG. Cada FG satisfará la ecuación de Schrödinger:

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_n(x) - E\right) G_n^{(0)}(x, x'; E) = \delta(x - x'). \quad (2.55)$$

Cuando ponemos a los dos medios en contacto, la FG total puede escribirse a partir de las  $G_n^{(0)}$  en la forma:

$$G_0^{(1)}(x, x') = G_0^{(0)}(x, x') - r_{01} \frac{G_0^{(0)}(x, x_1) G_0^{(0)}(x_1, x')}{G_0^{(0)}(x_1, x_1)} \quad x, x' \leq x_1 \quad (2.56)$$

$$G_1^{(1)}(x, x') = G_1^{(0)}(x, x') - r_{10} \frac{G_1^{(0)}(x, x_1) G_1^{(0)}(x_1, x')}{G_1^{(0)}(x_1, x_1)} \quad x, x' \geq x_1. \quad (2.57)$$

En estas ecuaciones,  $r_{01}(r_{10})$  es, por definición, la amplitud de reflexión del electrón propagándose del medio 0 al 1 (del 1 al 0). Los módulos al cuadrado de estas magnitudes corresponden a los coeficientes de reflexión. Para determinar las amplitudes de reflexión, basta con imponer las condiciones de contorno en  $x_1$ . Dichas condiciones son la continuidad de la FG y la igualdad de corriente en  $x = x_1$ :

$$G_0^{(1)}(x_1, x_1) = G_1^{(1)}(x_1, x_1) \quad (2.58)$$

$$\frac{\partial (G_0^{(1)}(x_1, x_1) - G_1^{(1)}(x_1, x_1))}{\partial x_1} = 0. \quad (2.59)$$

Si adicionalmente, como es nuestro caso, consideramos medios homogéneos, se tiene además que:

$$\frac{\partial G_n^{(0)}(x, x)}{\partial x} = 0. \quad (2.60)$$

Utilizando las ecuaciones (2.56) y (2.57) en las condiciones de contorno (2.58) y (2.59) y aplicando (2.60), llegamos a la siguiente expresión para las amplitudes de reflexión:

$$r_{01} = -r_{10} = \frac{G_0^{(0)} - G_1^{(0)}}{G_0^{(0)} + G_1^{(0)}} \quad (2.61)$$

donde hemos definido  $G_n^{(0)}(x_1, x_1) \equiv G_n^{(0)}$ .

### 2.5.2 Efecto de dos intercaras, generalización y relación de recurrencia

Hemos visto anteriormente el procedimiento seguido para incluir una intercara entre dos medios. El resultado ha sido poder calcular las amplitudes de reflexión  $r_{01}$  y  $r_{10}$  en función únicamente de las funciones de Green conocidas  $G_0^{(0)}$  y  $G_1^{(0)}$ . Para añadir un nuevo medio, con contorno en el punto  $x_2$ , donde consideraremos que  $x_1 < x_2$ , supondremos conocida  $G_2^{(0)}(x, x')$ . Ahora, la FG dada por las ecuaciones (2.56) y (2.57) hará el papel de una función de Green inicial a la izquierda de  $x_2$ , de la misma forma que anteriormente lo era  $G_0^{(0)}(x, x')$  a la izquierda de  $x_1$ . Así, análogamente a las ecuaciones (2.56) y (2.57), ahora podremos escribir:

$$G_2^{(2)}(x, x') = G_2^{(0)}(x, x') - R_{21}^{(2)} \frac{G_2^{(0)}(x, x_2)G_2^{(0)}(x_2, x')}{G_2^{(0)}(x_2, x_2)} \quad x, x' \geq x_2 \quad (2.62)$$

$$G_1^{(2)}(x, x') = G_1^{(1)}(x, x') - R_{12}^{(2)} \frac{G_1^{(1)}(x, x_2)G_1^{(1)}(x_2, x')}{G_1^{(1)}(x_1, x_1)} \quad x_1 \leq x, x' \leq x_2. \quad (2.63)$$

La magnitud  $R_{nm}^{(l)}$  significa, en general, la amplitud de reflexión cuando la onda se propaga del medio  $n$  al  $m$  con  $l$  contornos en la muestra. Dejaremos la notación  $r_{nm}$  para la amplitud de reflexión entre los medios  $n$  y  $m$  cuando estos dos medios son únicos en la muestra, y vendrán dados en general por una ecuación análoga a (2.61). Imponiendo condiciones de contorno idénticas al caso de una única intercara, pero ahora en  $x = x_2$ , obtenemos

$$R_{21}^{(2)} = \frac{r_{21} + \lambda_{12}r_{10}(1 - r_{12} - r_{21})}{1 - \lambda_{12}r_{10}r_{12}} \quad (2.64)$$

y

$$R_{12}^{(2)} = \frac{r_{12}(1 - \lambda_{12} - r_{10})}{1 - \lambda_{12}r_{10}r_{12}} \quad (2.65)$$

ecuaciones en las que se ha definido la función auxiliar  $\lambda_{12}$  de la forma:

$$\lambda_{12} = \lambda_{21} = \frac{G_1^{(0)}(x_1, x_2)G_1^{(0)}(x_2, x_1)}{G_1^{(0)}(x_1, x_1)G_1^{(0)}(x_2, x_2)} = \exp\left(-\int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{G_1^{(0)}(x, x)}\right). \quad (2.66)$$

El coeficiente más interesante es el expresado por la ecuación (2.64), porque da el valor de la amplitud de reflexión de un electrón incidiendo sobre el sistema desde la derecha. Hay que destacar que en esa amplitud de reflexión está incluido el efecto de las dos discontinuidades del sistema, y por lo tanto, nos da la reflexión del sistema total. El otro coeficiente interesante sería el que podríamos llamar  $R_{01}^{(2)}$ , y que nos daría la amplitud de reflexión de todo el sistema (con la información de las dos intercaras ya incluida) cuando el electrón incide por la izquierda. Para obtener ese otro coeficiente, no hay más que construir la FG análogamente a como se hizo en (2.62) y (2.63), pero en la región  $x, x' \leq x_1$ :

$$G_0^{(2)}(x, x') = G_0(x, x') - R_{01}^{(2)} \frac{G_0^{(0)}(x, x_1)G_0^{(0)}(x_1, x')}{G_0^{(0)}(x_1, x_1)} \quad x, x' \leq x_1. \quad (2.67)$$

Imponiendo las condiciones de contorno (2.58) y (2.59) a las FG de (2.67) y (2.63) en  $x = x_1$ , obtenemos:

$$R_{01}^{(2)} = \frac{r_{01} + \lambda_{12}(1 - r_{01} - r_{10})r_{12}}{1 - \lambda_{12}r_{10}r_{12}}. \quad (2.68)$$

Conviene hacer notar que el denominador  $1 - \lambda_{12}r_{10}r_{12}$  de  $R_{21}^{(2)}$  y  $R_{01}^{(2)}$  es el mismo, y además, puede escribirse en forma de determinante, al que vamos a llamar  $D_2^0$ :

$$D_2^0 = \begin{vmatrix} 1 & r_{12}\lambda_{12}^{1/2} \\ r_{10}\lambda_{12}^{1/2} & 1 \end{vmatrix} \quad (2.69)$$

determinante que, tanto a través de los  $r$  como de los  $\lambda$ , sólo depende de las conocidas  $G_i^{(0)}$ ,  $i = 0, 1, 2$ .

A continuación, podríamos repetir todo el proceso una y otra vez, añadiendo una tercera, cuarta, ...,  $j$ -ésima, ..., hasta incluir la  $N$ -ésima discontinuidad. En todos los casos, las correspondientes amplitudes de reflexión del sistema total si se incide por la izquierda ( $R_{01}^{(j)}$ ) y por la derecha ( $R_{j,j-1}^{(j)}$ ) pueden escribirse en forma de cociente con el mismo denominador. Tal denominador, generalizando el caso de dos discontinuidades, también puede escribirse en forma de determinante, con número de filas y columnas igual al número de intercaras incluidas en la FG.

Cuando hayamos incluido, por tanto, las  $N$  intercaras del sistema, tendremos el determinante de una matriz  $(D_{ij}^0)$  de orden  $N \times N$ , al que llamamos determinante característico del sistema,  $D_N^0$ . Los elementos de la matriz están dados por:

$$\begin{aligned} D_{ij}^0 &= \delta_{ij} + (1 - \delta_{ij})r_{j,j-1}\lambda_{ij}^{1/2} & i \geq j \\ D_{ij}^0 &= \delta_{ij} + (1 - \delta_{ij})r_{j-1,j}\lambda_{ij}^{1/2} & i \leq j. \end{aligned} \quad (2.70)$$

Realizando un procedimiento análogo (Aronov, Gasparian y Gummich, 1991a y 1991b) al que se hizo en el caso de funciones  $\delta$ , es posible encontrar una relación de recurrencia que permita calcular  $D_N^0$  con facilidad. La relación de recurrencia que resulta es formalmente idéntica a (2.23):

$$D_N^0 = A_N D_{N-1}^0 - B_N D_{N-2}^0 \quad (2.71)$$

donde

$$\begin{aligned} A_1 &= 1 \\ A_N &= 1 + \lambda_{N-1,N} \frac{r_{N-1,N}}{r_{N-2,N-1}} (1 - r_{N-2,N-1} - r_{N-1,N-2}) \quad N > 1 \\ B_N &= \lambda_{N-1,N} \frac{r_{N-1,N}}{r_{N-2,N-1}} (1 - r_{N-2,N-1})(1 - r_{N-1,N-2}). \end{aligned} \quad (2.72)$$

Conviene destacar que la expresión final del determinante estará dada únicamente en función de los  $r$  y los  $\lambda$ , magnitudes que dependen exclusivamente de las  $N$  FG correspondientes a cada uno de los medios que forman el sistema y que se suponen conocidas. Las ecuaciones (2.72) están obtenidas para un caso general. Si, como dijimos anteriormente, en nuestro caso suponemos que todos los medios son homogéneos, la condición que impone la ecuación (2.60) implica que en todos los casos  $r_{i,i+1} = -r_{i+1,i}$ . Por lo tanto, podemos introducir esas simplificaciones en las ecuaciones (2.72) para obtener finalmente:

$$\begin{aligned} A_N &= 1 + \lambda_{N-1,N} \frac{r_{N-1,N}}{r_{N-2,N-1}} \quad N > 1 \\ B_N &= \lambda_{N-1,N} \frac{r_{N-1,N}}{r_{N-2,N-1}} (1 - r_{N-2,N-1}^2). \end{aligned} \quad (2.73)$$

### 2.5.3 Sistemas multicapa de potencial constante

Aunque el formalismo desarrollado en el apartado anterior puede parecer complicado, en realidad ello se debe a que posee una gran generalidad y puede aplicarse a muy diferentes tipos de sistemas. En este apartado, vamos a introducir de manera breve los sistemas multicapa que vamos a utilizar en esta memoria, y que son de tipo muy sencillo: nosotros consideraremos sistemas formados por múltiples capas, caracterizadas cada una de ellas por su longitud y por el valor de la energía potencial en su interior, que será constante. Así, la capa  $j$ -ésima está perfectamente definida a través de su longitud,  $l_j$  y del valor de la energía potencial en ella,  $V_j$ . Por supuesto, consideramos que a la izquierda de la primera discontinuidad y a la derecha de la última tenemos dos medios semiinfinitos, por lo que éstos sólo están caracterizados por el valor de su energía potencial.

Para poder aplicar el método de los sistemas multicapa visto anteriormente, solamente es necesaria conocer la función de Green de cada uno de los medios cuando son infinitos. Para un medio infinito en el que la energía potencial es constante y vale  $V_j$ , la FG está definida por:

$$G_j^{(0)}(x, x') = \frac{i}{2\sqrt{E - V_j}} e^{i\sqrt{E - V_j}|x - x'|} \quad (2.74)$$

que, como puede apreciarse fácilmente, no es más que la generalización directa del caso de la partícula libre dado por (2.16). Definidas, por tanto, las funciones de Green de todas las capas del sistema, a partir de ellas podemos calcular todas las amplitudes de reflexión  $r_{j,j+1}$  necesarias para obtener los  $A_N$  y  $B_N$  de la relación de recurrencia (2.71). Para ello, basta con recordar que

$$r_{j,j+1} = \frac{G_j^{(0)} - G_{j+1}^{(0)}}{G_j^{(0)} + G_{j+1}^{(0)}} \quad (2.75)$$

donde, por definición,  $G_j^{(0)} \equiv G_j^{(0)}(x, x) = i/2\sqrt{E - V_j}$ . Las otras magnitudes que hay que determinar para poder calcular la relación de recurrencia son las funciones  $\lambda_{j,j+1}$ . Recordando su definición dada en (2.66), podemos utilizar la longitud de

la capa  $j$ -ésima dada por  $l_j$  y el hecho de que  $G_j^{(0)}$  no depende de  $x$  para integrar con respecto a  $x$  y llegar a:

$$\lambda_{j,j+1} = \exp\left(-\frac{l_j}{G_j^{(0)}}\right). \quad (2.76)$$

Así, con las ecuaciones (2.75) y (2.76) tenemos perfectamente definidas todas las funciones necesarias para el cálculo del determinante usando la relación de recurrencia para este modelo.

## 2.6 Comentario

En este capítulo, hemos obtenido la forma del determinante característico y el procedimiento para calcularlo para los tres modelos que emplearemos a lo largo de esta memoria. Aunque nuestro propósito aquí se limita a dar su estructura formal, las interesantes propiedades del determinante a la hora de determinar magnitudes físicas de interés serán puestas de relevancia en capítulos posteriores.

## Capítulo 3

# El espectro energético

### 3.1 Introducción

A partir del presente capítulo, completada la introducción y la descripción del método del determinante característico, vamos a utilizar una estructura de presentación de contenidos que se repetirá en capítulos futuros. En una primera parte, estudiaremos una determinada magnitud para sistemas sin campo eléctrico aplicado. En la segunda parte del capítulo, abordaremos los efectos que produce la aplicación de un campo eléctrico en el sistema sobre la magnitud correspondiente. De esta manera, proporcionaremos una visión de conjunto de cada una de las propiedades electrónicas consideradas en esta memoria.

En el capítulo dos, definimos el determinante característico y también proporcionamos los métodos de calcularlo para los diferentes modelos que usaremos a lo largo de este trabajo. Sin embargo, hasta ahora no hemos justificado del todo el interés que tiene, porque no hemos aclarado por completo su significado físico. Debido a la íntima conexión entre el determinante característico y la función de Green del sistema completo, podemos obtener a través de él una gran cantidad de información sobre las propiedades electrónicas del sistema. A lo largo de este capítulo, y como ya anticipamos en el capítulo anterior, veremos como es posible obtener de manera directa a partir del determinante característico el espectro discreto de un sistema. En capítulos posteriores, abordaremos también la obtención

del coeficiente de transmisión y de la densidad de estados electrónicos. Todas ellas son magnitudes fundamentales en la física del estado sólido. Además, el uso del determinante característico como herramienta para resolver la ecuación de Schrödinger puede servirnos de manera indirecta para el estudio de problemas como el de la localización de las funciones de onda, que es quizá la propiedad más fundamental de los electrones en los sólidos desordenados. Todas estas magnitudes y sus propiedades serán analizadas en sistemas con potenciales periódicos y cuasiperiódicos. Incluso incluiremos como referencia el comportamiento de las mismas en sólidos amorfos, lo que nos proporcionará un marco de referencia para poder establecer comparaciones. Así mismo, el determinante característico nos posibilitará el estudio de la aproximación de la masa efectiva en el método de la función envolvente, que será desarrollado en el último capítulo de esta memoria. Al margen de todas estas magnitudes, las virtudes que presenta el determinante característico para el cálculo numérico hace que se utilice con frecuencia en el estudio de otras propiedades físicas, como los estudios de tiempos de túnel (Gasparian *et al.*, 1997; Ruiz *et al.*, 1997).

En este capítulo, vamos a abordar el estudio del espectro energético en las secuencias periódicas y cuasiperiódicas. En esta introducción, comentaremos algunas de las características generales del espectro. A continuación, calcularemos condiciones que limitan el número de estados ligados incluidos en el espectro discreto, y lo caracterizaremos a través de sus propiedades fractales y de su estadística de niveles. Posteriormente, y como hemos comentado más arriba, analizaremos cómo se ven afectadas todas las propiedades del espectro cuando aplicamos un campo eléctrico uniforme en el sistema.

Una de las principales características de los hamiltonianos en mecánica cuántica es la existencia o no de espectro discreto. Los espectros discretos implican la existencia de estados ligados en el sistema, es decir, estados para los que la probabilidad de encontrar al electrón decae de forma aproximadamente exponencial al alejarnos de una región 'central' determinada (excepto en casos similares a un pozo infinito,



en los que la función de onda no decae, sino que es estrictamente nula en el exterior del pozo), o, en otras palabras, la función de onda correspondiente puede normalizarse a la unidad.

Dentro de los modelos que estamos considerando, el modelo de fuerte ligadura (si es finito) ya nos proporciona el espectro discreto dentro de una banda, aunque ello se debe a las propias limitaciones del hamiltoniano, pues éste es discreto por definición. Mucho más interesante resulta en este caso el modelo de funciones tipo  $\delta$ , ya que estamos tratando directamente con un hamiltoniano continuo, y sus estados ligados, si existen, formarán un verdadero espectro discreto. Dentro de este capítulo, nos proponemos estudiar las propiedades del espectro discreto para sistemas periódicos y cuasiperiódicos.

Si bien el espectro de sistemas periódicos es sobradamente conocido en cuanto a sus características generales, aquí estudiaremos ciertas propiedades interesantes no tan conocidas que aparecen al usar el modelo de funciones  $\delta$ . Estas propiedades, que podremos incluso estudiar analíticamente, se basan en la interacción que aparece entre pozos  $\delta$  cuando vamos agrandando el sistema a base de incorporar más y más pozos para formar una red.

En cuanto a los sistemas cuasiperiódicos, la característica que resalta fuertemente de su espectro es su estructura fractal. Para analizar este tipo de propiedad, usaremos el modelo de fuerte ligadura, porque nos brinda la posibilidad de obtener el espectro de grandes sistemas mediante la diagonalización directa de la matriz del hamiltoniano. Al disponer de un gran número de estados, podremos realizar estadísticas para caracterizar las estructuras fractales a través de la dimensión fractal, y también podremos calcular la distribución de niveles para vecinos más próximos. Esto posibilitará una comparación directa con las correspondientes distribuciones de niveles de sólidos cristalinos y desordenados, con lo que podremos cuantificar el grado de 'desorden' que produce la no periodicidad en los cuasicristales.

En el caso de sistemas con campo eléctrico aplicado, el espectro discreto es un

poco 'especial', y a los estados correspondientes los denominaremos cuasiestados. Por ejemplo, en el caso de un sistema periódico, si éste es infinito, la localización de Stark será completa para campos suficientemente altos. La función de onda correspondiente a un electrón se podrá normalizar a la unidad, porque el estado acaba localizándose en un único pozo, y las dos partes laterales de la función de onda tienden a cero en el infinito (Méndez *et al.*, 1993). Ello se debe a que el número de pozos del sistema es también infinito, y ello da lugar a una interferencia destructiva producida por las infinitas reflexiones y transmisiones en las barreras y pozos que localiza al electrón por completo. Sin embargo, en un sistema infinito (el campo eléctrico afecta a una región infinita), pero en el que el número de pozos es finito (serán los sistemas que estudiaremos aquí de manera exacta), la función de onda no es normalizable porque presenta una cola oscilante que no es integrable. En este caso, lo que ocurre es que el electrón posee un tiempo de escape del pozo (vida media). Cuando hablemos de localización para este sistema, habrá que sobreentender que lo hacemos para tiempos inferiores a dicha vida media. Además, también estudiaremos un modelo aproximado de sistema finito con campo eléctrico aplicado en el que podremos estudiar verdaderos estados ligados cuya función de onda es normalizable. En dicho modelo, sí podemos considerar a las funciones de onda como estacionarias. En este capítulo, estudiaremos las propiedades espectrales de este modelo, y en el capítulo quinto lo usaremos para el estudio de la localización inducida por el campo.

### 3.2 Relación del espectro con el determinante característico

Antes de pasar a estudiar las propiedades del espectro discreto, vamos a explicar su relación con el determinante característico, y, por lo tanto, como podemos obtener el primero a partir del segundo. La forma de hacerlo es prácticamente directa si se relaciona el espectro discreto de un cierto operador con su función de Green.

La función de Green para un operador en general, o para el hamiltoniano en particular, puede escribirse formalmente (Economou, 1983) como:

$$G(x, x') = \sum_n \frac{\psi_n^*(x)\psi_n(x')}{E - E_n} + \int dn \frac{\psi_n^*(x)\psi_n(x')}{E - E_n} \quad (3.1)$$

donde el sumatorio se realiza sobre el espectro discreto (si existe) y la integral sobre el espectro continuo (si existe), y donde  $E_n$  y  $\psi_n(x)$  son los autovalores y los autovectores del operador correspondiente. De esta forma podemos concluir que  $G$  posee polos simples en los autovalores del espectro discreto del hamiltoniano. El recíproco es también cierto: los polos de  $G$  constituyen el espectro discreto del hamiltoniano.

Conviene ahora recordar que, cuando en el capítulo 2 introducíamos el determinante característico, lo hacíamos diciendo que era el denominador de la función de Green del sistema completo. En el caso en el que considerábamos  $N$  funciones  $\delta$  (el modelo de fuerte ligadura es análogo, cambiando las amplitudes de las funciones  $\delta$  por las energías diagonales) teníamos que:

$$G_N(x, x') = G_{N-1}(x, x') - \frac{V_N G_{N-1}(x_N, x_N)}{1 + V_N G_{N-1}(x_N, x_N)} \frac{G_{N-1}(x, x_N) G_{N-1}(x_N, x')}{G_{N-1}(x_N, x_N)} \quad (3.2)$$

donde  $G_N(x, x')$  era la función de Green que incorporaba los efectos de las  $N$  funciones  $\delta$ . El denominador de la anterior ecuación  $1 + V_N G_{N-1}(x_N, x_N)$  se podía escribir en forma de determinante, y a ese determinante lo llamábamos el determinante característico. Para el modelo multicapa, cuando incorporábamos  $N$  interfaces entre diferentes medios, obteníamos que la función de Green que incorporaba los efectos de las múltiples reflexiones y transmisiones era de la forma:

$$G_N^{(N)}(x, x') = G_N^{(0)}(x, x') - R_{N,N-1}^{(N)} \frac{G_N^{(0)}(x, x_N) G_N^{(0)}(x_N, x')}{G_N^{(0)}(x_N, x_N)} \quad (3.3)$$

donde la magnitud  $R_{N,N-1}^{(N)}$  era la amplitud de reflexión de un electrón incidente por la derecha sobre el sistema con el efecto incluido de todas las interfaces. También demostrábamos que el denominador del cociente que aparece en (3.3) se podía

escribir en forma de determinante, y lo definíamos como el determinante característico para los sistemas multicapa.

Vimos en el capítulo 2 que el determinante característico se corresponde con el denominador de la función de Green del sistema completo. Los polos de dicha función de Green no serán otra cosa que los ceros del correspondiente determinante característico. De acuerdo, por tanto, con la condición de equivalencia enunciada anteriormente entre polos de la función de Green y espectro discreto, éste podrá calcularse directamente a través de los ceros del determinante característico resolviendo la ecuación

$$D_N = 0. \quad (3.4)$$

Teniendo en cuenta que, en general, el determinante es una función compleja de la energía, el algoritmo para el cálculo numérico de sus ceros es sencillo. Se calcula el determinante en una cierta región energética a través de las relaciones de recurrencia desarrolladas en el capítulo 2 utilizando un muestreo muy fino. Una vez hecho esto, no hay más que buscar cambios de signo simultáneos en las partes real e imaginaria del determinante. Si se desea mayor precisión, se puede aplicar por ejemplo alguno de los múltiples algoritmos de disección dentro del intervalo en el que se produce el cambio de signo.

### 3.3 El espectro en potenciales tipo $\delta$

En el caso de potenciales  $\delta$  tenemos un hamiltoniano continuo, y por lo tanto tradicionalmente necesitaríamos resolver la ecuación de Schrödinger para evaluar las autoenergías. Sin embargo, nosotros usaremos el método del determinante característico. La ventaja del modelo de funciones  $\delta$  es que es resoluble analíticamente, al menos para determinados casos.

En esta sección vamos a estudiar el espectro discreto de sistemas formados por pozos de potencial tipo  $\delta$ , que corresponde a utilizar amplitudes negativas para las funciones  $\delta$ . Nos centraremos en las propiedades del espectro y de como

éste se ve afectado por la interacción entre pozos. Para ello, vamos a determinar condiciones generales de interacción que limitan el número de autoenergías en la banda resultante, como función de la amplitud de los pozos y de la distancia entre ellos. La forma de proceder será partir del caso más sencillo, un sistema con un único pozo tipo  $\delta$ , y estudiar posteriormente qué ocurre con 2 pozos, para terminar con una generalización a  $N$  pozos e incluso al caso  $N \rightarrow \infty$ .

### 3.3.1 Sistema con un solo pozo $\delta$

Para empezar por el caso más sencillo, consideremos un potencial del tipo  $V(x) = -V_1\delta(x)$ , con  $V_1 > 0$ . La ecuación de Schrödinger puede escribirse como:

$$-\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} - V_1\delta(x)\Psi(x) = E\Psi(x). \quad (3.5)$$

Puesto que estamos interesados en el espectro discreto, el rango de energías ha de ser  $E < 0$ . La función de onda físicamente aceptable ha de tener la forma  $\Psi(x) = Ae^{-\kappa|x|}$ , donde  $\kappa = \sqrt{-E}$  y  $A$  es una constante de normalización. Imponiendo la continuidad de la función de onda y la discontinuidad de su primera derivada, ambas en  $x = 0$ , obtenemos que la autoenergía esta dada por:

$$E_1 = -\frac{V_1^2}{4} \quad (3.6)$$

y así, podemos integrar la función de onda a todo el espacio para obtener finalmente:

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{V_1}{2}}e^{-\frac{V_1}{2}|x|}. \quad (3.7)$$

Aquí también nos gustaría considerar el caso de un pozo  $\delta$  no centrado en  $x = 0$ . En este caso, tendríamos un potencial de la forma  $V(x) = -V_1\delta(x - x_1)$ . Si bien el único autovalor de un estado ligado sería trivialmente el mismo que en la ecuación (3.6), la función de onda pasaría a ser ahora:

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{V_1}{2}}e^{-\frac{V_1}{2}|x-x_1|}. \quad (3.8)$$

Aunque en esta sección sólo estamos interesados en el espectro discreto y parece que distinguir entre las funciones de onda dadas en (3.7) y (3.8) es irrelevante, queremos destacar que cuando introduzcamos posteriormente en nuestro sistema un campo eléctrico, la diferente simetría de las dos funciones de onda determinará el comportamiento de su espectro.

Desde el punto de vista del determinante característico, podríamos haber obtenido directamente la autoenergía dada por (3.6) con gran facilidad. En este caso, la función de Green del medio sin perturbar será la de la partícula libre (ver capítulo 2), que en la región  $E < 0$  viene dada por:

$$G_0(x, x') = \frac{1}{2\kappa} e^{-\kappa|x-x'|} \quad (3.9)$$

donde, como antes,  $\kappa = \sqrt{-E}$ . Por tener una sola función  $\delta$ , el determinante característico resulta ser de orden  $1 \times 1$ ,  $D_1 = 1 - V_1 G_0$ , donde  $G_0 \equiv G_0(x, x) = 1/2\kappa$ . Resolviendo simplemente la ecuación  $D_1 = 0$ , encontramos el valor de la única autoenergía permitida, que por supuesto resulta ser igual a la dada en (3.6).

En definitiva, el resultado obtenido para este primer caso sencillo es que existe un único valor de la energía dentro del espectro discreto, y que el estado correspondiente estará siempre presente con tal que  $V_1 \neq 0$ .

### 3.3.2 Sistema con dos pozos $\delta$

Vamos a considerar ahora un potencial formado por dos pozos que podemos escribir en la forma  $V(x) = -V_1 (\delta(x - a/2) + \delta(x + a/2))$ , con  $V_1, a > 0$ . Dado que el potencial es simétrico, podemos dividir el problema en estados pares e impares, de manera que los estados pares verificarán, para  $x \geq 0$ :

$$\Psi_p(x) = \begin{cases} A \cosh \kappa x & x < a/2 \\ B e^{-\kappa x} & x > a/2 \end{cases} \quad (3.10)$$

donde  $A$  y  $B$  son constantes necesarias para asegurar la continuidad y la normalización. Imponiendo la continuidad de  $\Psi_p(x)$  y la discontinuidad de  $\Psi_p(x)$ , ambas

en  $x = a/2$ , llegamos a la siguiente ecuación para las autoenergías de los estados pares:

$$\frac{2\kappa}{V_1} = 1 + e^{-\kappa a}. \quad (3.11)$$

Una ecuación de ese tipo, independientemente de los valores de  $V_1$  y  $a$ , tiene siempre una única solución. Para demostrarlo, basta definir la función:

$$f_p(\kappa) = 1 + e^{-\kappa a} - 2\kappa/V_1. \quad (3.12)$$

Puede verse que es una función continua, y que  $f_p(0) = 2$  y  $\lim_{\kappa \rightarrow \infty} f_p(\kappa) = -\infty$ . Por lo tanto, debe existir algún  $\kappa$  tal que  $f(\kappa) = 0$ . Además, como  $f'(\kappa) > 0 \forall \kappa$ , la función siempre es estrictamente creciente y, por tanto, la solución a  $f(\kappa) = 0$  es única. También es fácil demostrar que, llamando  $\kappa_p$  al valor de  $\kappa$  que verifica (3.11), la correspondiente autoenergía  $E_p = -\kappa_p^2$  es siempre menor que la autoenergía  $E_1$  correspondiente al sistema con un único pozo, dada en (3.6).

Para los estados impares, se tendrá para  $x > 0$ :

$$\Psi_i(x) = \begin{cases} C \sinh \kappa x & x < a/2 \\ D e^{-\kappa x} & x > a/2 \end{cases} \quad (3.13)$$

donde  $C$  y  $D$  son constantes para asegurar la continuidad y la normalización. Imponiendo de nuevo la continuidad de  $\Psi_i(x)$  y la discontinuidad de  $\Psi_i'(x)$ , ambas en  $x = a/2$ , obtenemos la ecuación para autoestados impares:

$$\frac{2\kappa}{V_1} = 1 - e^{-\kappa a}. \quad (3.14)$$

La ecuación anterior puede tener o no solución en función de los valores de  $V_1$  y  $a$ . Para demostrarlo, definimos ahora la función:

$$f_i(\kappa) = 1 - e^{-\kappa a} - 2\kappa/V_1. \quad (3.15)$$

Es fácil ver que  $f_i(0) = 0$  y  $\lim_{\kappa \rightarrow \infty} f_i(\kappa) = \infty$ . Si, como en el caso de estados pares, la función  $f_i(\kappa)$  fuera siempre creciente, la ecuación (3.14) no tendría solución. La condición para que exista el estado impar está determinada por la existencia de

un mínimo de la función  $f_i(\kappa)$ . Si este mínimo existe,  $f_i(\kappa)$  será decreciente hasta alcanzarlo (y, por lo tanto, menor que 0 al ser  $f_i(0) = 0$ ) y crecerá a partir del mínimo cambiando de signo en algún punto, porque  $\lim_{\kappa \rightarrow \infty} f_i(\kappa) = \infty$ . Para ver si existe ese mínimo, podemos derivar  $f_i(\kappa)$  para obtener  $f_i'(\kappa)$  e igualar a cero. Después de un pequeño cálculo, llegamos a la ecuación

$$\kappa = \frac{\ln V_1 a / 2}{a}. \quad (3.16)$$

Para que exista un  $\kappa > 0$  que verifique esa ecuación, es necesario que el argumento del logaritmo sea mayor que 1, lo que nos conduce a la condición de la existencia del estado impar; éste existirá si:

$$V_1 a > 2. \quad (3.17)$$

Esta condición ha sido previamente obtenida, por ejemplo, por Glasser *et al.* (1990). Si esa condición no se verifica, el espectro sólo estará formado por el estado par, y a pesar de tener dos pozos, únicamente existirá un estado ligado. Si la condición se cumple, el espectro discreto estará compuesto por un estado par y otro impar. Llamando  $E_i$  a la energía correspondiente al estado impar, cuando éste exista, es fácil demostrar que  $E_p < E_1 < E_i$ .

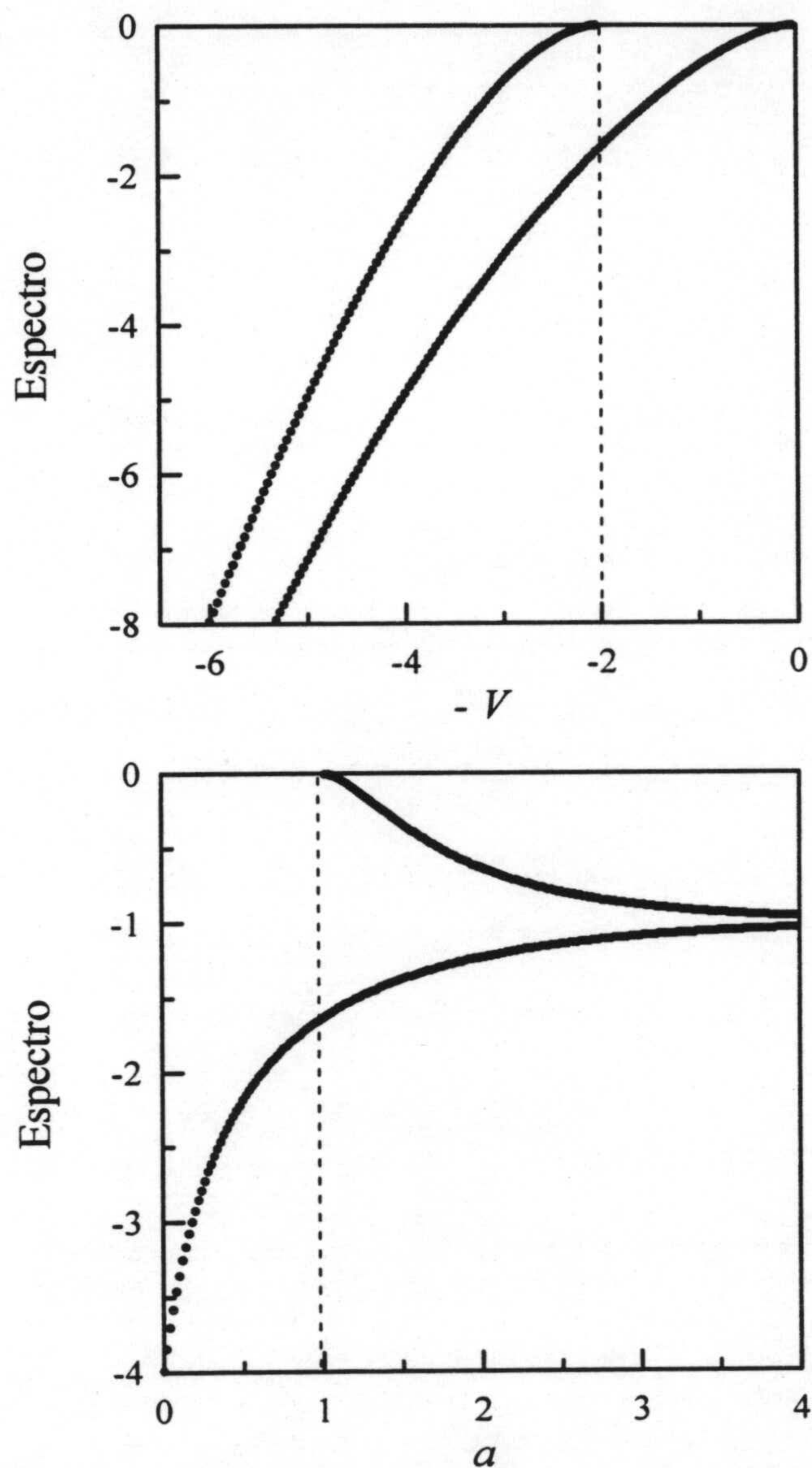
Hasta aquí, hemos realizado los cálculos de la manera tradicional, mediante la resolución de la ecuación de Schrödinger. En el formalismo del determinante característico, en este caso de dos pozos tendríamos un determinante  $2 \times 2$  cuyos ceros nos darían el espectro discreto. La expresión explícita del determinante es:

$$D_2(\kappa) = \begin{vmatrix} 1 - \frac{V_1}{2\kappa} & -\frac{V_1}{2\kappa} e^{-\kappa a} \\ -\frac{V_1}{2\kappa} e^{-\kappa a} & 1 - \frac{V_1}{2\kappa} \end{vmatrix}. \quad (3.18)$$

Es fácil demostrar que  $D_2(\kappa) = f_p(\kappa) \cdot f_i(\kappa)$  y, por lo tanto, resolviendo  $D_2(\kappa) = 0$  obtenemos las mismas soluciones que las vistas anteriormente pero de manera más sencilla.

El comportamiento del espectro se muestra gráficamente en la figura 3.1, en la que en la parte superior se muestra la dependencia del espectro en función de la





**Figura 3.1:** Espectro de un sistema con dos pozos  $\delta$  en función de la amplitud  $V_1$  de los pozos (gráfico superior) y de la distancia entre ellos (gráfica inferior). En el primer caso se mantiene fija la distancia ( $a = 1$ ), y en el segundo, el valor del potencial ( $V_1 = 2$ ). También se muestra en ambos casos con línea discontinua la condición  $V_1 a = 2$ .



amplitud de los dos pozos,  $V_1$ , manteniendo constante la distancia entre pozos,  $a$  (numéricamente,  $a = 1$ ). En la parte inferior, aparece esta misma dependencia en función de la distancia  $a$  entre los dos pozos, manteniendo constante la amplitud de los pozos,  $V_1$  (numéricamente,  $V_1 = 2$ ). En ambas se muestra con una línea vertical la condición (3.17) de existencia del segundo estado ligado. Podemos observar claramente como al verificarse la condición (3.17), tenemos un espectro formado por dos estados, mientras que si no se cumple, únicamente existe un estado en el espectro. Queremos hacer notar que cuando aparece el estado impar, lo hace para una energía  $E_i = 0$ . Este hecho será determinante para obtener condiciones que limiten el número de estados en la banda cuando generalicemos el potencial a  $N$  pozos.

Podemos deducir de este caso que el uso del determinante nos permite un cálculo fácil del espectro. Pero no hemos obtenido a partir de él la condición que limita el número de estados existentes. Sin embargo, esta condición también puede calcularse con el determinante, aunque lo veremos en el caso más general de  $N$  pozos en la sección siguiente.

Por último, queremos destacar que el potencial que hemos usado aquí,  $V(x) = -V_1 (\delta(x - a/2) + \delta(x + a/2))$ , es simétrico (centrado en  $x = 0$ ). Si hubiéramos considerado un potencial no simétrico, que puede escribirse como

$$V(x) = -V_1 (\delta(x - x_1) + \delta(x - x_2)) \quad (3.19)$$

con  $x_1 \neq x_2$ , hubiéramos obtenido de manera trivial los mismos resultados para el espectro, sólo que ahora las funciones de onda no vendrían dadas por (3.10) y (3.13). Este hecho no cambia los resultados obtenidos aquí, pero será determinante a la hora de ver cómo se modifican las autoenergías cuando se introduzca un campo eléctrico.

### 3.3.3 Sistema con $N$ pozos $\delta$

Cuando el sistema estaba formado por un sólo pozo, siempre existía un estado ligado. Cuando incluíamos un nuevo pozo podían existir uno o dos estados ligados dependiendo del parámetro de interacción  $V_1 a$ . Ahora nos preguntamos que ocurre en un sistema general con  $N$  pozos idénticos. Para ello vamos a considerar un potencial de la forma

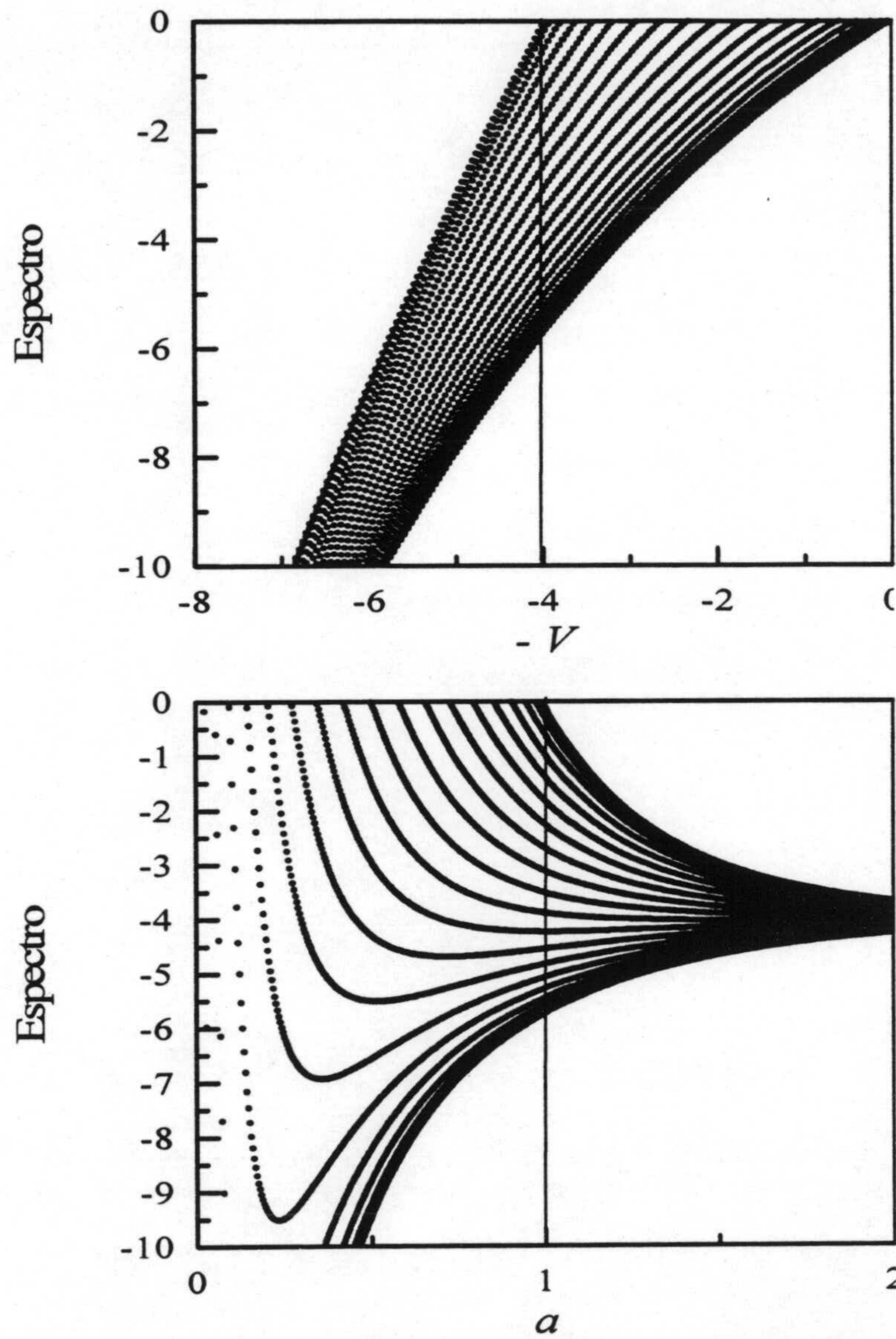
$$V(x) = - \sum_{n=1}^N V_1 \delta(x - na). \quad (3.20)$$

En los dos casos considerados hasta ahora, ha sido fácil llevar a cabo cálculos analíticos debido a su sencillez. Sin embargo, ahora en el caso general el cálculo analítico se complica considerablemente, y sería muy complejo tratar de resolver directamente la ecuación de Schrödinger.

Sin embargo, podemos utilizar el método del determinante característico para obtener el espectro discreto. El determinante será ahora de orden  $N \times N$ , y para evaluarlo en función de la energía, no hay más que utilizar la sencilla relación de recurrencia dada en el capítulo 2, y que también aparece en (3.22). Una vez obtenido  $D_N(E)$ , no hay más que buscar sus ceros, puesto que éstos son las autoenergías del hamiltoniano. El algoritmo de cálculo es muy sencillo porque, aparte de la simplicidad proporcionada por la relación de recurrencia, lo único que hay que hacer es buscar ceros simultáneos de la parte real e imaginaria del determinante, que, como ya comentamos, en general es una función compleja.

Los resultados obtenidos para un ejemplo numérico concreto se muestran en la figura 3.2, en la que consideramos un sistema con  $N = 20$  pozos. En la parte superior, aparece la evolución del espectro en función de  $V_1$  manteniendo constante el espaciamiento entre pozos (numéricamente,  $a = 1$ ). En la parte inferior, mostramos la evolución del espectro en función de la distancia  $a$  entre pozos, manteniendo constante el valor de la amplitud (numéricamente,  $V_1 = 4$ ).

Considerando el gráfico superior, podemos apreciar como al ir creciendo  $V_1$  van apareciendo de uno en uno nuevos estados ligados. Estos estados, que aparecen



**Figura 3.2:** Espectro para un sistema con  $N = 20$  pozos  $\delta$  como función de la amplitud  $V_1$  de los pozos (gráfico superior) y de la distancia  $a$  entre ellos (gráfico inferior). Para el primer caso, la distancia se mantiene constante ( $a = 1$ ), y para el segundo, lo hace el potencial ( $V_1 = 4$ ). También se muestra en ambos casos con líneas verticales la condición  $V_1 a = 4$ .

cada uno para un valor diferente del potencial  $V_1$ , van agrandando la correspondiente banda de energía hasta que se llega a un cierto valor crítico de  $V_1$ , muy cercano numéricamente a  $V_1 = 4$ , para el que aparece en  $E = 0$  la última autoenergía que completa la banda. A partir de ese valor, la banda permanece con el mismo número de estados ligados que pozos hay en el sistema.

Con respecto al gráfico de la parte inferior, podemos ver que para valores de  $a$  muy grandes, la interacción entre los pozos disminuye, y las 20 autoenergías tienden al valor  $E_1$ , que es la autoenergía de un único pozo cuando está aislado. Al ir acercando los pozos, la interacción hace que se abra una banda de energías permitidas cada vez más grande, hasta que para un cierto valor crítico de  $a$ , numéricamente muy próximo a  $a = 1$ , desaparece en el espectro continuo ( $E > 0$ ) la autoenergía de mayor valor. Si disminuimos todavía más la distancia, van desapareciendo en el espectro continuo sucesivamente todos los estados ligados de mayor a menor energía. En el límite  $a \rightarrow 0$ , es como si tuviéramos una sola  $\delta$ , pero con una amplitud igual a la suma de todas las amplitudes del sistema. Por lo tanto, el único estado ligado que permanecerá en el sistema en este límite tendrá, de acuerdo con (3.6), un valor dado por:

$$E_{a \rightarrow 0} = -\frac{\left(\sum_{n=1}^N V_n\right)^2}{4} = -\frac{N^2 V_1^2}{4}. \quad (3.21)$$

Lo más destacable es que la condición que limita que el número de autoestados sea igual que el número de pozos en el sistema depende del producto de  $V_1$  y  $a$ , producto al que nosotros consideramos siempre como el parámetro de interacción entre pozos. En el primer caso tenemos que la condición límite es  $V_1 \approx 4$  cuando  $a = 1$ , y en el segundo caso tenemos que  $a \approx 1$  cuando  $V_1 = 4$ . Además de esta condición, deben de existir otras  $N - 2$  condiciones que nos dirán para qué valores de  $V_1$  y  $a$  aparece el estado  $(N - 1)$ -ésimo, el  $(N - 2)$ -ésimo, ..., hasta el segundo estado de la banda, porque el primero siempre está presente. Nuestro objetivo será calcular analíticamente esas  $N - 1$  condiciones que limitan el número de estados en la banda.

El algoritmo anterior para buscar ceros del determinante nos permite calcular directamente el espectro discreto para unos valores particulares de  $V_1$  y  $a$ , pero ahora estamos más interesados en saber si, en el caso general que nos ocupa, aparece alguna condición, como ocurría en el caso  $N = 2$ , que limite el número de autoenergías existentes. También nos interesa saber si podemos deducir esas condiciones, en el caso de que existan, a través del determinante característico. Para ello, lo que vamos a hacer es tratar de sumar la relación de recurrencia:

$$D_N = A_N D_{N-1} - B_N D_{N-2} \quad (3.22)$$

en el caso en que la amplitud de todos los pozos  $\delta$  es la misma ( $V_i = V_1$ ), y también lo es la distancia entre pozos ( $x_i - x_{i-1} = a$ ). Para poder realizar la suma de la relación de recurrencia, vamos a comenzar por escribir convenientemente el valor de  $D_1$  dado en el capítulo 2, que para energías negativas resulta ser igual a:

$$D_1 = 1 - \frac{V_1}{2\kappa}. \quad (3.23)$$

Para continuar con el cálculo, es preciso utilizar la relación de dispersión que liga al cuasimomento  $\beta$  con la energía en un modelo de Kronig Penney infinito de barreras  $\delta$  de amplitud  $V_1$ . Dicha relación de dispersión (para energías positivas) que será obtenida detalladamente en el capítulo 4 es igual a:

$$\cos \beta a = \cos ka + \frac{V_1}{2k} \sin ka. \quad (3.24)$$

Teniendo en cuenta que ahora estamos utilizando pozos, hemos de cambiar  $V_1$  por  $-V_1$ , y además, al considerar energías negativas, también hemos de sustituir  $k$  por  $i\kappa$ . De esta forma, la relación de dispersión es ahora:

$$\cos \beta a = \cosh \kappa a - \frac{V_1}{2\kappa} \sinh \kappa a. \quad (3.25)$$

Utilizando dicha relación de dispersión y tras un pequeño cálculo, el determinante de orden 1,  $D_1$ , dado por (3.23), se puede escribir también como:

$$D_1 = e^{-\kappa a} \left[ \cos \beta a - \left( \frac{V_1}{2\kappa} \cosh \kappa a - \sinh \kappa a \right) \right]. \quad (3.26)$$

El paso siguiente para poder sumar la relación de recurrencia consiste en escribir también adecuadamente los valores de  $A_N$  y  $B_N$ . Conviene recordar la expresión de ambos coeficientes en el caso general, dados en el capítulo 2:

$$B_N = \frac{V_N}{V_{N-1}} e^{2ik(x_N - x_{N-1})} \quad (3.27)$$

$$A_N = 1 + V_N G_0 (1 - e^{2ik(x_N - x_{N-1})}) + B_N. \quad (3.28)$$

En el caso que estamos calculando, hemos de considerar de nuevo energías negativas ( $k \rightarrow i\kappa$ ). El valor de todas las amplitudes de las barreras  $\delta$  es el mismo, ( $V_1 \rightarrow -V_1$ ), y también lo es la distancia entre todas las barreras,  $a$ . Teniendo en cuenta que  $G_0 = i/2k = 1/2\kappa$ , y utilizando de nuevo (3.25), un cálculo sencillo pero algo laborioso permite escribir  $A_N$  y  $B_N$  como:

$$B_N = e^{-2\kappa a} \quad (3.29)$$

$$A_N = 2 \cos \beta a e^{-\kappa a}. \quad (3.30)$$

Una vez expresados así  $A_N$  y  $B_N$ , podemos evaluar en primer lugar  $D_2$  a través de  $D_2 = A_2 D_1 - B_2 D_0$ . Si recordamos que  $D_0 = 1$ , y usamos el valor de  $D_1$  dado en (3.26), obtenemos que

$$D_2 = e^{-2\kappa a} \left[ \cos^2 \beta a - \sin^2 \beta a - \left( \frac{V_1}{2\kappa} \cosh \kappa a - \sinh \kappa a \right) 2 \cos \beta a \right] \quad (3.31)$$

expresión que podemos escribir por conveniencia como

$$D_2 = e^{-2\kappa a} \left[ \cos 2\beta a - \left( \frac{V_1}{2\kappa} \cosh \kappa a - \sinh \kappa a \right) \frac{\sin 2\beta a}{\sin \beta a} \right]. \quad (3.32)$$

Con un poco de intuición, es fácil observar que la expresión anterior para  $N = 2$  es análoga a la dada en (3.26) para  $N = 1$ , sin más que cambiar los términos que contienen un 2 por los correspondientes con un 1. Parece adecuado suponer que el caso general puede ser igual al dado en (3.32) cambiando el 2 de la exponencial y las funciones trigonométricas por  $N$ . Para verificar que esto es correcto, vamos a demostrarlo por inducción. Ya sabemos que lo que queremos demostrar es cierto

para  $N = 1$  y para  $N = 2$ , por lo que vamos a considerar que es cierto para  $N - 1$  y  $N - 2$ , y comprobar que se cumple para  $N$ . podemos escribir  $D_{N-1}$  y  $D_{N-2}$  como:

$$D_{N-1} = e^{-(N-1)\kappa a} \left[ \cos(N-1)\beta a - \left( \frac{V_1}{2\kappa} \cosh \kappa a - \sinh \kappa a \right) \frac{\sin(N-1)\beta a}{\sin \beta a} \right] \quad (3.33)$$

$$D_{N-2} = e^{-(N-2)\kappa a} \left[ \cos(N-2)\beta a - \left( \frac{V_1}{2\kappa} \cosh \kappa a - \sinh \kappa a \right) \frac{\sin(N-2)\beta a}{\sin \beta a} \right]. \quad (3.34)$$

De la relación de recurrencia, y considerando (3.29) y (3.30), tenemos que  $D_N$  es

$$D_N = 2 \cos \beta a e^{-\kappa a} D_{N-1} - e^{-2\kappa a} D_{N-2}. \quad (3.35)$$

Si insertamos en esta ecuación los valores de  $D_{N-1}$  y  $D_{N-2}$  dados en (3.33) y (3.34), un cálculo directo a partir de la ecuación previa permite obtener el resultado siguiente (Gasparian, 1989):

$$D_N = e^{-N\kappa a} \left[ \cos N\beta a - \left( \frac{V_1}{2\kappa} \cosh \kappa a - \sinh \kappa a \right) \frac{\sin N\beta a}{\sin \beta a} \right]. \quad (3.36)$$

Si definimos la siguiente función

$$Z \equiv \frac{V_1}{2\kappa} \cosh \kappa a - \sinh \kappa a \quad (3.37)$$

y tenemos en cuenta que  $\cos N\beta a$  es el polinomio de Chebyshev de primera especie de orden  $N$ ,  $T_N(\cos \beta a)$ , y que  $\sin N\beta a$  es el polinomio de Chebyshev de segunda especie de orden  $N - 1$ ,  $U_{N-1}(\cos \beta a)$ , la expresión final del determinante de orden  $D_N$  se puede escribir de la siguiente forma:

$$D_N = e^{-N\kappa a} [T_N(\cos \beta a) - ZU_{N-1}(\cos \beta a)] \quad (3.38)$$

Es fácil demostrar que aparece uno de los ceros del determinante (una de las autoenergías) para  $E = 0$  ( $\kappa = 0$ ) si consideramos un potencial  $V_1$  dado por:

$$V_1 a = 2(1 - g_{\min}) \quad (3.39)$$



donde  $g_{\min}$  es la raíz más pequeña del polinomio  $U_{N-1}$ . Para demostrarlo, basta con considerar que en la ecuación (3.25), hacemos  $\kappa = 0$  ( $E = 0$ ). En este caso, un calculo directo nos da

$$V_1 a = 2(1 - \cos \beta a). \quad (3.40)$$

Como  $\cos \beta a$  es la variable de los polinomios  $T_N$  y  $U_{N-1}$ , si damos a  $\cos \beta a$  el valor correspondiente a la raíz más pequeña de  $U_{N-1}$  (en realidad, sirve cualquier raíz, como veremos ahora), hacemos que  $D_N = 0$  para  $\kappa = 0$ , y así tenemos una autoenergía dada por  $E = 0$ .

La ecuación (3.39) permite, por ejemplo, obtener la condición válida en el caso  $N = 2$ . Para este valor de  $N$ , el polinomio  $U_1$  sólo posee una solución en  $\cos \beta a = 0$ . Por consiguiente, el resultado en este caso es  $V_1 a = 2$ , que es precisamente la condición límite que ya obtuvimos en (3.17). En el caso general que nos ocupa, la ecuación (3.39) nos proporciona el valor de la interacción  $V_1 a$  para el que aparece el  $N$ -ésimo estado ligado de la banda permitida. En cualquier caso, los otros estados también van apareciendo en la banda para el valor energético  $E = 0$ , o equivalentemente,  $\kappa = 0$ . Usando este valor de  $\kappa$  en la ecuación (3.25), como ya hicimos para llegar a la ecuación (3.40), encontramos las  $N - 2$  condiciones restantes que verifica la interacción para la aparición de los estados ligados, que evidentemente son los  $N - 2$  valores adicionales de  $\cos \beta a$  que hacen que  $U_{N-1} = 0$ . Así, las  $N - 2$  raíces restantes del polinomio  $U_{N-1}(\cos \beta a)$  nos dan las condiciones para que aparezca en la banda el estado  $(N - 1)$ -ésimo, el  $(N - 2)$ -ésimo, ..., hasta el estado número 2. Todo este conjunto de condiciones pueden escribirse de forma compacta en una sola ecuación:

$$(V_1 a)_i = 2(1 - g_{N-i}) \quad (3.41)$$

donde el índice  $i$  varía entre 1 y  $N - 1$ , y  $g_i$  es la  $i$ -ésima raíz de  $U_{N-1}$ . En esta ecuación se asume implícitamente que  $g_1$  es la menor raíz de  $U_{N-1}$ , y que  $g_{N-1}$  es la mayor.

El significado de estos valores puede entenderse claramente: si  $V_1 a < (V_1 a)_1$ ,

tenemos únicamente un estado ligado en la banda; si  $V_1a = (V_1a)_1$ , aparece el segundo estado ligado para una energía  $E = 0$ . En general, si la interacción está en el rango  $(V_1a)_i < V_1a < (V_1a)_{i+1}$ , tendremos  $i+1$  estados ligados dentro de la banda y el estado  $(i+2)$ -ésimo aparecerá para una energía  $E = 0$  exactamente cuando  $V_1a = (V_1a)_{i+1}$ . Por consiguiente, únicamente existirán en la banda el mismo número de estados ligados que pozos forman el potencial cuando  $V_1a \geq (V_1a)_{N-1}$ .

Teniendo en cuenta lo anterior, la generalización para el límite termodinámico  $N \rightarrow \infty$  es fácil. En este límite, la raíz más pequeña de  $U_{N-1}$  ( $g_1$  en nuestra nomenclatura) tiende a  $-1$ . Por lo tanto, la condición para que en este límite existan en la banda tantos estados ligados como pozos es simplemente:

$$V_1a \geq 4. \quad (3.42)$$

Esta condición explica directamente los resultados obtenidos numéricamente para  $N = 20$  mostrados en la figura 3.2. Aunque el valor exacto del producto  $V_1a$  para el cual aparece el último estado ligado puede obtenerse exactamente de (3.41), la menor raíz del polinomio de Chebyshev de segunda especie  $U_{19}$  es tan próxima a  $-1$  (realmente es  $-0.9867$ ), que en la figura prácticamente se verifica la condición de aparición del último estado para  $V_1a \approx 4$ .

### 3.3.4 Densidad de estados

Hasta aquí, hemos estado estudiando como afecta la interacción entre pozos  $\delta$  dispuestos formando un sistema periódico al número de estados que constituyen la banda. Sin embargo, no hemos abordado las características que posee la banda, como por ejemplo como se distribuyen los estados dentro de la misma. La manera de caracterizar esa distribución de estados es mediante la densidad de estados, tradicionalmente llamada  $g(E)dE$ . Dicha función, que puede ser definida en términos de la FG del sistema,  $G$ , a través de la ecuación (Economou, 1983)

$$g(E) = \frac{1}{\pi L} \int_0^L \text{Im}G(x, x; E) dx \quad (3.43)$$

, nos da el número de estados con energías comprendidas entre  $E$  y  $E + dE$ .

Una manera gráfica de obtener esa información para un sistema como el representado en la figura 3.2 es simplemente dando un corte vertical para un cierto valor de  $V_1$ . Podemos apreciar como, en este caso, el espaciamiento entre estados es mucho menor en los bordes de la banda que en su parte central. Una manera equivalente de expresar lo mismo es decir que hay muchos más estados por unidad de energía en los bordes de la banda que en el centro. Este hecho es una característica común de las bandas de los sistemas periódicos unidimensionales, ya que estos poseen singularidades de Van Hove (Ashcroft & Mermin, 1976) en los bordes de las bandas permitidas. Aunque estrictamente hablando la densidad de estados sólo está bien definida en el límite termodinámico  $N \rightarrow \infty$ , es decir, cuando el espectro es continuo, podemos ver como en el caso que nos ocupa, la banda refleja las mismas propiedades cualitativas que para un sistema infinito. Este hecho será puesto de manifiesto explícitamente cuando estudiemos los espectros en el modelo de fuerte ligadura, de los que nos ocupamos en la sección siguiente.

### 3.4 Espectro en el modelo de fuerte ligadura

Ya comentamos anteriormente que en el modelo de fuerte ligadura, el propio hamiltoniano que describe el modelo es discreto y, por lo tanto, también lo será el espectro resultante. La matriz del hamiltoniano para una cadena unidimensional con  $n$  átomos puede escribirse como:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_1 & V & 0 & \cdot & 0 \\ V & \varepsilon_2 & V & \cdot & \cdot \\ 0 & V & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & V \\ 0 & \cdot & 0 & V & \varepsilon_n \end{pmatrix} \quad (3.44)$$

donde la energía diagonal  $\varepsilon_i$  representa la energía característica del átomo  $i$ -ésimo, y los términos no diagonales  $V$  representan la transferencia entre vecinos más próximos. La aproximación de vecinos más próximos es la usual y la que

utilizaremos en esta memoria. Puesto que las energías diagonales pueden tener cualquier valor, dependiendo de la secuencia de energías  $\varepsilon_i$  que utilicemos, podemos construir fácilmente sistemas periódicos, cuasiperiódicos o desordenados a voluntad.

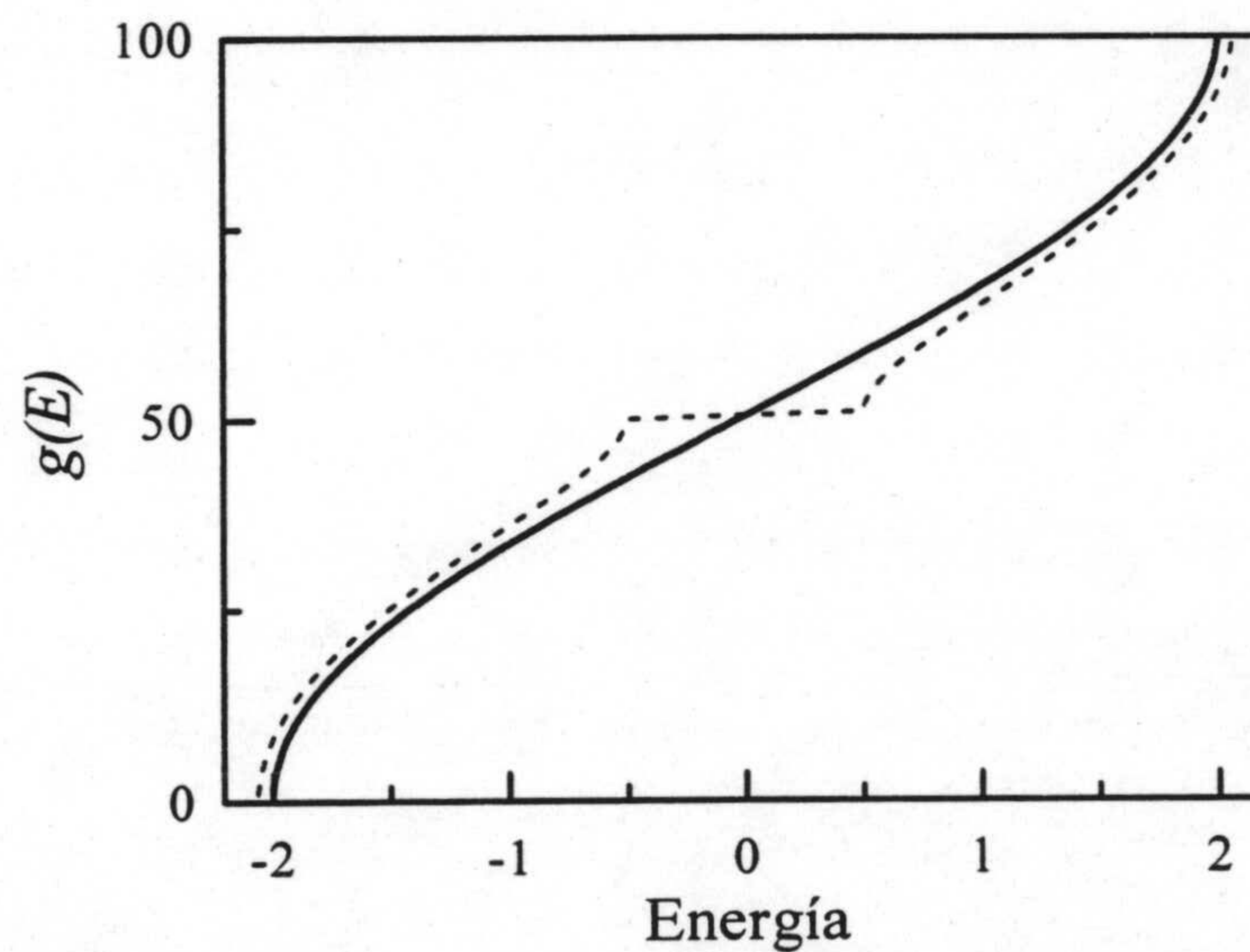
Para obtener espectros usando este modelo, tanto para sistemas periódicos como para cuasiperiódicos, podríamos utilizar dos procedimientos. El primero, tal y como hemos hecho hasta ahora, a través del determinante característico. En el capítulo 2 se dio una expresión explícita de la función de Green del medio sin perturbar en el modelo de fuerte ligadura, así como la correspondiente relación de recurrencia para el cálculo del determinante. El único problema que se presentaría es que, si no se establece alguna condición adicional, el sistema sería un sistema abierto, y por lo tanto no tendría espectro discreto. Para solventar esta dificultad, lo único que hay que hacer es cerrar el sistema; para ello, basta con hacer numéricamente tan grande como sea posible las dos energías de los átomos que limitan el sistema,  $\varepsilon_1$  y  $\varepsilon_n$ . Esta condición es suficiente para cerrar el sistema, y así, éste posee un espectro discreto que estará formado por  $n - 2$  valores. Si estamos interesados en el espectro discreto de una cierta secuencia formada por  $n$  átomos, habremos de calcular el determinante correspondiente de orden  $n + 2$ , donde las energías de nuestra secuencia empezarán en  $\varepsilon_2$  y acabarán en  $\varepsilon_{n+1}$ .

El segundo procedimiento para el cálculo del espectro es la diagonalización directa de la matriz dada por (3.44). Teniendo en cuenta la gran abundancia de librerías de subrutinas de alta precisión para la diagonalización de matrices (IMSL, 1980; EISPACK, 1976), este método es más rápido y será el que utilicemos a la hora del cálculo numérico.

### 3.4.1 Sistemas periódicos

En esta breve sección, vamos a mostrar gráficamente las propiedades cualitativas del espectro de los sistemas periódicos. Para ello, a través del modelo de fuerte ligadura, analizaremos las propiedades de una banda a través de una magnitud

que nos será muy útil en lo sucesivo, llamada densidad integrada de estados (DIE). La DIE es una función que depende de la energía, y que nos dice el número de estados con energía menor a la considerada. A partir de su definición, sabemos que la derivada de esta magnitud en un sistema para una energía  $E$  nos da el número de estados por unidad de energía para esa energía, es decir, la densidad de estados. Un crecimiento rápido de la DIE en una cierta zona indicaría que en esa región los estados están muy próximos, o, equivalentemente, que la densidad de estados en esa región es grande. Sin embargo, si la DIE fuera horizontal, eso indicaría que en esa región no hay estados. Esto nos permite localizar los gaps muy fácilmente. Si, por último, la DIE se comporta linealmente en una cierta región, podemos concluir que los estados están equiespaciados energéticamente, o sea que la densidad de estados en esa zona es una constante.



**Figura 3.3:** Densidades integradas de estados para un sistema periódico formado por 100 átomos en el modelo de fuerte ligadura. La línea continua muestra una sola banda, obtenida para 100 átomos idénticos con los valores  $V = 1$  y  $\varepsilon = 0$ . La línea partida muestra dos bandas para un sistema periódico de 100 átomos, con  $\varepsilon_1 = -0.5$ ,  $\varepsilon_2 = 0.5$  y  $V = 1$ .

Para analizar las propiedades de las secuencias periódicas, el primer paso consiste en obtener el espectro. Para ello, basta con construirse una secuencia periódica de energías diagonales, e introducirla en la matriz (3.44). La secuencia periódica más simple, y que será suficiente para ilustrar las características de los sistemas periódicos, es aquella en la que todas las energías de la secuencia son idénticas, es decir,  $\varepsilon_i = \varepsilon_0 \forall i$ . En la figura 3.3 se muestra con línea continua la DIE obtenida para una cadena periódica formada por 100 átomos, y donde los parámetros numéricos utilizados son  $\varepsilon_0 = 0$  y  $V = 1$ .

A partir de esta figura, podemos extraer información cualitativa de carácter general. En primer lugar, la pendiente de la DIE es mayor en los bordes de la banda. Esto quiere decir, como ya anticipábamos al estudiar secuencias de pozos tipo  $\delta$ , que los estados están más concentrados en esta región debido a las singularidades de Van Hove. En segundo lugar, se puede apreciar como en la zona central de la banda la DIE se comporta linealmente, lo que significa que los estados están prácticamente equiespaciados o, equivalentemente, que la densidad de estados es aproximadamente constante. Por último, la DIE aparece como una curva suave, en la que no hay tramos horizontales, o de pendiente nula. Esto significa que la banda es continua, y en su interior no aparecen gaps o zonas prohibidas.

Las propiedades que hemos obtenido en el caso anterior, en el que únicamente aparecía una banda debido a la igualdad de todas las energías diagonales, son extrapolables a todas las bandas de sistemas periódicos con mayor número de bandas. Si por ejemplo hubiéramos construido una secuencia periódica de energías diagonales pero con un período formado por dos energías diferentes (cadena diatómica), hubiéramos obtenido dos bandas, cada una de ellas con características análogas a la de una única banda, separadas por un gap que en la DIE aparecería como un tramo horizontal. La DIE para un sistema de este tipo puede verse también en la figura 3.3, en la que hemos considerado una secuencia de 100 átomos con dos energías diagonales diferentes  $\varepsilon_1 = -0.5$  y  $\varepsilon_2 = 0.5$ , dispuestas alternativamente de

manera periódica y con  $V = 1$ . Ahora podemos apreciar, como ya comentábamos, la presencia de dos bandas separadas por un gap (tramo horizontal), pero la estructura de cada una de las dos bandas es análoga a la expuesta anteriormente para el sistema constituido por 100 átomos idénticos.

Aparte de las características que se pueden deducir de la DIE, el otro aspecto del espectro que utilizaremos para caracterizar a los sistemas cuasiperiódicos será la distribución del espaciamiento energético entre vecinos más próximos. Suele ser tradicional obtener esta función en la parte central de la banda, porque en los laterales de la misma, como ya hemos comentado, aparecen singularidades de Van Hove. Si obtuviéramos esa magnitud para una banda como las representadas en 3.3 y calculada en la zona central de la banda, obtendríamos prácticamente una función tipo  $\delta$  (caso límite de una distribución normal muy picuda) centrada en el valor del espaciado medio. Esto es así porque, como ya expusimos, en la zona central de la banda el espaciamiento energético es aproximadamente constante, como puede deducirse de la linealidad de la DIE en esa región. Ya veremos como esta distribución de espaciamiento energético entre vecinos más próximos puede servirnos para caracterizar a los sistemas cuasiperiódicos y situarlos en una región intermedia entre los sólidos periódicos y los desordenados.

### 3.4.2 Sistemas cuasiperiódicos

El espectro discreto de los sistemas cuasiperiódicos puede proporcionarnos dos tipos de información de interés. En primer lugar, a través de la distribución del espaciamiento energético entre niveles adyacentes, conseguimos un criterio para compararlos con las distribuciones correspondientes a sistemas desordenados y sistemas periódicos. Una de las propiedades más relevantes de los sistemas desordenados, como ya comentamos en el capítulo 1, es que su distribución de niveles es una magnitud que depende del desorden del sistema. Para un sistema con desorden pequeño, esta distribución se aproxima a la distribución de Wigner. Si el desorden se hace mayor, la distribución se hace de tipo Poisson. Este hecho nos

proporciona un criterio de comparación, que nos permite deducir cuando en un sistema cuasiperiódico encontramos un comportamiento más 'desordenado' o más 'periódico'.

La otra información que podemos extraer del espectro discreto es su comportamiento fractal, que será estudiado utilizando la dimensión fractal. Este parámetro nos proporciona una idea de la discretitud de los espectros, criterio que nos permitirá compararlos con el espectro de sistemas periódicos. Como para estos sistemas el espectro es una curva 'suave' y continua (ver figura 3.3), la dimensión fractal correspondiente es la unidad. Estudiaremos esta característica en primer lugar.

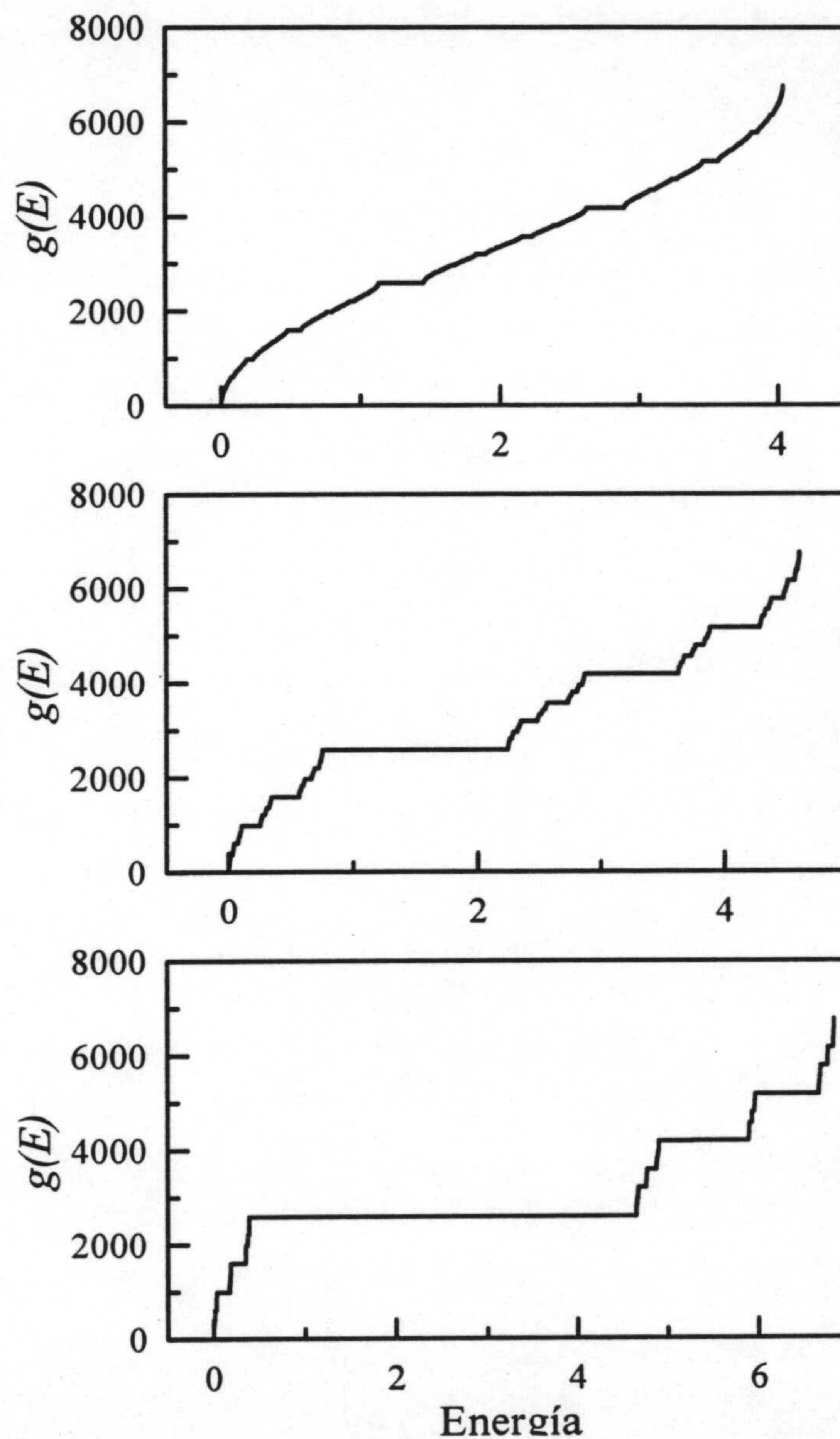
### Fractalidad de las secuencias de Fibonacci.

La característica más importante de las autoenergías obtenidas a partir de las secuencias generadas por la sucesión de Fibonacci es que poseen estructura fractal. En concreto, el espectro (si el sistema fuese infinito) constituye un conjunto de Cantor de medida de Lebesgue nula (Kohmoto *et al.*, 1987) y ha sido estudiado múltiples veces usando teorías de grupos de renormalización (Kohmoto *et al.*, 1983; Ostlund *et al.*, 1983), incluso para secuencias de Fibonacci ternarias (Tong, 1996). Una forma gráfica y simple de apreciar las propiedades fractales del espectro es estudiando las DIE (Carpena, Gasparian & Ortuño, 1995) obtenidas para esta secuencia.

En la figura 3.4 hay representadas tres DIE obtenidas por diagonalización directa de la matriz tridiagonal del modelo de fuerte ligadura. En la matriz, las energías diagonales están construidas según una secuencia de Fibonacci, utilizando valores diferentes para las dos energías básicas que forman la secuencia, que está constituida por 6765 átomos ( $F_{20}$ ). Los valores numéricos son  $\varepsilon_B = 0$ , y de arriba a abajo  $\varepsilon_A = 0.5, 2$  y  $5$ . En todos los casos, hemos escogido la energía de transferencia entre vecinos más próximos igual a la unidad.

Como puede apreciarse de la figura 3.4, la característica que más resalta de





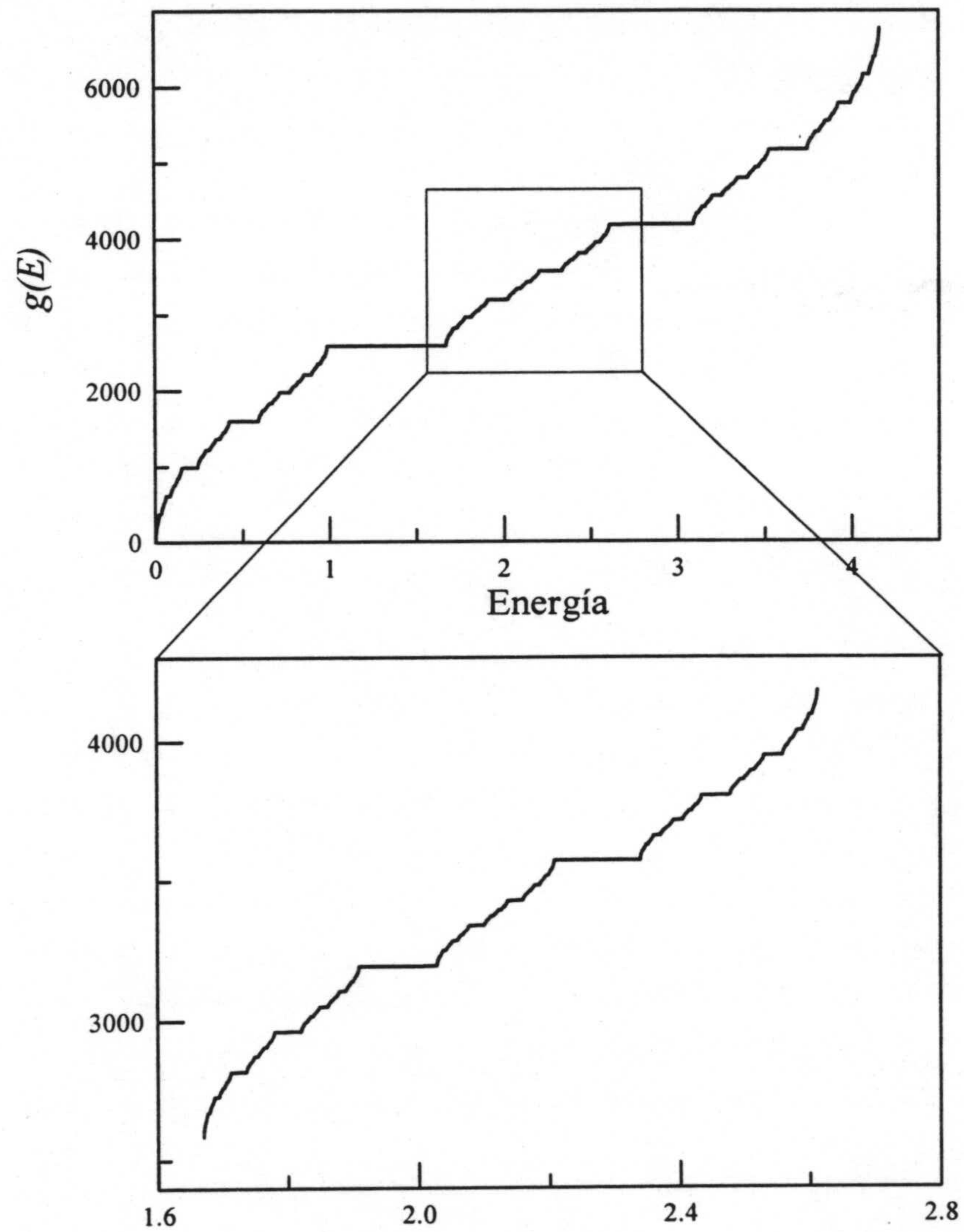
**Figura 3.4:** Densidades integradas de estados para una cadena de Fibonacci en el modelo de fuerte ligadura. El sistema está formado por 6765 átomos y los potenciales son  $\epsilon_B = 0$  y  $\epsilon_A = 0.5, 2$  y  $5$  para las curvas superior, media e inferior, respectivamente.

los espectros es la existencia de tramos horizontales en las DIE, lo que indica la presencia de múltiples gaps. Estos gaps, aunque en la figura no pueden apreciarse con detalle debido al propio grosor de la línea, siguen apareciendo a escalas menores dentro de cualquier porción de la DIE que se seleccione, lo que confirma la estructura fractal, así como la autosimilitud estadística de los espectros. Ambas características suelen aparecer juntas.

Las regiones energéticas en las que no hay estados en la figura anterior cambian de anchura dependiendo de los valores particulares de  $\varepsilon_A$  y  $\varepsilon_B$ , pero lo más destacable es que, en todos los casos, los gaps siempre aparecen en números de Fibonacci anteriores al número de Fibonacci igual al número de átomos que forman la cadena. En concreto, las cadenas que están representadas en la gráfica están formadas por 6765 átomos ( $F_{20}$ ). El número de estados hasta el primer gap grande es de 2584 ( $F_{18}$ ), entre el primer gran gap y el segundo es de 1597 ( $F_{17}$ ), y, por supuesto, el número restante es de nuevo  $F_{18}$ . Pero a su vez, cada una de estas subbandas presenta gaps más pequeños situados también en números de Fibonacci anteriores al número de Fibonacci que nos da el número de estados dentro de esa subbanda, con una estructura exactamente igual, pero a escala más pequeña, que la del espectro completo (Carpena, Gasparian & Ortuño, 1995).

Para poner de manifiesto esta repetición de la estructura del espectro frente a cambios de escala, en la figura 3.5 representamos una DIE obtenida para el modelo de fuerte ligadura con una secuencia de Fibonacci formada por 6765 átomos. Los valores de los parámetros son  $\varepsilon_A = 1$ ,  $\varepsilon_B = 0$  y  $V = 1$ . En esta figura, hemos ampliado la banda central, comprendida entre los dos gaps más grandes, y podemos observar como tiene una estructura idéntica a la del espectro total.

Podríamos repetir el proceso de zoom a escalas menores un número finito de veces, porque los espectros de los que disponemos son, por supuesto, también finitos. Sin embargo, si el sistema fuese infinito, sería posible esta división en subbandas según los números anteriores de Fibonacci para cualquier escala deseada y la estructura se seguiría repitiendo. De este hecho se puede deducir que el espectro de



**Figura 3.5:** Densidad integrada de estados para una cadena de Fibonacci con 6765 átomos en el modelo de fuerte ligadura, y con  $\varepsilon_A = 1$  y  $\varepsilon_B = 0$ . Se amplía la banda central para apreciar su autosimilitud.

la secuencia de Fibonacci es una magnitud autosimilar y, en consecuencia, poseerá una dimensión fractal que la caracteriza (Mandelbrot, 1982). En particular, las DIE que hemos mostrado presentan la estructura de un fractal bien conocido y llamado 'la escalera del diablo', que fue encontrada por primera vez por Bak y Bruinsma en 1982 en estudios sobre el potencial químico.

En resultados experimentales recientes sobre dispersión fotónica (Hattori *et al.*, 1994), realizados en superredes construidas siguiendo la secuencia de Fibonacci, se han encontrado comportamientos similares a los representados en la figura 3.5 para la fase de la luz transmitida a través de esta superred. Puede demostrarse que hay una relación directa entre la fase y las DIE que hemos obtenido, por lo que podemos concluir que los hechos experimentales avalan los resultados numéricos obtenidos aquí.

Al margen de las características ya comentadas, cabría añadir también con carácter general, que a medida que la diferencia  $\varepsilon_A - \varepsilon_B$  se incrementa, los gaps (zonas horizontales en las DIE) van haciéndose cada vez más grandes. Los estados se van agrupando en regiones energéticas cada vez más pequeñas, y tienden a concentrarse en unos pocos valores discretos altamente degenerados. Posteriormente cuantificaremos esta discretitud del espectro mediante la dimensión fractal.

### Fractalidad de las secuencias de Thue-Morse

En las secuencias de Thue-Morse, podemos analizar de forma parecida las propiedades del espectro a como lo acabamos de hacer en el caso de Fibonacci, es decir, utilizando la DIE. En el caso que nos ocupa, resulta más difícil apreciar el carácter autosimilar del espectro. Como ejemplo, en la figura 3.6 representamos dos DIE obtenidas por diagonalización del modelo de fuerte ligadura con  $\varepsilon_B = 0$  y  $\varepsilon_A = 1$  y 2, de arriba a abajo, respectivamente. En ambos casos, la cadena está constituida por 4096 átomos y el término de transferencia entre vecinos más próximos tiene un valor unidad. En esta ocasión, la estructura de la DIE no presenta la misma cadencia que en el caso anterior, aunque puede apreciarse una simetría del espec-

tro, debido a que el número de átomos con energía igual a  $\varepsilon_A$  es igual al número de ellos con energía  $\varepsilon_B$ .

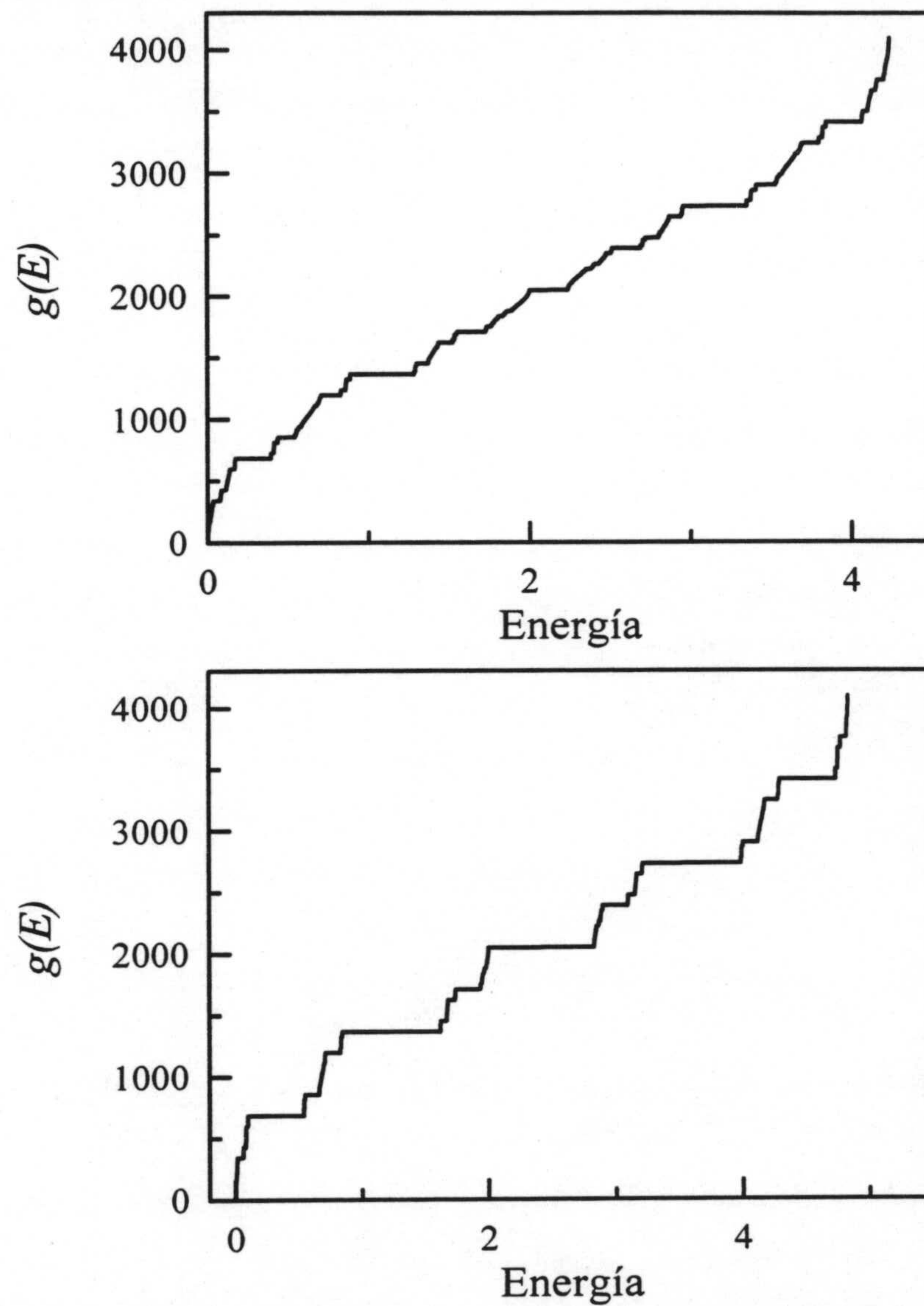
Para ver con más detalle la estructura del espectro, de la misma forma que hicimos en el caso de Fibonacci, vamos a realizar la ampliación de una zona del espectro, tal y como puede verse en la figura 3.7. La característica que más resalta es la irregularidad del espectro, en el que se alternan zonas muy densamente pobladas de gaps con regiones que parecen tener una cierta continuidad. En cualquier caso, este último aspecto es difícil de decidir, porque cabe la posibilidad de que en las zonas aparentemente continuas lo que ocurra en realidad sea la existencia de gaps demasiado pequeños como para ser puestos de manifiesto en esta escala.

Junto con lo ya comentado, una característica común que aparece en los dos sistemas es la tendencia del espectro a discretizarse en regiones muy estrechas rodeadas de grandes gaps cuando aumentamos la diferencia  $\varepsilon_A - \varepsilon_B$ . Todas estas características que provienen de la extraña discretización del espectro en ambos casos puede cuantificarse a través de la dimensión fractal, magnitud que es introducida a continuación.

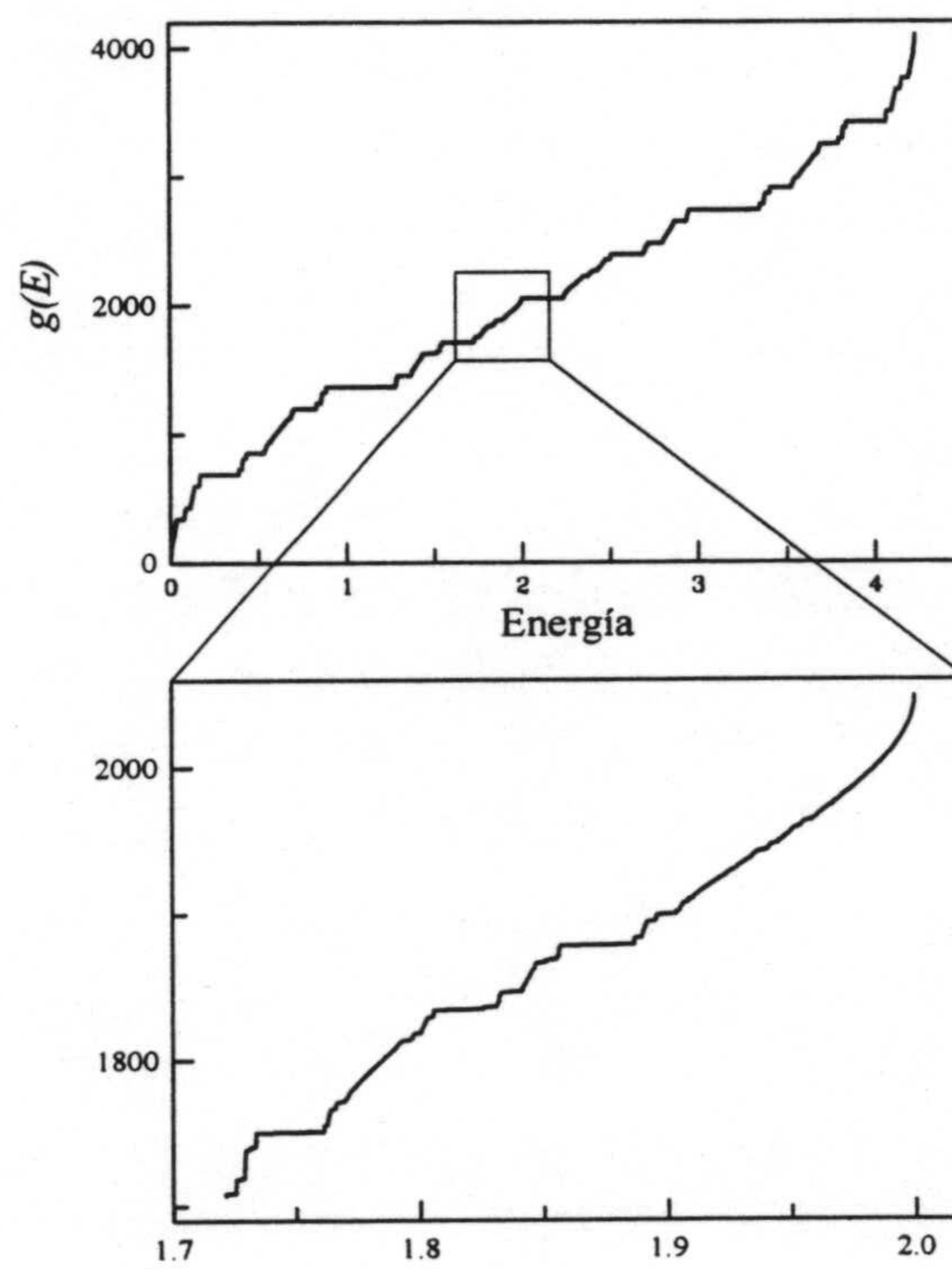
### 3.5 La dimensión fractal

Podemos definir la dimensión fractal de un cierto conjunto mediante la técnica de recubrimiento por cajas (box counting en inglés). El nombre 'caja' es genérico; representa, por ejemplo, a un segmento para medir un conjunto de puntos de  $\mathcal{R}$ , a un cuadrado para medir un conjunto de puntos de  $\mathcal{R}^2$ , o a un cubo (o caja) para medir un conjunto de puntos de  $\mathcal{R}^3$ . En dicha técnica, dado un determinado conjunto, se cuenta el número  $n$  de cajas de tamaño  $\epsilon$  que son necesarias para recubrir completamente el conjunto. La dependencia del número de cajas  $n$  con su tamaño  $\epsilon$  es de la forma:

$$n(\epsilon) \propto \epsilon^{-d} \quad (3.45)$$



**Figura 3.6:** Densidades integradas de estados para una cadena de Thue-Morse en el modelo de fuerte ligadura. El sistema está formado por 4096 átomos y las energías son  $\epsilon_B = 0$  y  $\epsilon_A = 1$  y  $2$  para las curvas superior e inferior, respectivamente.



**Figura 3.7:** Densidad integrada de estados para una cadena de Thue-Morse con 4096 átomos en el modelo de fuerte ligadura, y con  $\epsilon_A = 1$  y  $\epsilon_B = 0$ . Se amplía una pequeña zona del espectro para apreciar más detalles.

donde  $d$  es, por definición, la dimensión fractal del conjunto. Aunque existen definiciones de dimensión fractal mucho más rigurosas que la dada por (3.45), basadas en una teoría más general de la medida elaborada por Hausdorff, esta definición simple es suficiente para nuestros propósitos en esta memoria.

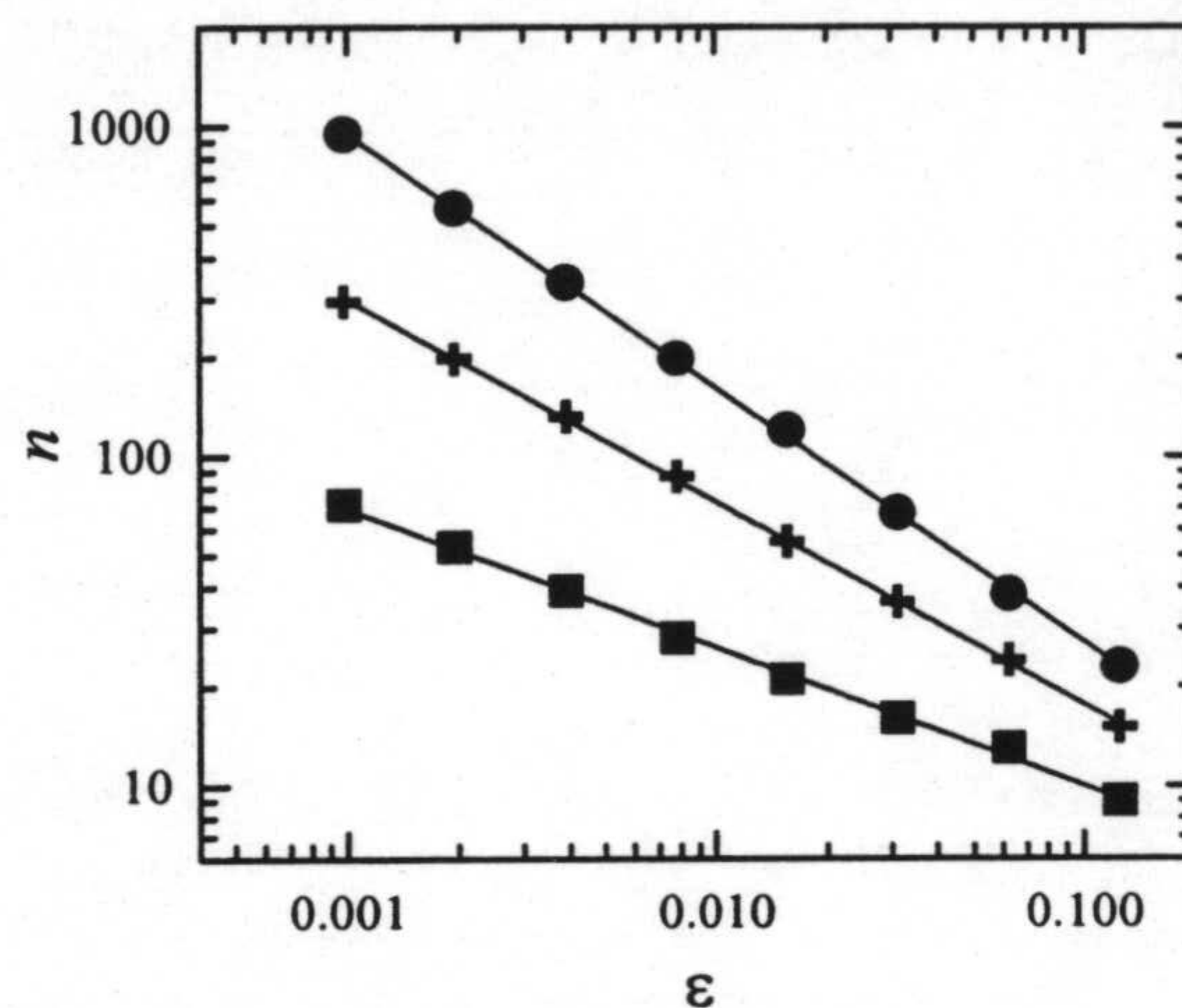
Es fácil construir un algoritmo que calcula la dimensión fractal directamente a partir de su definición. Dado que nuestros espectros son cada uno un conjunto de números reales, nuestras cajas serán segmentos. Para una anchura de segmento dada, dicho algoritmo cuenta el número de ellos que son necesarios para cubrir el espectro completo. A continuación, varía la anchura de los segmentos considerados y repite el proceso. Si representamos el número de segmentos utilizados  $n(\epsilon)$  frente a la longitud  $\epsilon$  de los segmentos, obtenemos la dimensión fractal a través de un ajuste en ley de potencias.

Para asegurarnos que nuestro algoritmo funciona correctamente, podemos utilizarlo en sistemas en los que conocemos previamente el resultado. Tanto en secuencias periódicas como desordenadas, la estructura de la DIE, a pesar de que puede ser más o menos irregular, no presenta esa compleja estructura de gaps que se repiten frente a cambios de escala, sino que posee continuidad. Este hecho hace que la dimensión fractal en estos dos casos sea la unidad, y nuestro algoritmo, dentro de un margen razonable de error, proporciona este valor.

Puesto que ya disponemos de la herramienta de cálculo, podemos aplicarla a las secuencias cuasiperiódicas que estamos considerando. En las figuras 3.8 y 3.9, representamos en una doble escala logarítmica el número de segmentos que se necesitan para recubrir diferentes espectros de secuencias de Fibonacci y Thue-Morse, respectivamente, frente a su anchura. Los sistemas están compuestos por 6765 átomos en el caso de Fibonacci y 4096 en el de Thue-Morse. Las correspondientes dimensiones fractales son las pendientes, en valor absoluto, de las rectas ajustadas según la ecuación (3.45). Los resultados obtenidos son 0.77 para  $\epsilon_A - \epsilon_B = 1$ , 0.61 para  $\epsilon_A - \epsilon_B = 2$  y 0.42 para  $\epsilon_A - \epsilon_B = 5$  en el caso de Fibonacci. Para la secuencia de Thue-Morse, obtenemos 0.68 para  $\epsilon_A - \epsilon_B = 1$  y 0.58 para  $\epsilon_A - \epsilon_B = 2$ . Estos



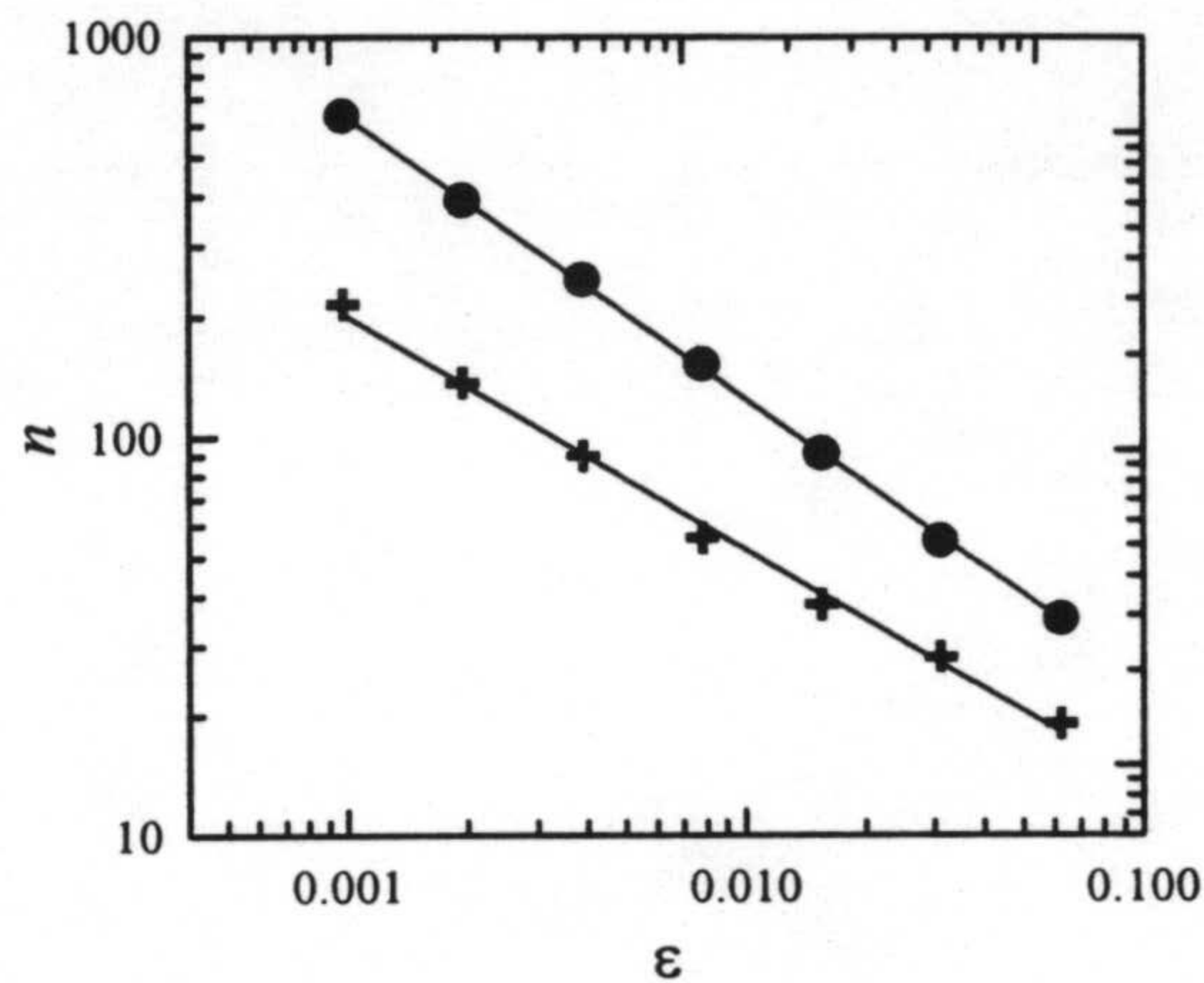
datos confirman lo que intuitivamente ya habíamos podido apreciar, es decir, que



**Figura 3.8:** Número de segmentos utilizados para recubrir el espectro, en función de su anchura, para tres secuencias de Fibonacci calculadas con el modelo de fuerte ligadura. Los parámetros son  $N = 6765$  átomos y  $V = 1$  en todos los casos, y  $\varepsilon_A - \varepsilon_B = 1$  (círculos), 2 (cruces) y 5 (cuadrados). El valor absoluto de las pendientes de las rectas de ajuste es la dimensión fractal de cada espectro.

al incrementarse la diferencia  $\varepsilon_A - \varepsilon_B$ , el espectro tiende a discretizarse cada vez más y la compleja estructura de gaps cobra, si cabe, más relevancia, lo que queda perfectamente reflejado de manera cuantitativa en la dimensión fractal.

Aparte de las características comunes a ambos sistemas, hemos de hacer notar una diferencia que aparece entre ellos y es que, para sistemas equivalentes de Fibonacci y Thue-Morse construidos con los mismos parámetros, obtenemos sistemáticamente una dimensión fractal menor para las secuencias de Thue-Morse. Esto indica una estructura de gaps más profunda e irregular, lo cual nos sirve como criterio para diferenciar ambos sistemas. Dicho resultado contradice a algunos obtenidos previamente en la bibliografía (Rikiund *et al.*, 1987), que concluían que las secuencias de Thue-Morse eran más regulares que las de Fibonacci.



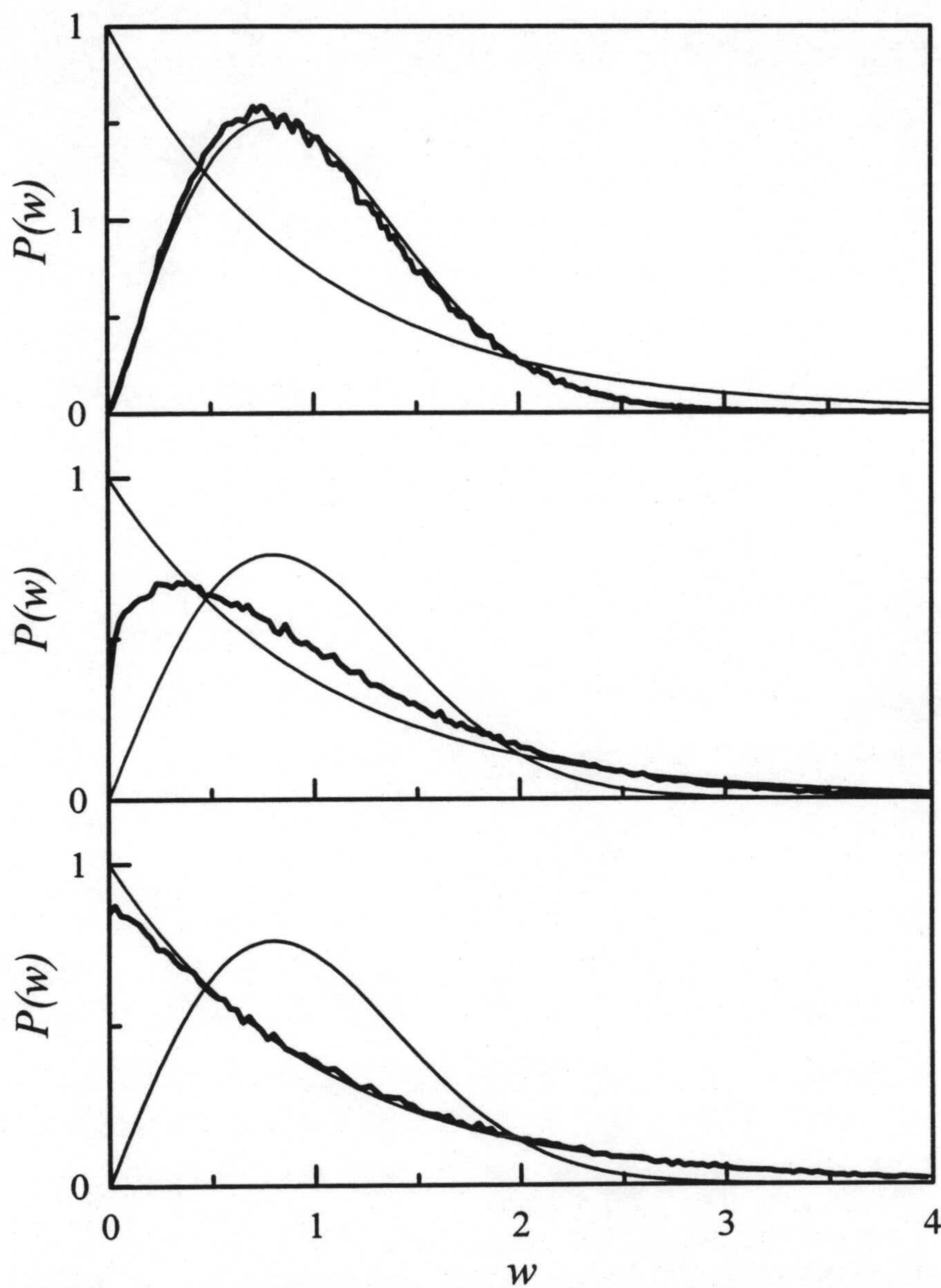
**Figura 3.9:** Número de segmentos utilizados para recubrir el espectro en función de su anchura para dos secuencias de Thue-Morse en el modelo de fuerte ligadura. Los parámetros son  $N = 4096$  y  $V = 1$  en todos los casos, y  $\varepsilon_A - \varepsilon_B = 1$  (círculos) y 2 (cruces).

## 3.6 Estadística de niveles

### 3.6.1 Sistemas desordenados

Vamos a proceder a calcular la función de espaciamiento de niveles energéticos adyacentes en el espectro de sistemas desordenados. Posteriormente usaremos esta información como punto de partida para poder interpretar los resultados que obtendremos para secuencias cuasiperiódicas. En la figura 3.10 podemos ver diferentes estadísticas de niveles, obtenidas numéricamente para el modelo de Anderson con diferentes valores del desorden. La unidad de energía en el eje horizontal es, en todos los casos, el espaciado medio entre niveles. Junto a los resultados numéricos, representamos también las distribuciones teóricas de Wigner y Poisson.

Para desordenes bajos, se observa una correlación energética muy alta, que ocasiona una repulsión entre niveles, y la curva es similar a la estadística de Wigner para el COG, que describimos en el capítulo 1. Conforme aumenta el desorden,



**Figura 3.10:** Estadística de niveles para el modelo de Anderson con  $N = 500$ . El desorden aumenta de la gráfica superior a la inferior, y sus valores son 1, 2.5 y 7, respectivamente. También se representan las distribuciones teóricas de Wigner y Poisson para poder comparar con los resultados numéricos.

la correlación entre energías disminuye, con lo que desaparece la repulsión entre niveles y los resultados se ajustan más a una distribución exponencial como la de Poisson. Como ya anticipamos en el capítulo 1, este resultado de la estadística de niveles es explicable en términos de las funciones de onda. Si el desorden es pequeño, también lo será la localización y por lo tanto, las funciones de onda estarán más extendidas, lo que produce que exista un solapamiento entre ellas, y, por tanto, una repulsión de niveles. Este hecho es lo que aparece reflejado en la estadística de Wigner. Si, por el contrario, aumentamos el desorden, conseguimos una mayor localización de las funciones de onda y en consecuencia, un menor solapamiento de las mismas. Esto hace que la repulsión de niveles decrezca, con lo que disminuye la correlación energética y la distribución de espaciamiento evoluciona hasta reflejar el comportamiento de la estadística de Poisson (Brody *et al.*, 1981; Wischmann y Müller-Hartmann, 1990). El análisis detallado del modelo de Anderson y las propiedades estadísticas de su espectro ha sido objeto de numerosos estudios en la bibliografía en una dimensión (Wischmann y Müller-Hartmann, 1990), dos dimensiones (Soukoulis *et al.*, 1982) y tres dimensiones (Hofsteter & Shreiber, 1993).

### 3.6.2 Sistemas cuasiperiódicos

A fin de estudiar la distribución de espaciamiento energético entre niveles adyacentes, hemos construido y calculado el espectro para secuencias de Fibonacci y Thue-Morse utilizando los dos modelos básicos de esta memoria, es decir, el modelo de funciones  $\delta$  y el modelo de fuerte ligadura. Los resultados, como era de esperar, no dependen del modelo seguido, y las propiedades cualitativas son idénticas en ambos casos: conforme aumentamos la diferencia entre las dos energías básicas que utilizamos para construir la secuencia  $\varepsilon_A - \varepsilon_B$ , el comportamiento de ambas secuencias se acerca al de los sistemas desordenados, como puede verse en la figura 3.11.

Dada la estructura de gaps puesta de manifiesto por las DIE, no se puede

realizar una estadística del espectro completo, sino, a lo sumo, de una zona de energía (Carpena, Gasparian & Ortuño, 1995). En la figura 3.11 representamos la distribución del espaciamiento entre niveles más próximos para una secuencia de Fibonacci construida con diferentes parámetros. El cálculo se realiza en la banda central de energía, situada entre los dos gaps más grandes para tres espectros discretos de Fibonacci obtenidos con el modelo de fuerte ligadura y con energía de transferencia entre vecinos más próximos igual a la unidad. Las unidades en el eje de abscisas están normalizadas de forma que la unidad corresponde al espaciado medio en esa banda de energía. El número de átomos de la cadena es  $N = 6765$  y las diferencias  $\varepsilon_A - \varepsilon_B$  son 1, 5 y 10 para las curvas superior, media e inferior, respectivamente. También se representa en cada gráfica las distribuciones teóricas de Wigner y Poisson para poder comparar fácilmente.

Para evitar redundancia, omitimos en este caso la representación análoga a la anterior obtenida para la secuencia de Thue-Morse, pues los resultados obtenidos son cualitativamente los mismos.

Podemos observar que la característica más destacada es que la diferencia  $\varepsilon_A - \varepsilon_B$  actúa en cierta forma como un parámetro de desorden (Carpena, Gasparian & Ortuño, 1995). Si esta diferencia es pequeña (gráfica superior), la distribución es picuda y centrada en el espaciado medio, lo que denota un espaciado casi constante como ocurre en los sistemas ordenados. Si incrementamos esta diferencia (gráfica central), el resultado se ajusta a la distribución de Wigner, que corresponde a un sistema débilmente desordenado, en el que todavía existe correlación entre los niveles energéticos. Si hacemos crecer todavía más la diferencia  $\varepsilon_A - \varepsilon_B$ , las energías dejan de estar correlacionadas y el sistema se ajusta a la estadística de Poisson, que es la que caracteriza a los sistemas con un alto grado de desorden.

### 3.7 El efecto del campo eléctrico sobre el espectro discreto

Hasta ahora, hemos analizado con todo detalle diversas características del espectro energético tanto en sistemas periódicos como cuasiperiódicos usando varios modelos. En esta sección, nos proponemos estudiar como esas características se ven modificadas si introducimos un campo eléctrico uniforme, que llamaremos de ahora en adelante  $\mathcal{E}$ .

Estrictamente hablando, y como ya comentamos en el primer capítulo de este trabajo, la existencia de espectro discreto en sistemas cuánticos cuando se introduce un campo eléctrico uniforme es paradójica. La inclusión en el Hamiltoniano del sistema de un potencial del tipo  $U(x) = e\mathcal{E}x$ , derivado del campo eléctrico  $\mathcal{E}$ , hace que la solución de la correspondiente ecuación de Schrödinger se extienda desde  $-\infty$  a  $+\infty$ . Dado que la caída de energía potencial en el sentido del eje  $x$  negativo está dominada por el término lineal asociado al campo eléctrico, independientemente de lo baja que sea la energía que consideremos, el sistema siempre estará abierto por su extremo izquierdo. Consecuentemente, si el sistema está abierto, difícilmente podemos hablar de espectro discreto, porque éste sólo aparece para energías para las que el sistema es cerrado. Sin embargo, ya se empezó a especular inmediatamente después de la creación de la mecánica cuántica con los extraños efectos que un campo eléctrico uniforme produciría sobre el espectro energético de un cristal. Así, cabe recordar los efectos ya comentados en la introducción de este trabajo de la escalera de Wannier-Stark, la localización de Stark, y las oscilaciones de Bloch. Estos efectos, que han suscitado una profunda controversia en las últimas décadas debido a la dificultad que presentan para ser observados experimentalmente, han podido detectarse en el laboratorio gracias al desarrollo tecnológico que ha dado lugar al desarrollo de las superredes (ver capítulo de la masa efectiva). Así, parece firmemente establecido que la aplicación de un campo eléctrico produce la aparición de estados cuasiligados, es decir, estados que

pertenecen al espectro continuo, pero cuya capacidad de difundirse (escaparse al infinito) es pequeña, y están localizados espacialmente en una región del sistema.

En esta sección, nos proponemos estudiar la aparición de este espectro especial en sistemas periódicos y cuasiperiódicos, y observar la aparición de escaleras de Wannier-Stark. Así mismo, estudiaremos como se ven alteradas las propiedades fractales de los espectros cuasiperiódicos, y también veremos qué ocurre con las estadísticas de niveles. Para ello, lo más conveniente es utilizar hamiltonianos continuos, como el modelo de funciones  $\delta$  o el modelo de multicapas. La ventaja del primero, como veremos después, es que proporciona una solución exacta, y lo usaremos para estudiar sistemas pequeños. Sin embargo, a la hora de estudiar sistemas grandes para ver propiedades estadísticas, el tiempo de computación aumenta enormemente, y utilizaremos una aproximación a través de un modelo multicapa.

### 3.7.1 Solución exacta. Modelo de funciones $\delta$ .

En el modelo de funciones  $\delta$  podemos calcular el espectro discreto de sistemas bajo los efectos del campo eléctrico de manera exacta, sin más que conocer la adecuada función de Green del sistema sin perturbar. En este caso, al disponer de esa función de Green, podemos calcular exactamente sus polos, teniendo en cuenta que el campo eléctrico afecta al sistema desde  $+\infty$  hasta  $-\infty$ .

Vamos a estudiar cómo se ve afectado el espectro discreto de una cadena de pozos tipo  $\delta$  cuando se aplica un campo eléctrico uniforme al sistema. La manera de proceder será, como ya hicimos con anterioridad, analizar el caso de un único pozo, para después ir ampliando el sistema a tamaños mayores. Las maneras de identificar a los estados cuasiligados en la bibliografía han sido básicamente dos: como picos en la densidad de estados, o como valores resonantes en el coeficiente de transmisión (Cota *et al.*, 1987; Zekri *et al.*, 1996). Aquí, al utilizar el método del determinante característico, detectaremos este espectro como polos de la función de Green del sistema completo, o equivalentemente, como ceros del determinante

característico. En el caso que nos ocupa, y como puede deducirse de la función de Green del medio sin perturbar que explicamos a continuación, el determinante es real, lo que acelera todavía más el procedimiento numérico para la búsqueda de ceros. Para poder aplicar el método del determinante (ver capítulo dos), necesitamos conocer la función de Green adecuada al caso en el que hay un campo eléctrico aplicado en el sistema. Una función de Green apropiada para el estudio del espectro energético, teniendo en cuenta que  $e\mathcal{E} = F$ , siendo  $F$  la fuerza eléctrica, es la siguiente (Glasser *et al.*, 1990):

$$G_0(x, x') = -\frac{\pi}{F^{1/3}} Ai(\xi^+) Bi(\xi^-) \quad (3.46)$$

donde  $\xi = (Fx - E) / F^{2/3}$ ,  $\xi^+(\xi^-) = \max(\min)(\xi, \xi')$ , y  $Ai$  y  $Bi$  son las funciones de Airy (Abramovitz & Stegun, 1965).

### Sistema con un pozo $\delta$

Vamos a empezar considerando un potencial de la forma:

$$V(x) = -V_1\delta(x - x_1) + Fx. \quad (3.47)$$

Para encontrar el espectro discreto de este potencial, aplicando el método del determinante característico, basta con resolver la ecuación  $D_1 = 0$ , puesto que nuestro determinante será de orden  $1 \times 1$ . Más explícitamente, y dada la definición de  $D_1$ , la ecuación resulta ser:

$$1 - V_1 G_0(x, x) = 0 \quad (3.48)$$

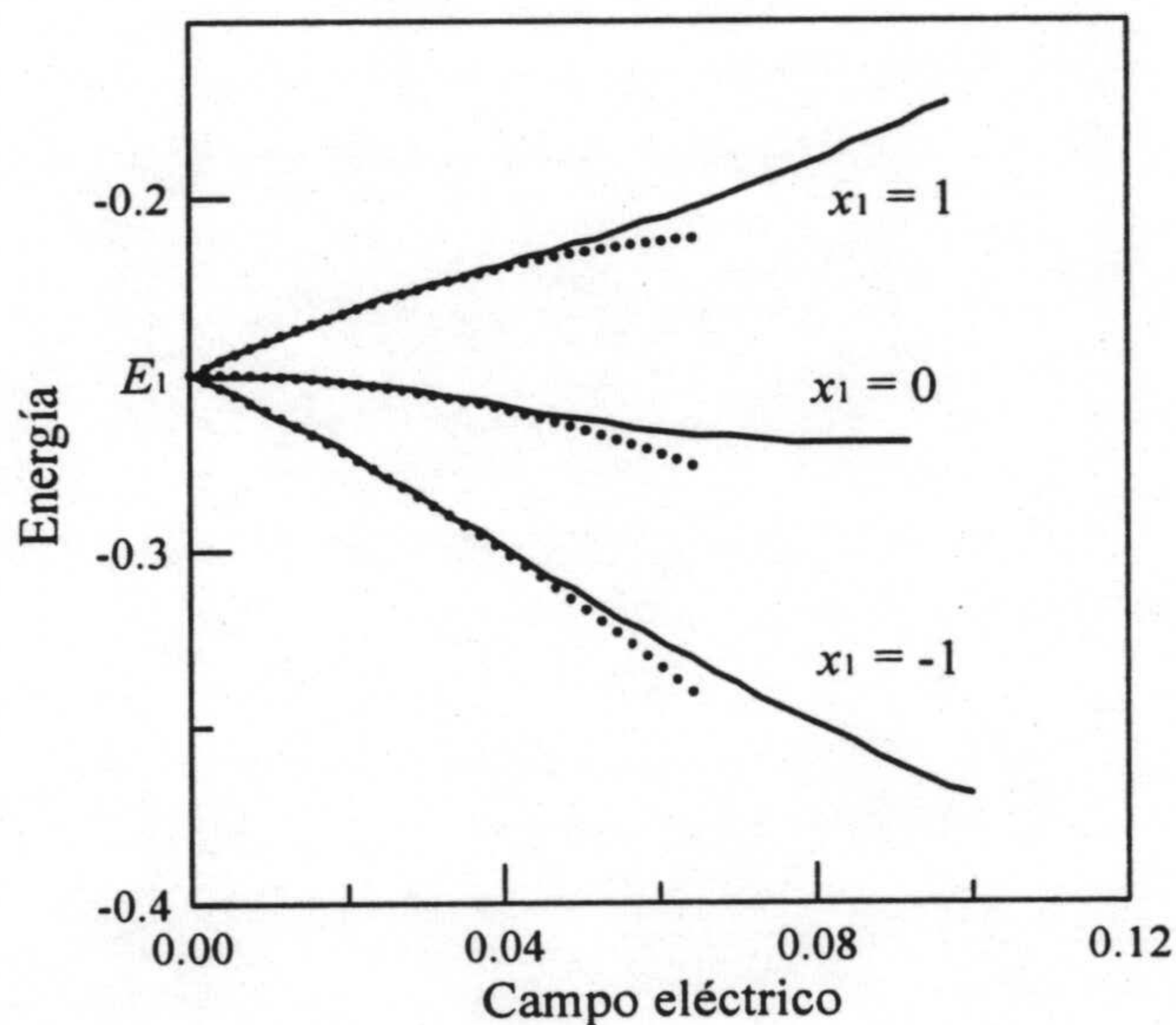
ecuación que debe resolverse numéricamente debido a la presencia de las funciones de Airy.

La distinción que hacíamos, cuando estudiábamos el espectro de pozos  $\delta$  sin campo eléctrico, acerca de si  $x_1 = 0$  o  $x_1 \neq 0$ , que era trivial anteriormente, ahora resulta ser enormemente importante. Los resultados se muestran en la figura 3.12, en la que representamos el espectro cuasiligado del potencial (3.47) como función



del campo eléctrico aplicado,  $F$  ( $F \propto \mathcal{E}$ , o bien  $F = \mathcal{E}$  si, como hacemos de ahora en adelante, consideramos que  $e = 1$ ). Los valores utilizados, tal y como se muestra en la figura, son  $x_1 = 0$ ,  $x_1 = -1$  y  $x_1 = 1$  (líneas continuas), mientras que en ambos casos consideramos  $V_1 = 1$ .

Como era de esperar, en el límite  $F \rightarrow 0$ , obtenemos en ambos casos el valor que ya obtuvimos para  $F = 0$  dado en la ecuación (3.6), que aquí resulta ser  $E_1 = -1/4$ . La diferencia entre el caso simétrico ( $x_1 = 0$ ) y el asimétrico ( $x_1 \neq 0$ ) es que, en el primer caso, observamos un decrecimiento parabólico de la energía del único estado cuasiligado con respecto al campo eléctrico para valores pequeños de éste, mientras que en el segundo, la energía varía linealmente con el campo.



**Figura 3.12:** El espectro cuasiligado de un sistema con un solo pozo  $\delta$ , colocado en tres lugares diferentes,  $x_1 = 1$ ,  $x_1 = 0$  y  $x_1 = -1$  (líneas continuas). Se muestra la región de pequeño campo eléctrico, y en líneas punteadas los resultados obtenidos usando teoría de perturbaciones.

Una explicación de lo que ocurre para valores pequeños del campo puede obtenerse usando teoría de perturbaciones. En el caso en que  $x_1 = 0$ , la correspondiente función de onda para el estado ligado con  $F = 0$  dada por (3.7) posee simetría par,

y por lo tanto, la perturbación de primer orden a la energía es cero. Usando teoría de perturbaciones de segundo orden, hemos obtenido la expresión para pequeños valores del campo de la energía del estado cuasiligado, que resulta ser:

$$E = -\frac{V_1^2}{4} - \frac{2\pi}{V_0^4} F^2. \quad (3.49)$$

Este decrecimiento cuadrático de la energía en función del campo, que ha sido obtenido variacionalmente en otros tipos de pozos (Bastard *et al.*, 1983), se muestra también en la figura 3.12 como una curva punteada. En dicha figura, puede apreciarse como el término perturbativo coincide para valores pequeños del campo con la solución numérica de la ecuación (3.48).

Sin embargo, si  $x_1 \neq 0$ , la función de onda correspondiente a  $F = 0$  dada por (3.8) no posee paridad, y la corrección de primer orden a la energía no es cero. En este caso, la expresión que hemos obtenido usando perturbaciones de primer y segundo orden para la energía del estado cuasiligado es

$$E = -\frac{V_1^2}{4} + Fx_1 - \frac{2\pi}{V_0^4} F^2. \quad (3.50)$$

Por consiguiente, ahora obtenemos un comportamiento lineal de la energía con respecto al campo, que también se muestra como líneas punteadas en la figura 3.12, y que coincide con la solución numérica para pequeños valores de  $F$ .

Las expresiones perturbativas dadas por (3.49) y (3.50) podrían haberse obtenido directamente a través del método del determinante característico usando las expresiones asintóticas de las funciones de Airy (Abramovitz & Stegun, 1965). Para el caso en que no hay simetría, por ejemplo, tenemos que:

$$Ai(-\xi) \sim \frac{1}{2} \pi^{-1/2} |\xi|^{-1/4} \exp\left(-\frac{2}{3} |\xi|^{3/2}\right), \quad \xi \rightarrow -\infty \quad (3.51)$$

y

$$Bi(-\xi) \sim \pi^{-1/2} |\xi|^{-1/4} \exp\left(\frac{2}{3} |\xi|^{3/2}\right), \quad \xi \rightarrow -\infty \quad (3.52)$$

con  $\xi = (Fx_0 - E)/F^{2/3}$ . Cuando el campo tiende a cero,  $F \rightarrow 0$ , tenemos que  $\xi \rightarrow \infty$ . Haciendo uso de (3.46) para construir la función de Green para valores

pequeños de  $F$ , llegamos a

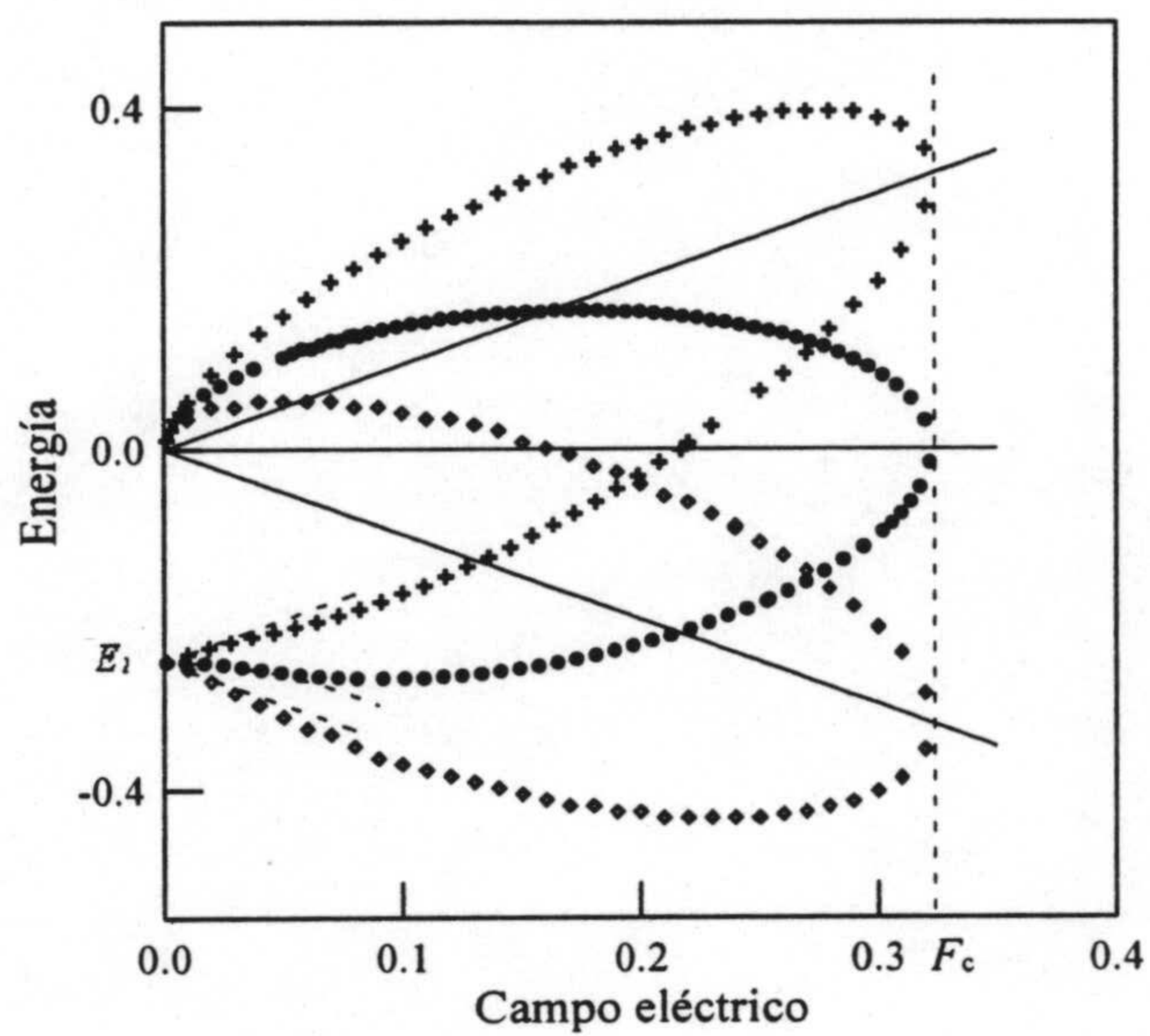
$$G_0(x, x) = \frac{1}{2\sqrt{|E - Fx_0|}}. \quad (3.53)$$

Si insertamos la función anterior en (3.48), obtenemos la misma relación de la energía del estado cuasiligado con el campo eléctrico que la dada en (3.50).

Hasta ahora sólo hemos estudiado el comportamiento del espectro para pequeños valores del campo eléctrico aplicado, cuando es válida la teoría de perturbaciones. Una cuestión interesante es si el pozo cuántico considerado es capaz de mantener un estado cuasiligado en su interior, o existe algún valor del campo eléctrico para el que el espectro cuasiligado desaparece. De la misma forma, se puede cuestionar si este campo crítico, en el caso de que exista, depende o no de  $x_1$ , como ocurre con el espectro para pequeños valores del campo eléctrico. Para responder a estas cuestiones, es conveniente realizar un estudio numérico para un rango mayor de campo eléctrico aplicado y de energía.

Los resultados de dicho estudio aparecen reflejados en la figura 3.13. Los parámetros utilizados son  $V_1 = 1$ , y  $x_1 = 1$  (cruces),  $x_1 = 0$  (círculos) y  $x_1 = -1$  (diamantes). Como era de esperar, los valores del espectro dependen del punto  $x_1$  donde está colocado el pozo. Sin embargo, esa dependencia resulta ser engañosa. El motivo es que, para poder evaluar correctamente el tipo de espectro, hemos de tener en cuenta si el estado que obtenemos se encuentra dentro del pozo correspondiente (estado cuasiligado), o si por el contrario, éste se encuentra situado sobre el pozo, y forma lo que se conoce como estado resonante, o resonancia. El problema es que, dependiendo de la posición en la que se encuentre el pozo, el origen o cima del mismo varía su energía en función del campo eléctrico. Para un determinado pozo situado en  $x_1$ , la cima del mismo varía con el campo según la función  $E = Fx_1$ . Esta función, para cada valor de  $x_1$ , aparece representada también en la figura 3.13 como líneas continuas.

Esta función nos proporciona un criterio definitivo para distinguir entre estados cuasiligados y resonancias. Si para un determinado pozo obtenemos un polo de la



**Figura 3.13:** Resultados del espectro energético de un pozo  $\delta$  situado en tres posiciones diferentes como función del campo eléctrico aplicado. Los parámetros son  $V_1 = 1$  y  $x_1 = 1$  (cruces),  $x_1 = 0$  (círculos), y  $x_1 = -1$  (diamantes). También se muestran en líneas continuas las funciones  $Fx_1$ .

FG por debajo de  $Fx_1$ , este polo debe corresponder a un estado cuasiligado, situado en el interior del pozo. Si por el contrario, el polo obtenido es mayor que  $Fx_1$ , el estado resultante se encuentra por encima del pozo, y por lo tanto corresponde a una resonancia. En trabajos previos de la bibliografía, esta distinción no estaba clara, y se escogía como energía límite entre estados cuasiligados y resonancias el valor  $E = 0$ , independientemente de la posición del pozo,  $x_1$ .

Los resultados obtenidos y representados en la figura 3.13 son bastante concluyentes. Para todos los casos, encontramos un estado cuasiligado en el interior del pozo, y un estado resonante sobre el mismo (sobre  $Fx_1$ ). La energía de estos dos estados varía con el campo, pero para campos altos, ambos estados se aproximan el uno al otro, uno desde el interior del pozo, y otro por encima de él. Finalmente, para un valor crítico del campo llamado  $F_c$  en la figura 3.13, los dos estados solapan exactamente en el origen del pozo (en  $E = F_c x_1$ ), y desaparecen. A partir de este valor del campo, el pozo es incapaz de mantener ningún cuasies-tado, y el espectro pasa a ser completamente continuo. El campo crítico  $F_c$  resulta ser el mismo para todos los casos, lo que se explica a continuación.

Si bien el comportamiento bruto del espectro es diferente para cada valor de  $x_1$ , el comportamiento neto del mismo, es decir, con respecto a la cima del pozo dada por  $E = Fx_1$ , es idéntico. Este hecho puede deducirse porque si a cada espectro representado en la figura 3.13 le sustraemos el término  $Fx_1$ , todos los espectros solapan en uno solo. Así, parece claro que existe un origen de energía 'natural' para el sistema, dado por  $Fx_1$ . Por lo tanto, podemos concluir que el espectro es universal. Debido a ello, no es sorprendente que el campo crítico sea el mismo en todos los casos.

La última cuestión que queda por dilucidar es el valor de este campo crítico que hace desaparecer el espectro cuasidiscreto. Para el valor  $F_c$  ocurre que  $E - F_c x_1 = 0$ . Así, la función de Green definida en (3.46) pasa a ser:

$$G_0(x_1, x_1) = -\frac{\pi}{F_c^{1/3}} Ai(0) Bi(0). \quad (3.54)$$

En este caso, el espectro viene determinado por la solución de la ecuación (3.48), con  $G_0(x_1, x_1)$  la dada en (3.54). Conocidos los valores de  $Ai(0)$  y  $Bi(0)$  (Abramovitz & Stegun, 1965), la ecuación (3.48) es en este caso:

$$1 - V_1 \frac{\pi}{F_c^{1/3}} \frac{\sqrt{3}}{3^{4/3} \Gamma(2/3)^2} = 0 \quad (3.55)$$

que puede resolverse fácilmente para obtener el valor del campo crítico (Carpena, Gaspariian & Ortuño, 1997c):

$$F_c = \frac{\pi^3}{3^{5/2} \Gamma^6(2/3)} V_1^3. \quad (3.56)$$

Este valor, que puede ser muy bien aproximado por  $F_c \approx V_1^3/3$  coincide exactamente con los resultados numéricos presentados en la figura 3.13.

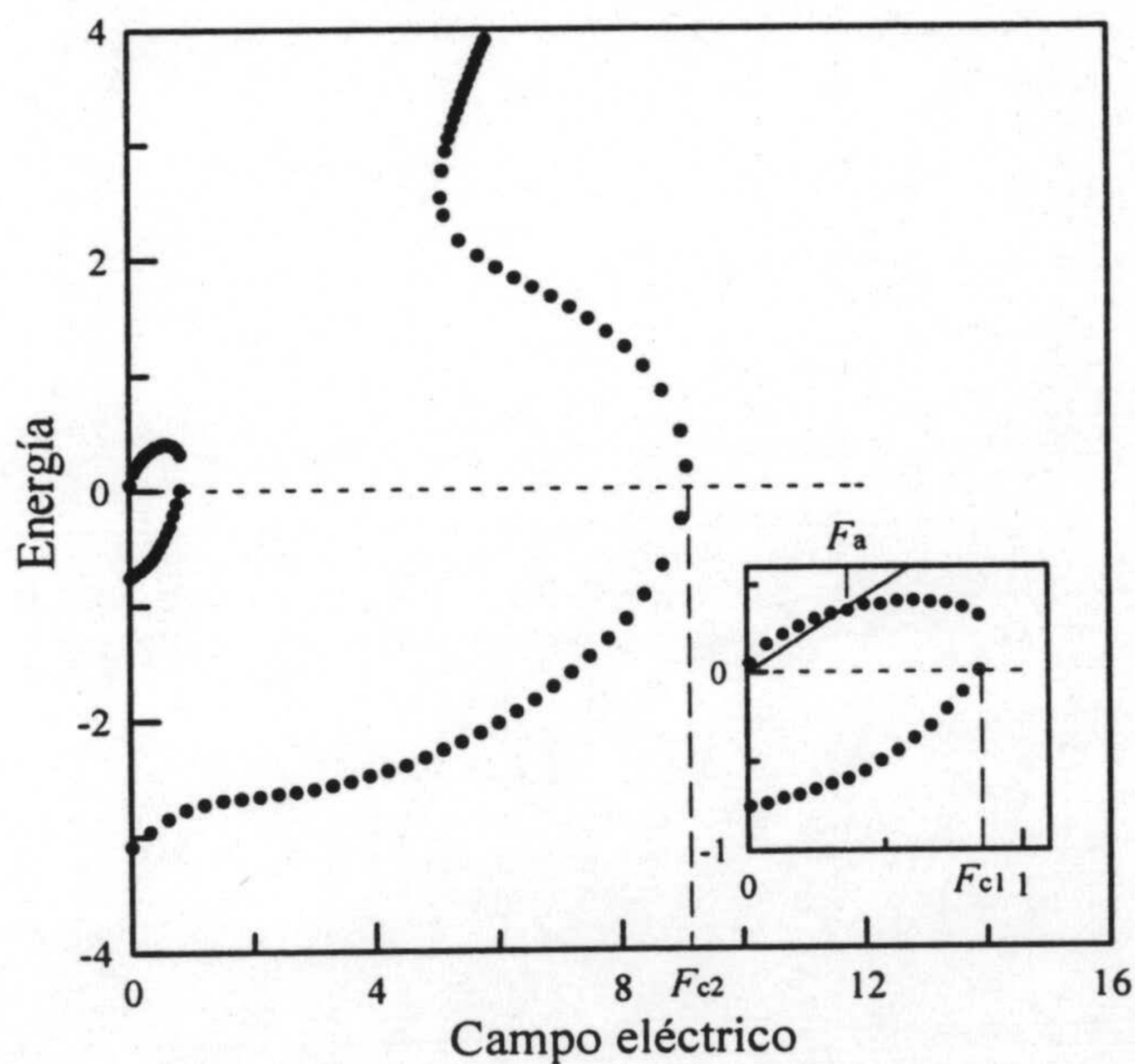
### Sistema con dos pozos $\delta$

Al aplicar un campo eléctrico uniforme a un sistema formado por dos pozos tipo  $\delta$ , las energías de los estados cuasiligados han de obtenerse de nuevo numéricamente, debido a que, como antes,  $G_0$  está definida en términos de las funciones de Airy. El cálculo numérico se realiza usando el determinante característico, que en este caso será de orden  $2 \times 2$ . En este problema, ya resulta útil la relación de recurrencia (3.22), donde  $A_2$  y  $B_2$  (ver capítulo dos) están dadas en términos de  $V_1$ ,  $G_0$  y  $\lambda_1$ .  $G_0 \equiv G_0(x, x)$  es de nuevo la escrita en (3.46), mientras que  $\lambda_1$  se obtiene por integración numérica de  $G_0$ .

En analogía con el caso de un único pozo  $\delta$ , hemos considerado aquí un potencial simétrico con respecto al punto  $x = 0$  ( $V(x) = -V_1(\delta(x-x_1) + \delta(x+x_1))$ ) y uno que no lo es ( $V(x) = -V_1(\delta(x-x_1) + \delta(x-x_2))$ ), con  $x_1 \neq x_2$ . Los resultados obtenidos son en cierta forma como una extensión natural de los obtenidos para un solo pozo, pero con algunas diferencias significativas. El comportamiento del espectro para valores pequeños de  $F$  resulta depender de la simetría del potencial. Si bien cuando  $F \rightarrow 0$  en ambos casos obtenemos el espectro correspondiente a  $F = 0$ , las energías de los cuasiestados varían de forma diferente según la simetría. Para potenciales

simétricos, obtenemos un decrecimiento cuadrático de las cuasienergías en función del campo eléctrico aplicado. Para potenciales no simétricos, lo que se observa es una variación lineal. Estos resultados, de la misma forma que se hizo para un único pozo  $\delta$ , pueden explicarse fácilmente usando teoría de perturbaciones.

En el caso simétrico, las dos funciones de onda correspondientes a los dos estados ligados del potencial sin campo eléctrico poseerán simetría. Por consiguiente, la corrección de primer orden a la energía es nula, y hay que utilizar la corrección de segundo orden. Dicha corrección depende de  $F^2$ , y se ajusta a los resultados numéricos. Por el contrario, para potenciales asimétricos, las correspondientes funciones de onda de los estados ligados del potencial sin campo eléctrico no tendrán simetría. En consecuencia, la corrección de primer orden a la energía no es nula, sino que depende linealmente de  $F$ , y también coincide con los correspondientes resultados numéricos.



**Figura 3.14:** Espectro universal de un sistema formado por dos pozos  $\delta$ . La distancia entre los pozos es la unidad, y  $V_1 = 3$ . El origen natural de energía está dado por  $E = 0$ .

Sin embargo, aunque la dependencia del espectro con la energía depende de la simetría, o lo que es lo mismo, del origen de energía escogido, que es arbitrario, es posible conseguir un espectro único si realizamos una traslación energética de todos los resultados para unificar el origen energético. Esto se consigue, por ejemplo, si a cada espectro se le resta un término dado por  $Fx_1$ . Dicho término proporciona la energía potencial de la cima del primer pozo (el situado a la izquierda) del sistema. Por lo tanto, hemos construido un origen de energía 'natural' dado precisamente por  $Fx_1$ , con respecto al cual el espectro es idéntico, independientemente de la simetría, y puede ser considerado como universal.

Dicho espectro universal se muestra en la figura 3.14, en la que en una ampliación se detalla el comportamiento del estado de mayor energía (menor en valor absoluto). La distancia entre los dos pozos es la unidad, y hemos utilizado  $V_1 = 3$ . El origen natural de energía está situado en  $E = 0$ , y aparece como una línea discontinua.

El problema que surge a la hora de interpretar los resultados es el siguiente: en el caso de un solo pozo, utilizamos el criterio de considerar como una resonancia aquel polo de la FG que estuviera por encima de la cima del pozo, es decir, por encima de  $Fx_1$ . Pero cuando tenemos dos pozos, es posible encontrar (de hecho, ocurre) un polo de la FG con una energía mayor que  $Fx_1$ , es decir, por encima del primer pozo, pero que esté por debajo de  $Fx_2$ , que da la energía de la cima del segundo pozo. En este caso, dicho polo puede corresponder a un estado resonante asociado al primer pozo, o a un estado cuasiligado asociado al segundo pozo.

El comportamiento del estado de menor energía es fácil de analizar. Cuando aumenta el campo eléctrico, la energía de este estado, que debe estar casi completamente asociado al pozo de menor energía potencial debido a la localización de Stark, varía con el campo, y acaba por irse aproximando al origen de energía, situado precisamente en la cima de este primer pozo. Simultáneamente, por encima del origen de energía, aparece una resonancia asociada a este pozo, cuya energía disminuye, acercándose también al origen. Finalmente, para un valor del campo



eléctrico llamado  $F_{c2}$  en la figura 3.14, el cuasiestado y la resonancia solapan exactamente en el origen de energía, y desaparecen. A partir de este valor del campo, el sistema de dos pozos es incapaz de mantener más cuasiestados, y el espectro se transforma en continuo.

Sin embargo, el cuasiestado de mayor energía, detallado en la zona ampliada de la figura 3.14 se comporta de manera peculiar. En este caso, podemos ver que para valores muy pequeños del campo, aparece una resonancia en  $E = 0$ , que se mantiene por encima de  $Fx_2$  (línea continua en la zona ampliada), función que proporciona la energía de la cima de este segundo pozo. Esta resonancia, por su comportamiento energético, parece claramente asociada a este segundo pozo porque acaba solapando con el estado correspondiente a éste. Sin embargo, para un valor de campo eléctrico llamado  $F_a$  en la figura 3.14, la resonancia atraviesa la línea continua  $Fx_2$ . Esto quiere decir que cruza la cima del pozo, y se introduce en él. De esta manera, el estado deja de ser una resonancia, y pasa a ser un estado cuasiligado asociado al pozo. Este fenómeno resulta sorprendente, porque en el rango  $F_a < F < F_{c1}$  dicho pozo contiene dos cuasiestados, fenómeno que nunca ocurre para un pozo tipo  $\delta$  en ausencia de campo eléctrico. Si el campo eléctrico sigue aumentando, los dos cuasiestados se aproximan mutuamente, y acaban por solapar y desaparecer en el origen natural de energía para un valor del campo eléctrico dado por  $F_{c1}$ . En vista de ello, cabe comentar que, de alguna manera, los dos cuasiestados reconocen el origen 'natural' de energía, porque acaban desapareciendo al encontrarlo. A partir de este valor  $F_{c1}$ , el pozo situado en  $x_2$  ya no es capaz de contener cuasiestados, y el espectro queda reducido a los estados asociados al pozo situado en  $x_1$ , cuyo comportamiento se ha explicado anteriormente.

En vista de los resultados ya comentados, pensamos que es conveniente modificar la clasificación espectral que se utiliza normalmente en la bibliografía. Dicha clasificación únicamente distingue entre cuasiestados y resonancias, sin aclarar demasiado la distinción entre ellas. Nosotros proponemos considerar un espectro dividido en tres clases, que se definen a continuación:

La primera clase espectral, que llamamos cuasiestados totales, pueden definirse como polos de la FG situados por debajo del origen de energía, situado por conveniencia en la cima del primer pozo energético. Dichos cuasiestados pertenecen a todo el sistema, porque la función de onda puede acceder a todos los pozos.

La segunda clase, que llamamos cuasiestados parciales, son polos de la FG situados por encima del origen de energía, pero que a la vez están por debajo de la cima energética del pozo al que estén asociados. Serán cuasiestados que, al estar por encima del origen de energía, no pueden acceder a todos los pozos del sistema. En particular, no pueden acceder al pozo situado a la izquierda, porque están por encima de él. Así, podemos concluir que no pertenecen al sistema total, sino sólo a su pozo correspondiente.

La tercera y última clase está constituida por las resonancias reales, que son polos de la FG situados por encima del origen de energía, y también por encima de la cima energética del pozo al que estén asociadas. La manera de saber a qué pozo se asocia una resonancia consiste en ver con qué cuasiestado solapa al final.

Por último, nos gustaría comentar que el campo crítico  $F_{c2}$  a partir del cual el espectro es continuo, y que es el que hace que desaparezca el cuasiestado asociado al pozo de menor energía potencial, es el mismo que el obtenido para el caso de un único pozo  $\delta$ , cuyo valor explícito está dado en la ecuación (3.56), y que resulta ser un valor universal que representa al campo eléctrico límite que hace que desaparezcan los cuasiestados, y sólo permanezca en el sistema el espectro continuo.

Conviene destacar aquí que, aparte de las resonancias mostradas en las figuras anteriores, en la región de energías positivas y campos eléctricos pequeños es posible encontrar un gran número de resonancias que adoptan patrones muy complejos, y que desaparecen al aumentar el campo eléctrico. Debido a los estados resonantes que hemos encontrado, y de los que se presenta evidencia experimental en Austin & Jaros (1987), es muy posible que la escalera de Wannier-Stark sólo esté bien definida en la región de campo eléctrico débil, cuando todavía no ha desaparecido ningún cuasiestado, y en la región energética por debajo del origen

natural de energía ( $E < 0$ ) para evitar a las resonancias. En la sección siguiente, en la que consideramos sistemas más grandes, nos limitamos a estos rangos para estudiar la aparición de la escalera de Wannier-Stark.

### Sistema con $N$ pozos $\delta$ .

Vamos a considerar ahora el caso más general, en el que el potencial incluye  $N$  pozos  $\delta$ :

$$V(x) = Fx - \sum_{n=1}^N V_1 \delta(x - x_n). \quad (3.57)$$

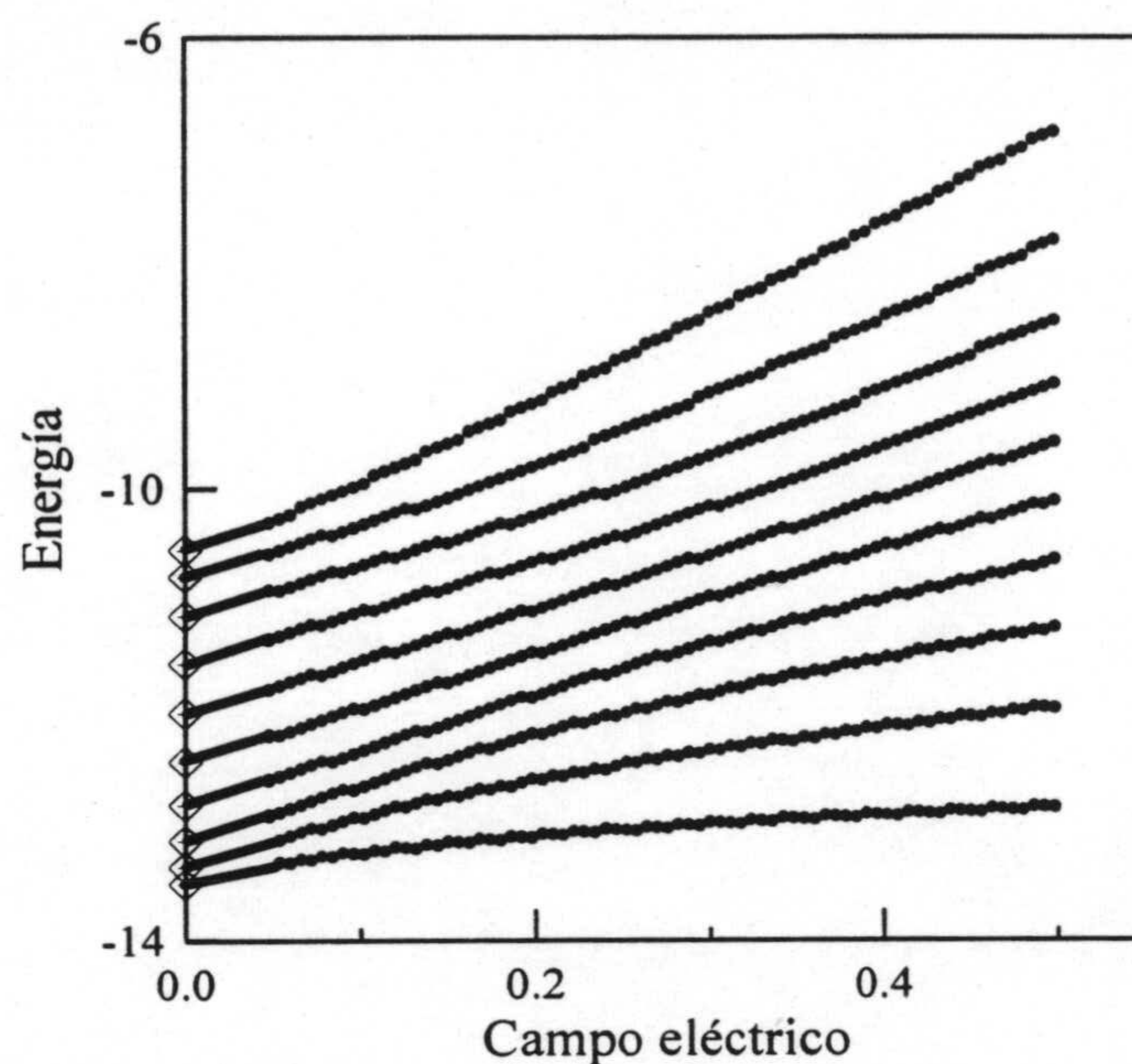
Los cuasiestados de este potencial pueden obtenerse, como antes, resolviendo numéricamente la ecuación  $D_N = 0$ , donde ahora  $D_N$  es un determinante  $N \times N$ . Para propósitos numéricos, usamos la relación de recurrencia (3.22), donde  $G_0$  está dada por (3.46) y  $\lambda_n$  se calcula por integración numérica de la función de Green anterior.

De la misma forma que ocurría en casos anteriores, el comportamiento en bruto del espectro depende de la simetría del potencial en la región de campo eléctrico pequeño. Para casos no simétricos, domina la corrección de primer orden, y se obtiene un comportamiento lineal de los cuasiestados, mientras que en el caso simétrico, donde la corrección de primer orden a la energía es nula, se obtiene un decrecimiento cuadrático de la energía de los cuasiestados. El comportamiento diferente asociado a la simetría puede ser explicado exactamente igual a como se hizo para sistemas con 1 y 2 pozos  $\delta$ , a través del uso de la teoría de perturbaciones.

Sin embargo, como extensión natural de los casos anteriores, para sistemas grandes también es posible la obtención de un espectro universal. Debido a que un desplazamiento en  $x$  equivale a un desplazamiento energético, si se realiza un cambio adecuado del origen de energía, independientemente de la simetría original todos los espectros solapan en uno único, que llamamos espectro universal.

Los resultados obtenidos para el espectro universal de un sistema formado por 10 pozos aparecen en la figura 3.15, en la que mostramos los cuasiestados obtenidos

en un sistema en función del campo eléctrico (en escala logarítmica) con  $V_1 = 7$  y la distancia interpozos igual a la unidad.



**Figura 3.15:** El espectro universal de un sistema con 10 pozos  $\delta$  en función del campo eléctrico aplicado. La amplitud es  $V_1 = 7$ , y la distancia entre los pozos es la unidad.

Cuando  $F \rightarrow 0$ , obtenemos exactamente el espectro correspondiente al mismo sistema sin campo eléctrico aplicado, que aparece marcado con rombos en la figura 3.15. Conforme incrementamos el valor de  $F$ , las cuasienergías aumentan de forma prácticamente lineal

Aparte de lo ya comentado, cabe añadir que para la región de campo eléctrico mostrada, en la que no han comenzado los fenómenos de resonancia, se puede observar también como el campo afecta al espaciamiento energético entre cuasiestados consecutivos. Así, se observa que en la región central de la figura, este espaciado es prácticamente constante, por lo que un corte vertical muestra una escalera de Wannier-Stark.

### 3.7.2 Sistemas con dos tipos de pozos

#### Sistemas periódicos

A la hora de estudiar el espectro discreto de cadenas periódicas, nos limitamos voluntariamente a sistemas formados por un único tipo de pozo  $\delta$ , que se repetía a lo largo de la secuencia. El motivo es que todas las propiedades que hemos deducido para un único tipo de pozo, se pueden extender de manera directa a cadenas binarias, cuyo periodo está formado por dos pozos diferentes. Por ejemplo, cuando se acoplan sistemas binarios, el espectro discreto estará formado por dos bandas, cada una de ellas originadas por un tipo de pozo. Sin embargo, las propiedades de cada una de estas bandas serán iguales a la de la única banda que resulta al considerar un único tipo de pozo, y que ya hemos estudiado previamente.

No obstante, cuando consideramos el efecto de la aplicación de un campo eléctrico a un sistema binario, aparece un fenómeno totalmente nuevo, y que no aparece en sistemas con un sólo tipo de pozo con campo eléctrico aplicado. Para explicar en que consiste, vamos a considerar por sencillez un potencial formado por dos pozos  $\delta$ , con dos amplitudes diferentes,  $V_1$  y  $V_2$ :

$$V(x) = -V_1\delta(x - x_1) - V_2\delta(x - x_2) \quad (3.58)$$

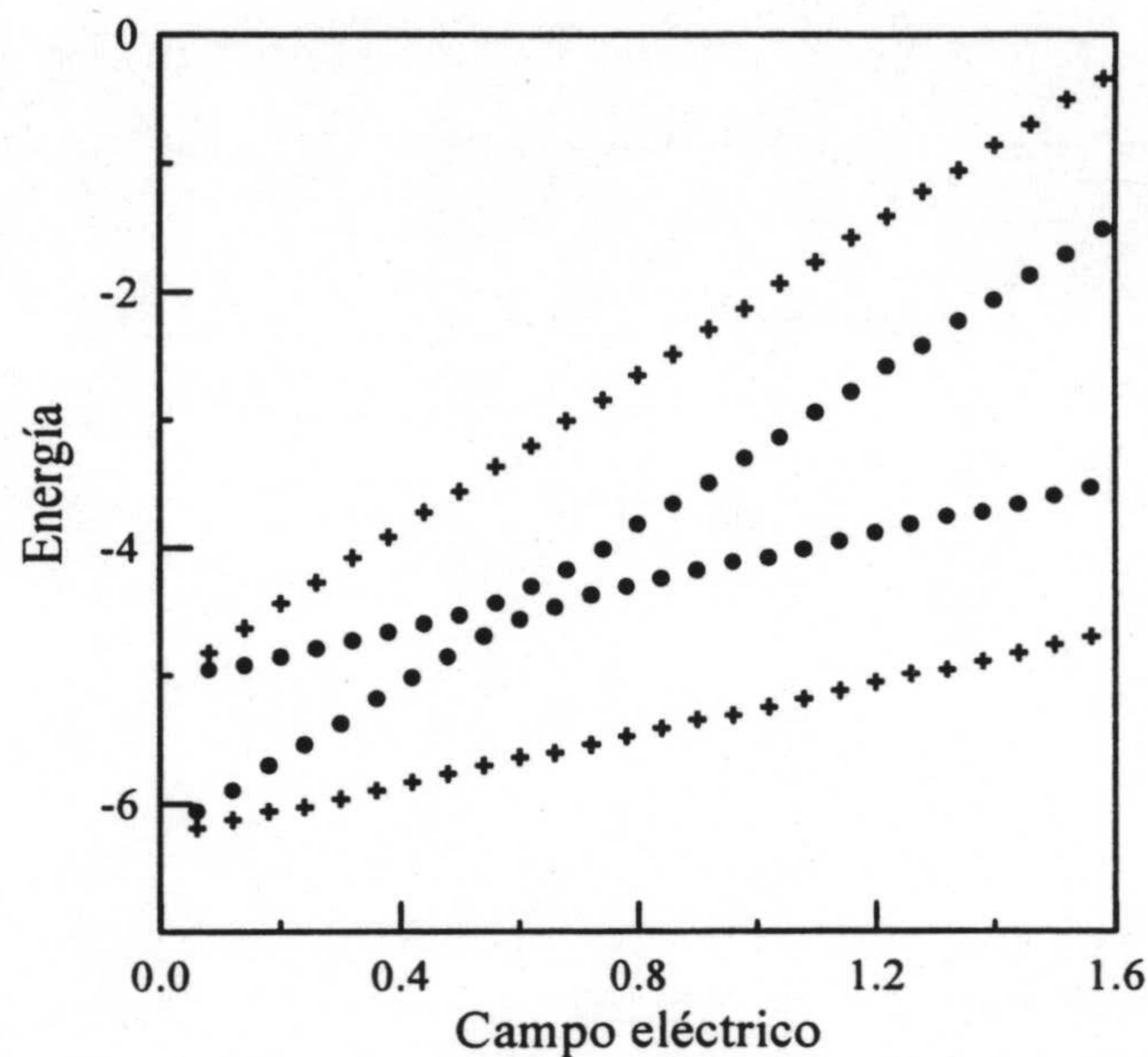
donde  $V_1, V_2 > 0$  y, para fijar ideas, consideraremos un potencial asimétrico, aunque ya sabemos que el espectro es universal, y por lo tanto  $0 < x_1 < x_2$ .

Si consideramos que  $V_1 > V_2$ , podemos deducir los resultados que obtendríamos para el espectro en función del campo eléctrico aplicado utilizando los resultados ya conocidos para sistemas con un solo tipo de pozo. Para  $F = 0$ , y siempre que se cumpla la condición (3.17), tendremos dos estados ligados. Al aumentar el campo eléctrico, el estado de menor energía se localizará en el pozo más profundo, que además resulta ser el pozo situado más a la izquierda del sistema, cuya energía potencial aumenta menos con el campo eléctrico, dado que  $x_1 < x_2$ . Como la variación del cuasiestado asociado a cada pozo depende fuertemente del punto en el que está situado el pozo, el estado de menor energía incrementará su valor con el

campo de manera lineal con una pendiente que será básicamente  $x_1$ . Por contra, el estado más energético, que estará asociado al pozo menos profundo, incrementará también linealmente su energía con el campo, pero con una pendiente controlada por  $x_2$ . Como  $x_2 < x_1$ , el estado más energético sube más deprisa, separándose del menos energético y posteriormente desaparecerá solapando con estados resonantes que se encuentran sobre el pozo, y algo equivalente ocurrirá con el estado de menos energía.

Sin embargo, si  $V_1 < V_2$ , ocurre algo diferente. Para  $F = 0$ , el espectro ha de ser idéntico al que obteníamos anteriormente. Sin embargo, al aumentar el campo eléctrico, parece razonable suponer que el estado más profundo (el menos energético) se localice en el pozo más profundo, cuya amplitud es  $V_2$ . Pero ahora, este pozo se encuentra situado en el punto  $x_2$ , con lo que su correspondiente energía se incrementará con el campo de manera más rápida que el estado de mayor energía, controlado a su vez por  $x_1$ . Debido a esto, y con una elección apropiada de los parámetros  $V_i$  y  $x_i$ , parece posible conseguir que el estado menos energético alcance al de mayor energía para un cierto valor de  $F$ . Si esto sucediera, tendríamos una degeneración de los estados cuasiligados, pues habría dos cuasiestados con la misma energía. Sin embargo, y en contra de lo que cabría esperar, este hecho no sucede nunca.

Los resultados numéricos para un sistema con un potencial como el dado en (3.58) se muestran en la figura 3.16. En ella, representamos los valores de las cuasienergías en función del campo eléctrico aplicado para dos casos diferentes. En ambos casos,  $x_1 = 1$  y  $x_2 = 3$ , mientras que las cruces representan el caso  $V_1 = 5$  y  $V_2 = 3$ , y los círculos el caso  $V_1 = 3$  y  $V_2 = 5$ . De los resultados obtenidos es posible apreciar que, si bien cuando  $V_1 > V_2$ , obtenemos lo que esperábamos, en el caso contrario  $V_1 < V_2$  ocurre algo nuevo. En este último caso, y como ya anticipábamos, el estado menos energético (más profundo) incrementa su energía más rápidamente al estar controlado por  $x_2$ . Pero cuando ambos cuasiestados se aproximan y parece que van a cruzarse, aparece un mecanismo de repulsión entre



**Figura 3.16:** Espectro de un sistema binario formado por dos pozos  $\delta$  de amplitud diferente. Las posiciones en los dos casos son  $x_1 = 1$  y  $x_2 = 3$ . Las amplitudes son  $V_1 = 5$  y  $V_2 = 3$  (cruces), y  $V_1 = 3$  y  $V_2 = 5$  (círculos).

niveles que evita este cruce, y por lo tanto tampoco se produce la degeneración energética (Carpena, Gasparian y Ortuño, 1997c). Este fenómeno de repulsión aparece siempre, incluso para sistemas más grandes, lo cual nos permite concluir que en ningún caso los cuasiniveles son degenerados.

Un hecho destacable es que, después de la repulsión entre cuasiestados, éstos intercambian las pendientes con las que se incrementa su energía. La interpretación de este fenómeno es clara, pero conduce a pensar en la existencia de un efecto extraño y totalmente nuevo. Debido a la localización de Stark, cada cuasiestado estará fundamentalmente localizado en un único pozo. Esto se pone de manifiesto de manera clara porque cada estado aumenta su energía con una pendiente que depende de su pozo correspondiente. Sin embargo, después de la repulsión, el cambio de pendiente que se aprecia en la figura 3.16 indica que el estado menos

energético, localizado antes del choque en el pozo situado en  $x_2$  como muestra su pendiente, aumenta su energía con una pendiente  $x_1$  después del mismo. Un fenómeno recíproco ocurre con el otro estado. Este intercambio de pendientes conduce a pensar a que cuando los niveles se aproximan, el electrón contenido en el pozo más profundo salta al menos profundo y la correspondiente cuasienergía aumenta con  $x_1$ , y lo mismo ocurre con el otro electrón. Este fenómeno de salto electrónico constituye un efecto completamente nuevo, y merece una investigación más profunda desde el punto de vista experimental, que ha aparecido recientemente iniciada en el review de Ferreira & Bastard (1997).

En vista de los resultados obtenidos para un sistema binario formado por dos pozos, es fácil adivinar los resultados que cabe esperar en sistemas más grandes, cuando se construye la secuencia  $V_1V_2V_1V_2V_1\dots$ . Debido a las diferentes pendientes con las que se incrementan las correspondientes cuasienergías, se producirán múltiples repulsiones entre niveles adyacentes en función del campo eléctrico aplicado. Ello se traducirá en sucesivos acercamientos y alejamientos entre niveles consecutivos, con los correspondientes saltos electrónicos que conllevan las repulsiones. Este carácter oscilante de los cuasiniveles puede detectarse experimentalmente, porque al variar la distancia energética entre niveles consecutivos con el campo eléctrico aplicado, el mismo carácter oscilante se detectará en el espectro de absorción del sistema al variar el campo eléctrico al que se somete el mismo.

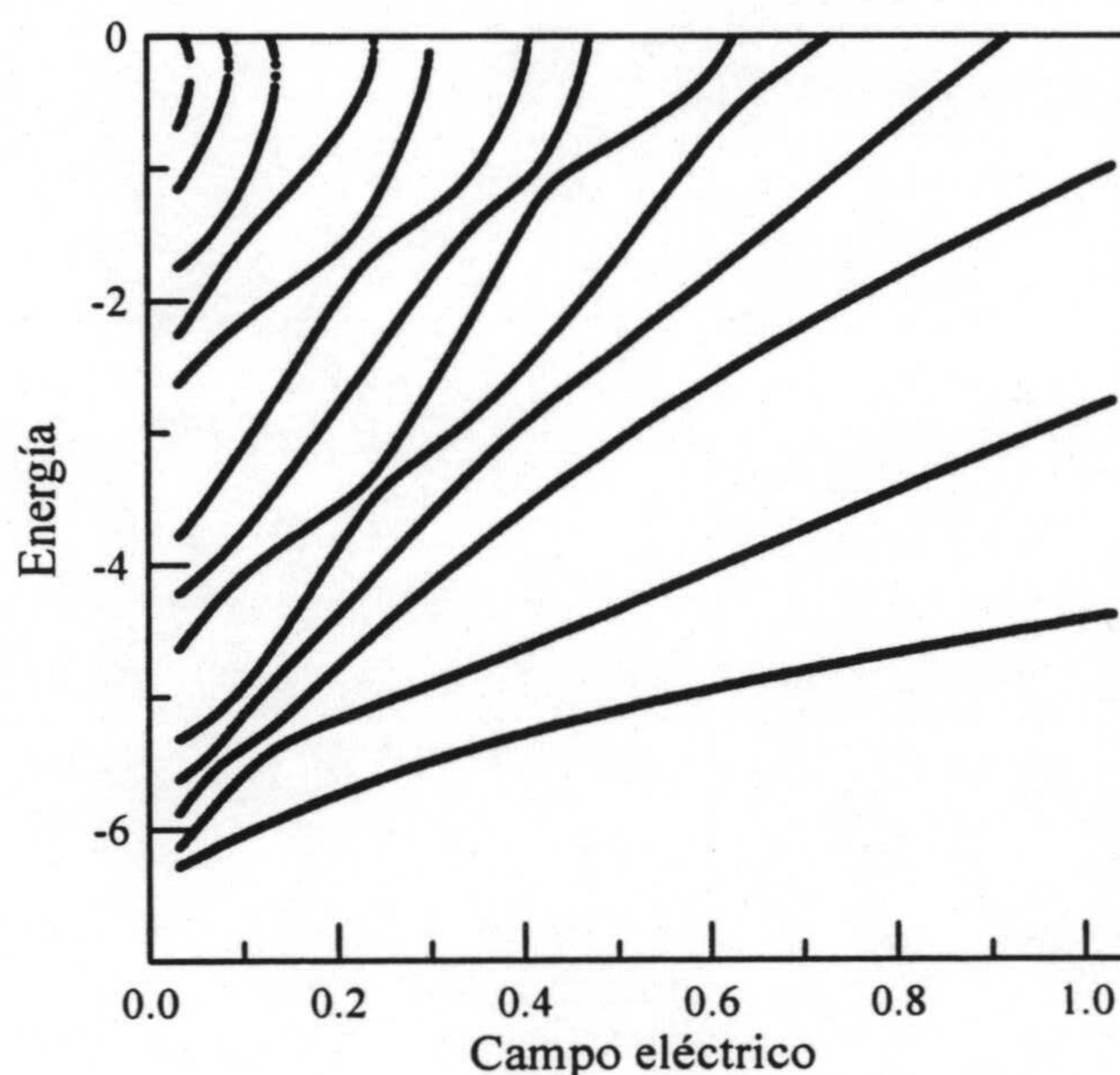
Por último, nos gustaría destacar que, aunque nos hemos restringido al caso de un potencial asimétrico, porque en él es fácil realizar predicciones, los fenómenos descritos aquí ocurren para cualquier otra disposición del potencial. simétrica o no, debido al carácter universal del espectro puesta de manifiesto en secciones anteriores.

### Sistemas cuasiperiódicos

Vamos a aprovechar esta breve sección para exponer los resultados numéricos correspondientes al espectro de secuencias cuasiperiódicas de pozos  $\delta$  con campo



eléctrico aplicado. Si bien en el caso  $F = 0$  no utilizamos este modelo para estudiar las propiedades del espectro, porque el modelo de fuerte ligadura era más conveniente para ello, aquí vamos a mostrar los resultados exactos de la evolución del espectro cuasiperiódico con campo eléctrico.



**Figura 3.17:** Evolución del espectro de una secuencia de Fibonacci de pozos  $\delta$  en función del campo eléctrico aplicado. La distancia entre pozos es siempre la unidad, y las dos amplitudes son  $V_A = 5$  y  $V_B = 3$ .

Nos vamos a limitar aquí al caso de una secuencia de Fibonacci, porque vamos a realizar un estudio meramente descriptivo, cuyos resultados son análogos a los que se obtendrían con secuencias de Thue-Morse. En la figura 3.17 representamos la evolución de las cuasienergías en función del campo eléctrico aplicado para una secuencia de Fibonacci con 13 pozos tipo  $\delta$ . Los parámetros utilizados son  $V_A = 5$  y  $V_B = 3$ , y la distancia interpozos es igual a la unidad. En el límite  $F = 0$ , obtenemos la estructura de conjunto de Cantor ya estudiada en este capítulo. Conforme aumenta el campo eléctrico, es posible observar, como cabía esperar, un

incremento energético con pendiente diferente para cada estado, lo que conduce inevitablemente a un serie de repulsiones entre niveles adyacentes, de estructura más compleja que la que resultaría en un sistema periódico debido a la aperiodicidad de la secuencia. Estas repulsiones, y los saltos electrónicos que se deducen de ellas, también podrían ser observados experimentalmente a través del espectro de absorción para campo eléctrico variable.

Por último, queremos comentar que un estudio más cuantitativo del espectro discreto con campo eléctrico aplicado será realizado con un modelo multicapa en la sección siguiente. Debido a que no es necesario utilizar las funciones de Airy en los cálculos, se requiere un menor tiempo de computación aun cuando se utilicen sistemas grandes, en los que pueden estudiarse propiedades fractales y realizar estadística de niveles, que permitirán cuantificar los efectos del campo sobre el espectro.

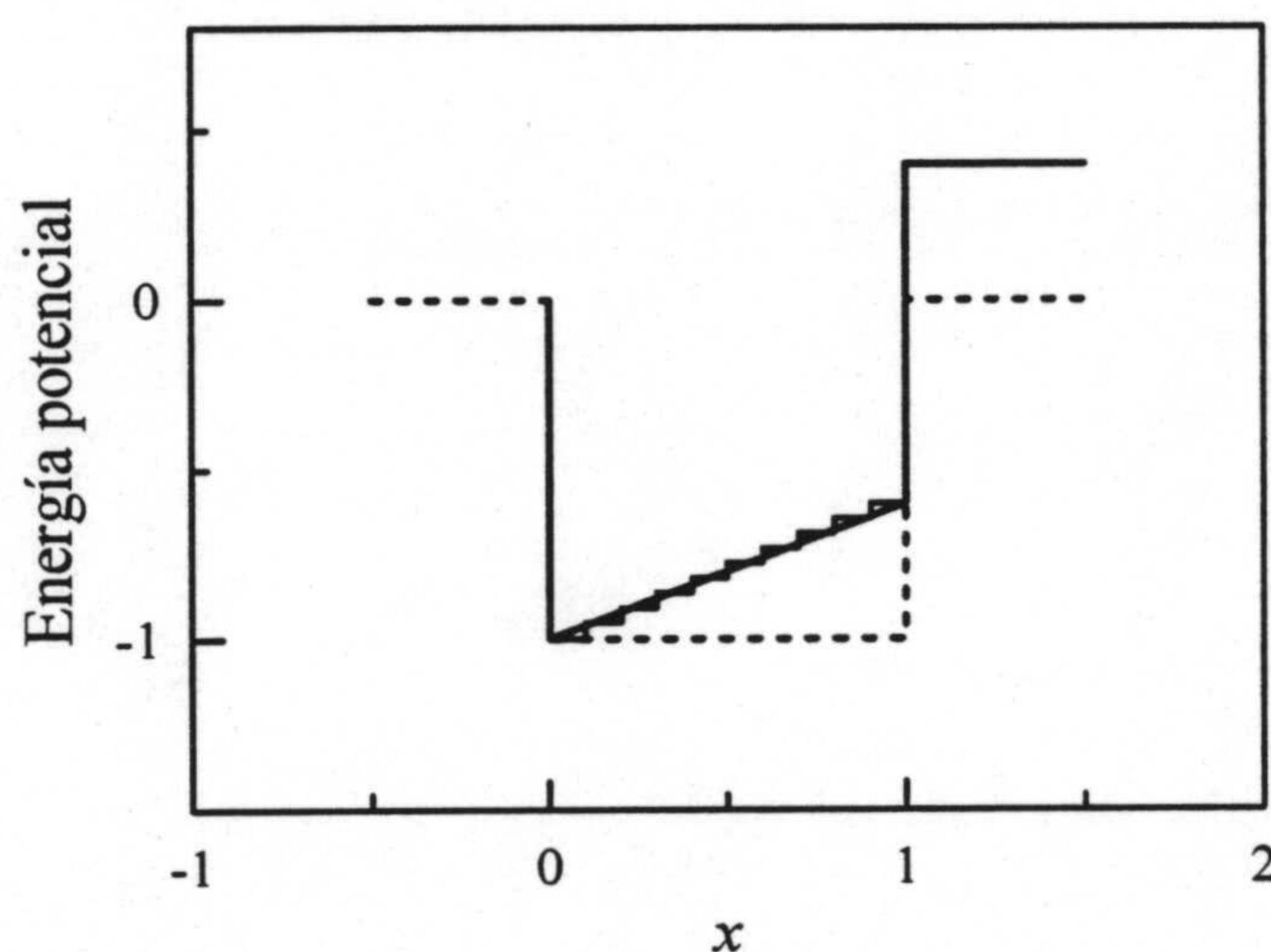
### 3.7.3 La solución aproximada. El modelo multicapa

Como ya comentamos anteriormente, la solución exacta del espectro de un sistema bajo los efectos del campo eléctrico requiere un tiempo de computación muy grande, porque es necesario el cálculo y la integración numérica de magnitudes dadas en términos de las funciones de Airy, que no se pueden expresar en términos de funciones elementales, y por lo tanto han de calcularse numéricamente. Sin embargo, podemos construir sistemas finitos utilizando el modelo de multicapas que se aproximen cuanto queramos a un sistema con campo eléctrico. La idea es utilizar un modelo de pozos y barreras cuadradas, caracterizados por su longitud y por el valor constante de su energía potencial. Recordemos que la función de Green de un material con valor constante de la energía potencial está dada por:

$$G_0(x, x) = \frac{i}{2\sqrt{E - V_0}} \quad (3.59)$$

donde  $V_0$  es la energía potencial constante característica del medio. Al utilizar estas funciones, que son muy sencillas, podremos manejar un gran número de capas

en el método del determinante manteniendo aceptablemente bajo el tiempo de computación. Cuando apliquemos un campo eléctrico uniforme a nuestro sistema de pozos y barreras, su efecto será un incremento lineal de la energía potencial en los fondos de los pozos y en las cimas de las barreras. La aproximación consiste en discretizar este incremento lineal por una escalera de trocitos pequeños de potencial constante, cuya función de Green ya sabemos que está dada por (3.59). La idea del método se muestra en la figura 3.18 en la que mostramos un pozo sin campo eléctrico (línea discontinua), con un campo eléctrico aplicado, y la aproximación de escalera.



**Figura 3.18:** Ejemplo de la aproximación de escalera, usada para modelar los efectos del campo eléctrico. Con línea discontinua se muestra un pozo sin campo eléctrico, mientras que con línea continua mostramos el efecto exacto del campo eléctrico sobre el pozo, y el aproximado a través de 10 trozos de potencial constante.

Gracias a este método, y a la sencillez de las funciones de Green en el modelo multicapa, podemos simular el efecto del campo eléctrico sobre sistemas grandes (Carpena, Gasparian & Ortuño, 1997a). A la hora del cálculo del espectro de nuestros sistemas, siempre elegiremos valores de profundidad y anchura de pozos

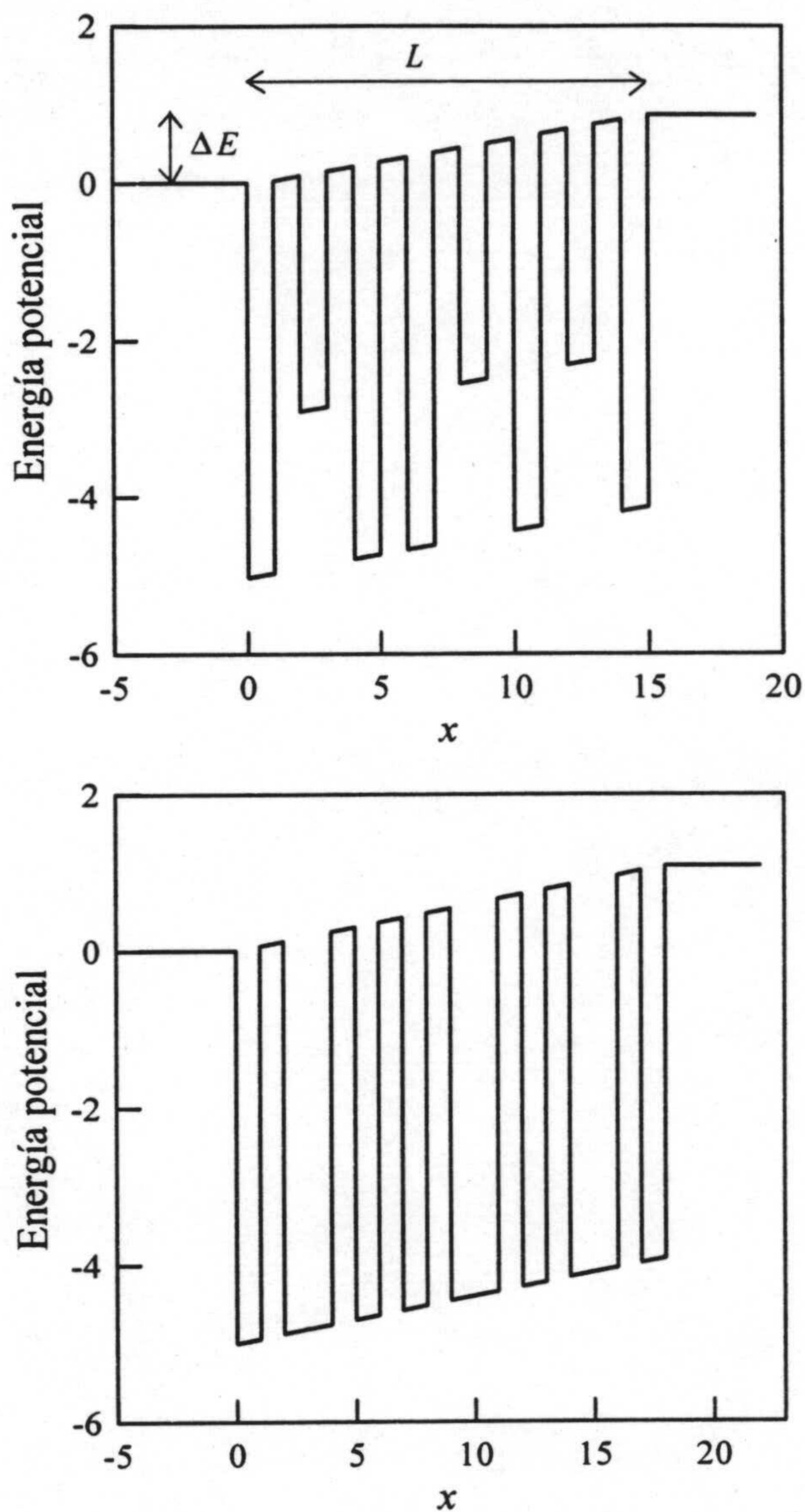
de manera que, cuando estos están aislados, contienen un único estado ligado, y de esa forma al acoplar varios pozos sólo formaremos una única banda. En todos los casos, consideraremos que el campo eléctrico afecta únicamente a la zona del sistema donde hay pozos y barreras, y esta zona estará rodeada siempre por dos medios semiinfinitos de potencial constante.

Para ver como el espectro energético de sistemas cuasiperiódicos es afectado por el campo eléctrico, vamos a estudiar tres magnitudes. Analizaremos las DIE, lo que hará que veamos como se ve alterada la estructura de gaps puesta de manifiesto en ausencia de campo, y sobre todo, para detectar la presencia de escaleras de Wannier-Stark en secuencias cuasiperiódicas, postuladas en principio únicamente para sistemas periódicos. En segundo lugar, estudiaremos la dimensión fractal  $d$ , para cuantificar el efecto del campo sobre la estructura de gaps. Y, por último, analizaremos la estadística de niveles para comprobar si el 'orden' de las secuencias es alterado por el campo.

### 3.7.4 Densidades integradas de estados (DIE).

Vamos a calcular el espectro de secuencias cuasiperiódicas y a reflejar sus características a través de las densidades integradas de estados. Para ello, vamos a considerar el modelo de multicapas con la aproximación de escalera, pero aplicado a dos tipos diferentes de secuencias cuasiperiódicas. En el primer tipo (tipo 1), consideraremos que el parámetro de desorden que nos permite construir la secuencia cuasiperiódica es la profundidad de los pozos. En el segundo caso (tipo 2), consideraremos que el parámetro de desorden es la anchura de los pozos. Un ejemplo de ambos sistemas aparece en la figura 3.19, en la que se muestra una cadena de Fibonacci con ocho pozos, en la que la secuencia construida es de la forma  $\alpha\beta\alpha\alpha\beta\alpha\beta\alpha$ .

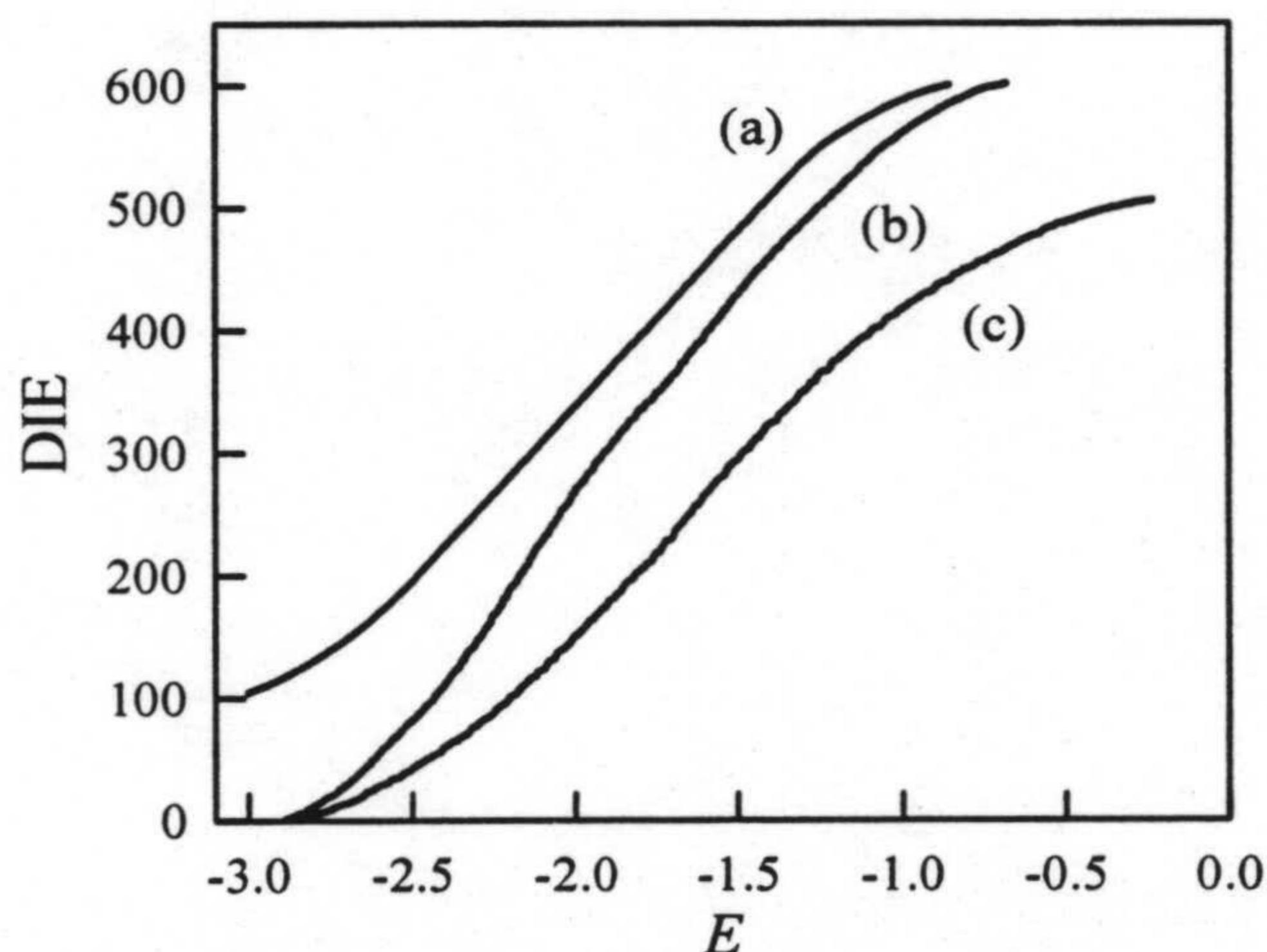
Para los sistemas tipo 1,  $\alpha$  y  $\beta$  corresponden a las dos profundidades diferentes, y para los tipo 2, corresponden a las dos anchuras diferentes. En todos los casos, y como también se muestra en la figura anterior, el campo eléctrico puede obtenerse



**Figura 3.19:** Representación esquemática de dos secuencias de Fibonacci de pozos y barreras. El gráfico superior corresponde a un sistema tipo 1, donde el parámetro para construir la secuencia es la profundidad de los pozos ( $\alpha = 5$  y  $\beta = 3$  en la figura). En el gráfico inferior mostramos un sistema tipo 2, donde el parámetro para definir la secuencia es la anchura de los pozos ( $\alpha = 1$  y  $\beta = 1.5$ ).

a través de  $F = \Delta E/L$ .

Los resultados obtenidos para las DIE se muestran en la figura 3.20, para un sistema periódico (a), uno de Fibonacci (b), y uno de Thue-Morse (c). En los tres casos, los sistemas son de tipo (1). El sistema periódico está formado por 500 pozos de profundidad 5, mientras que el de Fibonacci consta de 610 pozos, y el de Thue-Morse, de 512 pozos. En estos dos últimos casos, las dos profundidades son  $\alpha = 5$  y  $\beta = 4.5$ . En los tres casos, el campo eléctrico aplicado es el mismo,  $F = 0.005$ , y la DIE del sistema periódico en la figura anterior ha sido desplazada verticalmente para evitar solapamiento.



**Figura 3.20:** Densidades integradas de estados para un sistema periódico de 500 pozos (a), uno de Fibonacci con 610 pozos (b), y uno de Thue-Morse con 512 pozos (c). En los tres casos, los sistemas son tipo 1, y el campo eléctrico aplicado es  $F = 0.005$ .

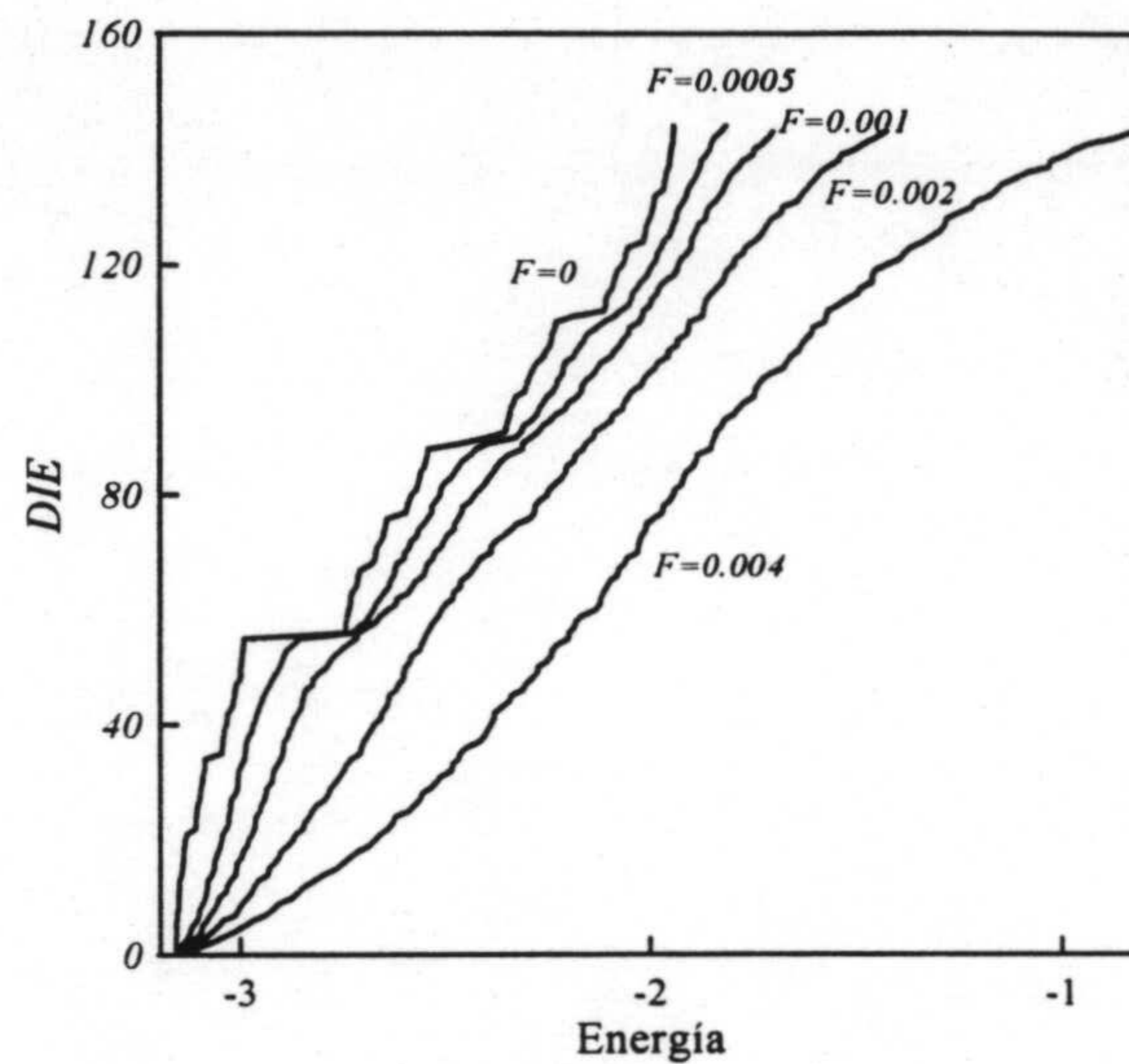
Para hacerse una idea de las modificaciones introducidas por el campo, basta con comparar estas DIE con las mostradas en ausencia de campo en las figuras 3.3, 3.4 y 3.6. Con respecto al sistema periódico, cabe comentar dos características (Carpena, Gasparian & Ortuño, 1997a). La primera, es que el campo eléctrico produce una migración de niveles de los bordes de la banda hacia el centro de la misma. Ello se deduce de la inversión de la pendiente de la DIE en los dos bordes

con respecto a la de la figura 3.3, con lo que podemos considerar que el campo elimina las singularidades de Van Hove, típicas de los bordes de la banda en los sistemas periódicos. La segunda característica, muy importante, es que la DIE en toda la zona central de la banda es totalmente rectilínea. Ello nos indica la presencia de una escalera de Wannier-Stark, en la que el espaciado entre niveles es constante.

En los sistemas cuasiperiódicos, el cambio de las DIE con respecto a las correspondientes sin campo eléctrico es todavía más drástico que en el caso periódico. Podemos comprobar como la estructura de gaps, tan característica de estos sistemas para  $F = 0$ , ha desaparecido en su totalidad. En este caso, las densidades de estados son curvas suaves en las que no es posible detectar claramente zonas planas, indicativas de la existencia de gaps. Además, las pendientes de las DIE, tanto en Thue-Morse como en Fibonacci, son de nuevo prácticamente constantes, especialmente si despreciamos, como suele ser habitual, los dos bordes de la banda, en los que es normal la existencia de ciertas anomalías. Esta constancia de la pendiente es muy importante, porque indica claramente que también en sistemas cuasiperiódicos aparecen escaleras de Wannier-Stark, con espaciado prácticamente constante entre niveles consecutivos.

Por último, queremos ver si estos fenómenos aparecen también en sistemas de tipo 2. Para ello, en la figura 3.21 mostramos la evolución de la DIE de una cadena de Fibonacci con 144 pozos sujeta a diferentes valores del campo eléctrico, que se indican en la figura. Las dos diferentes anchuras de pozo escogidas son  $\alpha = 1$  y  $\beta = 1.5$ , mientras que la profundidad de todos los pozos es 5.

El comportamiento de los sistemas tipo 2 es cualitativamente similar a los de tipo 1. Es posible observar como las curvas van suavizándose con el campo cada vez más, y tienden también hacia una curva con pendiente constante. Incluso los grandes gaps obtenidos para  $F = 0$  van desapareciendo al aumentar el campo, poniendo de manifiesto la aparición también aquí de una escalera de Wannier-Stark.



**Figura 3.21:** Representación de varias DIE obtenidas para una secuencia de Fibonacci tipo 2 con 144 pozos, y diferentes campos eléctricos aplicados.

Para cuantificar la modificación de la estructura de gaps que se muestra cualitativamente en las DIE, es conveniente realizar un estudio de la dimensión fractal, lo que se hace en el apartado siguiente.

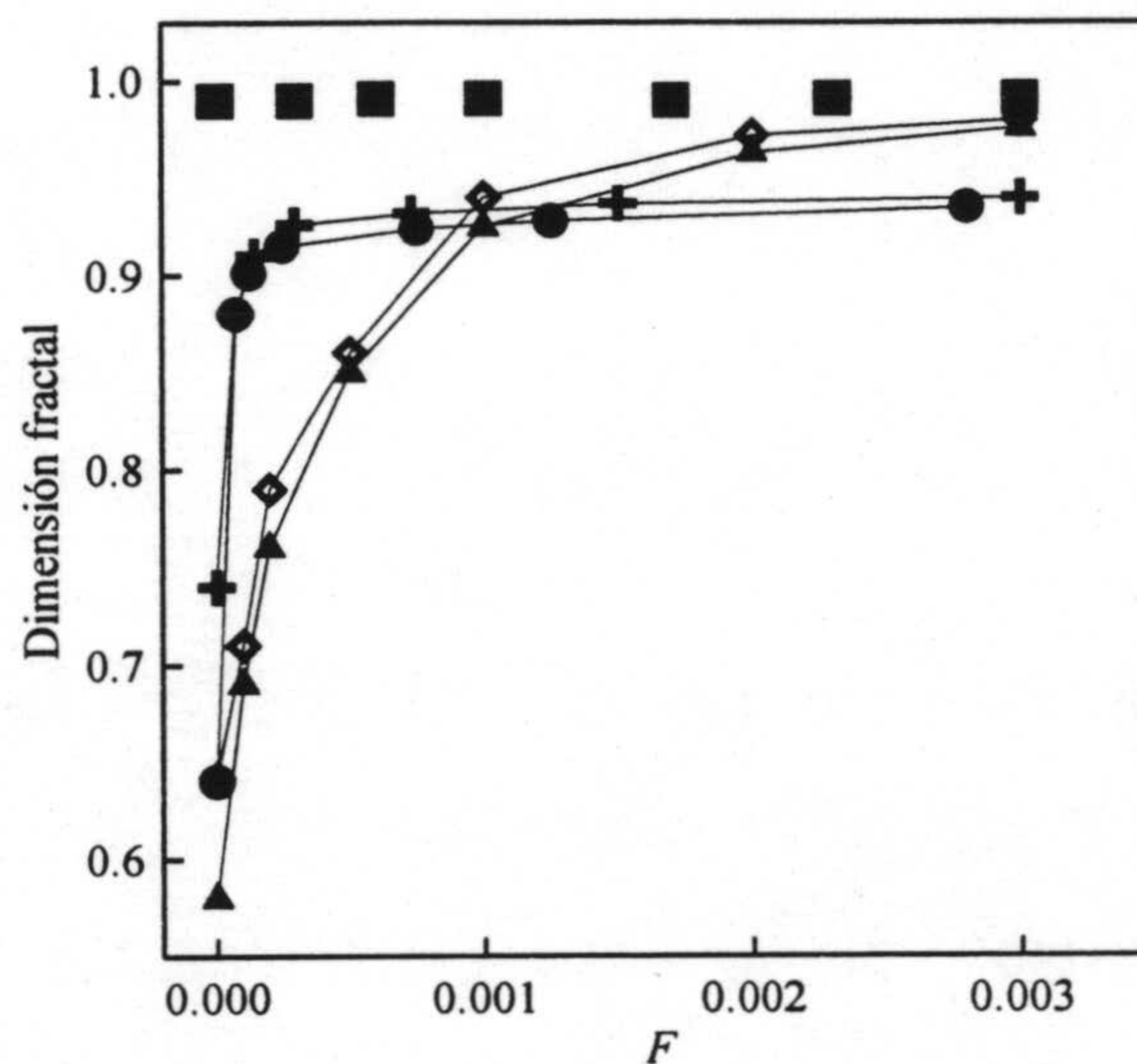
### 3.7.5 La dimensión fractal y el campo eléctrico

Para dar cuenta de la profunda modificación que introduce el campo eléctrico en la estructura de gaps de las secuencias cuasiperiódicas, vamos a calcular la dimensión fractal  $d$  de los espectros en función del campo eléctrico aplicado. Ello nos permitirá averiguar si la estructura de gaps desaparece realmente o, lo que también sería posible, que esa estructura apareciera a escalas más pequeñas. Si eso ocurriera, sería detectado al calcular la dimensión fractal, definida en (3.45), porque el rango de tamaños de segmento utilizados para recubrir los espectros alcanza valores pequeñísimos.

Los resultados obtenidos para la dimensión fractal como función del campo

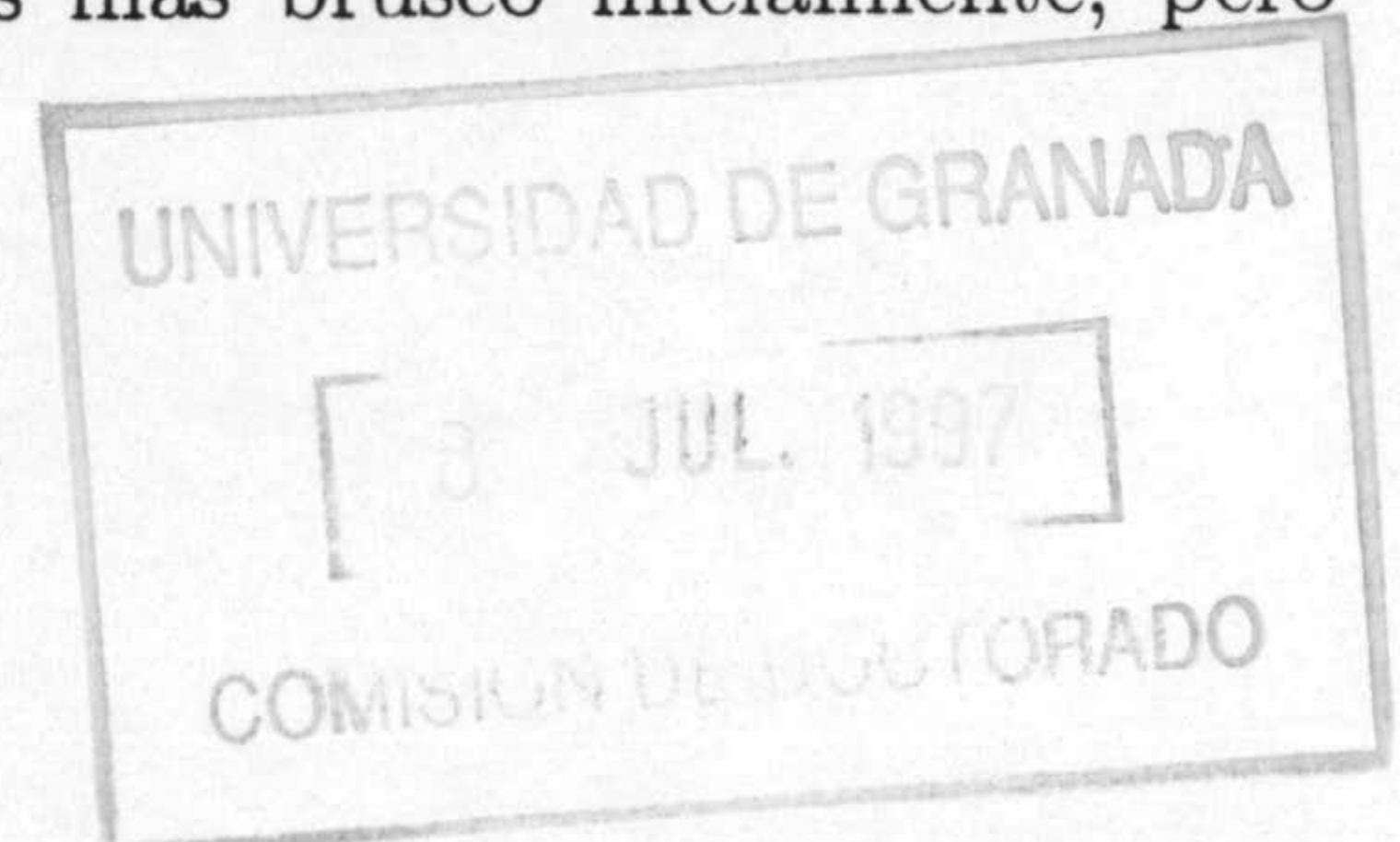


eléctrico aplicado se muestran en la figura 3.22. En ella, se calcula también, para probar el algoritmo de cálculo, la dimensión fractal correspondiente a un sistema periódico (cuadrados). Al carecer de estructura de gaps, independientemente de  $F$ , la dimensión fractal ha de ser la unidad, valor que obtenemos usando nuestro algoritmo.



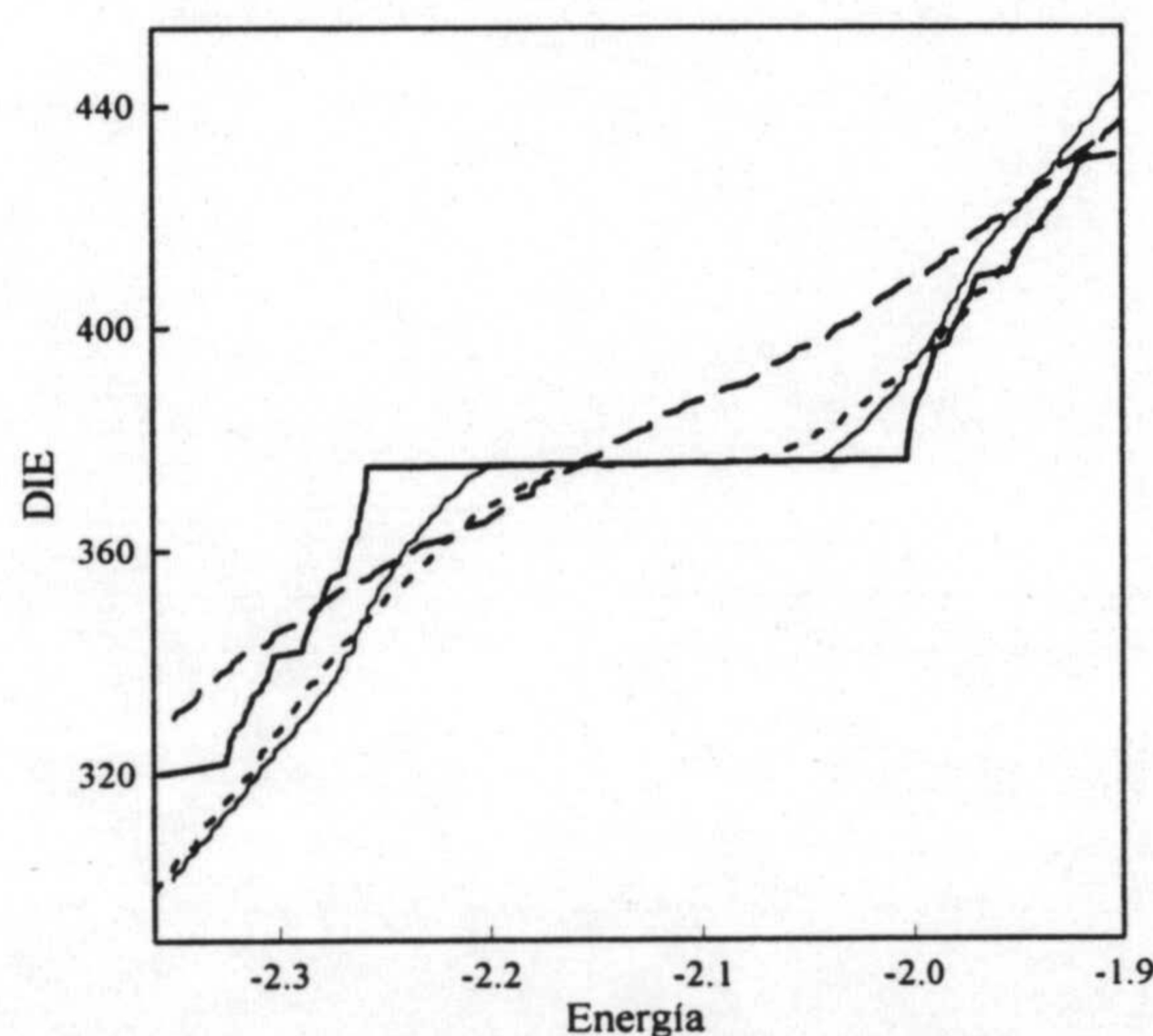
**Figura 3.22:** Dimensión fractal de diversas secuencias en función del campo eléctrico aplicado. Los cuadrados corresponden el espectro de una secuencia periódica con 500 pozos. Las secuencias de Fibonacci están formadas por 610 pozos, y las de Thue-Morse, por 512 pozos. Las cruces corresponden a Fibonacci tipo 1 y los diamantes a Fibonacci tipo 2. Los círculos corresponden a Thue-Morse tipo 1, y los triángulos a Thue-Morse tipo 2.

Los valores representados en la figura 3.22 corresponden a sistemas de Fibonacci tipo 1 (cruces) y tipo 2 (diamantes), y Thue-Morse tipo 1 (círculos) y tipo 2 (triángulos). En la región de campo eléctrico bajo, observamos un incremento brusco de la dimensión fractal para ambos tipos de secuencias. Este hecho refleja la eliminación de gran parte de la estructura de gaps presente para  $F = 0$ . La diferencia fundamental entre sistemas tipo 1 y sistemas tipo 2 es que, para los primeros, el aumento de la dimensión fractal es más brusco inicialmente, pero



después el valor de  $d$  se estanca, y sube de manera muy lenta, lo que refleja una estructura de gaps a escalas pequeñas más difícil de eliminar por el campo eléctrico. Para los sistemas tipo 2, el aumento de  $d$  con el campo se produce de forma más gradual, pero sin embargo dentro del rango de campo eléctrico calculado, llega a alcanzar valores muy cercanos a la unidad. Esto muestra que, para estos sistemas, el campo elimina la estructura de gaps de forma más lenta inicialmente, pero sin embargo consigue suprimirla totalmente para el rango de campo eléctrico estudiado.

Las conclusiones que podemos obtener son, por tanto, que el campo eléctrico incrementa la dimensión fractal del espectro, lo que equivale a decir que hace que los sistemas sean más regulares que en ausencia de campo, casi como si aumentara el orden de los sistemas (Carpena, Gasparian & Ortuño, 1997a). Para verificar este cambio desde el punto de vista del desorden, vamos a estudiar la estadística de niveles en función del campo eléctrico, lo que aclarará definitivamente la cuestión.



**Figura 3.23:** Esquema de la evolución de un gap que aparece en la DIE obtenida para una secuencia de fibonacci con 610 pozos para  $F = 0$  (línea gruesa), al aplicar diversos campos eléctricos. El sistema es tipo 1, con profundidades  $\alpha = 5$  y  $\beta = 4.5$ . Los valores de  $F$  son 0.0005 (línea continua delgada), 0.002 (línea punteada) y 0.02 (línea troceada).

### 3.7.6 Estadística de niveles

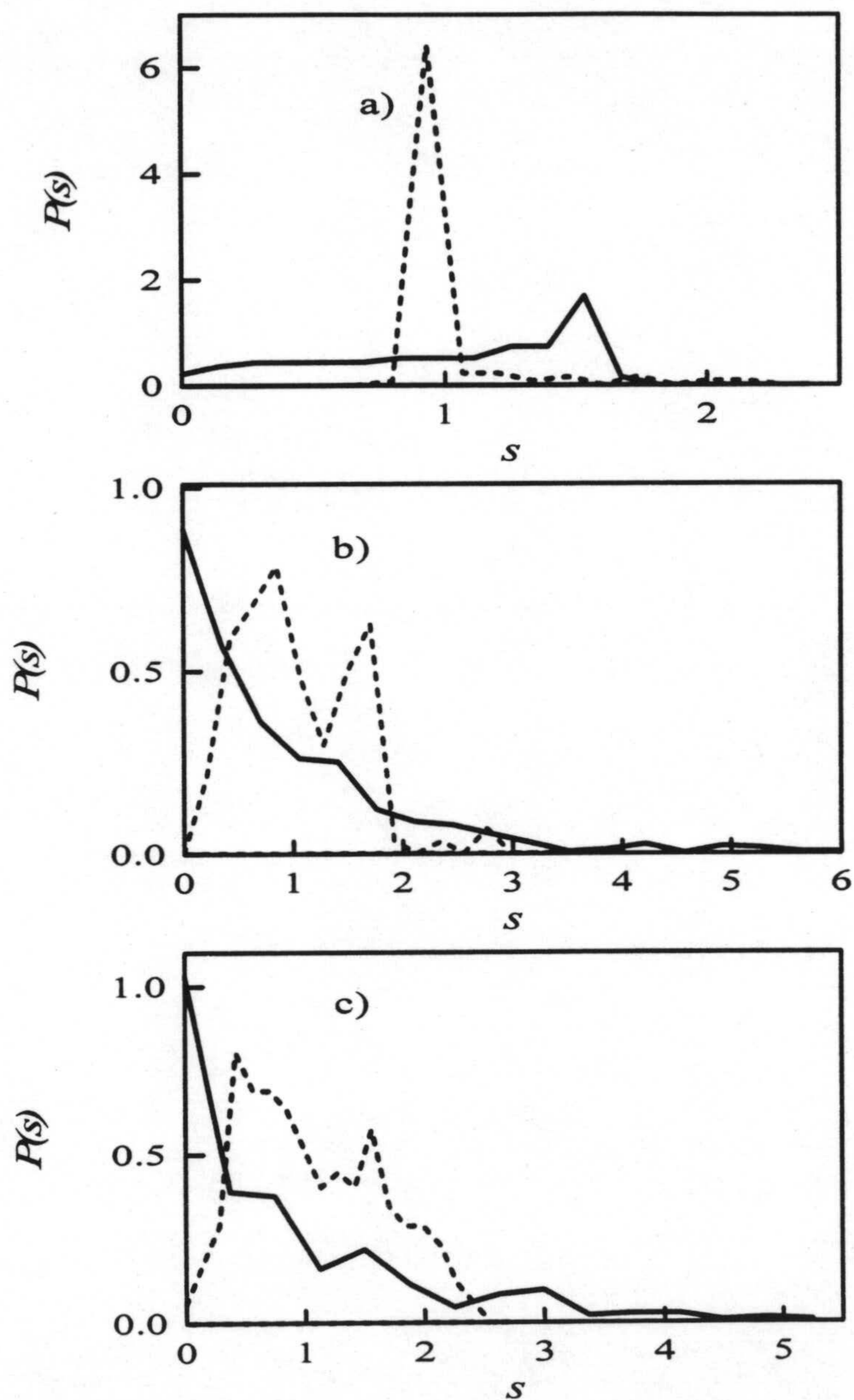
Los resultados que obtuvimos para el espectro en ausencia de campo eléctrico, que mostraban una estructura de gaps infinita en las secuencias cuasiperiódicas a lo largo de todo el espectro, impedían hablar estrictamente de estadística de niveles dentro de las secuencias cuasiperiódicas, por no poder definir una separación media entre niveles. Este hecho nos obligaba a estudiar esta magnitud en una subbanda del espectro completo. Sin embargo, la aplicación del campo eléctrico, como ya hemos tenido ocasión de comprobar, suaviza el espectro, de manera que podemos calcular la estadística usando la banda completa. Para mostrar gráficamente lo anterior, en la figura 3.23 representamos una pequeña zona de la DIE correspondiente a una cadena de Fibonacci para diferentes valores del campo eléctrico aplicado. En ella podemos comprobar como, en la región en la que inicialmente ( $F = 0$ ) existía un gran gap, este va desapareciendo paulatinamente al aumentar  $F$ , hasta desaparecer por completo.

Los resultados obtenidos para la estadística de niveles aparecen en la figura 3.24. En ella se muestran, para dos valores diferentes del campo eléctrico ( $F = 0$ , líneas continuas y  $F = 0.005$ , líneas discontinuas), la distribución normalizada del espaciamiento de niveles adyacentes para un sistema periódico (a), uno de Fibonacci (b) y uno de Thue-Morse (c).

Las conclusiones son claras. En el caso periódico, para el valor  $F = 0$  obtenemos la distribución habitual en un sistema periódico unidimensional, mientras que al aplicar un campo, obtenemos una distribución muy picuda en torno a  $s = 1$ . Este hecho muestra claramente la existencia de una escalera de Wannier-Stark, que se refleja en un espaciamiento constante e igual a 1 (el espaciado medio). Para los sistemas cuasiperiódicos, observamos un cambio en la forma de la distribución. Para  $F = 0$ , podemos ver una distribución de tipo exponencial, similar a la de Poisson. Ello indica que para  $F = 0$  los sistemas poseen un alto grado de desorden. Sin embargo, con un campo eléctrico aplicado, podemos observar como existe una repulsión de niveles, que hace que  $P(s)$  tienda a cero cuando  $s$  tiende a cero. Así,

las distribuciones son más parecidas a una de tipo Wigner, correspondiente a un sistema con bajo desorden.

Con arreglo a las magnitudes que hemos estudiado aquí, (DIE, dimensión fractal y estadística de niveles) podemos concluir que el campo eléctrico hace a las secuencias cuasiperiódicas mucho más regulares: elimina las estructuras de gaps, aumenta la dimensión fractal, e introduce 'orden' en el sistema (Carpena, Gasparian & Ortuño, 1997a).



**Figura 3.24:** Espaciamiento de niveles para un sistema periódico (a), Fibonacci (b), y Thue-Morse (c). En todos los casos, mostramos con línea continua las curvas obtenidas para  $F = 0$ , y en línea discontinua, las correspondientes a  $F = 0.005$ .

## Capítulo 4

# La transmisión electrónica y la densidad de estados

### 4.1 Introducción

En el presente capítulo, vamos a estudiar el coeficiente de transmisión  $T$  y la densidad de estados en secuencias periódicas y cuasiperiódicas. Dado que las propiedades cualitativas no deben depender del modelo elegido, vamos a considerar aquí el modelo de Kronig-Penney de funciones  $\delta$  porque, a pesar de su sencillez, posee todas las ventajas de un Hamiltoniano continuo, y además facilita el cálculo analítico. En el capítulo dos, ya incluimos como anticipo la forma de calcular  $T$  a partir del determinante en el modelo de funciones  $\delta$ . El resultado final del cálculo, dado por la ecuación (2.50) nos da una expresión compacta de  $T$  en función de  $D_N$ . Dicha relación es general, y se puede aplicar siempre para calcular  $T$  numéricamente, junto con la relación de recurrencia (2.23).

Sin embargo, para estudiar mejor las propiedades de  $T$  en secuencias periódicas finitas e infinitas, es conveniente tener una expresión analítica de  $T$ . El estudio de dichas propiedades y la obtención de la expresión analítica de  $T$  se realizarán en la sección número dos de este capítulo. Las propiedades generales de  $T$  en sistemas cuasiperiódicos se abordarán en la sección número tres, en la que nos centraremos en la dependencia de  $T$  con la energía de las barreras que forman las secuencias y

con la longitud de las mismas. En la sección cuarta, proporcionaremos la relación entre la densidad de estados y el determinante característico, y la calcularemos en secuencias periódicas y cuasiperiódicas. Realizaremos también una comparación entre el coeficiente de transmisión y la densidad de estados, que puede servir para detectar la presencia de estados localizados. Por último, en la sección número cinco, comentaremos la características generales del coeficiente de transmisión en sistemas con campo eléctrico aplicado.

## 4.2 Comportamiento de $T$

Las dos características más importantes del coeficiente de transmisión de un determinado sistema son, primera, su comportamiento frente a la energía del electrón que incide sobre el sistema, y segunda, su dependencia con la longitud del mismo. Si analizamos la primera de ellas, encontraremos aquellas energías para las que el electrón puede cruzar el sistema, o bandas permitidas, y aquellas para las que esto no es posible, que formarán las bandas prohibidas o gaps. La dependencia de  $T$  con la longitud del sistema es un factor muy importante para analizar las propiedades de transporte del mismo, y que posteriormente relacionaremos también con el problema de la localización electrónica. Mientras que para la primera característica es suficiente un estudio cualitativo, para la segunda resulta muy interesante realizar un estudio cuantitativo. En primer lugar, analizaremos los sistemas periódicos como punto de referencia para estudiar después los sistemas cuasiperiódicos.

### 4.2.1 $T$ en sistemas periódicos

Por simplicidad, en este apartado consideraremos un sistema periódico constituido por  $N$  barreras  $\delta$  de potencial con un valor idéntico de su amplitud,  $V$ . Este sistema podría considerarse como una especie de modelo de Kronig-Penney **finito** (Kronig & Penney, 1931) en el que las barreras de potencial son funciones  $\delta$ . Si se considerara otro tipo de sistema periódico, por ejemplo un sistema binario con un

periodo formado por dos barreras  $\delta$ , se alteraría la periodicidad de  $T$  pero no lo harían sus propiedades cualitativas.

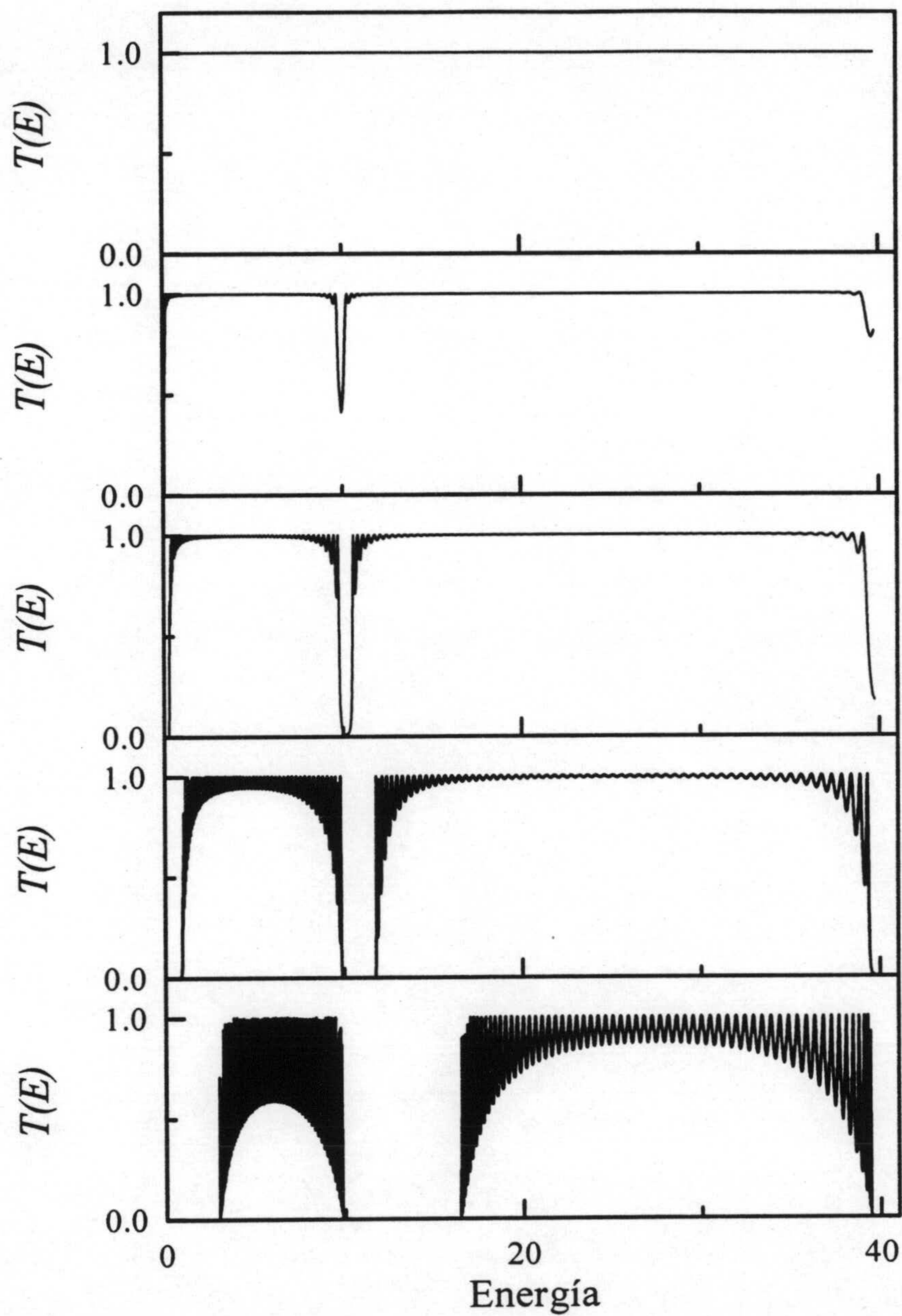
El comportamiento del coeficiente de transmisión frente a la energía de electrón incidente para diferentes valores de la amplitud  $V$  de las barreras puede analizarse en la figura 4.1. En ella se representa, para varios valores de  $V$ , el coeficiente de transmisión en las dos primeras zonas de Brillouin ( $0 < E < 4\pi^2$ ) en un sistema formado por  $N = 64$  funciones  $\delta$ . El primer caso corresponde a  $V = 0$ , y es el caso trivial: si no existen barreras de potencial, el sistema corresponde a electrones libres, y el coeficiente de transmisión es idénticamente igual a la unidad. Si aumentamos el valor del potencial ( $V = 0.1, 0.3, 1$  y  $4$ , respectivamente) observamos un fenómeno conocido pero interesante, que es la aparición de ciertas zonas energéticas en las que la transmisión disminuye y tiende a cero (gaps) rodeando a regiones en las que la transmisión tiene valores muy cercanos a 1 (valor que se alcanza estrictamente para un conjunto formado por  $N - 1$  valores energéticos) que constituyen las bandas permitidas. Surgen dos cuestiones de interés. La primera es dónde está el origen de las bandas permitidas y prohibidas, que responderemos resolviendo el modelo de Kronig-Penney para el caso infinito y viendo su relación con el caso finito que nos ocupa. La segunda cuestión es demostrar de forma analítica la existencia de  $N - 1$  valores de la energía para los que el coeficiente de transmisión alcanza valor unidad, y que podrían ser considerados como resonancias en la transmisión.

Para resolver el modelo de Kronig-Penney infinito, consideremos un potencial dado por  $V(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_0 \delta(x - na)$ , con  $V_0, a > 0$ . En el intervalo  $0 < x < a$  el potencial es cero, y por lo tanto la función de onda será:

$$\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (4.1)$$

donde  $k = \sqrt{E}$ . Pero además, al ser el potencial perfectamente periódico, las funciones de onda, que son funciones de Bloch, presentan la siguiente propiedad





**Figura 4.1:** Coeficiente de transmisión en un sistema periódico construido con 64 funciones  $\delta$  y diferentes valores de la amplitud  $V$  de las barreras. Los valores de  $V$ , de arriba a abajo, son respectivamente 0, 0.1, 0.3, 1 y 4. Las unidades de energía se obtienen considerando que  $\hbar = 2m = 1$ .

de traslación:

$$\Psi(x) = e^{i\beta a} \Psi(x - a) \quad (4.2)$$

donde  $\beta$  hace el papel de cuasimomento, y sólo coincide con  $k$  cuando la partícula es libre. Por verificarse esa propiedad de traslación, la función de onda en el intervalo  $a < x < 2a$  será de la forma:

$$\Psi(x) = e^{i\beta a} [Ae^{ik(x-a)} + Be^{-ik(x-a)}]. \quad (4.3)$$

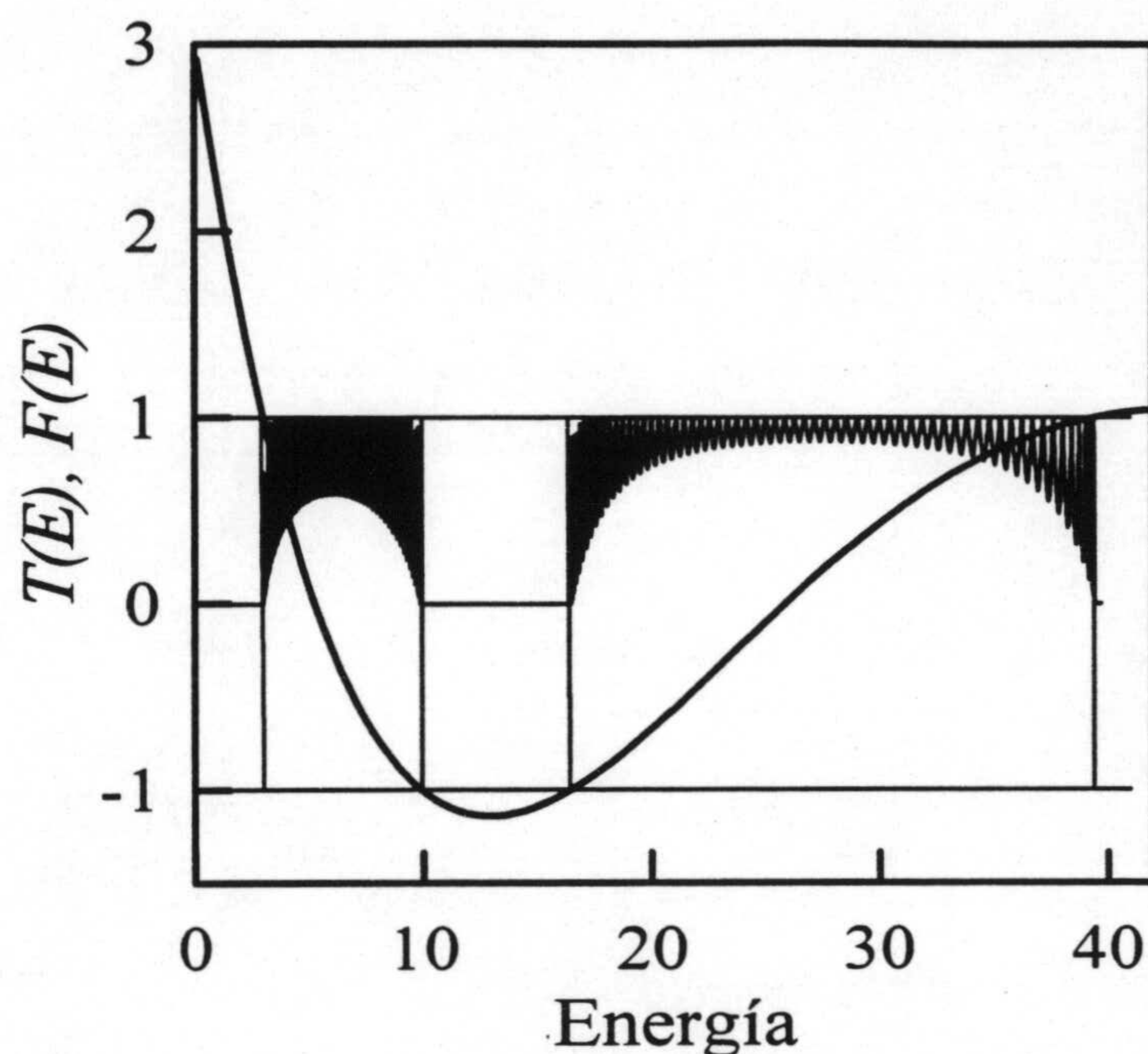
Como ya vimos anteriormente, en una función  $\delta$  la función de onda es continua, pero la derivada no lo es, como se deduce de la ecuación (2.29). Aplicando estas condiciones de contorno en el punto  $x = a$ , llegamos a un sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas,  $A$  y  $B$ , que, escrito en forma matricial, resulta ser:

$$\begin{bmatrix} e^{ika} + e^{i\beta a} & e^{-ika} - e^{i\beta a} \\ ik(e^{i\beta a} - e^{ika}) - V_0 e^{ika} & -ik(e^{i\beta a} - e^{-ika}) - V_0 e^{-ika} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0. \quad (4.4)$$

Para que el sistema tenga solución no trivial, el determinante de la matriz de coeficientes ha de anularse. Tras un cálculo sencillo pero laborioso, llegamos a la siguiente ecuación, que nos determina el espectro energético:

$$\cos ka + \frac{V_0 a \sin ka}{2ka} = \cos \beta a \quad (4.5)$$

y que es la relación que liga la energía ( $k = \sqrt{E}$ ) con el cuasimomento  $\beta$ . Dicha relación de dispersión ya fue usada en el capítulo tres para poder sumar la relación de recurrencia y obtener la expresión analítica del determinante característico. Mientras que, obviamente, la función  $\cos \beta a$  se mantiene siempre entre -1 y 1, la parte izquierda de la ecuación anterior no lo hace. Sólo serán físicamente aceptables aquellos valores energéticos para los que el momento asociado  $\beta$  esté bien definido. Cuando el rango de energía sea tal que la función  $F(E) \equiv \cos ka + (V_0 a \sin ka)/2ka$  se mantenga entre -1 y 1, hablaremos de bandas permitidas, porque el momento  $\beta$  estará bien definido. Si la función  $F(E)$  es mayor que 1, no tendrá sentido hablar del momento, y nos encontraremos dentro de una banda prohibida, o gap.



**Figura 4.2:** Coeficiente de transmisión  $T(E)$  para un potencial periódico de valor  $V = 1$  con 64 funciones  $\delta$ , junto con la función  $F(E)$ , definida en el texto, resultado del modelo de Kronig-Penney para funciones  $\delta$ .

Todo el desarrollo que hemos hecho hasta ahora es estrictamente válido para un sistema infinito. ¿Qué ocurre si nuestro sistema no lo es? Para comprobar que ocurre, en la figura 4.2 representamos el coeficiente  $T(E)$  obtenido para un sistema con 64 funciones  $\delta$  utilizando los parámetros  $V_0 = 4$  y  $a = 1$ , en el intervalo energético  $0 \leq E \leq 4\pi^2$ . En la misma figura, y con los mismos parámetros, representamos también la función  $F(E)$ , correspondiente al sistema infinito. Las bandas permitidas dadas por  $F(E)$  están delimitadas por líneas verticales. Como es posible apreciar, las bandas permitidas para el sistema infinito coinciden muy exactamente con las dadas por el coeficiente de transmisión para el sistema finito, debido a que el número de funciones  $\delta$  que forman el potencial ( $N = 64$ ) es ya bastante grande. Las diferencias substanciales con respecto al sistema infinito son

básicamente dos: la primera, es que el coeficiente de transmisión es estrictamente cero en las bandas prohibidas para el sistema infinito, y no llega a serlo en el sistema finito; la segunda, que abordaremos a continuación, es que, para el sistema infinito,  $T$  ha de ser estrictamente igual a 1 dentro de una banda permitida, y en nuestro caso finito  $T$  posee un comportamiento oscilatorio, y el valor unidad sólo se alcanza  $N - 1$  veces dentro de cada banda ( $N - 1$  resonancias).

Para explicar este comportamiento oscilatorio de  $T$ , y también el número de resonancias, vamos a tratar de obtener  $T$  de manera analítica. Para ello, y teniendo en cuenta que nosotros obtenemos  $T$  a partir del determinante característico a través de (2.50), vamos a encontrar el valor de  $D_N$  en este caso. Dado que todos los potenciales son iguales, y también lo es la distancia de red  $a$ , es posible sumar el determinante analíticamente utilizando la relación de recurrencia que introdujimos en el capítulo 2. Dicho cálculo ya fue realizado previamente en el capítulo tres, y el resultado apareció en la ecuación (3.36). La única diferencia con respecto al caso presente estriba en que ahora estamos considerando energías positivas en lugar de negativas, y barreras en lugar de pozos. Para obtener el resultado apropiado al caso que nos ocupa, basta con cambiar en (3.36)  $\kappa$  por  $k/i$  y  $V_1$  por  $-V_0$ . Estos cambios hacen que desaparezcan de (3.36) las funciones hipérbolicas, que ahora aparecerán como trigonométricas. El resultado final viene dado por (Gasparian, 1989):

$$D_N = e^{iNka} \left[ \cos N\beta a + i \left( \frac{V_0}{2k} \cos ka - \sin ka \right) \frac{\sin N\beta a}{\sin \beta a} \right]. \quad (4.6)$$

Utilizando este resultado en la ecuación (2.50), obtenemos el coeficiente de transmisión. Podemos reescribir el resultado en función de la resistencia  $\rho$  de la muestra empleando el formalismo de Landauer (Landauer, 1981):

$$\rho = \frac{R}{T} = \frac{1 - T}{T}. \quad (4.7)$$

El coeficiente de transmisión para una secuencia periódica de  $N$  barreras  $\delta$  puede

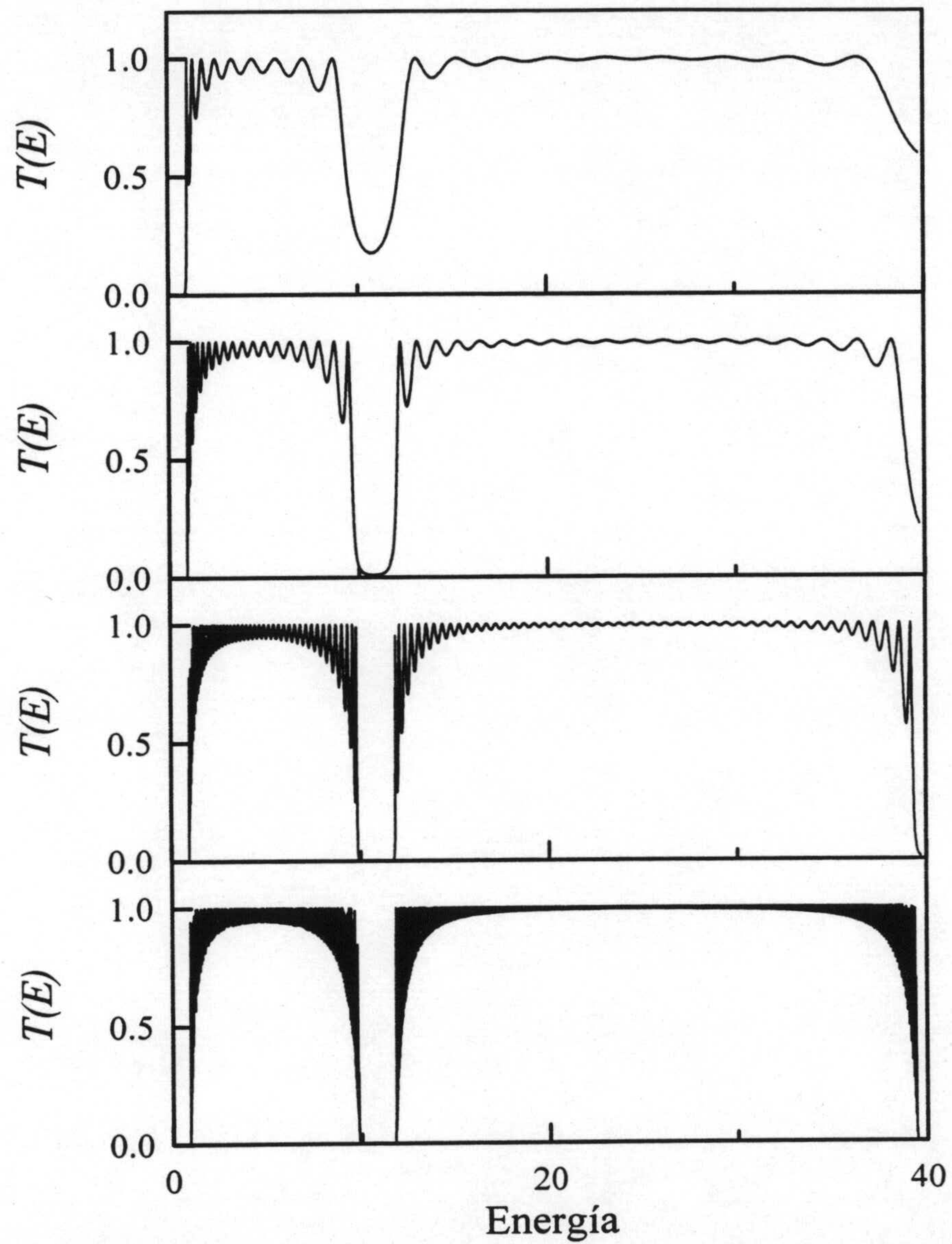
expresarse finalmente como:

$$T_N = \frac{1}{1 + \rho_1 \frac{\sin^2 N\beta a}{\sin^2 \beta a}} \quad (4.8)$$

donde  $\rho_1$  es la resistencia de una única barrera  $\delta$ , que puede obtenerse a partir de (4.7) utilizando el coeficiente de transmisión para una única barrera,  $T_1$ , dado por (2.35). El cociente  $\sin N\beta a / \sin \beta a$  no es otra cosa que el polinomio de Chebyshev de segunda especie  $U_{N-1}(\cos \beta a)$  (Abramovitz & Stegun, 1965) y por lo tanto, posee  $N - 1$  ceros. Precisamente en estos ceros, como puede verse en (4.8),  $T_N$  alcanza un valor unidad, de manera que quedan así explicadas las  $N - 1$  resonancias encontradas en el coeficiente de transmisión, y también su comportamiento oscilatorio, puesto que los polinomios de Chebyshev también presentan esa característica.

Una vez obtenida la expresión de  $T$  para un sistema finito, podemos explicar directamente los resultados en el límite termodinámico  $N \rightarrow \infty$ . En este caso, tendríamos infinitos ceros del polinomio de Chebyshev correspondiente, y por lo tanto el número de resonancias también sería infinito, con lo que  $T$  tendría siempre el valor 1 dentro de una banda permitida.

La otra característica de  $T$ , de la que todavía no hemos hablado, al menos directamente, es de su dependencia con el tamaño del sistema. Por lo dicho anteriormente, el coeficiente de transmisión depende de  $N$ , el número de funciones  $\delta$ , a través de la relación dada por (4.8). Para comprender mejor el significado de esa dependencia, en la figura 4.3 representamos el coeficiente de transmisión para  $V = 1$  en el rango de energía  $0 \leq E \leq 4\pi^2$  y para diferentes longitudes del sistema ( $N = 10, 20, 50$  y  $300$  de arriba a abajo respectivamente). La conclusión más importante que se puede extraer de esta figura es que, si bien ya demostramos analíticamente que el número de oscilaciones de  $T$  crece con  $N$ , el **promedio** del coeficiente de transmisión,  $\langle T \rangle$ , es prácticamente constante dentro de una banda, e independiente, por tanto, de la longitud de la cadena. Posteriormente veremos una representación cuantitativa de esta característica, junto con los resultados



**Figura 4.3:** Coeficiente de transmisión en función de la energía para un potencial periódico de valor  $V = 1$  y longitud variable. Los valores de  $N$  son, de arriba a abajo, 10, 20, 50 y 300 funciones  $\delta$ .

obtenidos para los sistemas cuasiperiódicos. La representación conjunta permitirá una mejor comparación entre ambos tipos de sistemas.

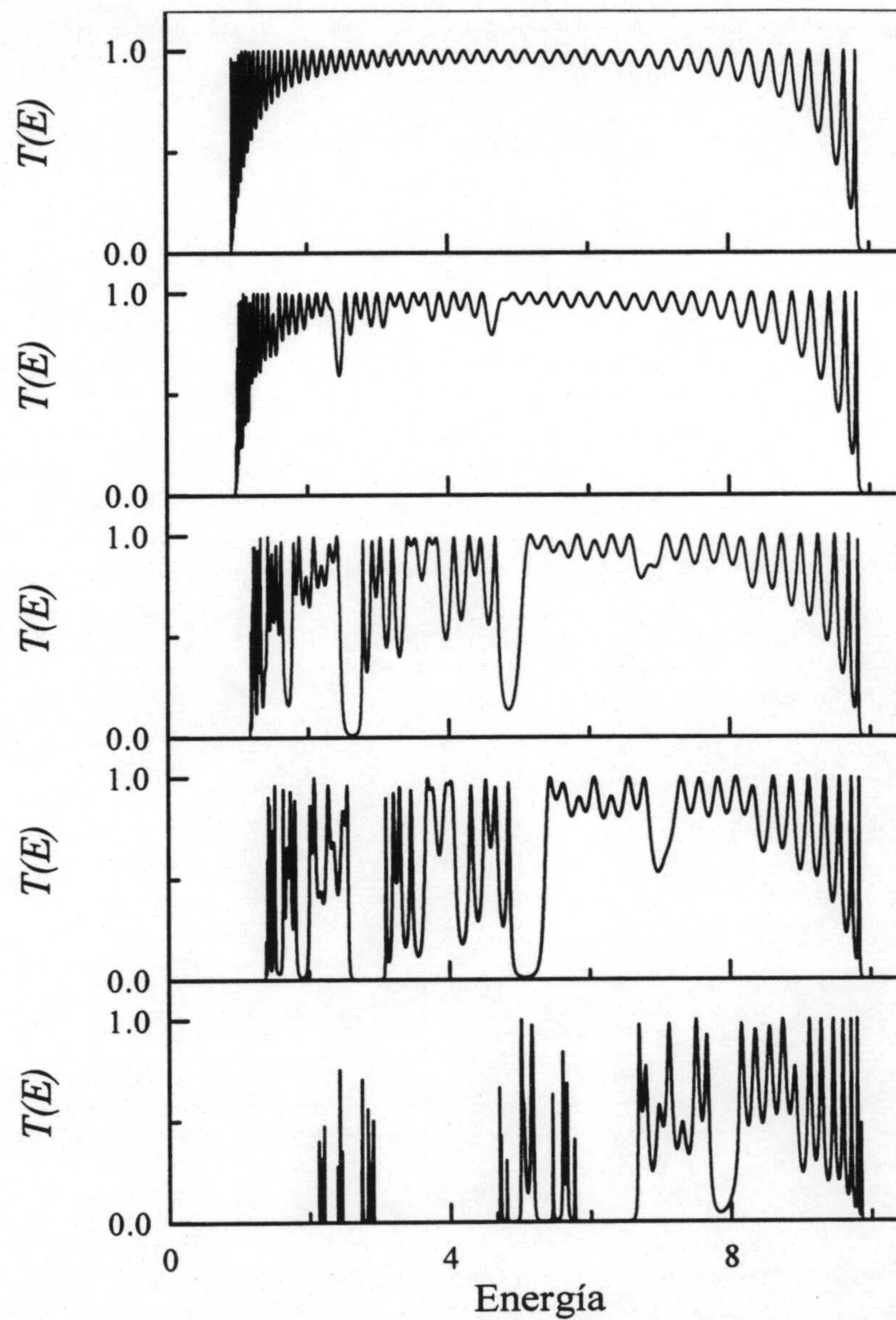
### 4.3 $T$ en sistemas cuasiperiódicos

En los últimos años, la cuestión de la transmisión a través de sistemas cuasiperiódicos ha sido ampliamente tratada en la bibliografía (Avishai & Berend, 1990 y 1992), incluso de manera experimental utilizando superredes (Hattori *et al.*, 1994). Aquí, nos proponemos estudiar las propiedades del coeficiente de transmisión en secuencias de Fibonacci y Thue-Morse construidas con barreras  $\delta$ . Este estudio nos permitirá no sólo una descripción de estas características, sino también decidir cuál de estos dos sistemas es más regular, y también, de manera indirecta, comprender la localización electrónica en los cuasicristales.

#### 4.3.1 Dependencia de $T$ con la energía

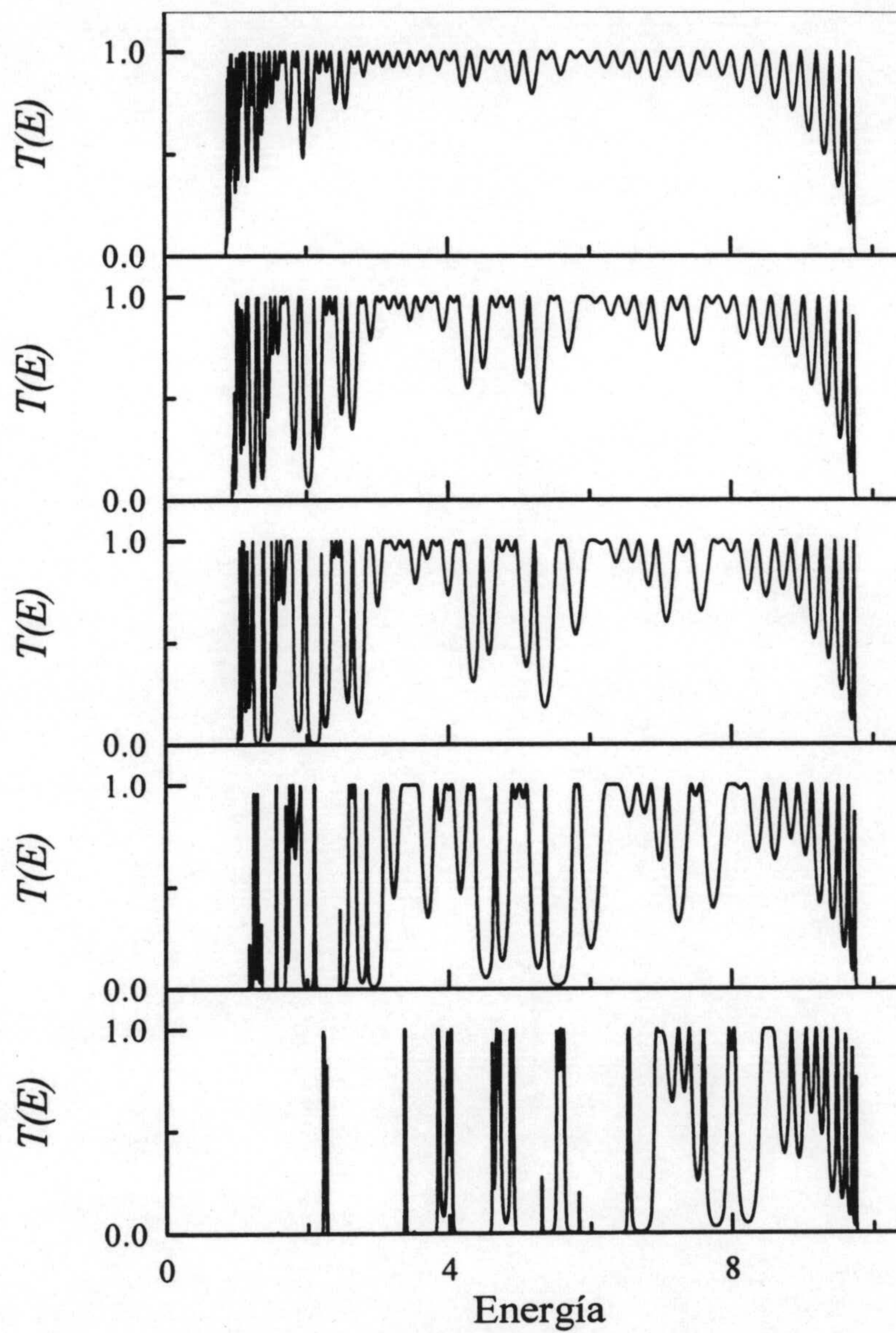
El primer estudio, como ya hicimos para las secuencias periódicas, consiste en analizar el coeficiente de transmisión en función de la energía del electrón incidente para secuencias cuasiperiódicas construidas con diferentes parámetros. En concreto, nosotros consideraremos como nuestros parámetros característicos las dos amplitudes diferentes,  $V_A$  y  $V_B$ , que generan la secuencia. En las figuras 4.4 y 4.5, representamos  $T$  frente a la energía para los modelos de Fibonacci y Thue-Morse, respectivamente. En ambas figuras, nos restringimos a la primera zona de Brillouin ( $0 < E < \pi^2$ ), mantenemos constante el valor de  $V_B$ , y variamos el valor de  $V_A$  ( $V_B = 1$  y  $V_A = 1.1, 1.3, 1.5, 2$  y  $5$  de arriba a abajo en las dos figuras). El número de funciones  $\delta$  es  $N = 55$  para el caso de Fibonacci y  $N = 64$  para el de Thue-Morse, y en ambos casos consideramos el espaciamiento  $a = 1$ .

El comportamiento de ambos sistemas resulta ser cualitativamente similar. En la figura superior, cuando  $V_A$  y  $V_B$  están muy próximos, la estructura de la banda aparece muy poco perturbada con respecto al caso periódico, como era de es-



**Figura 4.4:** Coeficiente de transmisión frente a la energía para una secuencia de Fibonacci con 55 funciones  $\delta$ , con un valor de  $V_B = 1$  fijo y, de arriba a abajo,  $V_A = 1.1$ , 1.3, 1.5, 2 y 4, respectivamente.





**Figura 4.5:** Coeficiente de transmisión frente a la energía para una secuencia de Thue-Morse con 64 funciones  $\delta$ , y con  $V_B = 1$  y  $V_A = 1.1, 1.3, 1.5, 2$  y  $4$  desde la curva superior a la inferior, respectivamente.

perar. Sin embargo, al incrementar sucesivamente el valor de  $V_A$ , el coeficiente de transmisión va adquiriendo una estructura cada vez más caótica, y pierde progresivamente la estructura regular de la banda periódica, hasta un punto en el que el concepto de banda pierde su significado. Sólo puede observarse una estructura algo más regular en la zona de energía más alta, que lógicamente estará menos perturbada por los potenciales  $\delta$ . Sin embargo, en las regiones de baja energía, encontramos un comportamiento muy irregular con zonas estrechas en las que  $T \neq 0$  rodeadas por gaps. Estos gaps aumentan en tamaño y en número cuando incrementamos  $V_A$ . Para valores altos de  $V_A$ , las 'bandas' se transforman en valores prácticamente aislados. Cuando posteriormente estudiemos la densidad de estados, veremos la conexión existente entre estas dos magnitudes, el coeficiente de transmisión y la densidad de estados. Cuando en la densidad de estados aparecen estados energéticos, el coeficiente de transmisión es distinto de cero, ya estén estos estados aislados o agrupados en bandas, mientras que los gaps en la densidad de estados se reflejan en gaps en el coeficiente de transmisión.

Para finalizar este estudio del comportamiento de  $T$  con la energía del electrón incidente, queremos destacar que los comportamientos casi caóticos en el coeficiente de transmisión calculados aquí numéricamente han sido observados experimentalmente, por ejemplo, por Hattori *et al.* en 1994 en una superred fotónica de Fibonacci formada por 55 capas, lo que avala nuestros resultados numéricos.

### 4.3.2 Dependencia de $T$ con la longitud

La otra característica que nos interesa estudiar es la dependencia del coeficiente de transmisión con la longitud del sistema. Esta magnitud nos será muy útil, pues nos permitirá comparar sistemas cuasiperiódicos con sistemas regulares, así como discriminar entre los sistemas de Fibonacci y Thue-Morse y decidir cual de ellos es más regular. Adicionalmente, después comprobaremos como también este parámetro será decisivo para estudiar la localización electrónica en los cuasicristales.

En primer lugar, realizaremos un estudio cualitativo sobre como se ve afectado

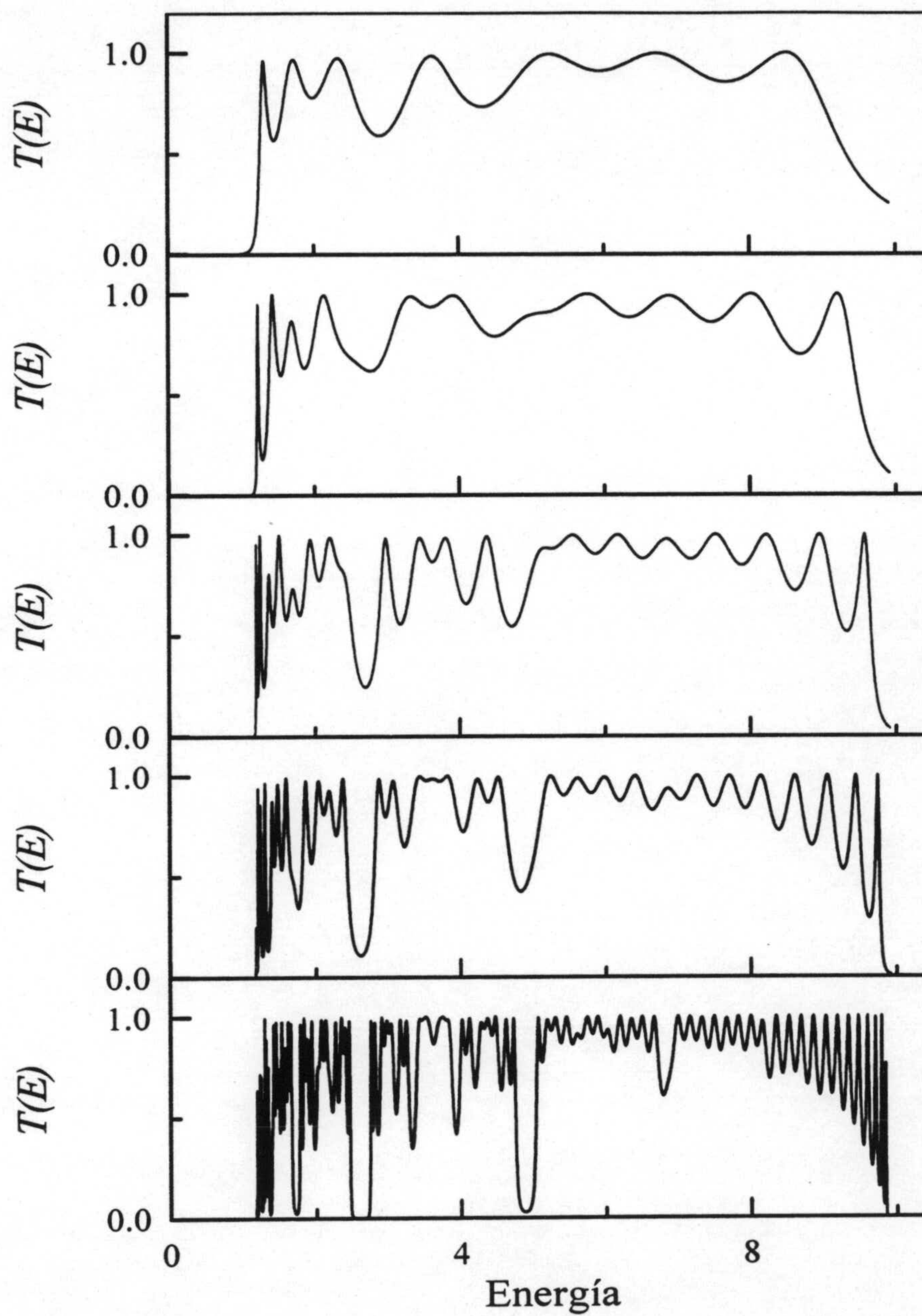
el coeficiente de transmisión de un cierto sistema al incrementar su longitud. En las figuras 4.6 y 4.7 se muestra la dependencia del coeficiente de transmisión frente a la energía para las secuencias de Fibonacci y Thue-Morse, respectivamente, para diversos tamaños. Las longitudes de los sistemas crecen de arriba a abajo en cada figura, y los potenciales básicos que forman la secuencia,  $V_A = 1$  y  $V_B = 1.5$  se mantienen constantes. Las longitudes utilizadas son  $L = 8, 13, 21, 34$  y  $89$  para el modelo de Fibonacci y  $L = 4, 8, 16, 32$  y  $64$  para el caso de Thue-Morse.

A partir de las figuras, puede observarse directamente como van apareciendo múltiples gaps conforme aumenta la dimensión del sistema, y como además los gaps previamente existentes van haciéndose mayores. Esos sistemas de gaps con una estructura tan compleja serán caracterizados, al menos indirectamente, cuando abordemos en el capítulo siguiente las propiedades fractales de los espectros de Fibonacci y Thue-Morse. El hecho de la aparición de nuevos gaps y el aumento de tamaño de los que ya existían tiene una gran influencia en el promedio del coeficiente de transmisión en esta primera banda de energía, porque el valor de  $T$  es muy pequeño en los gaps, y estos aumentan de tamaño y número. Consecuentemente, el valor promedio de  $T$  dentro de una banda energética dependerá fuertemente de la longitud del sistema.

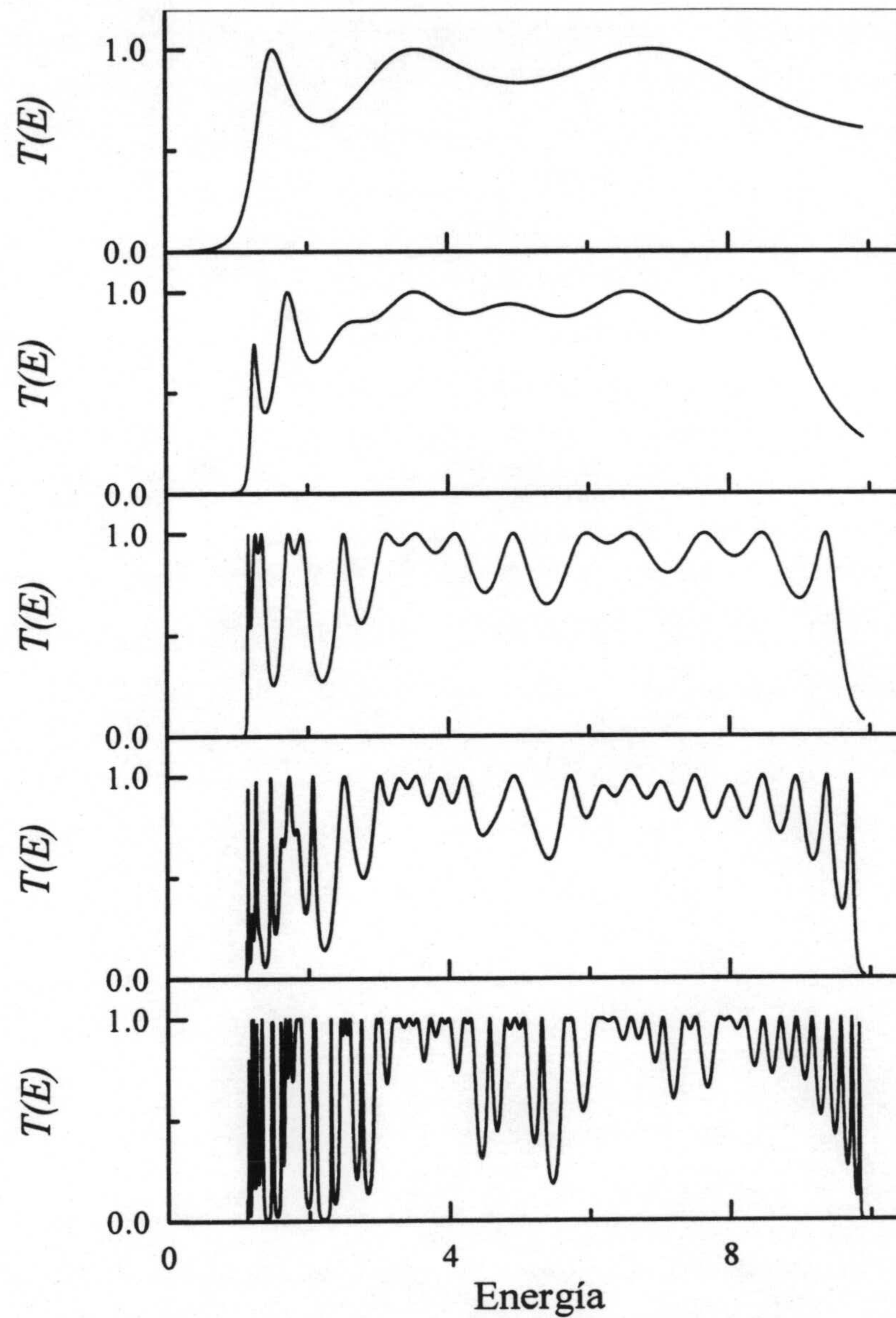
En la figura 4.8 podemos ver claramente reflejada la dependencia con la longitud del promedio del coeficiente de transmisión dentro de la primera banda de energía. En ella representamos, en doble escala logarítmica, los resultados obtenidos para un sistema periódico (triángulos), secuencias de Fibonacci (cuadrados) y secuencias de Thue-Morse (círculos). Para cada sistema cuasiperiódico, tomamos dos conjuntos de parámetros,  $V_A = 2$  y  $V_B = 1$  para las figuras huecas, y  $V_A = 3$  y  $V_B = 0.1$  para las figuras llenas. Como puede apreciarse, estos datos experimentales se ajustan muy bien a un comportamiento de la forma:

$$\langle T \rangle = aL^b \quad (4.9)$$

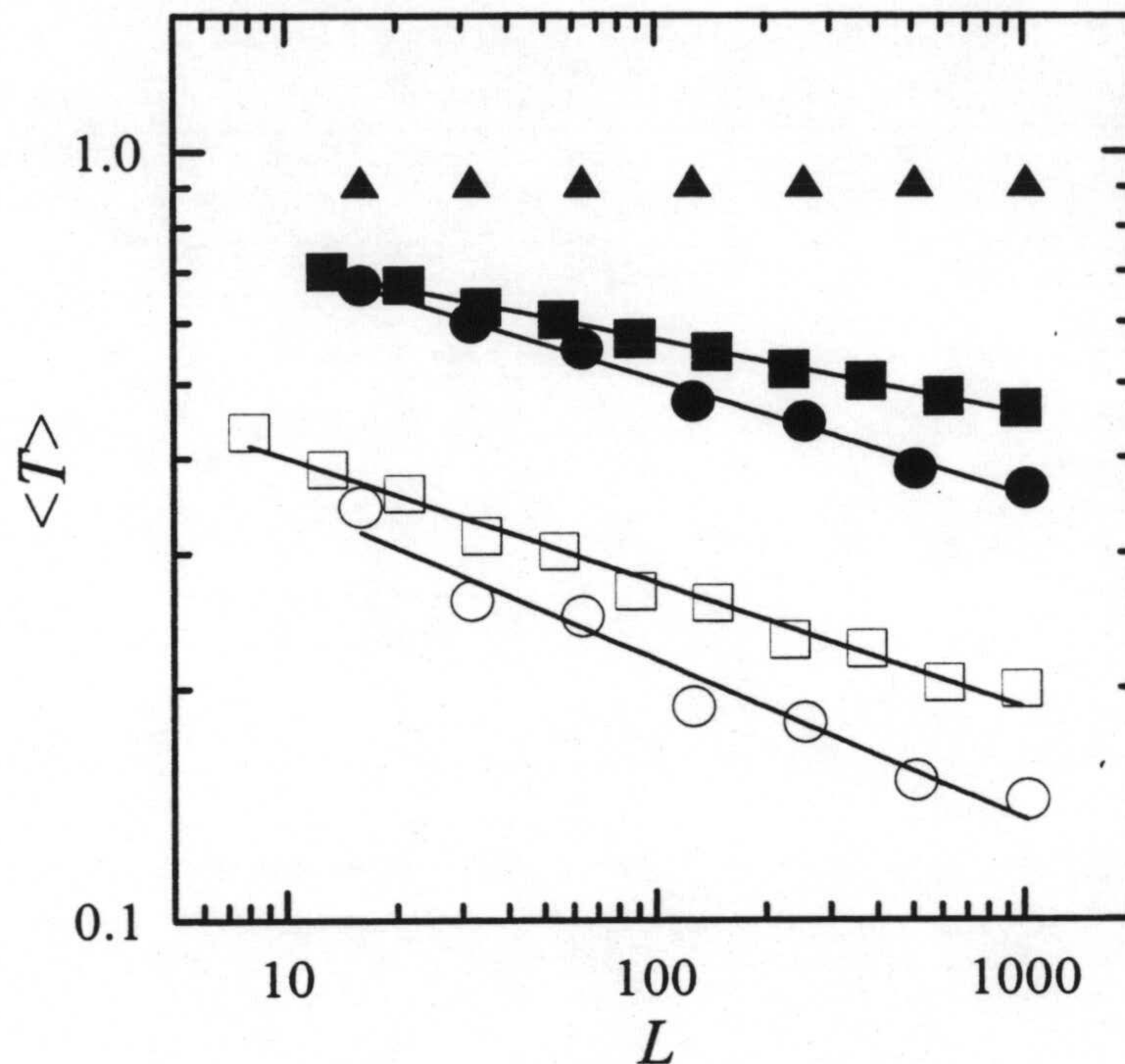
ecuación en las que  $a$  y  $b$  son constantes.



**Figura 4.6:** Coeficiente de transmisión frente a la energía del electrón incidente para un sistema de Fibonacci con  $V_A = 1.5$ ,  $V_B = 1$  y longitud variable. Las longitudes son, de arriba a abajo, 8, 13, 21, 34 y 89 funciones  $\delta$ .



**Figura 4.7:** Coeficiente de transmisión frente a la energía para un sistema de Thue-Morse con  $V_A = 1.5$ ,  $V_B = 1$  y con longitud variable. Las diferentes longitudes son, de arriba a abajo,  $N = 4, 8, 16, 32$  y  $64$  funciones  $\delta$ .



**Figura 4.8:** Dependencia del promedio del coeficiente de transmisión frente a la longitud del sistema, para secuencias periódicas (triángulos), de Fibonacci (cuadrados) y de Thue-Morse (círculos). Los valores del potencial son:  $V = 1$  (periódico),  $V_A = 2$  y  $V_B = 1$  (figuras huecas) y  $V_A = 3$  y  $V_B = 0.1$  (figuras llenas). Notar que  $\langle T \rangle$  no depende de la longitud en las secuencias periódicas.

La magnitud relevante en este ajuste es el valor del exponente  $b$ , que marca la pendiente de las rectas, y que es igual a  $-7.1 \times 10^{-5}$  para el sistema periódico,  $-0.098$  para los cuadrados huecos,  $-0.15$  para los círculos huecos,  $-0.16$  para los cuadrados llenos y  $-0.21$  para los círculos llenos.

Las conclusiones más importantes que podemos extraer del comportamiento reflejado en la figura anterior son las siguientes:

- El promedio del coeficiente de transmisión no depende de la longitud en secuencias periódicas. Esto se deriva directamente de las consecuencias del teorema de Bloch, aunque el sistema periódico considerado no es infinito. Dado

que la probabilidad de encontrar al electrón en cualquier parte del sistema debe tener la misma periodicidad que la red, el electrón podrá atravesar el sistema con la misma facilidad independientemente de la longitud del mismo. Una manera equivalente de expresar este hecho es decir que la resistencia del material no depende de la longitud del sistema si éste es periódico.

- Existe una fuerte dependencia de  $\langle T \rangle$  con la longitud en las secuencias cuasiperiódicas, que hace que la resistencia de estos materiales se incremente de forma exponencial con la longitud del sistema. Posteriormente, relacionaremos este hecho con la localización electrónica en los sistemas cuasiperiódicos.
- Obtenemos sistemáticamente una dependencia de  $\langle T \rangle$  con la longitud mayor en las secuencias de Thue-Morse que en las de Fibonacci. Esto quiere decir que la estructura de gaps de las primeras se hace mayor y más irregular que en las segundas, y por lo tanto  $T$  se ve más afectado. La conclusión a la que podemos llegar es que, a diferencia de lo que se propone en la bibliografía (Rikiund *et al.*, 1987), las secuencias de Thue-Morse son más irregulares que las de Fibonacci, al menos en lo que concierne a la transmisión electrónica a través de ellas.

#### 4.4 Densidad de estados

En el capítulo tres estudiamos las características del espectro discreto de un sistema, espectro que obteníamos cuando considerábamos energías negativas en el modelo de funciones  $\delta$ , o de manera directa en el modelo de fuerte ligadura. En ambos casos, existía el espectro discreto porque el sistema era cerrado. En esta sección vamos a considerar sistemas abiertos o, al menos, rangos de energía en los que el sistema es abierto. Es conveniente considerar el modelo de Kronig-Penney con un número finito de funciones  $\delta$  negativas y energías mayores que

cero, o, alternativamente podemos tomar un potencial con las amplitudes de las funciones  $\delta$  positivas, tal y como hemos hecho en el estudio de la transmisión. Dicho potencial, que sólo tendrá espectro continuo, es el que utilizaremos aquí por comodidad, aunque los resultados son iguales cualitativamente tanto si el potencial está formado por pozos ( $V_i < 0$ ) como si lo está por barreras ( $V_i > 0$ ). En ambos casos, el método del determinante asume implícitamente que a la izquierda de la primera barrera  $\delta$  y a la derecha de la última, tenemos dos medios semiinfinitos perfectamente conductores.

Para estudiar el espectro continuo, la magnitud más adecuada es la densidad de estados,  $g(E)$ . En primer lugar, vamos a explicar como puede obtenerse la densidad de estados a partir del determinante característico.

#### 4.4.1 Relación entre $g(E)$ y el determinante característico.

La función de Green de un sistema posee una gran cantidad de información acerca del mismo. En particular, la densidad local de estados de un sistema puede obtenerse a partir de su función de Green a través de la siguiente ecuación:

$$g(E) = \frac{1}{\pi L} \int_0^L dx \operatorname{Im} G(x, x; E) \quad (4.10)$$

donde la integral se extiende a todo el sistema, suponiendo que éste se encuentra entre 0 y  $L$ . Partiendo de esta expresión, y utilizando la relación entre la función de Green y el determinante característico, que se detalló en el capítulo 2, puede demostrarse (Gasparian *et al.*, 1988; Gasparian, 1989; Aronov, Gasparian & Gummich, 1991a y 1991b) que la densidad de estados viene dada en función del determinante característico  $D_L(E)$  a través de la expresión:

$$g(E) = g_0(E) - \frac{1}{\pi L} \operatorname{Im} \frac{\partial}{\partial E} \ln D_L(E) \quad (4.11)$$

donde  $L$  es la longitud del sistema, y  $g_0(E)$  es la densidad de estados electrónicos para el medio sin perturbar. Como medio sin perturbar, entendemos al medio sin



las funciones  $\delta$ . En nuestro caso, por lo tanto, esta densidad de estados corresponderá directamente a la densidad de estados para electrones libres, que para nuestra elección de unidades viene dada por:

$$g_0(E) = \frac{1}{2\pi k} \quad (4.12)$$

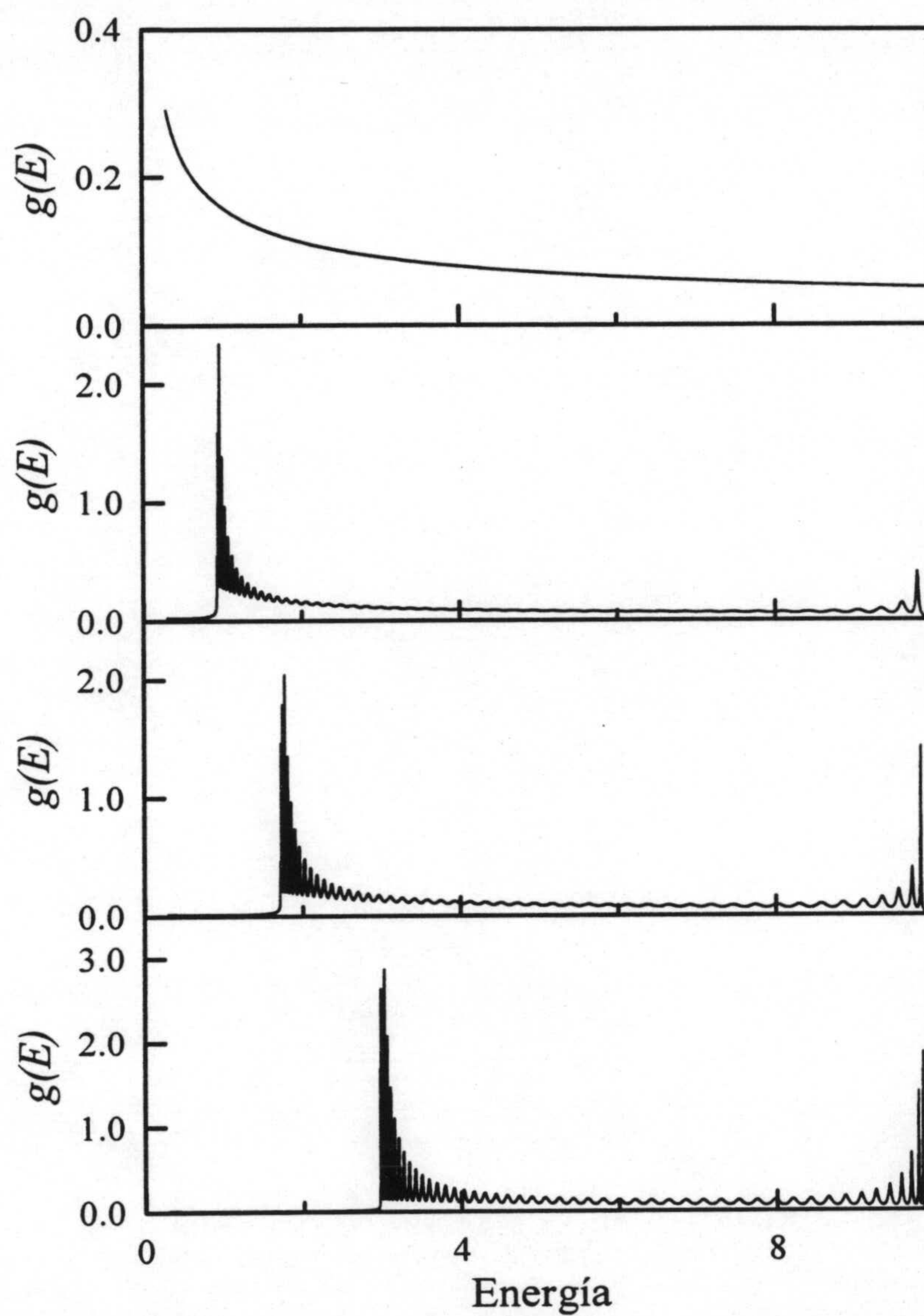
con  $k = \sqrt{E}$ . Este resultado puede obtenerse fácilmente aplicando la ecuación (4.10) a la función de Green la de la partícula libre, ecuación (3.9), sin más que hacer  $k = -i\kappa$ , porque hemos de considerar energías positivas.

#### 4.4.2 Sistemas periódicos

En el capítulo uno, ya dimos la expresión de la densidad de estados para el modelo de fuerte ligadura en el caso periódico. Aquí, vamos a calcular  $g(E)$  para el modelo de funciones  $\delta$  también en el caso de sistemas periódicos para ver si la información que obtenemos se corresponde con lo que cabría esperar. Para ello, calcularemos numéricamente la densidad de estados a través de la ecuación (4.11).

En la figura 4.9 representamos cuatro densidades de estados en función de la energía en la primera zona de Brillouin para un sistema ordenado con  $V = 0, 1, 2$  y  $4$ , de arriba a abajo respectivamente. Se trata de una secuencia periódica con constante de red  $a = 1$  y constituida por 50 barreras  $\delta$ . El primer caso  $V = 0$  corresponde a electrones libres, y la densidad de estados, por tanto, viene dada por (4.12). Conforme aumentamos el valor del potencial, aparece la conocida estructura de bandas permitidas y prohibidas, que ya explicamos cuando estudiamos el coeficiente de transmisión para el modelo de Kronig-Penney.

Dentro de cada banda permitida aparecen una serie de picos, que podríamos considerar como resonancias en la densidad de estados, y que también encontramos cuando estudiábamos el coeficiente de transmisión. Esto se debe a la finitud de los sistemas estudiados. El número de resonancias es función del número de barreras que forman el sistema. De hecho, se puede demostrar fácilmente que si el sistema tiene  $N$  barreras, aparecerán  $N - 1$  resonancias en el coeficiente de transmisión, y



**Figura 4.9:** Densidad de estados para cuatro secuencias periódicas de funciones  $\delta$ . Todas las secuencias contienen 50 barreras  $\delta$ , con un espaciado  $a = 1$ . Los valores de  $V$  son, de arriba a abajo, 0, 1, 2 y 4.

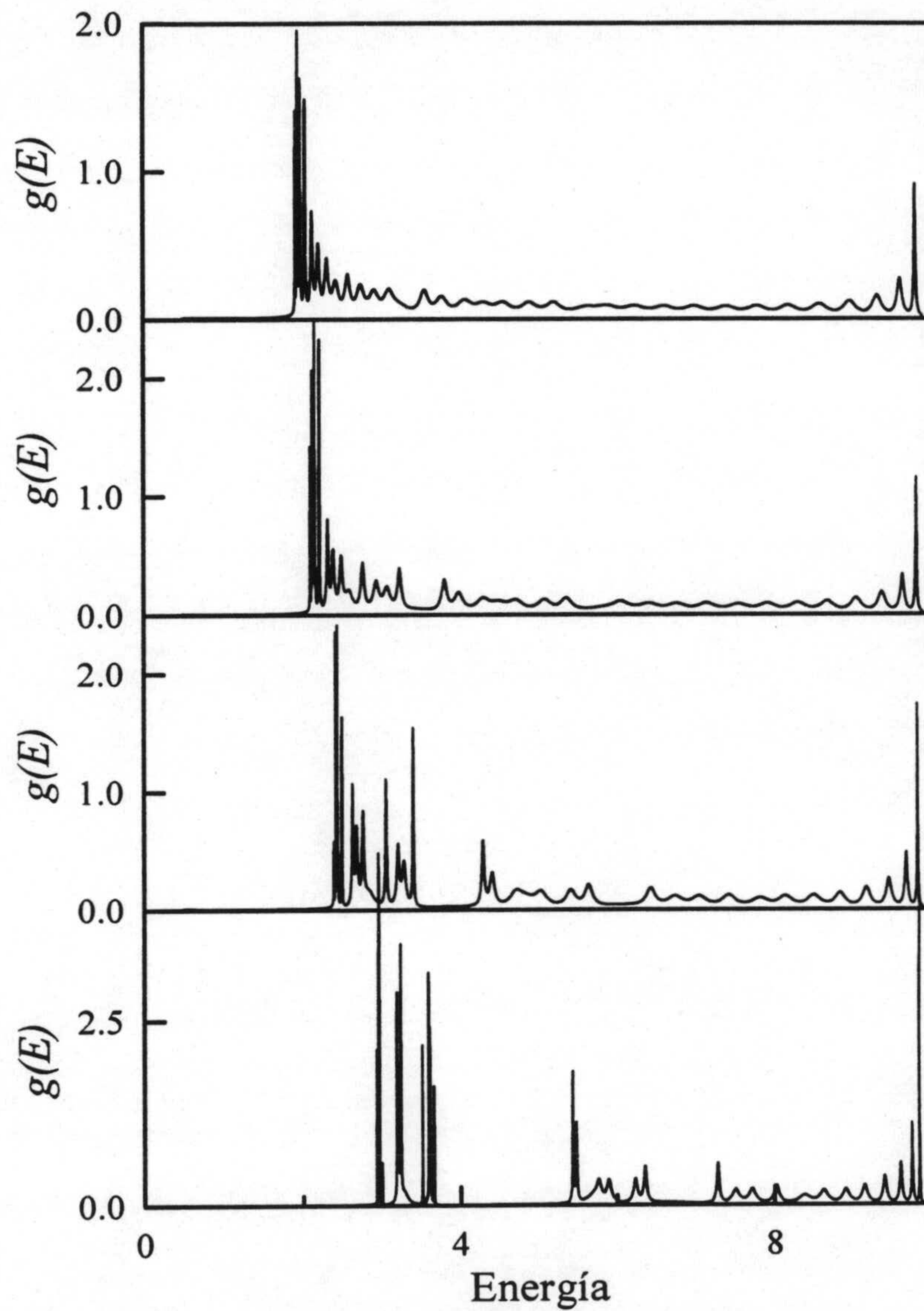
también en la densidad de estados.

En las densidades de estados representadas, podemos observar una característica que es común en general a los sistemas ordenados, y que también hemos comentado anteriormente en esta memoria. Las bandas energéticas están muy bien delimitadas, y presentan en sus extremos discontinuidades de Van Hove en las que la densidad de estados tiende a infinito. En nuestro ejemplo, en el que el sistema estudiado es finito, esto se refleja en los agudos picos que aparecen delimitando las bandas permitidas.

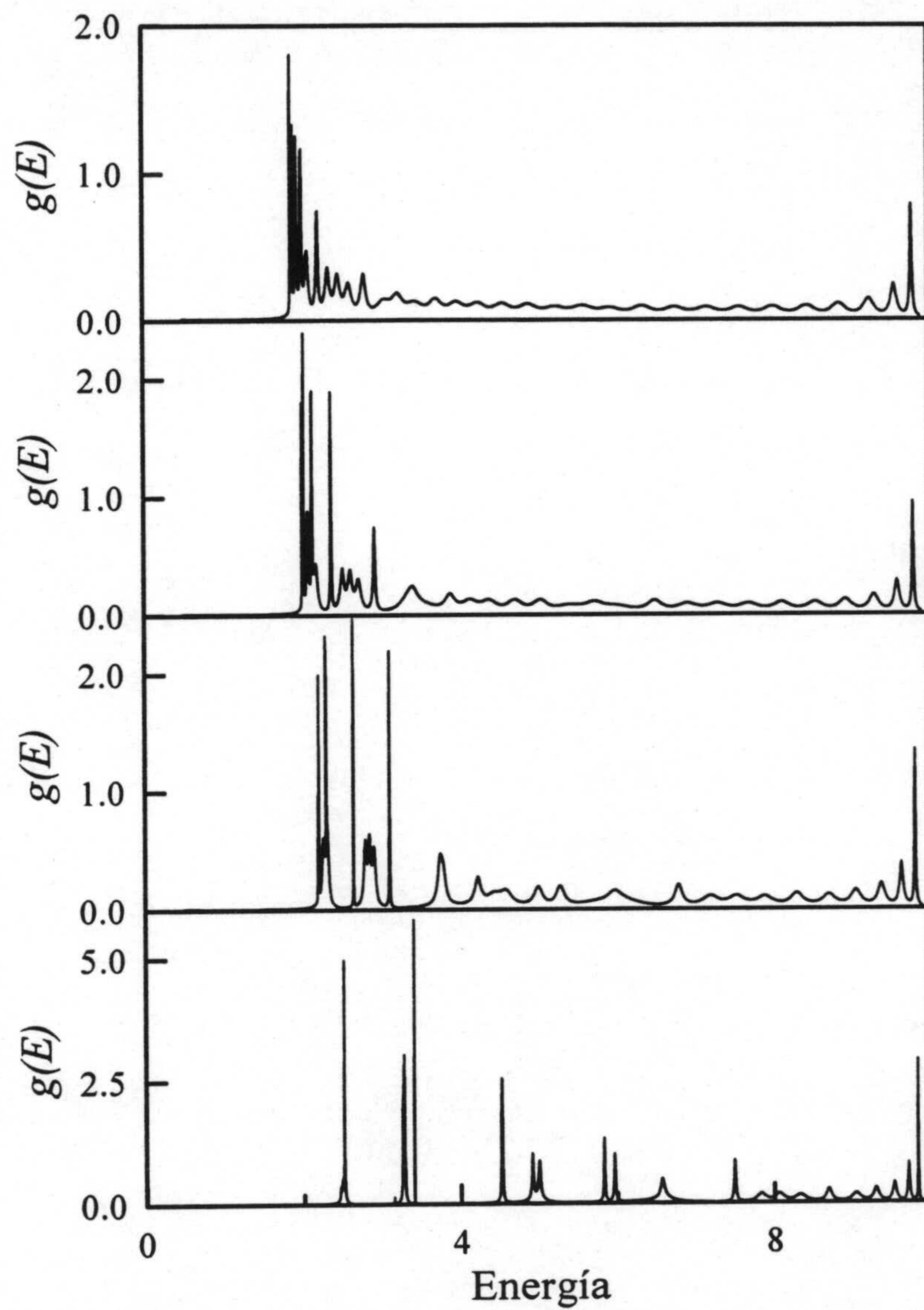
### 4.4.3 Sistemas cuasiperiódicos

Análogamente al estudio que acabamos de realizar, vamos a estudiar ahora las propiedades de la densidad de estados en secuencias cuasiperiódicas. En las figuras 4.10 y 4.11 representamos las densidades de estados frente a la energía en la primera zona de Brillouin para unas secuencias de 34 y 32 funciones  $\delta$ , respectivamente. Los valores de los potenciales son en ambas figuras  $V_B = 2$  y  $V_A = 2.5, 3, 4$  y  $7$  de arriba a abajo en las dos series.

El comportamiento de la densidad de estados en ambos sistemas es similar. Cuando se incrementa el valor de uno de los potenciales que forman las cadenas, la densidad de estados evoluciona, desde una estructura análoga a la de una banda periódica (en el gráfico superior de las dos figuras,  $V_A$  y  $V_B$  son parecidos y la banda está poco perturbada con respecto a un sistema periódico) hacia estructuras muy irregulares, en las que aparecen regiones con existencia de estados, y zonas sin estados o gaps, de forma más o menos caótica. Además, y aunque estamos considerando energías positivas, y por lo tanto, espectro continuo, para los valores más grandes de  $V_A$  es posible apreciar como hay regiones de la densidad de estados que se discretizan enormemente. Eso quiere decir que en esas zonas existen intervalos energéticos donde hay estados permitidos, pero cuya anchura tiende a cero, con lo que en el límite casi podríamos considerar que tenemos un estado cuasidiscreto inmerso en el espectro continuo. Conviene recordar aquí que un estado discreto

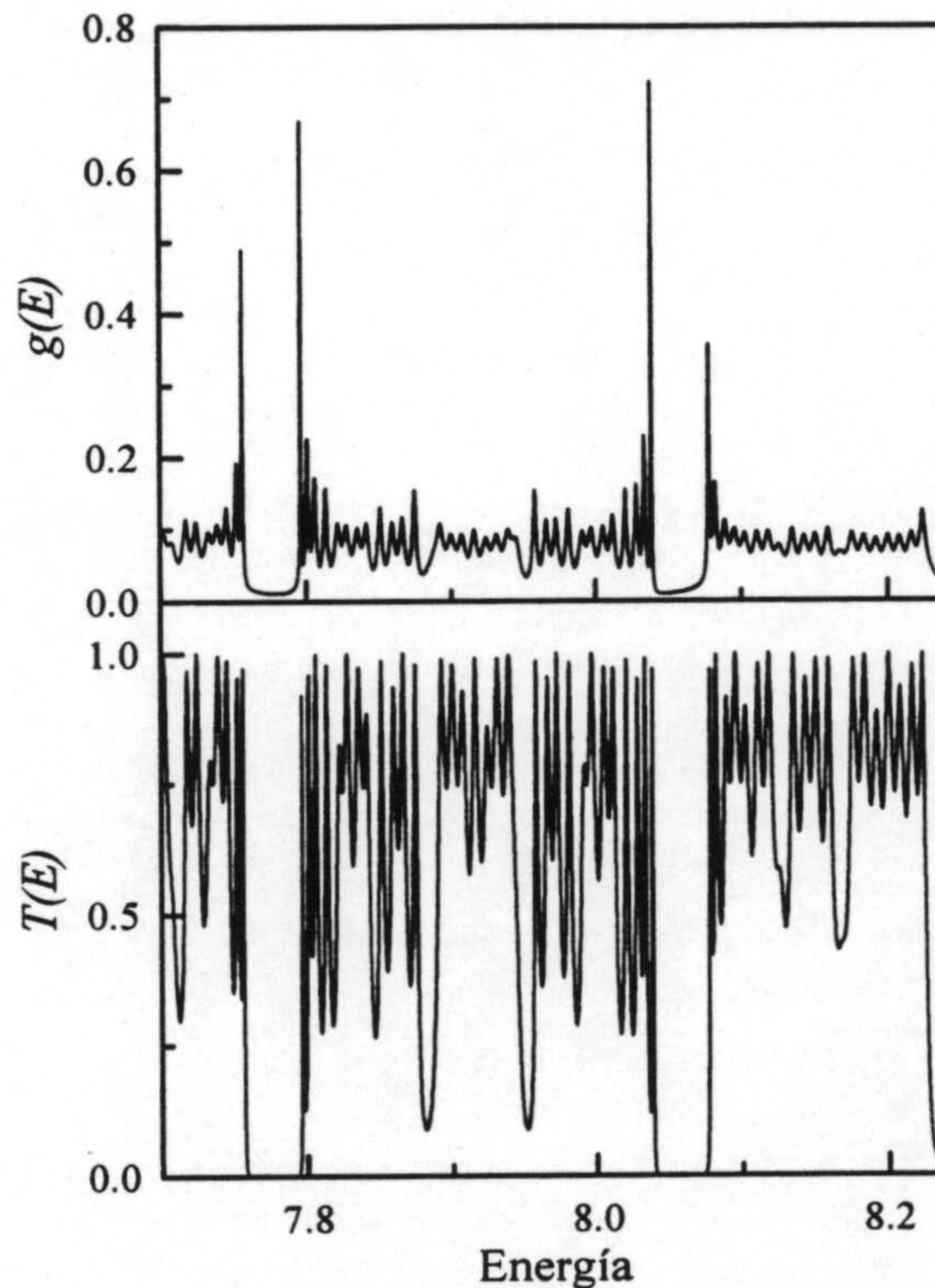


**Figura 4.10:** Densidad de estados obtenida para cuatro secuencias de Fibonacci formadas por 34 funciones  $\delta$  y con espaciado uniforme  $a = 1$ . En todos los casos,  $V_B = 2$ , mientras que los valores de  $V_A$  son, de arriba a abajo, 2.5, 3, 4 y 7.



**Figura 4.11:** Densidad de estados obtenida para cuatro secuencias de Thue-Morse formadas por 32 funciones  $\delta$  y con espaciado uniforme  $a = 1$ . En todos los casos,  $V_B = 2$ , mientras que los valores de  $V_A$  son, de arriba a abajo, 2.5, 3, 4 y 7.

aparecería como una función  $\delta$  en la densidad de estados, y que la presencia de los picos agudos en las densidades de estados obtenidas parecen tender precisamente a ese tipo de comportamiento.



**Figura 4.12:** Densidad de estados (arriba) y coeficiente de transmisión (abajo) para una secuencia formada por 1597 funciones  $\delta$  con espaciado constante  $a = 1$  y  $V_A = 3$  y  $V_B = 0.5$ . Ambas curvas se representan en la misma región energética para facilitar la comparación.

#### 4.4.4 Relación de $g(E)$ con el coeficiente de transmisión.

Una vez que hemos estudiado la forma de la densidad de estados en los sistemas cuasiperiódicos, estamos en condiciones de interpretar la estructura del coeficiente de transmisión, y de relacionarla con  $g(E)$ .

la transmisión será nula a través de él. Normalmente, esta dificultad se soslaya considerando que el campo eléctrico únicamente afecta a una parte del sistema, de manera que los dos extremos del mismo no se ven incluidos. Así se consigue que el sistema esté abierto, y tenga sentido hablar de transmisión electrónica. Pero aun así, si este caso se quiere calcular de manera exacta, aparecen dificultades de tipo práctico porque las funciones de onda, utilizadas para la obtención de  $T$ , no pueden considerarse como ondas planas en la región afectada por el campo eléctrico. En este caso, la solución de la ecuación de Schrödinger en dicha región está dada por una combinación lineal de las funciones de Airy, que son complejas de tratar porque el tiempo de computación requerido para el cálculo aumenta enormemente.

Para evitar el uso de las funciones de Airy, se recurre a una aproximación adicional que consiste en simular los incrementos lineales de energía potencial por pequeños tramos de potencial constante que forman una escalera en la dirección del campo eléctrico, ya comentada en el capítulo tres. Dentro de cada uno de estos pequeños tramos de potencial constante, la función de onda sí puede considerarse como una combinación lineal de ondas planas. Dicha aproximación, que ya utilizamos en esta memoria cuando estudiamos el espectro energético, será usada también para el análisis de la localización de las funciones de onda bajo los efectos de un campo eléctrico, y en el estudio que realizaremos en el capítulo 6 sobre la masa efectiva en el método de la función envolvente.

No obstante, el interés principal en calcular la transmisión en sistemas con campo eléctrico radica en que, a través de las resonancias de  $T$ , se pueden localizar los niveles energéticos que forman la escalera de Wannier-Stark, y que dan lugar a los cuasiestados. Sin embargo, en el capítulo anterior sobre el espectro energético, nosotros ya desarrollamos una manera más exacta y eficiente para el estudio de los cuasiestados en sistemas con campo eléctrico, con lo que el estudio de  $T$  en estos sistemas carece de utilidad, y no se verá aquí.

## Capítulo 5

# El problema de la localización

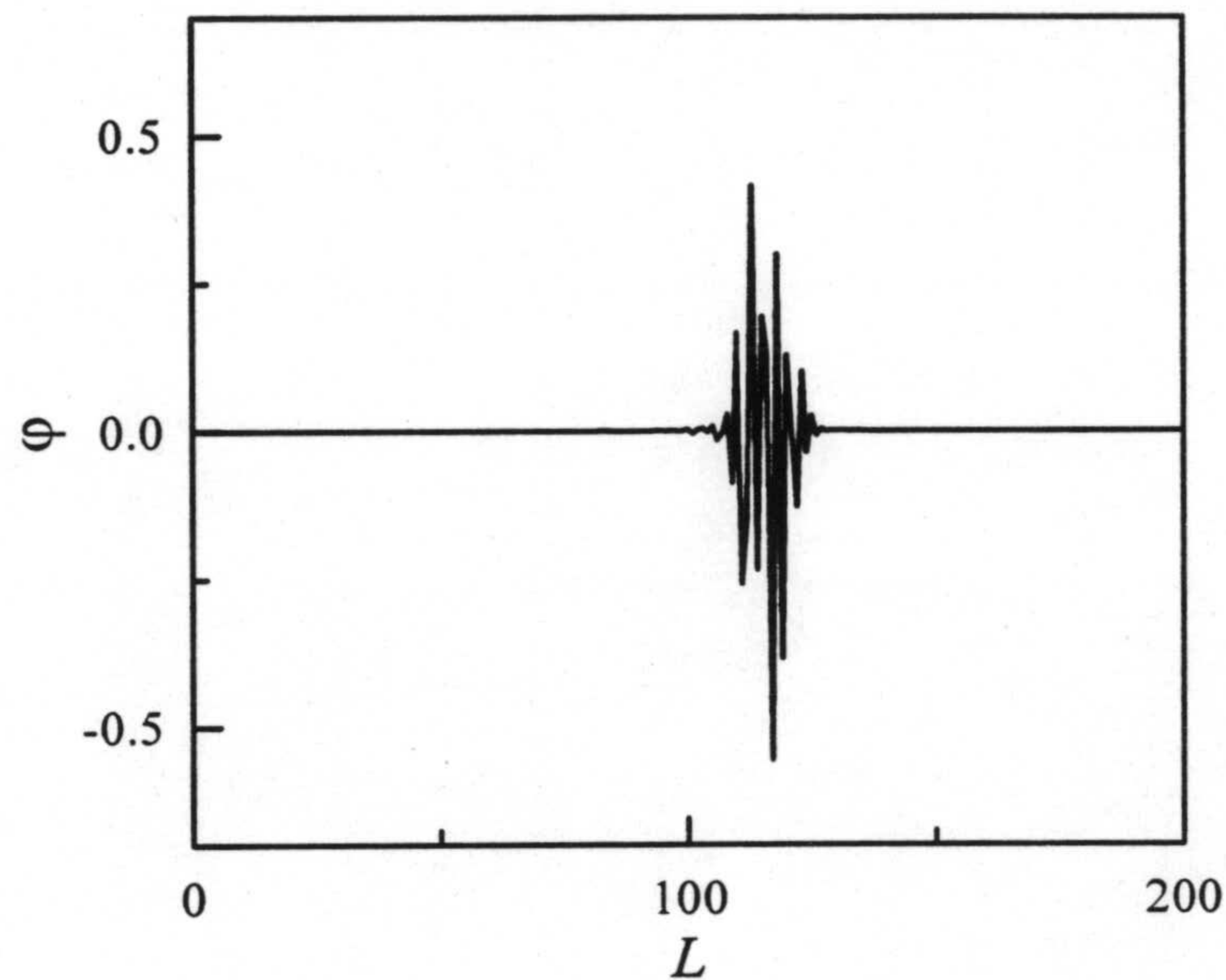
### 5.1 Introducción

Uno de los descubrimientos fundamentales en la física de los materiales desordenados es la aparición de estados localizados en este tipo de sistemas. En los sólidos cristalinos perfectos, las funciones de onda electrónicas son funciones de Bloch, y por lo tanto sus módulos presentan la misma periodicidad de la red. Debido a esto, la probabilidad de encontrar al electrón en puntos equivalentes de la estructura periódica es la misma. Una forma equivalente de decir lo mismo desde el punto de vista de la conducción eléctrica es que, si el electrón es capaz de moverse sin restricciones a través de todo el sistema, el material conducirá sin ninguna dificultad la corriente eléctrica y, por lo tanto, no tendrá resistencia, dando lugar a los habitualmente llamados conductores perfectos.

Sin embargo, el desarrollo de la física de los sistemas desordenados dio lugar a la aparición del concepto de localización electrónica. En un material desordenado, y por lo tanto carente de periodicidad, las funciones de onda electrónicas pueden ser localizadas. En este caso la probabilidad de encontrar al electrón es apreciable en una pequeña región del sistema, pero prácticamente nula en el resto. Este problema depende de manera crítica de la dimensión del sistema y del desorden, como ya se explicó en el capítulo 1. Para sistemas unidimensionales, como los que estamos estudiando aquí, las funciones electrónicas están localizadas indepen-



dientemente del grado de desorden del mismo. Un ejemplo gráfico de este hecho puede verse en la figura 5.1, en la que se representa una función de onda obtenida por diagonalización numérica del modelo de Anderson, y que presenta una fuerte localización.



**Figura 5.1:** Función de onda de una secuencia desordenada obtenida usando el modelo de Anderson. La cadena tiene 200 átomos, y está construida usando los parámetros  $W = 4$  y  $V = 1$ .

No obstante, si los sistemas desordenados presentan localización, y este fenómeno no se produce en los sólidos periódicos, cabe preguntarse qué ocurre en los sistemas cuasiperiódicos, cuyas propiedades han de ser intermedias. Este es un problema que no ha sido estudiado con profundidad en la bibliografía, y al que será dedicado este capítulo. En la primera parte del mismo, estudiaremos la posible localización en sistemas cuasiperiódicos en ausencia de campo eléctrico aplicado. En la segunda parte del capítulo, y como es habitual a lo largo de esta memoria, estudiaremos las características especiales que presenta la localización inducida por un campo

eléctrico (localización de Stark) en estos sistemas.

Para caracterizar el grado de localización de un sistema, se emplean varias magnitudes, como ya comentamos en el capítulo 1. En la bibliografía se utilizan en mayor o menor grado básicamente dos: la llamada longitud de localización,  $\lambda$ , y la magnitud denominada razón inversa de participación (ver capítulo 1). Así, nosotros ya definimos  $\lambda$  relacionándola con la envolvente de las funciones de onda en sistemas desordenados. Para ello, asumimos que las funciones de onda electrónicas consisten en una función de onda aleatoria,  $f(r)$ , modulada por una exponencial decreciente:

$$\Psi(r) = f(r)e^{-\frac{r}{\lambda}}. \quad (5.1)$$

Si  $\lambda$  es pequeña, el estado está muy localizado, mientras que si  $\lambda \rightarrow \infty$ , el estado está extendido. Una definición como la dada en la ecuación anterior no resulta demasiado útil desde el punto de vista operacional. Una alternativa a esta definición es la siguiente (Kramer & Mackinnon, 1993):

$$\frac{2}{\lambda} = - \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\ln T(E)}{L} \quad (5.2)$$

en donde  $T$  es el coeficiente de transmisión, que depende de la energía.

La otra medida de localización, que llamamos la razón inversa de participación ( $P^{-1}$ ) y usaremos preferentemente en este trabajo, se define de la manera siguiente (Wegner, 1980):

$$P^{-1} = \int_L |\Psi(r)|^4 dr, \quad \|\Psi\| = 1 \quad (5.3)$$

donde la integral ha de extenderse a todo el espacio, y por lo tanto, como se indica en la ecuación anterior, la función de onda ha de poder normalizarse. Esta magnitud, como ya explicamos en el capítulo 1, mide el diámetro medio del estado,  $D$ , a través de  $D = P^{1/d}$ , donde  $d$  es la dimensión del sistema.

En un sistema infinito y perfectamente periódico, el significado de  $\lambda$  y de  $P^{-1}$  es claro. El coeficiente de transmisión  $T$  es independiente de la energía y de la longitud del sistema, y vale la unidad dentro de una banda permitida, con lo cual

$\ln T = 0$ . Esto último implica, a través de (5.2), que  $\lambda \rightarrow \infty$  (estado extendido). Por lo que respecta a  $P^{-1}$ , como ya comentamos en el capítulo 1, para un estado perfectamente extendido en un sistema de longitud  $L$ , tenemos que  $P^{-1} = L^{-1}$ . En el límite  $L \rightarrow \infty$ , de nuevo encontramos que el diámetro medio del estado tiende a infinito ( $D = L$ ), con lo que obtenemos un resultado coincidente con el hallado a través de  $\lambda$ . Usaremos, por conveniencia y facilidad práctica, la razón inversa de participación.

Si bien resulta trivial aplicar las medidas de localización a sistemas que no están localizados, como los sólidos periódicos, serán reveladoras a la hora de analizar la localización en otros tipos de sistemas. En la sección siguiente, y previamente a la presentación de los resultados obtenidos, describimos el método de cálculo que utilizaremos a lo largo del capítulo para el estudio de la localización.

## 5.2 Procedimiento de cálculo

Para estudiar más cuantitativamente la existencia de localización y cómo se comporta, vamos a utilizar un modelo multicapa como el que se definió en el capítulo dos, a fin de formar un sistema de pozos y barreras rectangulares, como el representado en la figura 5.2 para una secuencia de Fibonacci formada por ocho pozos. Este sistema está rodeado por dos medios semiinfinitos caracterizados por el valor de sus energías potenciales, ambas iguales, y que nosotros consideraremos como nuestro valor de referencia,  $E = 0$ . La estructura periódica o cuasiperiódica de las secuencias está generada utilizando como parámetro de desorden la profundidad de los pozos. Esta profundidad tendrá un valor constante en todos los pozos si el sistema es periódico, o bien tendrá dos valores básicos,  $V_A$  y  $V_B$  que generarán la correspondiente secuencia cuasiperiódica, como el ejemplo mostrado en 5.2. En todos los casos que vamos a calcular aquí, la anchuras de los pozos y las barreras se considerarán iguales a la unidad, por simplicidad. Además, la profundidad de todos los pozos es tal que sólo existe un único estado ligado en su interior cuando



Para poder medir la localización de los estados, el proceso de cálculo puede dividirse claramente en tres pasos. El primero de ellos, que se realiza a través del determinante característico, consiste en determinar las autoenergías correspondientes a los estados ligados del sistema, que es equivalente a resolver la ecuación de Schrödinger. Para ello, construimos el determinante de orden  $N$ ,  $D_N$ , donde  $N$  es el número de capas que forman el sistema, utilizando las funciones de Green correspondientes a este modelo, que ya se dieron en el capítulo dos. Resolviendo numéricamente la ecuación  $D_N = 0$  para el rango energético  $E < 0$ , obtenemos las autoenergías del sistema.

El segundo paso consiste en encontrar la función de onda correspondiente a una autoenergía. Si suponemos que  $E_0$  es una de estas soluciones, el número de onda en la capa  $n$ -ésima será  $k_n = \sqrt{E_0 - V_n}$ , donde  $V_n$  es la energía potencial característica de esa capa. Es claro que en la región de la derecha de la figura 5.2 la única solución físicamente aceptable es la exponencial decreciente, luego en esa última capa, la función de onda será:

$$\Psi_N(x) = A_N e^{ik_N x} \quad (5.4)$$

donde, al ser  $V_N = 0$ , tenemos que  $k_N = \sqrt{E_0} = i\sqrt{-E_0}$ , y  $e^{ik_N x}$  será una exponencial real y decreciente. En cualquier otra capa  $n$ , la función de onda será de la forma:

$$\Psi_n(x) = A_n e^{ik_n x} + B_n e^{-ik_n x}. \quad (5.5)$$

Las constantes  $A_n$  y  $B_n$  pueden obtenerse iterativamente como función de  $A_{n+1}$  y  $B_{n+1}$  sin más que aplicar la continuidad de la función de onda y de su derivada en la intercara existente entre cada dos capas. En forma matricial, la relación entre estos coeficientes puede escribirse como:

$$\begin{pmatrix} \frac{k_n + k_{n+1}}{2k_n} e^{i(k_{n+1} - k_n)x_n} & \frac{k_n - k_{n+1}}{2k_n} e^{-i(k_{n+1} + k_n)x_n} \\ \frac{k_n - k_{n+1}}{2k_n} e^{i(k_{n+1} + k_n)x_n} & \frac{k_n + k_{n+1}}{2k_n} e^{-i(k_{n+1} - k_n)x_n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} \quad (5.6)$$

donde se considera que el punto  $x_n$  limita las capas  $n$ -ésima y  $(n + 1)$ -ésima.

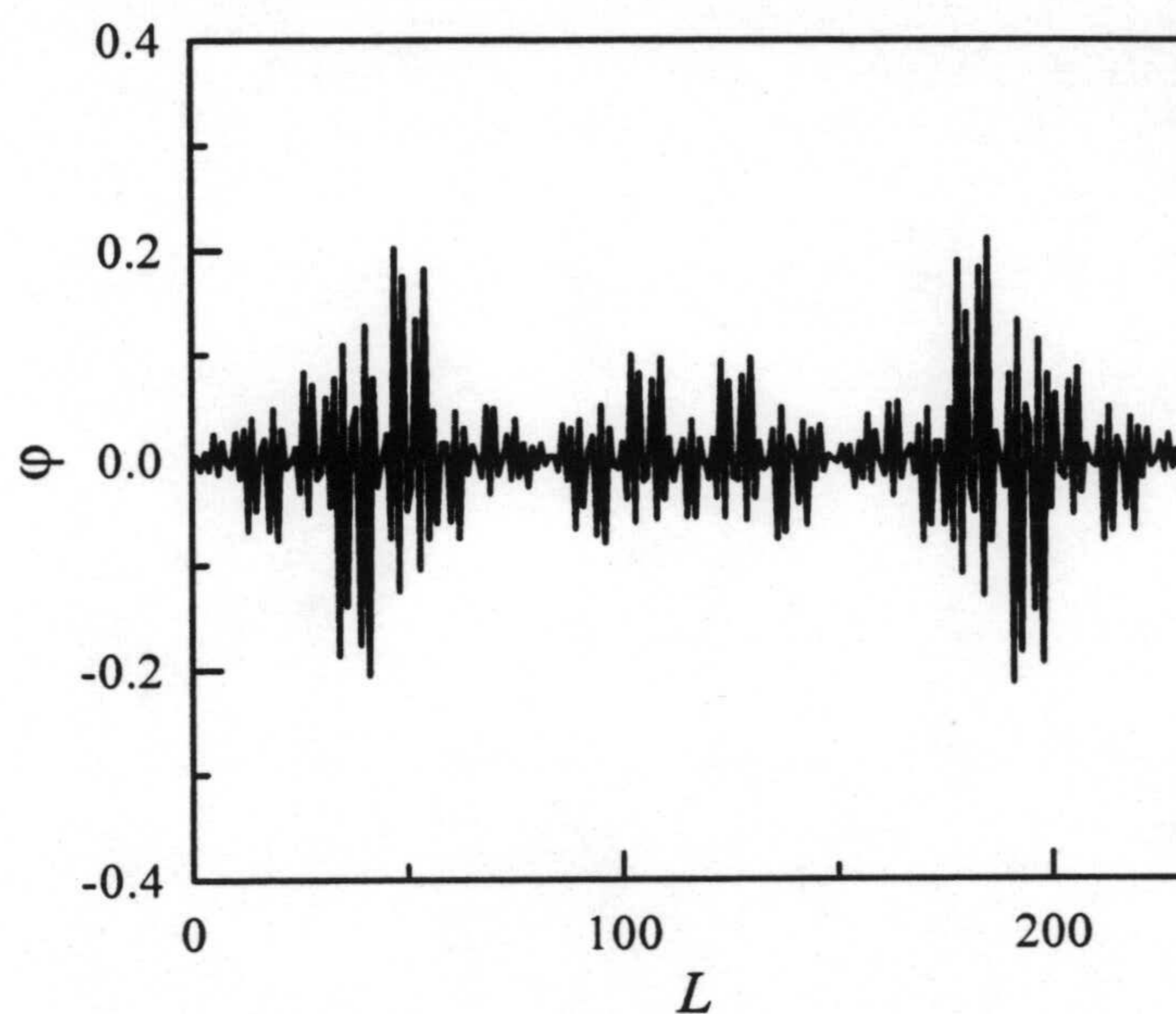
Si el valor de  $E_0$  corresponde a un autoestado, la función de onda así calculada será una solución de la ecuación de Schrödinger, y por lo tanto también tiende a cero de manera exponencial en la parte izquierda del sistema. A la hora de determinar el valor de las constantes  $A_n$  y  $B_n$ , el único parámetro arbitrario es  $A_N$ , al que puede darse cualquier valor. Una vez determinada la función de onda, y teniendo en cuenta que el sistema es finito, podemos normalizarla convenientemente y eliminar así la arbitrariedad de los coeficientes.

Y el tercer y último paso, una vez que tenemos calculada la función de onda normalizada, consiste en calcular numéricamente  $P^{-1}$  a través de la ecuación (5.3). Aunque estrictamente hablando la integral debe extenderse a todo el eje real (igual que en el caso de la normalización), teniendo en cuenta el carácter exponencial a ambos lados del sistema, puede cogerse un intervalo de integración numérica conveniente para el que el error cometido sea despreciable.

### 5.3 Localización en sistemas cuasiperiódicos

Si bien es clara la existencia de la localización en sistemas desordenados, la cuestión de la localización en sistemas cuasiperiódicos sigue sin esclarecerse del todo, y parece haber datos contradictorios en la bibliografía. Aquí, vamos a tratar de ver si existe o no la localización, y vamos a ver como se comporta. La controversia surge principalmente debido a la peculiar estructura que presentan las funciones de onda en este tipo de sistemas. En las figuras 5.3 y 5.4 se muestran funciones de onda de Fibonacci y Thue-Morse obtenidas a partir de la diagonalización del modelo de fuerte ligadura. Como podemos apreciar, la estructura de ambas funciones de onda está en una situación intermedia entre una función de onda completamente extendida, y la función de onda exponencialmente localizada de la figura 5.1, correspondiente a un sistema desordenado. Las características fractales de las funciones de onda para la secuencia de Fibonacci son bien conocidas, y pueden verse, por ejemplo, en el artículo de Kohmoto *et al.* (1987). Las funciones de

onda en el caso de Thue-Morse parecen presentar, al menos cualitativamente, las mismas características que las de Fibonacci.

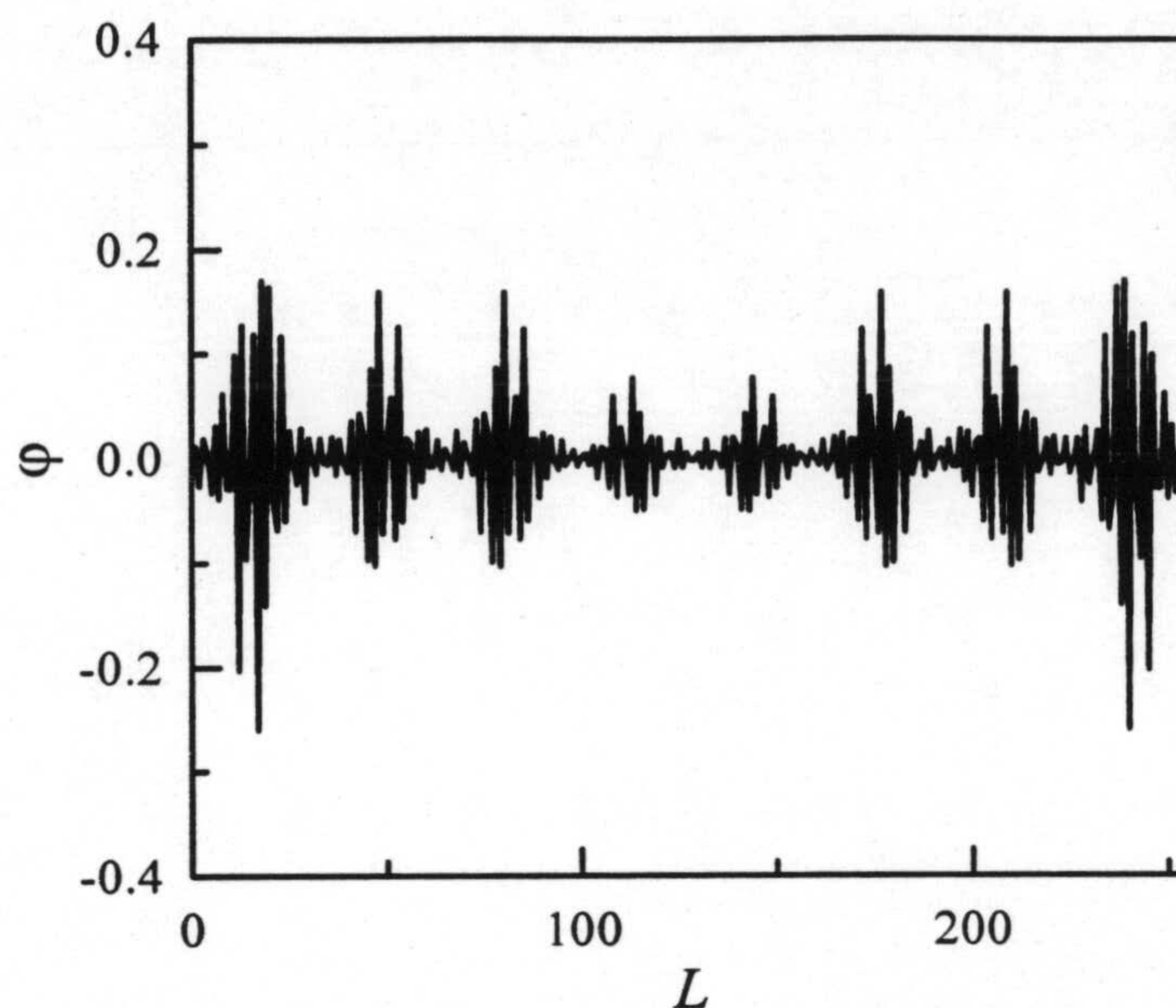


**Figura 5.3:** Función de onda de una secuencia de Fibonacci en el modelo de fuerte ligadura. La cadena tiene 233 átomos, y está construida usando los parámetros  $\varepsilon_A = 2$ ,  $\varepsilon_B = 0$  y  $V = 1$ .

Las funciones de onda mostradas en las figuras 5.3 y 5.4 sirven como ejemplo de la situación intermedia en la que se encuentran los sistemas cuasiperiódicos. Sin embargo, su utilidad es meramente descriptiva, y resulta necesario realizar un estudio más detallado de las propiedades de la localización, que se realiza en las secciones siguientes.

### 5.3.1 Fibonacci

En el estudio que vamos a realizar aquí, hemos limitado nuestro análisis al estado fundamental de las secuencias cuasiperiódicas consideradas, porque es suficiente para comprender el comportamiento de la localización. Los resultados de la razón



**Figura 5.4:** Función de onda de una secuencia de Thue-Morse en el modelo de fuerte ligadura. La cadena tiene 256 átomos, y está construida usando los parámetros  $\varepsilon_A = 2$ ,  $\varepsilon_B = 0$  y  $V = 1$ .

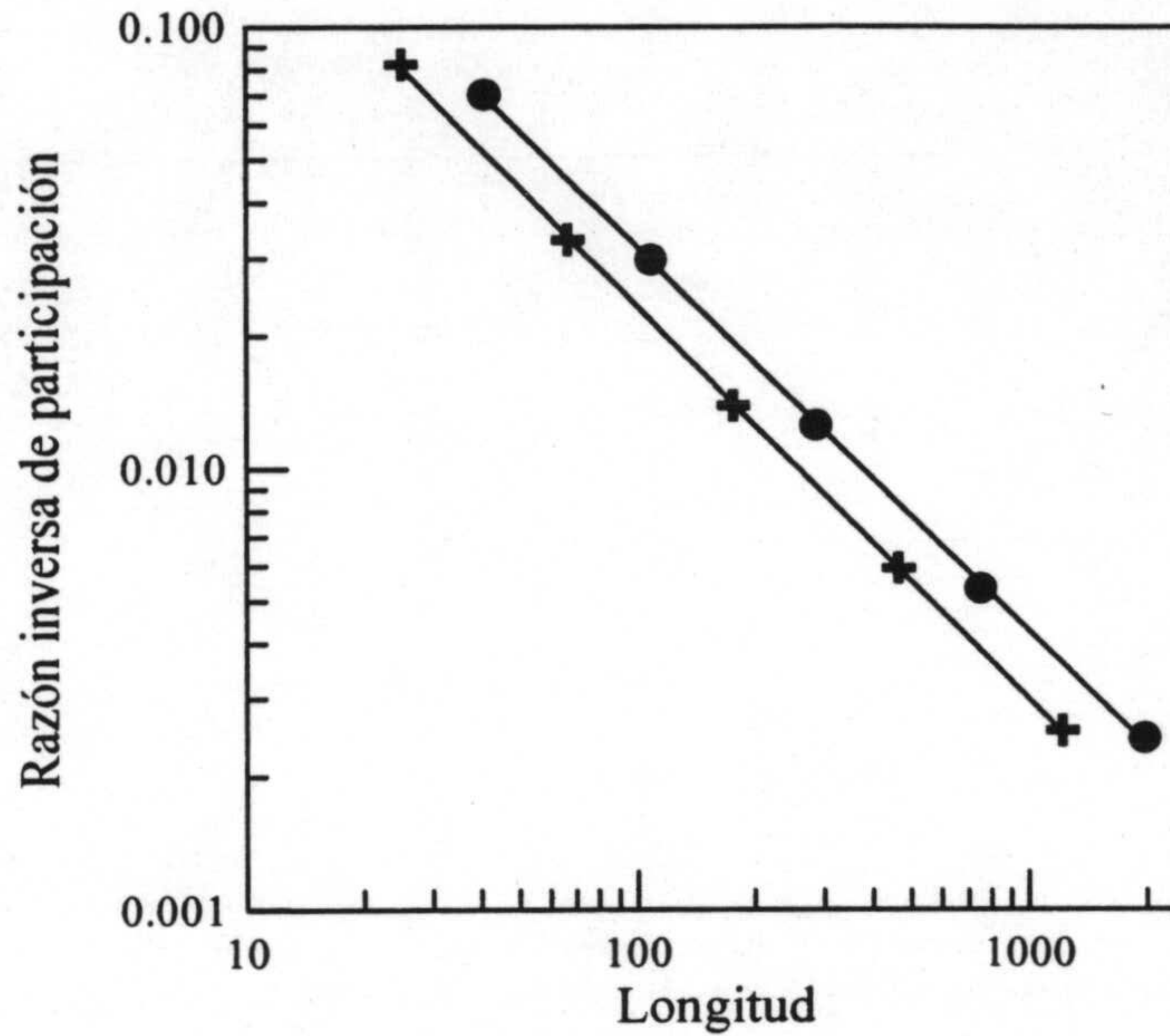
inversa de participación obtenidos para el estado fundamental de una secuencia de pozos de Fibonacci para diferentes longitudes del sistema se muestran en una doble escala logarítmica en la figura 5.5. Vamos a interpretar estos resultados desde el punto de vista del diámetro medio del estado para cada longitud. En el caso de Fibonacci, la longitud total de cada sistema puede obtenerse, teniendo en cuenta que la anchura de los pozos y las barreras es la unidad, como

$$L_n = 2F_n - 1 \quad (5.7)$$

donde  $F_n$  es el número de Fibonacci (ver capítulo 1) de orden  $n$ , que da el número de pozos de la secuencia de Fibonacci  $n$ -ésima.

Puede verse a partir de los datos obtenidos que, a pesar de existir una cierta uniformidad, aparece una fluctuación sistemática de la localización si el orden  $n$  de la secuencia es par o impar. Sin embargo, estas fluctuaciones desaparecen si





**Figura 5.5:** Razón inversa de participación obtenida para el estado fundamental de una secuencia de Fibonacci de pozos cuadrados, con  $V_A = -5$  y  $V_B = -4.5$ . Las secuencias pares están marcadas con cruces, y las impares con círculos. También se incluye un ajuste en ley de potencias (líneas rectas) para las secuencias pares e impares por separado.

consideramos únicamente secuencias pares o impares (obsérvese que los ajustes en ley de potencias de la figura 5.5 están realizados para secuencias pares e impares por separado). A partir de la calidad de los ajustes, podemos deducir que:

$$P_n^{-1} = K_{\text{par(impar)}} F_n^{-\gamma}. \quad (5.8)$$

La constante  $K$  es diferente para secuencias pares e impares, pero el exponente  $\gamma$  es el mismo para los dos casos (los dos ajustes de la figura son paralelos). Numéricamente obtenemos que  $\gamma = 0.90$ . La porción de la longitud total del sistema que es ocupada por el estado, que llamamos  $\Delta_n$ , puede obtenerse dividiendo su extensión  $D_n$  ( $D_n^{-1} = P_n^{-1}$ ) por la longitud total  $L_n$ . Así, tenemos que

$$\Delta_n = \frac{D_n}{L_n} = \frac{1}{P_n^{-1} L_n} = \frac{1}{2K F_n^{1-\gamma} - K F_n^{-\gamma}}. \quad (5.9)$$

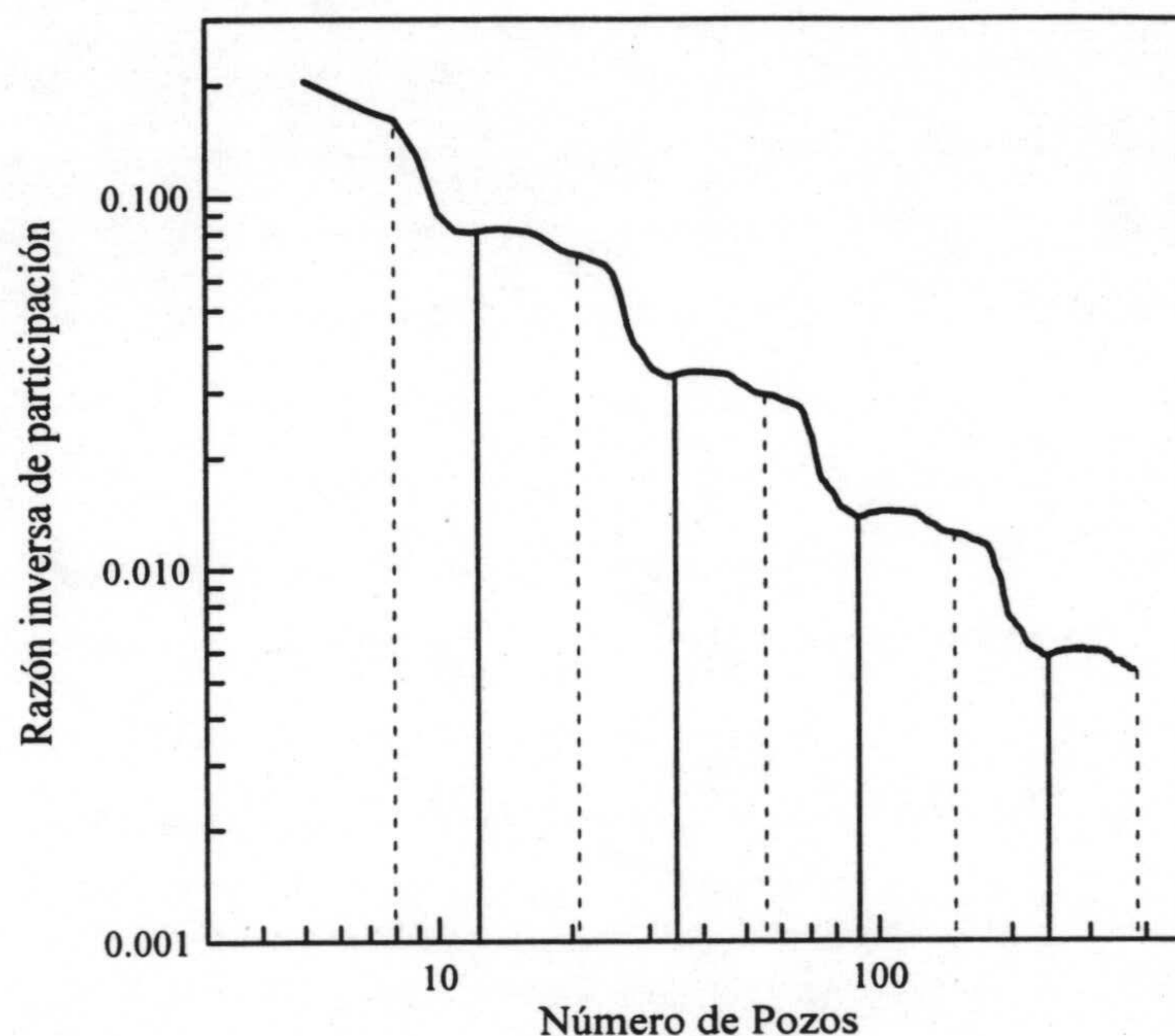
Como  $\gamma < 1$ , en el límite termodinámico  $L_n \rightarrow \infty$ , con  $n$  par o impar, tenemos de la ecuación anterior que  $\Delta_n \rightarrow 0$  y por consiguiente el estado está localizado (Carpena, 1997b).

Para un estado extendido, perteneciente a un sistema periódico, el exponente  $\gamma$  siempre tiene valor 1. Eso no significa que el diámetro medio del estado sea igual a la longitud total  $L_n$  del sistema, pero sí implica que es proporcional a ella,  $D_n \propto L_n$ , como puede deducirse de (5.8) para  $\gamma = 1$ . Eso quiere decir que, si el sistema aumenta de tamaño, también lo hace el estado en la misma proporción, que es la característica fundamental de un estado extendido. Por supuesto, en el límite termodinámico el diámetro del estado tiende a infinito, y la porción del sistema ocupada por el mismo no tiende a cero, sino a un valor constante dado por:

$$\Delta_{n \rightarrow \infty} = \frac{1}{2K}. \quad (5.10)$$

Otro aspecto relevante que hemos encontrado al estudiar la localización es que también posee una estructura fractal, de la misma forma que la presentan el espectro y las funciones de onda. Para apreciar este hecho, basta con considerar una determinada secuencia de Fibonacci suficientemente larga y, quitando uno a uno los pozos del sistema, medir para cada caso la localización, por ejemplo, del estado fundamental. El resultado se muestra en la figura 5.6, en la que representamos en una doble escala logarítmica  $P^{-1}$  calculado para el estado fundamental de secuencias de Fibonacci frente al número de pozos que la forman. Las secuencias 'puras' de Fibonacci, es decir, aquellas para las que el número de pozos es un número de Fibonacci se muestran con líneas verticales.

A partir de la figura 5.6, podemos concluir lo siguiente. Primero, que la localización se comporta como una magnitud autosimilar, como puede deducirse a partir de la 'periodicidad' de la figura, y teniendo en cuenta que la escala de la misma es logarítmica. Esto quiere decir que el perfil de la localización es invariante frente a cambios de escala (Carpena, 1997b), que es la característica fundamental de las magnitudes autosimilares. El factor de espaciado entre los sucesivos



**Figura 5.6:** Razón inversa de participación obtenida para el estado fundamental de una secuencia de pozos de Fibonacci, frente al número de pozos que forman la cadena. Con líneas verticales se muestran las secuencias 'puras' de orden par (líneas continuas) e impar (líneas discontinuas).

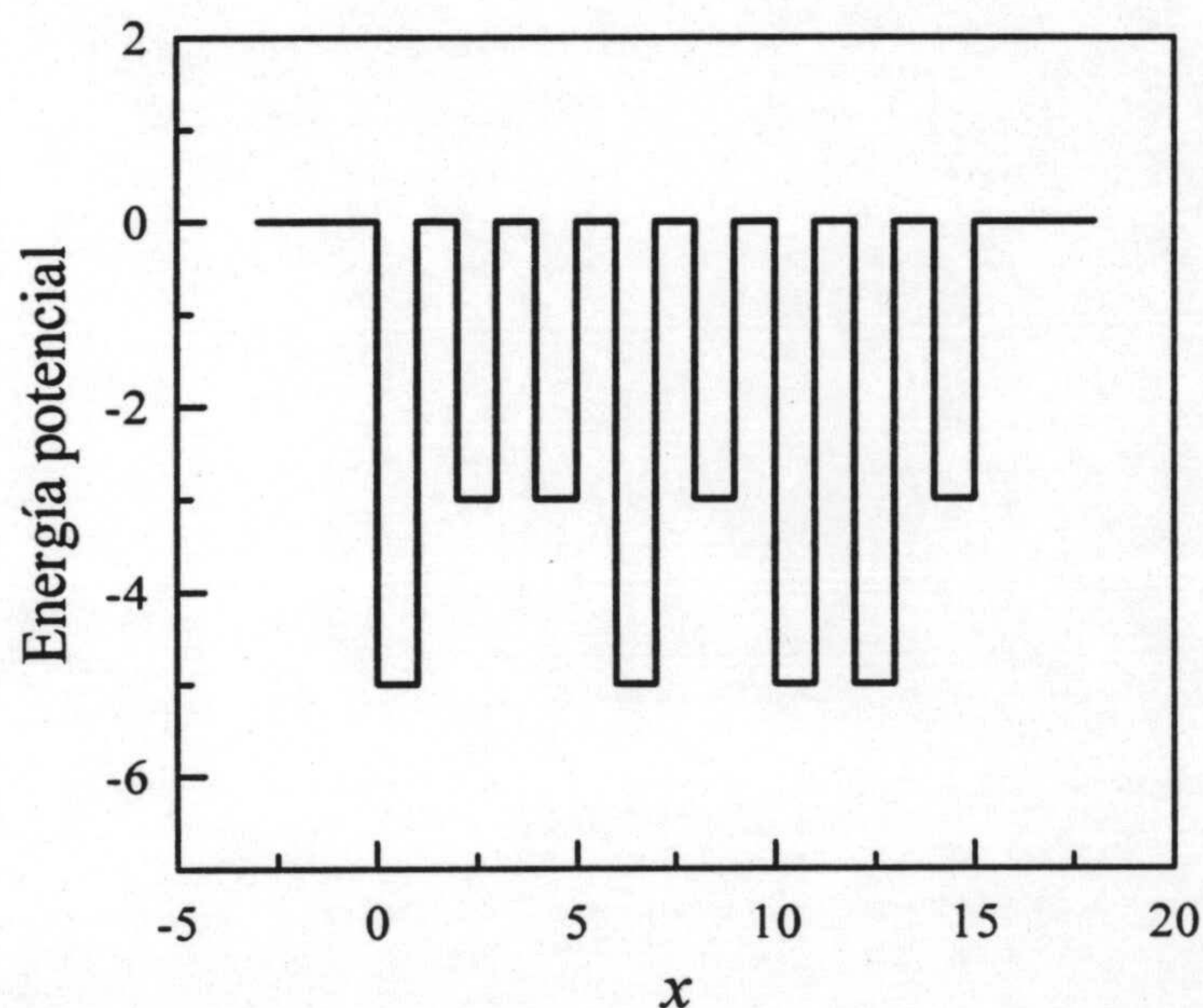
mínimos locales encontrados en  $P^{-1}$  mostrados en la figura 5.6 posee un valor de 2.35. Conviene recordar este valor pues nos será de utilidad para comprender la localización electrónica bajo los efectos de un campo eléctrico.

La segunda conclusión que podemos obtener es que las secuencias puras de Fibonacci son especiales desde el punto de vista de la localización. Como puede apreciarse en la figura 5.6, las secuencias puras de Fibonacci con  $n$  par (líneas continuas) son aquellas en las que se observan mínimos locales de  $P^{-1}$ . Esto quiere decir que, para estos casos, los estados están más extendidos y la porción total del sistema llenada por ellos es mayor que en cualquier otro caso. Este hecho es curioso, porque demuestra que de alguna manera el electrón 'sabe' si la secuencia es pura o no, es decir, reconoce cuando la secuencia está construida exactamente con la

estructura de Fibonacci. Esto se manifiesta en que, en el caso de secuencia pura con  $n$  par, la interferencia producida por las sucesivas reflexiones y transmisiones en las interfases de la estructura se minimiza y se hace más constructiva. Ello provoca que el electrón esté más extendido. Sin embargo, para las secuencias puras para las que  $n$  es impar (líneas discontinuas), lo que ocurre es que encontramos un punto de inflexión de la localización, en el que cambia la curvatura de  $P^{-1}$ .

### 5.3.2 Thue-Morse

Para estudiar la localización en las secuencias de Thue-Morse, hemos realizado un análisis similar al que hemos visto anteriormente para el caso de Fibonacci. En este caso, hemos usado también un sistema multicapa de pozos cuadrados, tal y como el que se muestra en la figura 5.7 para el caso de ocho pozos.



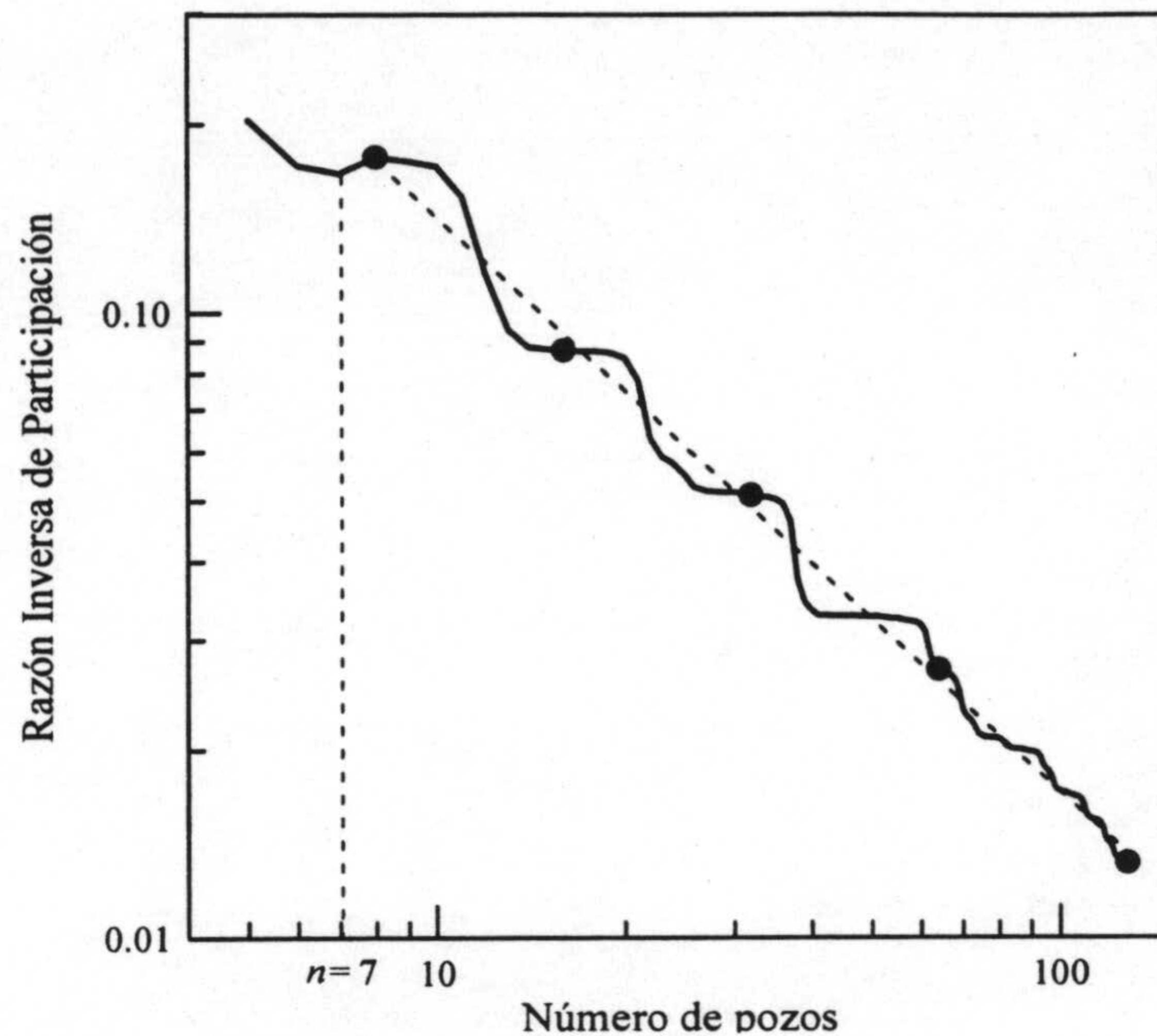
**Figura 5.7:** Esquema de una secuencia de Thue-Morse con 8 pozos de potencial. Las profundidades son  $V_A = 5$  y  $V_B = 3$ . La anchura de pozos y barreras es la unidad y los dos medios laterales son semiinfinitos.

Los resultados obtenidos son, al menos cualitativamente, similares al caso de Fibonacci. El estudio de la localización del estado fundamental a través de  $P^{-1}$ , tal y como se hizo anteriormente, puede verse en la figura 5.8. En ella mostramos, en una doble escala logarítmica,  $P^{-1}$  frente al número de pozos que forman la secuencia. Si bien obtenemos algo parecido al caso de Fibonacci, pueden establecerse dos claras diferencias. En primer lugar, el perfil de la curva es mucho más irregular, con oscilaciones que carecen de la 'periodicidad' que podía observarse en el caso de Fibonacci, y que nos hizo hablar de un comportamiento fractal de la localización. En segundo lugar, y a pesar de las oscilaciones anteriormente citadas, obtenemos un comportamiento de  $P^{-1}$  estrictamente decreciente salvo en un punto, cuando la secuencia está formada por 7 pozos. Esto indica que, a pesar de las fluctuaciones, la localización del estado no posee ningún mínimo local excepto el ya comentado.

De manera similar a como hicimos en el caso de Fibonacci, en la figura 5.8 también se muestran con círculos las secuencias 'puras' de Thue-Morse, y un ajuste en ley de potencias de las mismas. En este caso, casi podemos decir que no existen fluctuaciones apreciables entre secuencias de orden par e impar, y además, las secuencias puras no tienen propiedades especiales como ocurría en el caso de Fibonacci. Sin embargo, un hecho notable es que la pendiente del ajuste tiene un valor del orden de 0.92, algo mayor que en el caso de Fibonacci, para el que obteníamos 0.90 (en ambos casos, con un coeficiente de correlación de 0.999). Este hecho indica que las funciones de onda de las secuencias de Thue-Morse, a pesar de estar localizadas por ser la pendiente menor que la unidad, están más extendidas que las de Fibonacci, y resultan, por tanto, más similares a las correspondientes a sistemas periódicos.

## 5.4 Efectos del campo eléctrico en la localización

Como ya comentamos detalladamente en el capítulo 1, la aplicación de un campo eléctrico en un sólido periódico conduce a la localización de las funciones de onda,



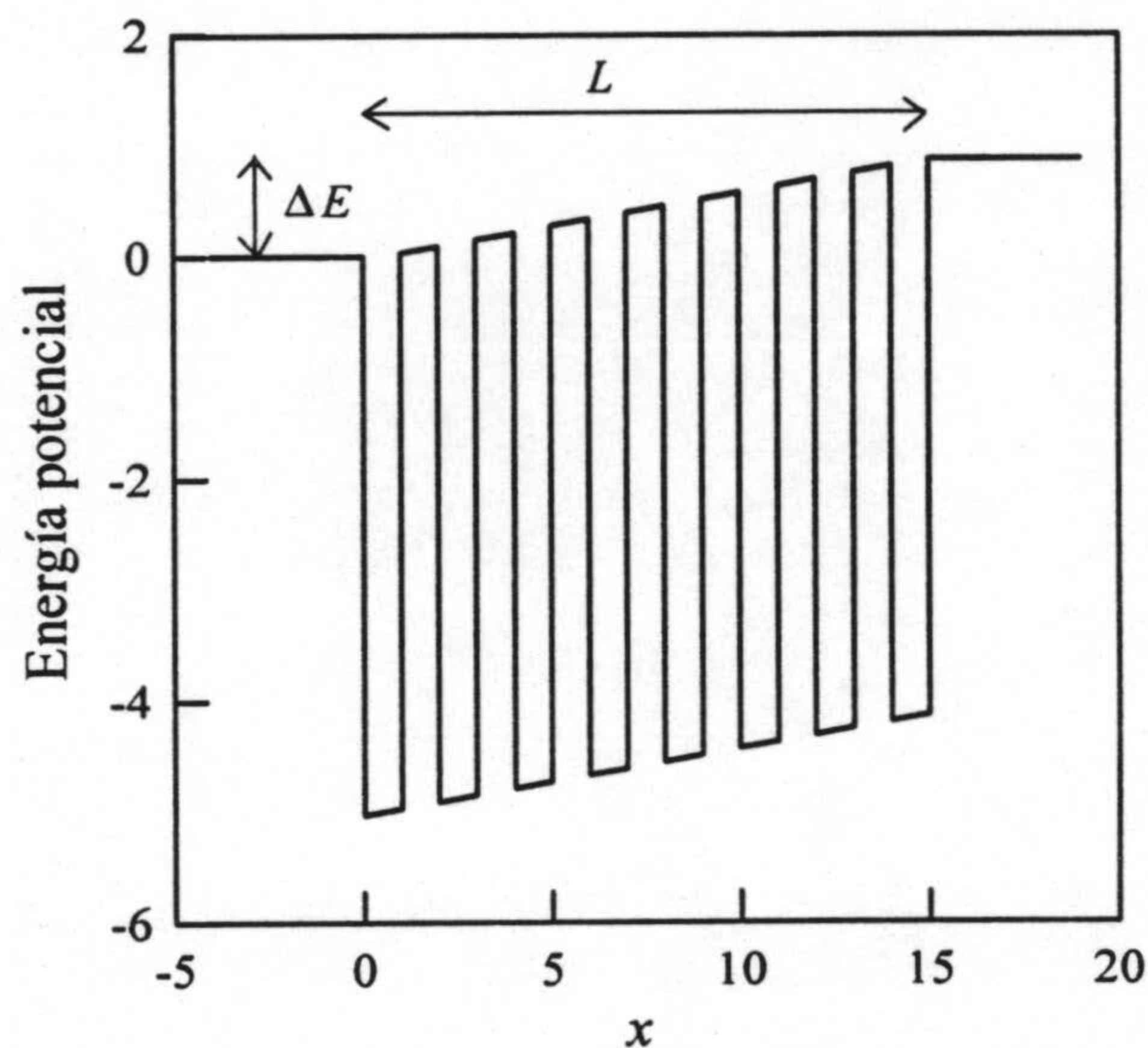
**Figura 5.8:** Dependencia de la razón inversa de participación con el número de pozos que forman la cadena para el estado fundamental de sistemas Thue-Morse. El único extremo local tiene lugar para  $n = 7$ , y se indica con una línea vertical. Las secuencias puras de Thue-Morse se muestran con círculos, y también se incluye un ajuste en ley de potencias (línea discreta) para estas secuencias puras.

fenómeno que es conocido como localización de Stark. En esta sección, vamos a estudiar la localización de Stark en secuencias cuasiperiódicas, para ver las diferencias que estas presentan con respecto a sistemas periódicos. Además, los resultados que hemos obtenido previamente al estudiar la localización en ausencia de campo eléctrico, nos servirán para explicar lo que ocurre al aplicar el campo. Este hecho nos permitirá entender mejor el mecanismo de la localización de Stark.

Vamos a comenzar mostrando los resultados de la localización de una cadena periódica con campo eléctrico aplicado, lo que nos permitirá posteriormente poder comparar con los resultados para sistemas de tipo Fibonacci y Thue-Morse.

### 5.4.1 Localización en sistemas periódicos

En este epígrafe, vamos a considerar únicamente secuencias periódicas constituidas por un sólo tipo de pozos, porque las características de la localización no depende de este hecho, y además se gana en simplicidad. Los sistemas de pozos rectangulares que estamos estudiando, utilizando la aproximación de escalera, descrita en el capítulo 4, presentan un esquema de energía potencial como el que se muestra en la figura 5.9. El campo eléctrico aplicado en cada caso puede obtenerse simplemente a través de  $F = \Delta E/L$ .

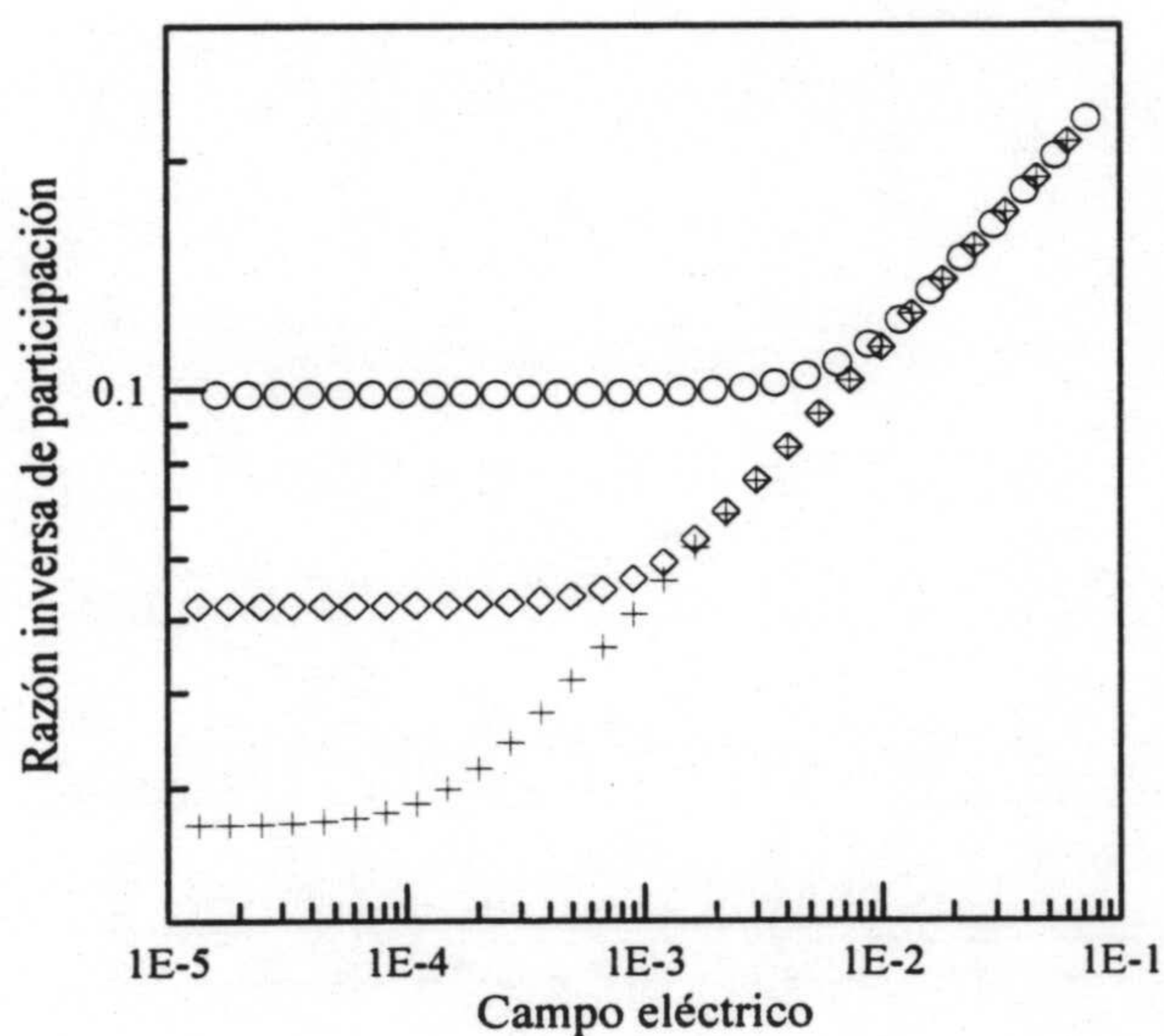


**Figura 5.9:** Perfil de energía potencial de una secuencia periódica de 8 pozos cuadrados con campo eléctrico aplicado.

Hemos considerado secuencias periódicas de pozos idénticos de diferentes longitudes (número de pozos) y hemos utilizado el procedimiento de cálculo detallado en la sección anterior. El comportamiento de  $P^{-1}$  frente a la longitud del sistema nos da idea de la magnitud de la localización. Los resultados obtenidos para tres secuencias periódicas de longitud diferente pueden verse en la figura 5.10. En ella

se representa en una doble escala logarítmica la razón inversa de participación,  $P^{-1}$ , obtenida para el estado fundamental de la secuencia correspondiente frente al campo eléctrico aplicado. Las diferentes longitudes son  $L = 16$  (círculos), 32 (rombos) y 64 (cruces). Los resultados obtenidos presentan las características que cabía esperar para una secuencia periódica.

El primer hecho remarcable es que en el límite  $F \rightarrow 0$ , el valor de  $P^{-1}$  es inversamente proporcional a la longitud del sistema. Esta característica es propia de los estados extendidos, e indica que al aumentar el tamaño del sistema el diámetro medio que ocupa el estado aumenta en la misma proporción. Desde el punto de vista de  $P^{-1}$ , si el sistema duplica su tamaño,  $P^{-1}$  se reduce a la mitad.



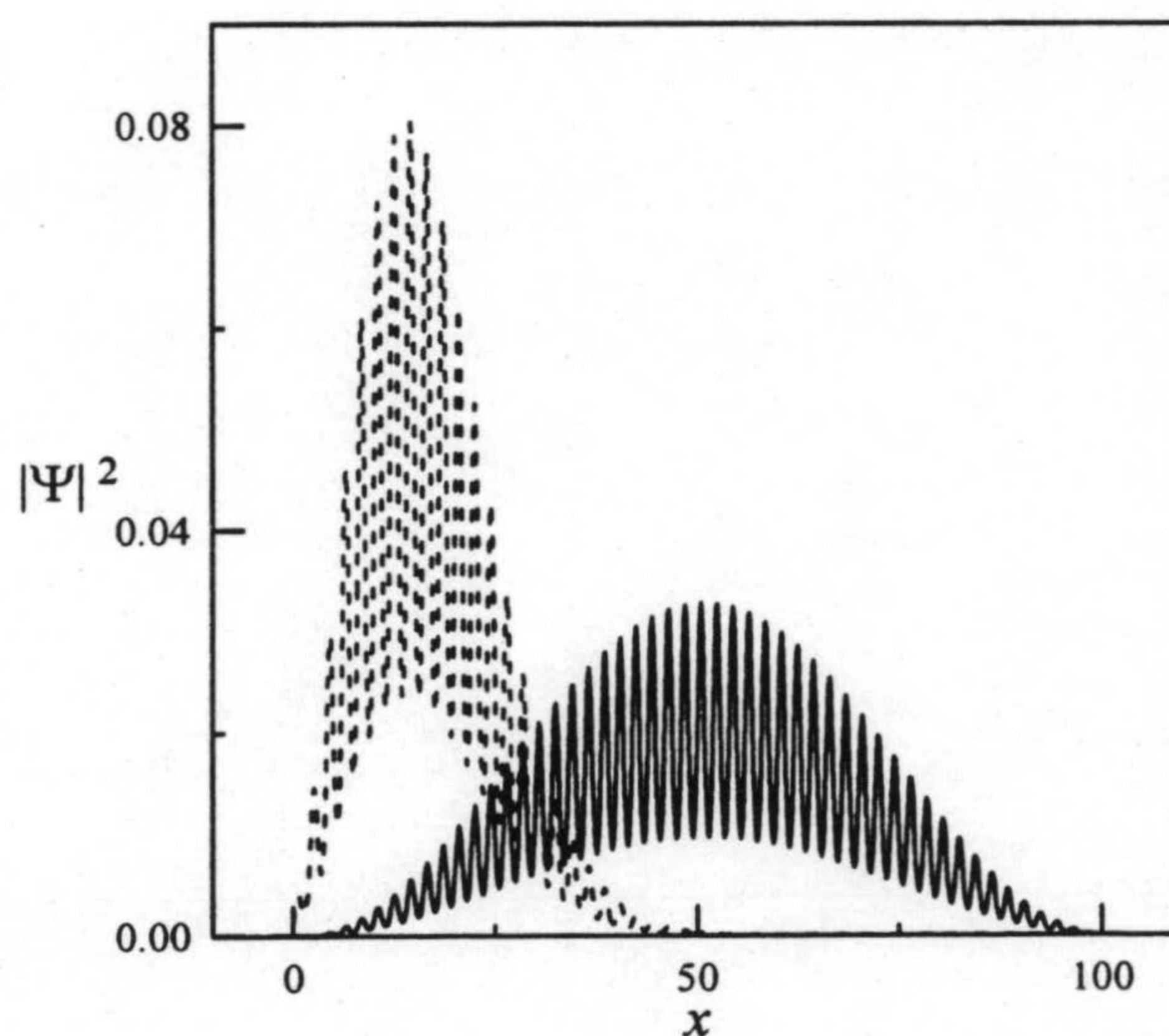
**Figura 5.10:** Representación de  $P^{-1}$  para el estado fundamental de tres secuencias periódicas en función del campo eléctrico aplicado. Se utiliza una doble escala logarítmica. Las longitudes son 16 (círculos), 32 (rombos) y 64 (cruces).

La segunda característica destacable es que, para cada longitud considerada, cuando el campo eléctrico es muy pequeño,  $P^{-1}$  depende de la longitud del sis-



tema. En esta región apenas se produce localización, como puede deducirse de las zonas planas al principio de las tres curvas mostradas en 5.10, para las que  $P^{-1}$  permanece casi constante. Sin embargo, para un cierto valor crítico del campo eléctrico aplicado, que resulta ser inversamente proporcional a la longitud del sistema, la localización empieza a aumentar de manera considerable.

Una vez que la localización empieza a ser notable, hay que destacar también que las tres curvas solapan perfectamente y dan lugar a un incremento totalmente uniforme de la localización. Aunque en la región de  $F$  pequeño  $P^{-1}$  depende de  $L$ , el solapamiento indica que, para valores suficientemente grandes de  $F$ ,  $P^{-1}$  no depende de la longitud. En este régimen la localización de un estado es una propiedad universal, que no depende del tamaño del sistema.



**Figura 5.11:** Representación del módulo al cuadrado de la función de onda del estado fundamental de una secuencia periódica con 50 pozos. La curva continua corresponde a  $F = 0$ , mientras que la punteada corresponde a  $F = 0.005$ .

El último hecho que conviene resaltar es la subida perfectamente uniforme de  $F$  con el campo eléctrico aplicado. Para entender este comportamiento, conviene comentar algo acerca del mecanismo que conduce a la localización de Stark. Cuando

en un sistema como el que estamos considerando se aplica un campo eléctrico, el perfil de energía es como el de la figura 5.9. Puesto que estamos considerando el estado fundamental del sistema, éste habrá de localizarse en la región de menor energía potencial ( a la izquierda de la figura anterior). La localización se produce porque el campo eléctrico va haciendo inaccesibles para el electrón los pozos de la derecha. Los pozos del extremo derecho del sistema incrementan mucho su energía, lo que conduce a que finalmente no puedan contener a un estado con energía muy baja, el estado fundamental. Estos pozos lejanos son los que primero quedan desacoplados del estado fundamental, pero conforme aumentamos el valor de  $F$ , va ocurriendo el mismo fenómeno para pozos cada vez más cercanos a la izquierda del sistema. Si el campo eléctrico es lo suficientemente grande, todos los pozos del sistema, salvo el primero, serán inaccesibles para el estado fundamental, que se encontrará totalmente localizado en él.

Un ejemplo gráfico de la localización se muestra en la figura 5.11 en la que se muestra la densidad de probabilidad del estado fundamental de una secuencia periódica formada por 50 pozos para  $F = 0$  (línea continua) y  $F = 0.005$  (línea punteada). Dado que existe un campo eléctrico aplicado, podemos ver como  $|\Psi|^2$  está desplazada hacia la izquierda, siendo prácticamente nula en la parte derecha del sistema. Para valores todavía mayores del campo eléctrico, la densidad de probabilidad únicamente sería diferente de cero para el primer pozo del sistema. En ese momento, la localización sería completa. Puesto que estamos en un sistema periódico, para el que todos los pozos son idénticos, éstos se van desacoplando de manera uniforme de la región accesible por el estado fundamental. Dicha uniformidad es la que aparece reflejada en el comportamiento de  $P^{-1}$  para campos suficientemente altos que se muestra en la figura 5.10.

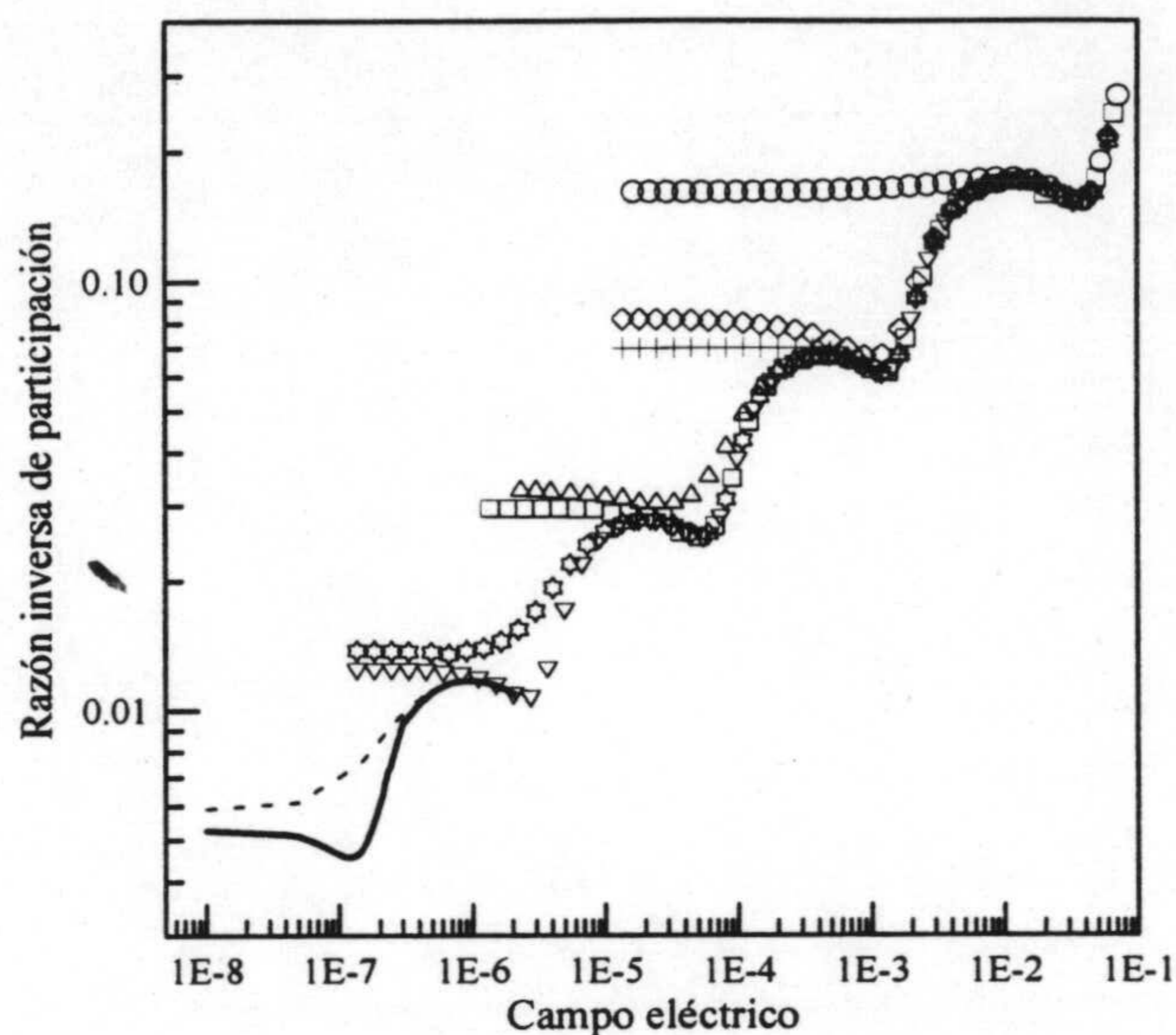
### 5.4.2 Localización en sistemas cuasiperiódicos

#### Secuencias de Fibonacci.

Vamos a realizar un estudio análogo al presentado en la sección anterior para sistemas periódicos. Para ello, hemos calculado la razón inversa de participación para el estado fundamental de secuencias de Fibonacci de varias longitudes. Los resultados se muestran en la figura 5.12, en la que representamos  $P^{-1}$  frente al campo eléctrico aplicado para secuencias de varias longitudes en una doble escala logarítmica. Los parámetros numéricos usados para construir las secuencias son  $V_A = 5$  y  $V_B = 4.5$ . Las longitudes de todos los pozos y barreras del sistema se fijan igual a la unidad, excepto los dos medios laterales, que se consideran semiinfinitos. El número de pozos de cada secuencia es 8 (círculos), 13 (rombos), 21 (cruces), 34 (cuadrados), 55 (estrellas), 89 (triángulos invertidos), 144 (línea discontinua) y 233 (línea continua). La longitud de cada secuencia, como ya comentamos anteriormente, puede obtenerse como  $L = 2F_n - 1$ , donde el número de Fibonacci  $F_n$  corresponde al número de pozos.

A partir de los resultados representados en la figura 5.12, es posible extraer información muy valiosa. En primer lugar, la región de pequeño campo eléctrico resulta depender de la longitud del sistema, como ya ocurría en el caso periódico. Pero una vez que el campo eléctrico aplicado es suficiente para que la localización empiece a aumentar, se obtienen características muy curiosas.

La propiedad más notable encontrada en  $P^{-1}$  es la aparición de mínimos locales en  $P^{-1}$ , de los que en la figura 5.12 pueden verse nítidamente cinco de ellos. El significado de estos mínimos de  $P^{-1}$  es claro pero sorprendente. Existen ciertos valores críticos del campo eléctrico, aquellos para los que  $P^{-1}$  es mínimo, para los que la localización electrónica disminuye. Conviene recordar que  $P$  nos da una idea del tamaño medio  $D$  ocupado por el estado. Un mínimo local en  $P^{-1}$  implica un máximo local de ese tamaño medio. Aunque es posible comprobar que el campo eléctrico aumenta la localización en promedio (la tendencia general de



**Figura 5.12:** Comportamiento de la razón inversa de participación ( $P^{-1}$ ) en función del campo eléctrico aplicado para el estado fundamental de secuencias de Fibonacci de diferentes longitudes. Las profundidades de los dos tipos de pozos son  $V_A = 5$  y  $V_B = 4.5$ . El número de pozos de cada secuencia es 8 (círculos), 13 (rombos), 21 (cruces), 34 (cuadrados), 55 (estrellas), 89 (triángulos invertidos), 144 (línea discontinua) y 233 (línea continua).

$P^{-1}$  es ascendente), existen regiones en las que el electrón se deslocaliza y aumenta el tamaño de su función de onda. Esta localización anómala es una característica totalmente nueva y que no aparece en los sólidos periódicos (Carpena, 1997b).

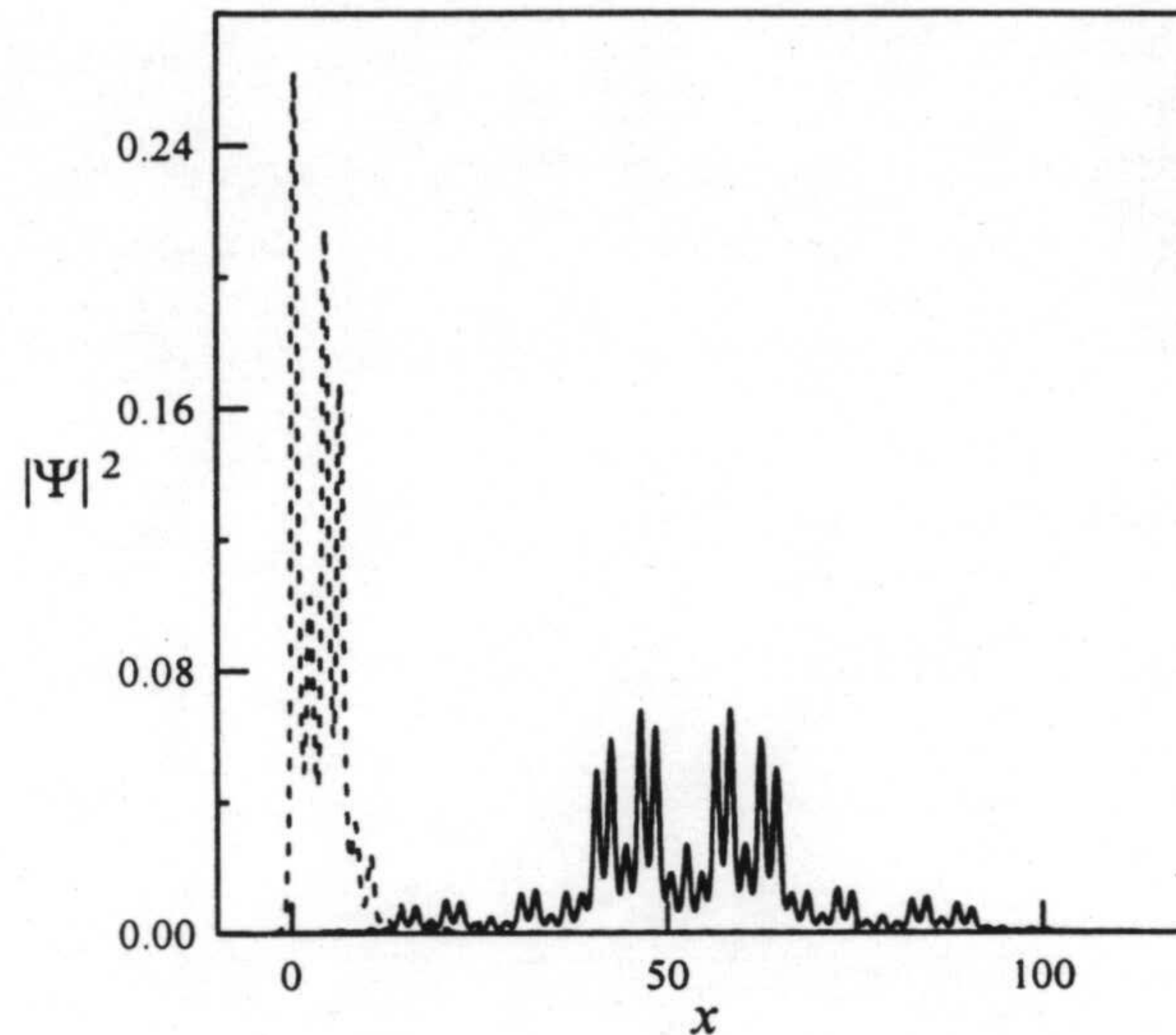
Por otra parte, la aparición de esos mínimos locales en  $P^{-1}$  se repite de manera periódica en escala logarítmica, lo que significa que  $P^{-1}$  es una magnitud autosimilar, que permanecerá invariante frente a cambios de escala, y por lo tanto puede ser considerada como un fractal. Esta magnitud pasa a engrosar el rico conjunto de propiedades fractales asociadas a las secuencias de Fibonacci, como las funciones de onda y el espectro electrónico. La localización también resulta ser un parámetro universal, independiente de la longitud de la secuencia como pone de

manifiesto el solapamiento de los resultados obtenidos para todas las longitudes.

El número de mínimos de  $P^{-1}$  aumenta al incrementar la longitud del sistema. Es fácil deducir que en el límite termodinámico  $L \rightarrow \infty$ , el perfil de  $P^{-1}$  presentaría un conjunto infinito de mínimos locales para los que el electrón está más extendido, y todos ellos equiespaciados en escala logarítmica. El factor de espaciamiento inter-mínimos que se obtiene de los datos de la figura 5.12 resulta ser 2.35. Este factor de espaciamiento es el mismo que el encontrado en la dependencia de  $P^{-1}$  con el número de pozos del sistema cuando no existía campo eléctrico aplicado. Esta coincidencia en el factor de espaciamiento no es una casualidad, y puede explicarse fácilmente con el concepto de localización de Stark, y teniendo en cuenta los resultados para  $F = 0$ .

Como hemos comentado anteriormente, cuando aplicamos un campo eléctrico, el estado fundamental se localiza en la parte izquierda del sistema. El efecto que produce la localización de Stark es limitar la porción del sistema accesible al electrón. Habrá un desacoplo gradual que comenzará por los pozos más lejanos y se aproximará progresivamente a los más cercanos. Pero este efecto del campo eléctrico es prácticamente igual que si en el sistema, con  $F = 0$ , estudiamos la localización conforme disminuimos el número de pozos del sistema, tal y como puede verse en la figura 5.6, si miramos la figura de derecha a izquierda según el eje horizontal. Cuando el campo eléctrico haga accesible al electrón  $F_n$  ( $n$  impar) pozos, encontraremos un mínimo en  $P^{-1}$ , tal y como ocurría para  $F = 0$ . Debido a esta similitud, el factor de espaciamiento entre mínimos consecutivos, 2.35, es el mismo. El siguiente mínimo aparecerá cuando el campo eléctrico permita al electrón acceder a  $F_{n-2}$  pozos.

El valor numérico del factor de espaciamiento entre sucesivos valores mínimos de  $P^{-1}$ , 2.35, se puede explicar como sigue: como los mínimos sólo aparecen para  $n$  impar, el cociente entre las longitudes de los sistemas que producen dos mínimos consecutivos es de  $F_n/F_{n-2} = 1 + F_{n-1}/F_{n-2}$ . En el límite  $n \rightarrow \infty$ , este cociente resulta ser  $1 + \tau = (3 + \sqrt{5})/2 \approx 2.618$ . Si el estado estuviera extendido, tendríamos



**Figura 5.13:** Representación del módulo al cuadrado de la función de onda del estado fundamental de una secuencia de Fibonacci con 55 pozos. La curva continua corresponde a  $F = 0$ , y la punteada a  $F = 0.005$ .

que  $P^{-1} \propto L^{-1}$  como ocurre en sistemas periódicos, para los que trivialmente se puede obtener que el exponente  $\gamma$  definido en (5.8) es  $\gamma = 1$ . En este caso, el factor de espaciado sería 2.618. Pero para el caso de Fibonacci, obtuvimos que el estado estaba localizado, con un valor de  $\gamma$  dado por  $\gamma = 0.9$ . Por consiguiente el factor de espaciado (*f.e.*) debe obtenerse como

$$\frac{f.e.}{2.618} = 0.9. \quad (5.11)$$

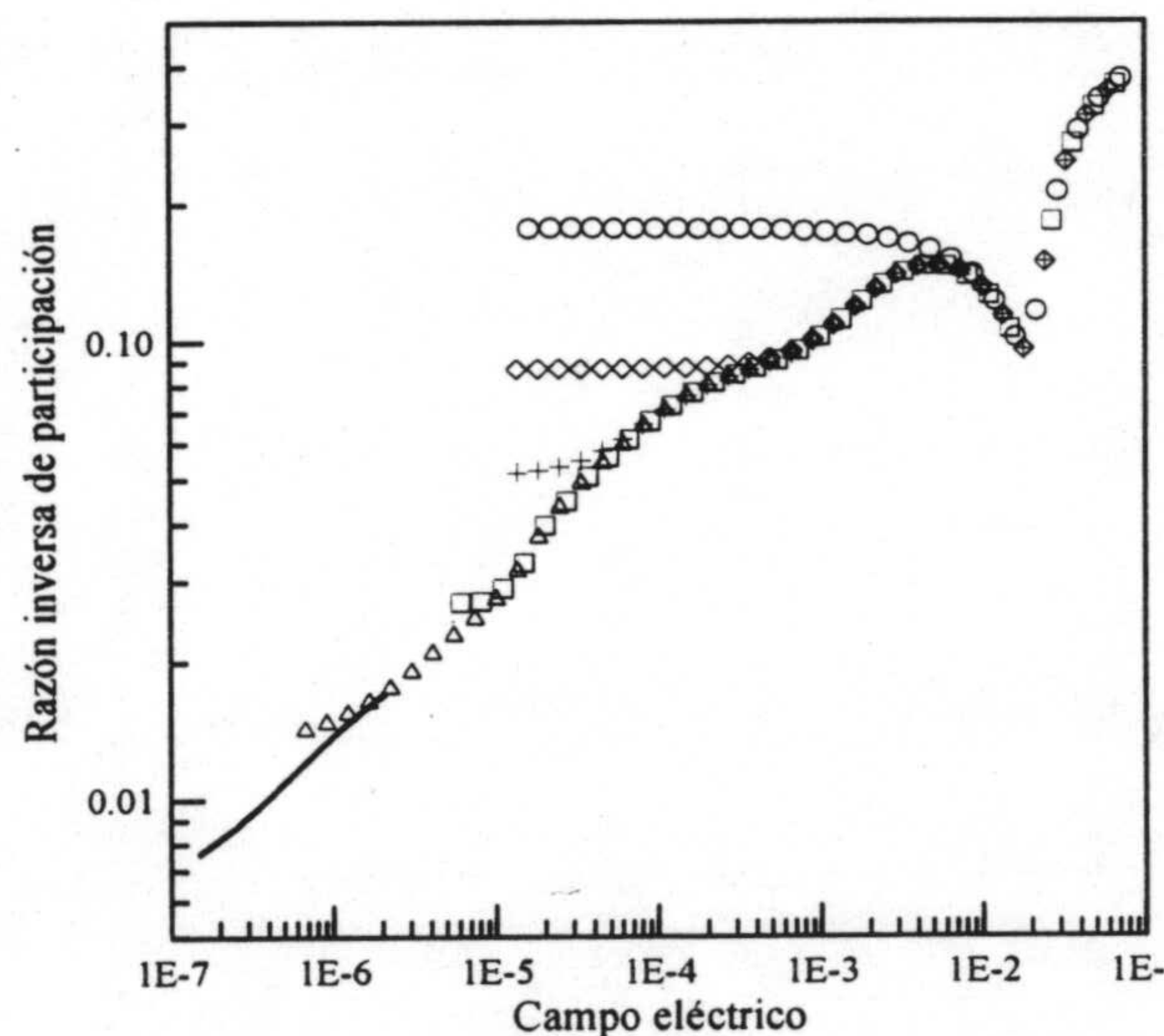
La solución de esta ecuación es  $f.e. = 2.356$ , que coincide perfectamente con el encontrado experimentalmente.

Un ejemplo gráfico de la localización de la función de onda para el caso de Fibonacci se muestra en la figura 5.13. El sistema posee 55 pozos, y los parámetros son  $V_A = 5$  y  $V_B = 4.5$ , mientras que las longitudes de los pozos y las barreras son la unidad. Con línea continua se muestra el caso  $F = 0$ , y con línea discontinua,  $F = 0.005$ . Para valores mayores de  $F$ , la función de onda todavía aparecería

localizada más a la izquierda del sistema.

### Secuencias de Thue-Morse

Análogamente al estudio realizado en el epígrafe anterior para el caso de Fibonacci, en la figura 5.14 representamos en una doble escala logarítmica  $P^{-1}$  obtenido a partir del estado fundamental para secuencias de Thue-Morse de diferentes longitudes, frente al campo eléctrico aplicado. Los parámetros numéricos son  $V_A = 5$  y  $V_B = 4.5$ , mientras que las anchuras de los pozos y las barreras se fija a la unidad. El número de pozos de cada secuencia es 8 (círculos), 16 (rombos), 32 (cruces), 64 (cuadrados), 128 (triángulos) y 256 (línea continua).



**Figura 5.14:** Resultados de  $P^{-1}$  en función del campo eléctrico para el estado fundamental de secuencias de Thue-Morse de varias longitudes. Los parámetros son  $V_A = 5$  y  $V_B = 4.5$ . El número de pozos de cada secuencia es 8 (círculos), 16 (rombos), 32 (cruces), 64 (cuadrados), 128 (triángulos) y 256 (línea continua).

Las conclusiones que se pueden extraer a partir de los resultados de la figura

5.14 son similares a las del caso anterior, si bien con alguna diferencia significativa. En primer lugar, y como ocurre en todos los casos, la región de campo eléctrico pequeño resulta depender de la longitud del sistema, y la localización no se manifiesta hasta que el campo eléctrico alcanza un determinado valor. Dicho valor escala con la longitud del sistema.

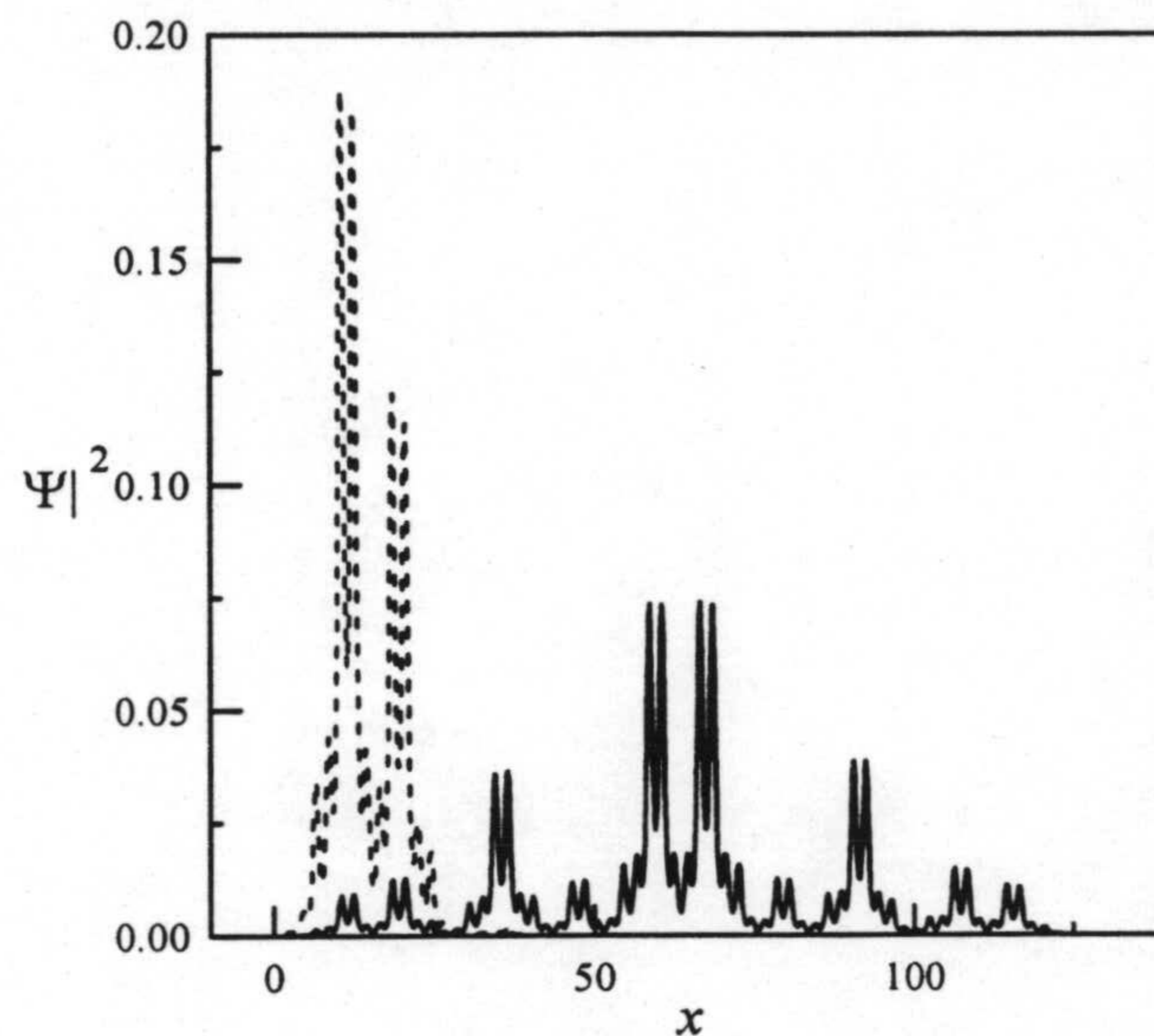
Por otra parte, aquí también podemos apreciar la universalidad de la localización, que queda de manifiesto en el solapamiento de  $P^{-1}$  para todas las longitudes consideradas.

A pesar de que la localización para los sistemas de Thue-Morse no es tan uniforme como en el caso periódico,  $P^{-1}$  es una magnitud monótonamente creciente, excepto en una única excepción. Este carácter monótono implica que, salvo fluctuaciones pequeñas, el campo eléctrico localiza progresivamente al electrón, y no aparece la estructura repetitiva de mínimos locales que encontramos en el caso de Fibonacci. La única excepción aparece para valores del campo eléctrico muy grande, donde es posible encontrar un mínimo muy pronunciado en  $P^{-1}$ . Sin embargo, esto no resulta sorprendente. Como ya explicamos para el caso de Fibonacci, el efecto del campo eléctrico puede simularse si, para  $F = 0$ , vamos suprimiendo uno a uno los pozos que forman el sistema. Este estudio ya se realizó, y los resultados se mostraron en la figura 5.8, en la cual sólo aparecía un mínimo local de  $P^{-1}$  cuando el número de pozos presentes era  $n = 7$ . Esto nos permite concluir que el único mínimo de  $P^{-1}$  cuando se considera un campo eléctrico aplicado, aparece cuando éste hace accesible al electrón exactamente 7 pozos. Además, dado que el comportamiento de  $P^{-1}$  en función del número de pozos era prácticamente monótono salvo la excepción ya comentada, aunque con carácter oscilante, también lo será cuando existe un campo, pero así mismo tendrá carácter oscilante. Precisamente estos resultados, deducidos a partir del caso  $F = 0$ , coinciden exactamente con los que aparecen en la figura 5.14.

Un ejemplo gráfico de la localización de la función de onda para el caso de Thue-Morse se muestra en la figura 5.15. El sistema posee 64 pozos, y los parámetros



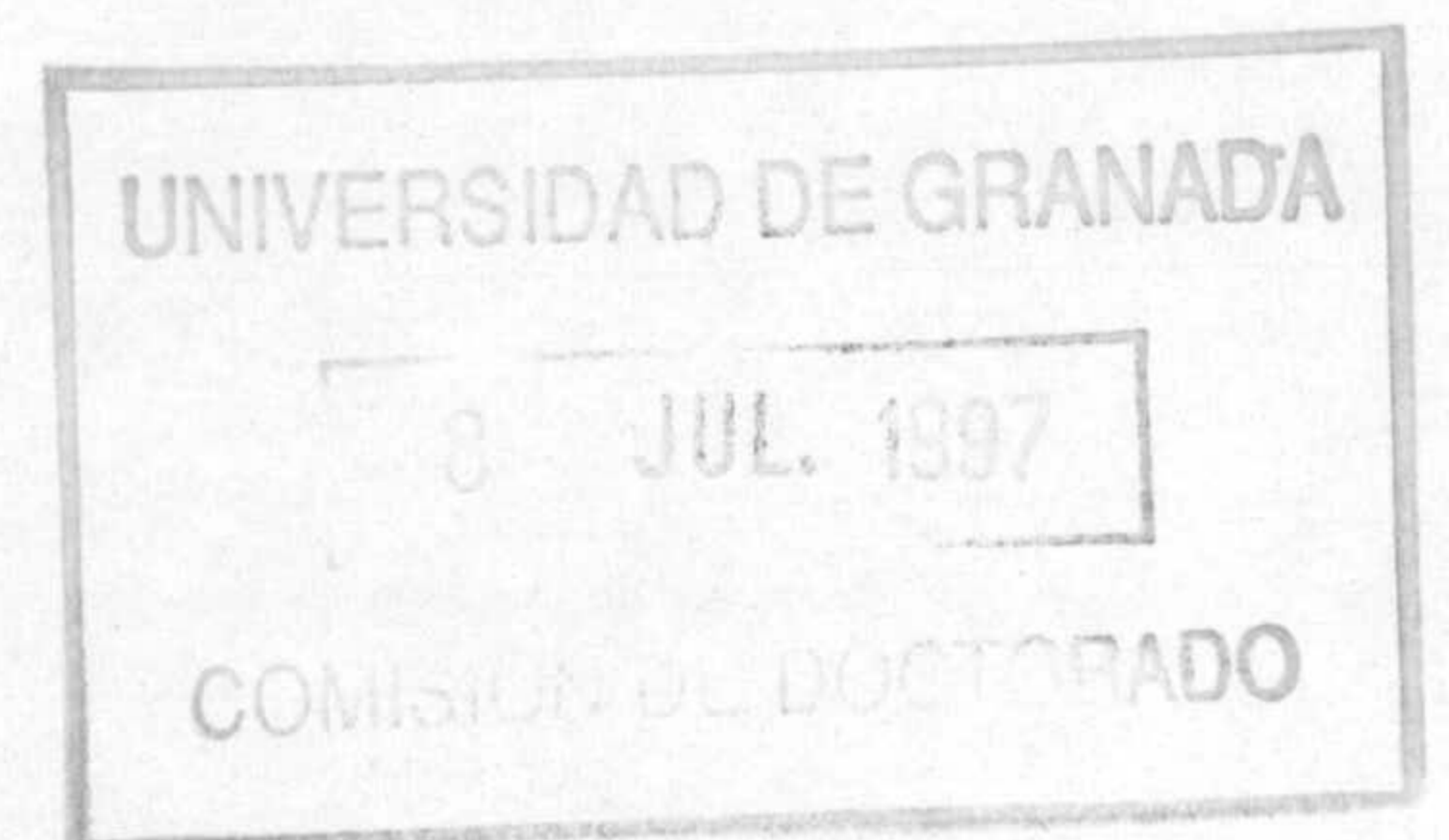
son  $V_A = 5$  y  $V_B = 4.5$ , mientras que la longitud de todos los pozos y barreras es la unidad. Con línea continua se muestra el caso  $F = 0$ , y con línea discontinua,  $F = 0.005$ .



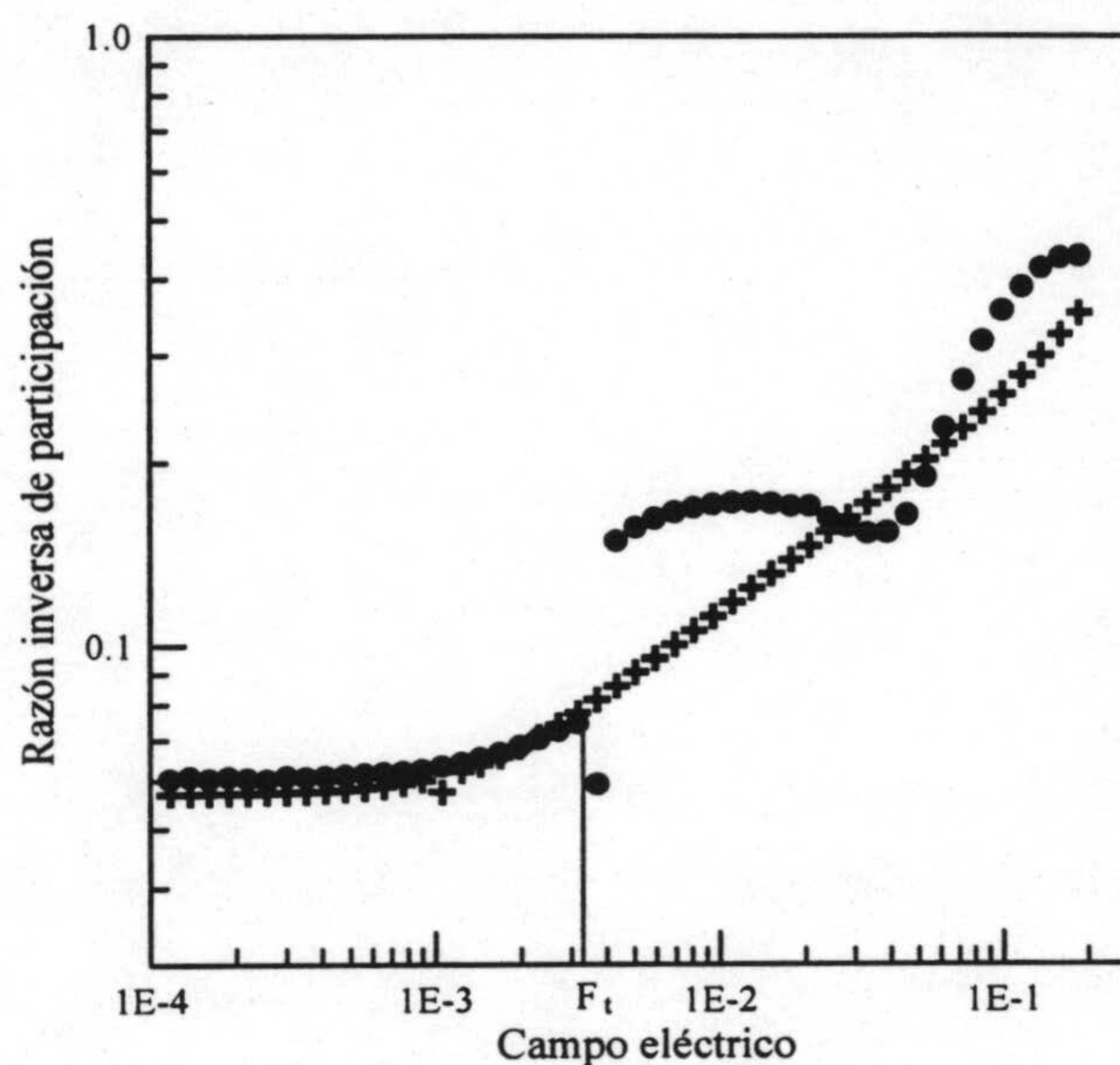
**Figura 5.15:** Localización de la función de onda del estado fundamental de una secuencia de Thue-Morse con 64 pozos. Los parámetros son  $V_A = 5$  y  $V_B = 4.5$ . Con línea continua se muestra el caso  $F = 0$  y con línea discontinua, el correspondiente a  $F = 0.005$ .

### Sistemas mixtos

Para completar nuestro estudio de la localización, vamos a considerar el caso en que el sistema objeto de estudio está formado a su vez por un subsistema periódico y otro cuasiperiódico. Para ello, hemos considerado un sistema formado por 26 pozos cuadrados. Los 13 primeros, son idénticos con una profundidad  $V = 5$ , y forman el subsistema periódico. Los pozos siguientes están dispuestos en una secuencia de Fibonacci, utilizando  $V_A = 5$  y  $V_B = 4.5$  como profundidades de los pozos.



Los resultados para  $P^{-1}$  del estado fundamental se muestran en la figura 5.16 en la que se representan dos casos diferentes. El primer caso (cruces), corresponde



**Figura 5.16:** Razón inversa de participación correspondiente a un sistema mixto con 26 pozos, formado por una mitad periódica y otra de Fibonacci. La parte periódica consta de 13 pozos con  $V = 5$ . En la de Fibonacci, usamos  $V_A = 5$  y  $V_B = 4.5$ . Con cruces, representamos el caso periódico-cuasiperiódico, y con círculos, el cuasiperiódico-periódico.

a tomar la ordenación periódico-cuasiperiódico (p-c), mientras que el segundo (círculos) corresponde a la ordenación inversa, cuasiperiódico-periódico (c-p). Los resultados confirman el análisis que hemos realizado anteriormente. En el caso (p-c), el campo eléctrico hace que el electrón se vaya localizando en la parte periódica de la red, y por lo tanto la localización se realiza de manera uniforme. Sin embargo, en el caso (c-p), puede observarse una ruptura brusca en la tendencia a la localización para un cierto valor del campo eléctrico, llamado  $F_t$  en la figura 5.16. Ello se debe a que, justamente para ese valor del campo eléctrico, el electrón comienza a localizarse únicamente en la región cuasiperiódica del sistema, que constituye la

mitad del mismo. Este hecho es demostrado por el comportamiento oscilatorio que aparece en  $P^{-1}$  una vez superado  $F_t$ . Este comportamiento es análogo al encontrado en las secuencias 'puras' estudiadas anteriormente. Así, podemos concluir que el campo  $F_t$  marca el límite de fuerte localización, que podría definirse como el momento en el que el electrón sólo puede acceder a la mitad del sistema.

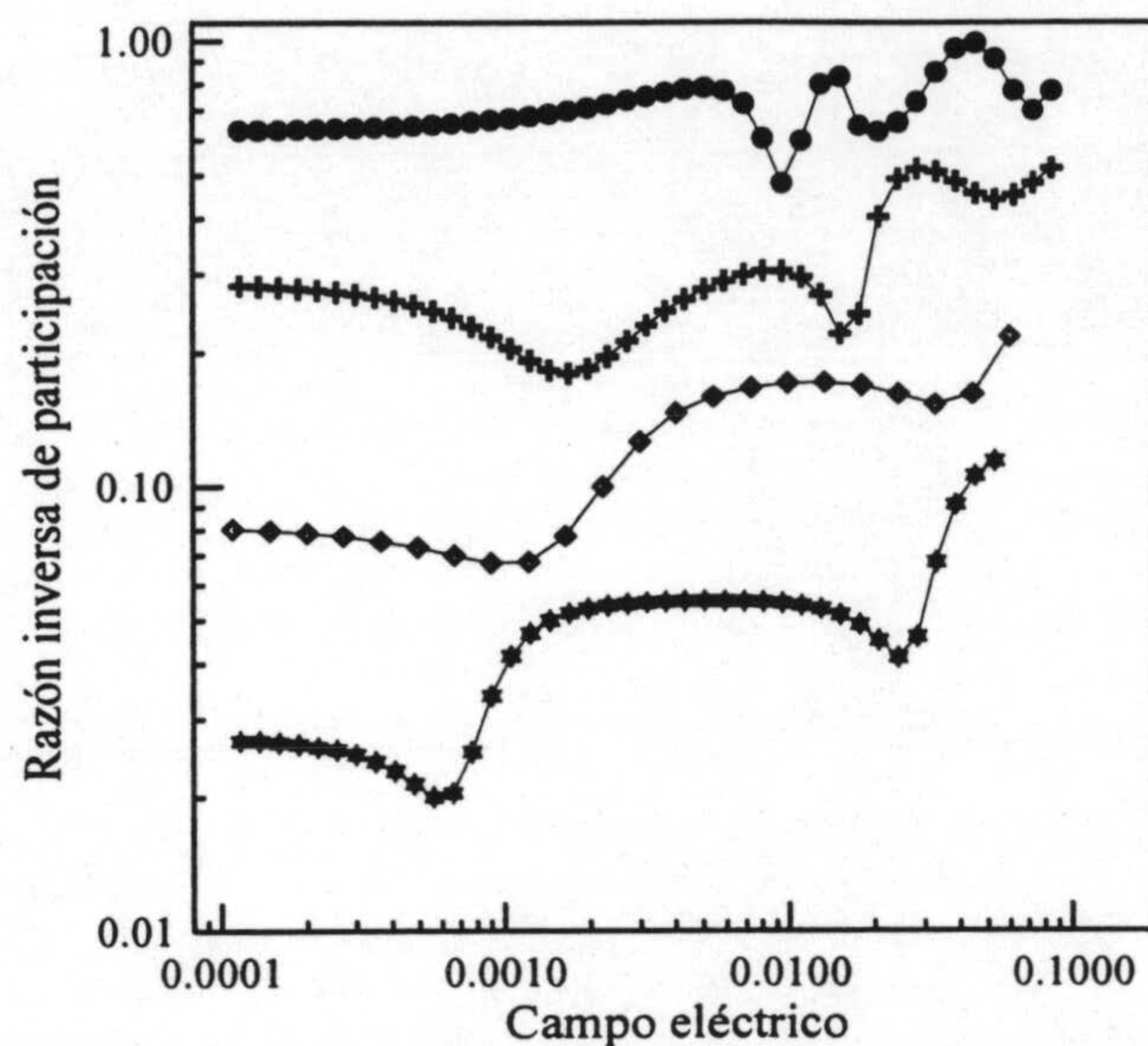
Aunque no presentamos resultados correspondientes a sistemas mixtos periódico-Thue-Morse para evitar redundancia, los resultados son idénticos al caso mixto estudiado aquí.

### 5.4.3 Generalización

Al análisis que hemos realizado de la localización es podría achacársele que carece de generalidad por dos motivos: el primero, porque hemos limitado nuestro estudio al estado fundamental de todos los sistemas, y parece que en principio nada garantiza que la localización anómala encontrada en las secuencias cuasiperiódicas constituya una propiedad general; el segundo, que puede ocurrir que los resultados dependan del modelo. En nuestro caso, la ordenación cuasiperiódica se ha construido utilizando como bloques básicos las dos profundidades diferentes de los pozos. Cabría preguntarse si el mismo fenómeno aparece cuando se consideran como bloques básicos la anchura de los pozos, o de las barreras entre pozos, definidos como sistemas tipo 2 en el capítulo 4.

En la figura 5.17 se representan los resultados de  $P^{-1}$  frente al campo eléctrico aplicado para el estado fundamental (diamantes), primer estado excitado (cruces), y segundo estado excitado (círculos) de un sistema tipo 1, y también los resultados para el estado fundamental de un sistema tipo 2 (estrellas) de una secuencia de Fibonacci constituida por 13 pozos. En el sistema tipo 1, las dos profundidades usadas son  $V_A = 5$  y  $V_B = 4.5$ , mientras que en el caso tipo 2, las dos longitudes de pozo son  $l_A = 1.5$  y  $l_B = 1$ . Para facilitar la observación de los resultados, éstos se han desplazado verticalmente para evitar que solapen.

La conclusión fundamental que podemos extraer en vista de estos resultados



**Figura 5.17:** Representación de  $P^{-1}$  para diversos estados como función del campo eléctrico aplicado. En todos los casos, se utiliza una secuencia de Fibonacci de 13 pozos, y los símbolos corresponden al estado fundamental (diamantes), primer estado excitado (cruces) y segundo estado excitado (círculos) de un sistema tipo 1 con  $V_A = 5$  y  $V_B = 4.5$ . Las estrellas corresponden al estado fundamental de un sistema tipo 2, con  $l_A = 1$  y  $l_B = 1.5$ . Los resultados para estados diferentes han sido desplazados verticalmente para evitar solapamiento.

es que el fenómeno de la localización anómala, con mínimos locales de  $P^{-1}$ , es una propiedad general de las secuencias cuasiperiódicas (Carpena, 1997b). Para una determinación completa del comportamiento de la localización, factor de espaciado, etc, de cada estado representado tendríamos que hacer un análisis exhaustivo equivalente para  $F = 0$ .

## 5.5 Comparación de las secuencias de Fibonacci y Thue-Morse

En el presente capítulo y en los dos anteriores hemos estudiado una serie de magnitudes físicas en las secuencias cuasiperiódicas de Fibonacci y de Thue-Morse.

Debido a que la filosofía del próximo capítulo es ligeramente diferente a los anteriores, queremos aprovechar esta sección para resumir de forma comparativa los resultados obtenidos para los dos tipos de secuencias. Para ello, iremos comentando el comportamiento de ambas con respecto a todas las magnitudes estudiadas:

- Con respecto al coeficiente de transmisión, en ambas secuencias se ha observado que el aumento de su tamaño produce la aparición de una estructura de gaps muy irregular. Sin embargo, cuando se estudia el promedio del coeficiente de transmisión en función de la longitud de la secuencia  $L$ , se observan diferencias. Si bien en ambos casos aparece un decrecimiento de  $\langle T \rangle$  con respecto a  $L$  en forma de ley de potencias, dicho decrecimiento resulta ser más rápido para el caso de Thue-Morse, lo que indica que la estructura de gaps es más irregular en este caso que en el de Fibonacci.
- Con respecto a las características que presenta el espectro discreto de ambos sistemas, parece obtenerse una conclusión parecida a la del punto anterior, porque sistemáticamente se obtiene una dimensión fractal del espectro menor en el caso de Thue-Morse que en el de Fibonacci. Sin embargo, en ambos sistemas se observa que la diferencia energética entre los dos bloques básicos constituyentes actúa como un parámetro de desorden. Así, es posible observar como la estadística de niveles de ambos cambia desde una distribución tipo Wigner (desorden débil) a una de tipo Poisson (desorden fuerte) cuando se incrementa dicha diferencia energética.
- Con respecto a los efectos del campo eléctrico, en ambos sistemas se observa la aparición de la escalera de Wannier-Stark. Además, el campo eléctrico actúa como una magnitud que introduce orden en el sistema, porque hace que la distribución de niveles tienda a una de tipo Wigner, y porque hace que aumente la dimensión fractal de los espectros. Sin embargo, incluso con campo eléctrico aplicado, obtenemos dimensiones fractales menores para el caso de Thue-Morse que para el de Fibonacci. Todo lo expuesto hasta

ahora parece avalar la mayor regularidad de las secuencias de Fibonacci. No obstante, existe una discrepancia que ponemos de manifiesto en el punto siguiente.

- Con respecto a la localización electrónica, hemos visto que las funciones de onda de ambas secuencias están localizadas para los modelos estudiados. Sin embargo, la localización resulta ser menor en las secuencias de Thue-Morse, como revelan los exponentes obtenidos por ajuste en ley de potencias de la razón inversa de participación con respecto a la longitud. Además, cuando se tiene un campo eléctrico aplicado, el comportamiento de los sistemas de Thue-Morse es también más parecido al de los sistemas periódicos. La razón inversa de participación en función del campo es mucho más uniforme en el caso de Thue-Morse que en el de Fibonacci, ya que este último presenta un patrón de mínimos locales. Esto hace pensar que en el caso de Fibonacci tenemos una localización en función del campo de tipo autosimilar de la que carece la secuencia de Thue-Morse.

En vista de los puntos anteriores, no parece posible concluir de manera rigurosa cuál de los dos sistemas es más regular. Dicho análisis sólo puede hacerse con respecto a propiedades individuales.

## Capítulo 6

# La masa efectiva en la función envolvente.

### 6.1 Introducción

En años recientes, los avances en el crecimiento de cristales han hecho posible la construcción de microestructuras de semiconductores de tamaño tan pequeño que sus propiedades electrónicas se desvían sustancialmente de aquellas correspondientes a cristales de tamaño macroscópico. En estas microestructuras, los electrones y huecos están confinados en una o más direcciones en una región de longitud  $L_c$ . Esta longitud, que por supuesto es mayor que la constante de red cristalina, es sin embargo lo suficientemente pequeña para que la función electrónica envolvente (ver sección siguiente) esté cuantizada. Estructuras de este tamaño reciben el nombre de mesoscópicas, porque la longitud de confinamiento, que puede tomarse como la dimensión característica de la estructura, es intermedia entre la constante de red (microscópica) y la extensión macroscópica de un material cristalino, como ya comentamos en el capítulo 1.

Los ejemplos más conocidos de tales estructuras mesoscópicas son los pozos cuánticos, donde los electrones están confinados en una dimensión espacial. El movimiento traslacional en el plano perpendicular a la dirección de confinamiento es libre. Este hecho hace que la dimensión interesante en el problema sea precisa-

mente la de confinamiento, por lo que podremos estudiar estos sistemas a través del determinante característico, apropiado para sistemas unidimensionales. Un pozo cuántico de este tipo puede construirse mediante crecimiento epitaxial, depositando capas de GaAs entre capas de un material con un gap mayor, como por ejemplo  $\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ , con  $0 < x < 0.4$ .

Si el confinamiento electrónico ocurre en dos dimensiones, se habla de un hilo cuántico (quantum wire en inglés), mientras que si el confinamiento es tridimensional, hablamos de un punto cuántico (quantum dot en inglés). En este trabajo, y por las limitaciones unidimensionales del determinante característico, nos restringiremos al método de la función envolvente en el caso de confinamiento unidimensional. Tal confinamiento, cuyo caso más simple lo constituye el pozo cuántico, también se manifiesta cuando se acoplan varios pozos cuánticos y dan lugar a una superred.

## 6.2 El método de la función envolvente

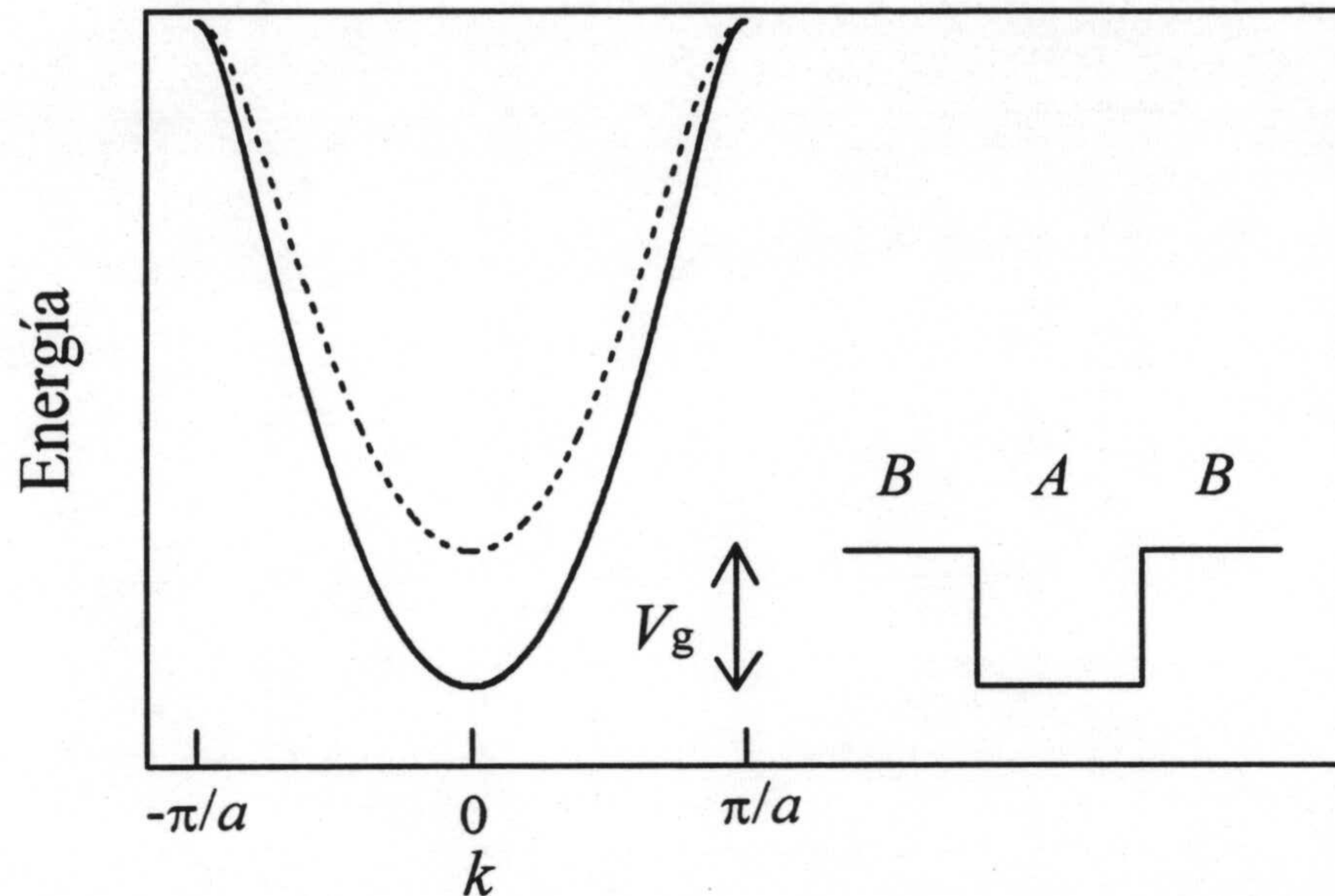
En un sólido cristalino infinito, o, equivalentemente, con dimensiones macroscópicas, las funciones de onda electrónicas son funciones de Bloch:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{L^{3/2}} u(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (6.1)$$

ecuación en la que  $u(\mathbf{r})$  es una función periódica en el espacio real con periodicidad igual a la de la red. Sin embargo, la función de onda anterior deja de ser válida cuando hablamos de estructuras mesoscópicas, en las que la periodicidad es de muy corto alcance, si es que existe.

Imaginemos que en la dirección del eje  $z$ , tenemos un diagrama de bandas como el de la figura 6.1, que podría corresponder, como comentamos antes, al confinamiento unidimensional que tiene lugar cuando encerramos una capa de GaAs (material  $A$ ) con dos capas laterales mucho más grandes de  $\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$  (material  $B$ ).





**Figura 6.1:** Relación de dispersión  $E(k)$  para dos materiales diferentes  $A$  y  $B$ . Entre el fondo de la banda de ambos existe una diferencia energética  $V_g$ , de manera que si se dispone la secuencia  $BAB$ , aparece un pozo cuántico en la dirección de crecimiento de la secuencia. Dicho pozo se esquematiza en la parte derecha de la figura.

El método de la función envolvente, en su versión más simple (Haug & Koch, 1994), asume que el perfil de la energía potencial en la dirección  $z$  es como el que se muestra en la parte derecha de la figura anterior. En este caso, habrá evidentemente una cuantización energética en el eje  $z$  porque tendremos estados en el espectro discreto, y la función de onda será de la forma:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \zeta_n(z) \frac{e^{i(k_x x + k_y y)}}{L} u(\mathbf{k} \simeq \mathbf{0}, \mathbf{r}) \quad (6.2)$$

donde suponemos que  $\mathbf{k} \simeq \mathbf{0}$  porque, al igual que en el esquema de la figura 6.1, consideramos que estamos muy cerca del fondo de ambas bandas de conducción, y que éste se halla en el centro de la primera zona de Brillouin. La función envolvente y lentamente variable  $\zeta_n(z)$  representa a una función de onda correspondiente al  $n$ -ésimo estado cuantizado del interior del pozo, y sustituye a la correspondiente

onda plana en la dirección del eje  $z$  que está implícitamente escrita en la función de Bloch (6.1).

Como puede verse en el esquema de la figura 6.1, la diferencia de anchura de los gaps de ambos materiales creará un pozo cuántico para los electrones de la banda de conducción cuando construyamos una secuencia del tipo  $BAB$ . Para un pozo creado con GaAs-GaAlAs, la profundidad energética del pozo es del orden de  $2/3$  de la diferencia de anchura de los gaps para los electrones de la banda de conducción. El método de la función envolvente asume habitualmente las tres siguientes aproximaciones:

- Aunque el material que forma el pozo tiene normalmente una longitud de únicamente unos cuantos periodos, se considera que la estructura de bandas de este material corresponde a la que tendría si fuese infinito (macroscópico). Por eso, el fondo del pozo está energéticamente situado en el comienzo de la banda de conducción del material  $A$  en el caso en el que este es infinito.
- Se asume habitualmente que el salto de potencial en la dirección  $z$  ocurre de manera muy rápida espacialmente hablando, lo que hace que normalmente se modelen estos pozos para calcular los estados discretos como simples pozos rectangulares unidimensionales.
- Al modelar el pozo cuántico de la manera citada en el punto anterior, las correspondientes funciones envolventes  $\zeta_n(z)$  asociadas a los estados discretos contenidos en el pozo pierden la estructura de la red cristalina subyacente, transformándose en este caso en funciones envolventes suaves (de ahí el nombre del método) que estarían modulando las funciones de onda reales, las cuales oscilarían mucho más rápidamente.

Para modelar el pozo cuántico como un pozo rectangular unidimensional, se

asume un potencial de confinamiento en el eje  $z$  dado por:

$$V_{\text{con}} = \begin{cases} 0 & \text{si } -L_c/2 < z < L_c/2 \\ V_g & \text{si } |z| > L_c/2 \end{cases} \quad (6.3)$$

donde  $V_g$  es la diferencia entre los fondos de la banda de conducción de ambos materiales. El cálculo habitual de los estados ligados pasa por la solución de la ecuación de Schrödinger. Como en el plano  $x - y$  el electrón es libre, podemos separar las variables y considerar únicamente el problema unidimensional en la dirección  $z$ . Para encontrar los estados cuantizados, se resuelve el problema como un ejemplo típico de potencial simétrico. Habrá estados pares e impares, que serán básicamente funciones de onda exponenciales decrecientes en las dos regiones exteriores del pozo, y funciones oscilantes (de tipo coseno para estados pares y de tipo seno para los impares) en la región interior del pozo, debido a que las funciones de onda han de poder normalizarse por tratarse de estados discretos.

La imposición de la continuidad de la función envolvente  $\zeta_n(z)$  y su derivada en las intercaras  $z = \pm L_c/2$  conduce a la siguiente condición para las autoenergías pares:

$$\sqrt{E_z} \tan \left( \sqrt{m_0 \frac{E_z}{2\hbar^2}} L_c \right) = \sqrt{V_g - E_z}. \quad (6.4)$$

Aplicando el mismo procedimiento, la condición que determina las autoenergías impares resulta ser:

$$-\sqrt{E_z} \cot \left( \sqrt{m_0 \frac{E_z}{2\hbar^2}} L_c \right) = \sqrt{V_g - E_z}. \quad (6.5)$$

Las ecuaciones (6.4) y (6.5) son trascendentes, y por lo tanto han de resolverse numéricamente. El número de estados ligados del pozo depende de su profundidad,  $V_c$ . Dado que  $V_g$  es positivo, hay siempre al menos un estado ligado de simetría par, el estado fundamental. Si existen más estados confinados, la simetría se va alternando consecutivamente hasta alcanzar el estado energético más alto.

### 6.2.1 La aproximación de masa efectiva

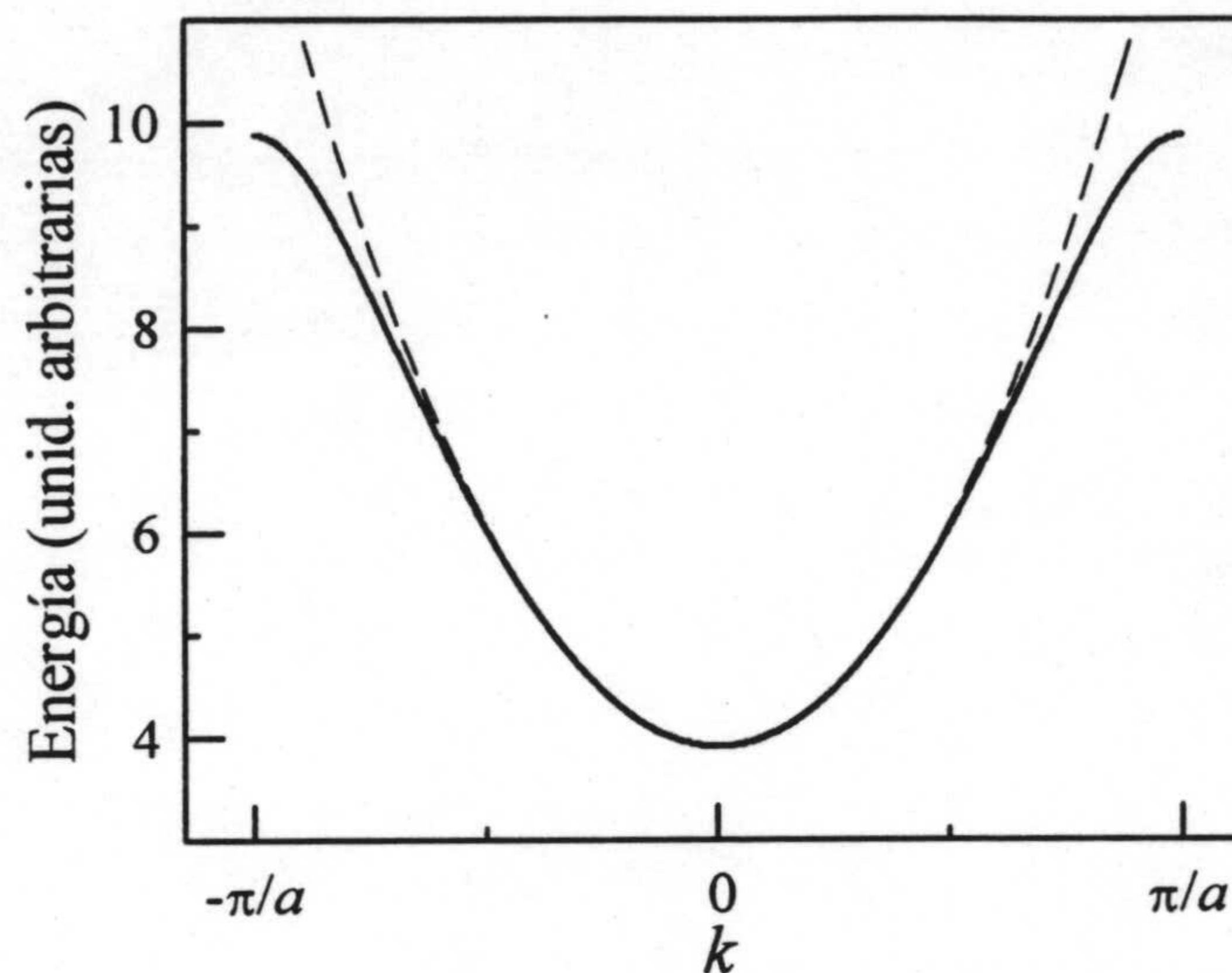
El pozo cuántico descrito en la sección anterior se forma habitualmente en las estructuras reales por la diferencia energética entre el fondo de la banda de conducción de los dos materiales  $A$  y  $B$  usados para construirlo. Normalmente, las estructuras se construyen de manera que, primero, el pozo no sea demasiado profundo, y segundo, esté situado en el centro de la primera zona de Brillouin. Puesto que el pozo es poco profundo y está centrado en torno a  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ , es muy frecuente el uso de la conocida aproximación de masa efectiva dentro del método de la función envolvente. En lugar de utilizar la relación de dispersión que liga la energía con el momento  $E(\mathbf{k})$  que proporciona la estructura real de bandas del material, pero que puede ser bastante complicada o no ser conocida de manera exacta, se utiliza la aproximación de masa efectiva. Según ésta, la relación de dispersión puede aproximarse cerca del fondo de la banda de conducción de manera parabólica según la ecuación:

$$E(\mathbf{k}) \simeq E_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\text{ef}}} \quad (6.6)$$

donde  $E_0 = E(\mathbf{k} = 0)$  representa la energía del fondo de la banda de conducción. En el régimen en que una relación de dispersión como la anterior es válida, podemos considerar al electrón como si fuera libre, pero con una masa dada por  $m_{\text{ef}}$  (la masa efectiva), en lugar de la masa  $m_0$ , que es la masa del electrón libre. Para la obtención de esta masa efectiva, se utilizan básicamente dos procedimientos: el primero, poco habitual y que puede ser complicado, parte de que se conoce la relación de dispersión exacta  $E(\mathbf{k})$ . En este caso, la masa efectiva puede obtenerse a través de:

$$m_{\text{ef}} = \frac{\hbar^2}{\left| \frac{\partial^2 E(\mathbf{k})}{\partial k^2} \right|_{k=0}}. \quad (6.7)$$

Este método parte de que se conoce la relación de dispersión exactamente, cosa que no ocurre casi nunca. Además, y aunque se conociera, en los casos en que esto ocurre las relaciones de dispersión ligan a la energía y el momento de forma implícita, con lo que resulta muy complicado derivar analíticamente.



**Figura 6.2:** Para la obtención de la masa efectiva en el fondo de la banda, es usual ajustar la relación de dispersión  $E(k)$  (línea continua) a una parábola (línea discontinua). El coeficiente de  $k^2$  es inversamente proporcional a la masa efectiva en la región de ajuste.

El segundo procedimiento, más habitual, y que será el que seguiremos aquí, se basa en la obtención numérica de la relación de dispersión  $E(k)$ . Una vez hecho esto, y mediante un método de ajuste por mínimos cuadrados o alguno similar, se aproxima la región del fondo de la banda de acuerdo a una curva parabólica en  $k$ , tal y como se muestra en la figura 6.2. De acuerdo con la ecuación (6.6), el coeficiente que acompañe a  $k^2$  será, salvo constantes, el inverso de la masa efectiva. En algunos casos en los que se estudian energías no demasiado próximas al fondo de la banda es necesario considerar efectos de no parabolicidad (Lopez-Villanueva *et al.*, 1993).

### 6.3 Superredes y la función envolvente

Hasta ahora, hemos hablado de la microestructura más básica, el pozo cuántico. La generalización directa de una estructura tan simple como la ya citada es obvia.

Si en lugar de crear por crecimiento la secuencia de materiales  $BAB$ , que daba lugar al pozo cuántico, introducimos un mayor número de capas, por ejemplo dispuestas de manera alternativa,  $ABABABAB\dots$ , creamos lo que se conoce como superred, y que ya describimos brevemente en el capítulo 1. La estructura recibe este nombre porque, de manera artificial, se pueden crear estructuras periódicas unidimensionales cuyo periodo puede ser incluso ordenes de magnitud mayor (en este caso el periodo de la red sería la suma de los espesores del material  $A$  y del material  $B$ ) que el de un sólido cristalino normal, en el que la constante de red es muy pequeña, y está dada por la distancia interatómica en el cristal. Si la secuencia  $BAB$  producía un único pozo cuántico en la dirección  $z$ , dejando libres las otras dos direcciones espaciales, en el caso de una superred, podemos construir a voluntad una secuencia de pozos y barreras cuánticos en el eje  $z$  pero con el período que queramos.

Al crear una superred periódica, conseguimos, en lugar de estados cuantizados como ocurría para un solo pozo cuántico, una estructura de bandas casi controlable a voluntad. La diferencia con respecto a un sólido cristalino normal es que, al ser la constante de red mucho mayor en la superred, las bandas de transmisión son mucho más estrechas (en realidad, se conocen como minibandas). Esto hace que en las superredes, como ya hemos visto en capítulos anteriores, se observen fenómenos asociados a la aplicación de campos eléctricos (escalera de Wannier-Stark, localización de Stark, oscilaciones de Bloch, etc) que son prácticamente imposibles de observar en cristales normales, debido a que se necesitarían campos eléctricos mucho más grandes.

La estructura real de la energía potencial en una superred puede ser enormemente compleja, debido a las perturbaciones atómicas locales dentro del material  $A$  y dentro del material  $B$ , y a la finitud de los mismos, lo que ocasiona efectos de borde en las intercaras. La forma habitual de modelar las superredes, de la misma forma que se hizo con un único pozo cuántico, es a través de una serie de pozos y barreras rectangulares dispuestos consecutivamente, cuya altura vendrá dada por

la diferencia energética entre los fondos de la banda de conducción del material  $A$  (material de pozo) y del material  $B$  (material de barrera). La anchura de los pozos vendrá dada por el número de periodos del material  $A$ , y la anchura de las barreras, por el número de periodos del material  $B$ . Así, normalmente se analizan las superredes con el método de la función envolvente según este modelo de Kronig-Penney finito, con las mismas tres aproximaciones que ya se describieron al hablar de los pozos cuánticos.

### 6.3.1 El problema de la transmisión. La doble barrera

Una de las cuestiones más frecuentemente estudiadas en las superredes es el de la transmisión electrónica a través de ellas. Para resolver el problema, se utiliza el método de la función envolvente mediante la construcción de las correspondientes funciones de onda en cada uno de los dos materiales. Uno de los sistemas que se estudian habitualmente en la bibliografía desde del punto de vista de la transmisión electrónica es la doble barrera. Para construirla, basta con hacer crecer una secuencia de materiales de la forma  $ABABA$ , de manera que la estructura energética resultante, con las simplificaciones habituales del método de la función envolvente, es como la que aparece en la figura 6.3.

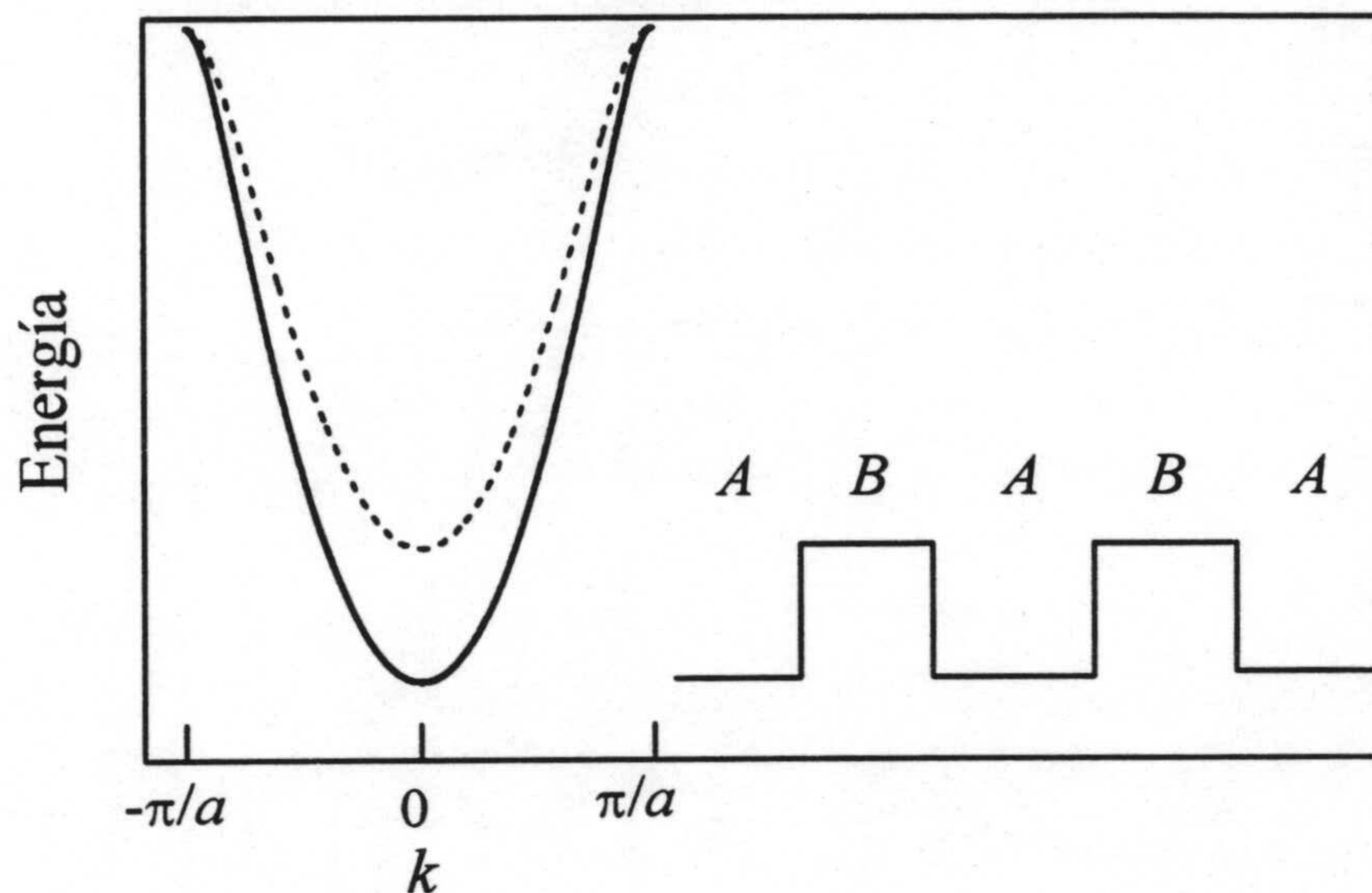
El problema para modelar una estructura real como la que acabamos de comentar (por ejemplo, usando GaAs como material  $A$  y GaAlAs como material  $B$ ) radica en que, por supuesto, no conocemos exactamente el perfil de la energía potencial a lo largo del eje  $z$ . Para calcular la transmisión electrónica, se hace uso de la aproximación de masa efectiva, utilizando las masas efectivas correspondientes al material  $A$  para la parte de las funciones de onda contenidas en él, y haciendo lo propio con el material  $B$ . La función de onda para energías superiores a la altura de la barrera sería de la forma:

$$\zeta_A(z) = \alpha e^{ik_A z} + \beta e^{-ik_A z} \quad z \text{ en el material } A \quad (6.8)$$

y

$$\zeta_B(z) = \gamma e^{ik_B z} + \delta e^{-ik_B z} \quad z \text{ en el material } B. \quad (6.9)$$

Los pares de constantes de cada trozo de la función de onda ( $\alpha$  y  $\beta$  por ejemplo en



**Figura 6.3:** Representación esquemática de la disposición de los materiales  $A$  y  $B$  para la creación de una doble barrera (parte derecha). En la parte izquierda, se representan las bandas de los dos materiales, en la que se aprecia que la diferencia entre los fondos de ambas bandas es igual a la altura de las barreras formadas.

el primer caso) se calcularán posteriormente tras aplicar condiciones de contorno adecuadas. Además, tomando como energía de referencia  $E = 0$  el fondo de la banda de conducción del material  $A$ , tenemos que:

$$k_A = \sqrt{\frac{2m_A E}{\hbar^2}} \quad (6.10)$$

y

$$k_B = \sqrt{\frac{2m_B(E - V_g)}{\hbar^2}} \quad (6.11)$$

siendo  $m_A$  y  $m_B$  las masas efectivas en los materiales  $A$  y  $B$  respectivamente, y



$V_g$  la altura de las barreras, o lo que es lo mismo, la diferencia energética entre los fondos de las bandas de conducción de ambos materiales.

Una vez hecho esto, se aplican condiciones de contorno apropiadas a la función envolvente, lo que en ciertos casos puede suponer serios problemas técnicos (Ando *et al.*, 1989a y 1989b). En el estudio de la transmisión electrónica las condiciones de contorno apropiadas en la intercara entre los materiales  $A$  y  $B$  son, primero, la continuidad de la función envolvente, y segundo, la continuidad de la derivada de la función envolvente dividida por la correspondiente masa efectiva, es decir:

$$\zeta_A = \zeta_B \quad (6.12)$$

y

$$\frac{1}{m_A} \frac{d\zeta_A}{dz} = \frac{1}{m_B} \frac{d\zeta_B}{dz}. \quad (6.13)$$

Si la transmisión se estudia a energías mayores que la de la altura de la doble barrera, tal y como se supone en la función de onda dada en (6.8) y (6.9), las hipótesis que hemos hecho hasta ahora parecen bastante razonables. Basta con calcular las masas efectivas de ambos materiales usando los procedimientos explicados anteriormente, e incluirlas en las correspondientes ecuaciones. El problema aparece si, como suele ser habitual, se intenta estudiar la transmisión de túnel resonante a través de la doble barrera.

Cuando tenemos una estructura tipo doble barrera, es decir, un pozo cuántico rodeado por dos barreras finitas, el coeficiente de transmisión para energías inferiores a la altura de la barrera presenta valores energéticos para los que la transmisión vale la unidad (túnel resonante). Estas energías resonantes están asociadas a los estados ligados que contendría el pozo si las barreras fueran infinitamente anchas, como en el caso de un único pozo cuántico descrito al principio de este capítulo. Para estos valores de energía, el electrón es capaz de atravesar la doble barrera por efecto túnel sin ninguna dificultad. Este proceso, muy útil en dispositivos electrónicos de efecto túnel, es objeto de un amplio estudio en la bibliografía ac-

tual (Rousseau *et al.*, 1989; Lunz *et al.*, 1996; Zhu *et al.*, 1996), que se lleva a cabo siempre utilizando el formalismo de la función envolvente con la aproximación de masa efectiva.

El fenómeno de túnel resonante que acabamos de describir se produce, lógicamente, para energías inferiores a la altura de la barrera ( $E < V_g$ ). Por lo tanto,  $k_B$  (ec. (6.11)) pasará a ser imaginario, y las exponenciales de (6.9) pasarán a ser reales. Esto quiere decir que el electrón se transmite a través del gap del material de barrera (material  $B$ ). Sin embargo, con el método de la función envolvente, hemos de considerar una masa efectiva para el electrón en el material  $B$  **aun cuando al atravesarlo el electrón se encuentra en su gap**. Y aquí surge el problema: al 'estar' el electrón en un gap, la masa efectiva no está bien definida. Por consiguiente, aparece la dificultad de asignar algún valor a la masa efectiva del material  $B$  para energías correspondientes a su gap. Dicho valor es necesario, puesto que hay que incluirlo en (6.11), sin el que la función envolvente no está bien definida. Algunos autores utilizan la masa efectiva del material  $B$  en el fondo de su banda de conducción. Otros consideran que la masa importante es la del material que forma el pozo y los dos medios laterales del sistema (material  $A$ ), y utilizan el valor de  $m_A$  para la masa efectiva del material de barrera. Nuestra intención aquí no es proponer ningún valor de la masa efectiva  $m_B$  en el gap, sino **calcularla** y ver cuál es su comportamiento. El procedimiento de cálculo se explica en la sección siguiente.

## 6.4 Cristal real. Procedimiento de cálculo

La idea que utilizamos para poder calcular la masa efectiva en el gap del material de barrera es simple. Se basa en comparar los resultados obtenidos para la transmisión a través de una doble barrera usando el método de la función envolvente con la aproximación de masa efectiva, y los obtenidos para un cristal real de manera exacta. Evidentemente, si podemos calcular algo de manera exacta, ¿para qué

vamos a utilizar una aproximación? La respuesta es que en la realidad nunca se puede calcular algo de manera exacta. Pero si diseñamos artificialmente un caso sencillo que admita solución exacta, y a ese mismo ejemplo le aplicamos el método aproximado de la función envolvente tal y como se aplica en casos reales, podemos obtener alguna información útil acerca de este método y extraer conclusiones generales que sean útiles en casos más complicados para los que no se dispone de la solución exacta.

Para ello, utilizaremos cristales perfectos contruidos a través de modelos de Kronig-Penney con funciones  $\delta$ . Como ya comentamos en el capítulo 2, el método del determinante es tan general, que basta con conocer la función de Green de un cierto sistema cuando este es infinito y está aislado para, utilizando el caso de multicapas, crear una heteroestructura y poder calcular, por ejemplo, el coeficiente de transmisión de manera exacta.

La función de Green exacta  $G(x, x)$  de un cristal unidimensional de Kronig-Penney infinito formado por barreras  $\delta$  de idéntica amplitud  $V$ , y para energías dentro de una banda permitida viene dada por (Maleev, 1965):

$$G(x, x) = \frac{i |\sin ka|}{2k \sin \beta a} \left\{ 1 + \frac{V \sin kx \sin k(a-x)}{k \sin ka} \right\} \quad (6.14)$$

donde, tomando  $\hbar = 2m_0 = 1$ , tenemos que  $k = \sqrt{E}$ , y  $a$  es la constante de red. En esta ecuación,  $\beta$  hace el papel de cuasimomento, y está definido a través de la relación de dispersión que da el espectro de un cristal infinito:

$$\cos \beta a = \cos ka + \frac{V}{2k} \sin ka \quad (6.15)$$

donde  $V$  es la amplitud de las funciones  $\delta$  que forman el cristal.

Cuando la energía se encuentra en un gap del cristal, la función de Green exacta resulta en este caso

$$G(x, x) = \frac{|\sin ka|}{2k \sinh \gamma a} \left\{ 1 + \frac{V \sin kx \sin k(a-x)}{k \sin ka} \right\} \quad (6.16)$$

donde ahora,  $\gamma$  se define a partir de la relación

$$\cosh \gamma a = \left| \cos ka + \frac{V}{2k} \sin ka \right| > 1. \quad (6.17)$$

Para construir la doble barrera real, según la secuencia *ABABA*, no tenemos más que construir dos cristales tipo  $\delta$  diferentes. Escogiendo dos valores diferentes de amplitud  $V_A$  y  $V_B$ , y utilizándolos en la relación de dispersión (6.15) para calcular sus correspondientes espectros, podemos conseguir fácilmente una determinada diferencia energética entre el fondo de la banda de conducción del material *A* y el fondo de la banda del material *B*. Si nos limitamos a estudiar el rango energético comprendido entre ambos fondos, estaremos en una zona permitida para el material *A* y para él usaremos en el determinante la función de Green dada por (6.14), con  $\beta$  definido usando  $V_A$ . En ese rango, estaremos sin embargo en una zona prohibida para el material *B*, y para él hemos de usar la función de Green dada por (6.16), con  $\gamma$  definido usando  $V_B$ . Puesto que la secuencia a construir es *ABABA*, nos quedará simplemente un determinante  $5 \times 5$  que podemos resolver fácilmente de manera numérica a través de la relación de recurrencia vista en el capítulo dos. Además, en el determinante también está incluida la información de la longitud de cada trozo de material. En el método se impone implícitamente que los materiales a ambos lados del sistema (en nuestra secuencia *ABABA* los dos medios laterales *A*) son infinitos, lo que se ajusta con precisión a las heteroestructuras reales, porque los materiales que las limitan son macroscópicos.

El coeficiente de transmisión así calculado es exacto, puesto que conocemos perfectamente la función de Green de ambos cristales. En ningún momento necesitamos usar la aproximación de masa efectiva en ambos materiales, porque al resolver el problema de forma exacta, es el electrón con su masa  $m_0$  el que se mueve por el cristal.

Desde el punto de vista de la función envolvente, el problema se aproximaría por una doble barrera formada por dos barreras rectangulares de anchura igual a la de los dos trozos de material *B* del sistema real, y de altura igual a la difer-

encia energética que haya entre el fondo de la banda de conducción de ambos materiales. Las dos barreras rodean a un pozo con valor de potencial constante y de anchura igual a la del material central  $A$  del sistema real. La doble barrera estaría rodeada por trozos infinitos de potencial constante y de valor igual al del pozo, correspondientes a los dos trozos laterales del material  $A$  en el sistema real. Para poder calcular el coeficiente de transmisión, habría que incluir, como ya explicamos anteriormente, las masas efectivas de cada material en la función envolvente. Nosotros, que calcularemos el coeficiente de transmisión para este caso usando de nuevo el determinante característico, vamos a emplear un método equivalente al de la función envolvente usando el formalismo de las funciones de Green. En este caso, las funciones de Green 'envolventes' en el material  $A$  y en el  $B$ , corresponden a sistemas en los que la energía potencial es constante (ver capítulo 2) pero incluyendo en ellas la masa efectiva. Como ya comentamos antes, si tomamos nuestra referencia energética en el fondo de banda del material  $A$ , tenemos que:

$$G_A(x, x) = \frac{im_A}{\sqrt{2m_A E}} \quad (6.18)$$

y

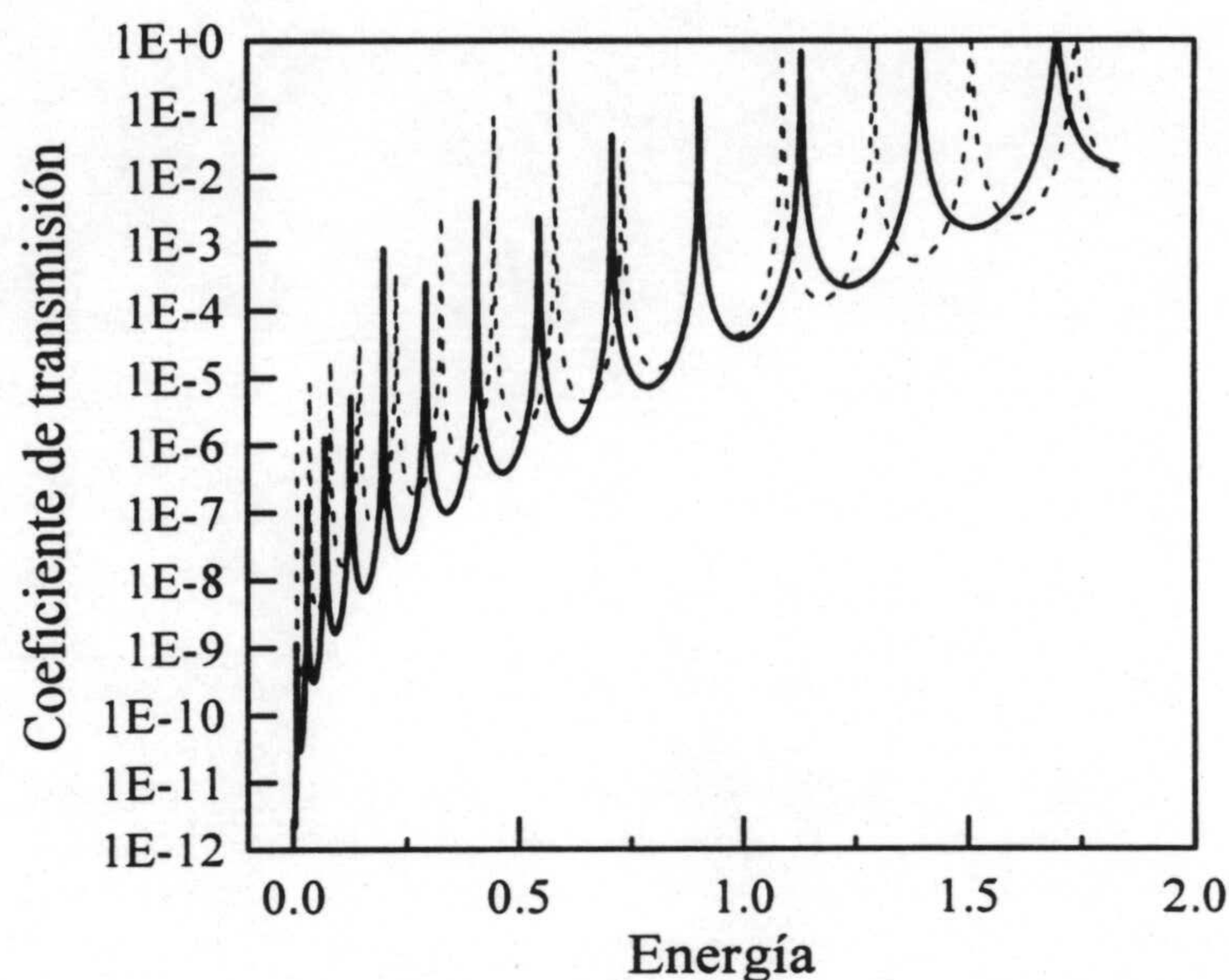
$$G_B(x, x) = \frac{im_B}{\sqrt{2m_B(E - V_g)}} \quad (6.19)$$

donde, como antes,  $\hbar = 1$ , y en estas unidades la masa  $m_0$  del electrón es igual a  $1/2$ .

#### 6.4.1 Método de ajuste

Para poder calcular las masas efectivas  $m_A$  y  $m_B$  compararemos el valor del coeficiente de transmisión del cristal real con el obtenido a partir de las funciones de Green en función de la masa efectiva. Ello nos permitirá calcular qué valores de  $m_A$  y  $m_B$  hacen que ambos coeficientes se ajusten lo mejor posible.

El hecho de utilizar este método para calcular el coeficiente de transmisión en una doble barrera presenta una ventaja. Como hemos comentado, la doble



**Figura 6.4:** Coeficiente de transmisión obtenido en una doble barrera real (línea continua), y el obtenido a través del método de la función envolvente para la misma estructura. Se muestra el ajuste de una resonancia (parte central), lo que permite obtener  $m_A$  y  $m_B$  para la energía de la resonancia.

barrera presenta energías resonantes para las que la transmisión alcanza valor unidad. Estas resonancias aparecen como picos muy agudos en el coeficiente de transmisión, como puede apreciarse en la figura 6.4, en la que se representa con línea continua el coeficiente de transmisión de una doble barrera real en función de la energía en el rango de la altura de las barreras. Los dos cristales utilizados son los generados con  $V_A = 2$  y  $V_B = 3$ , y la transmisión que se muestra es la que ocurre en la doble barrera que se forma en la tercera banda de ambos materiales. El número de resonancias se puede controlar fácilmente variando la profundidad del pozo central (variando el material  $B$  a través de  $V_B$ ), o bien cambiando la anchura de dicho pozo, que es el procedimiento que hemos usado aquí.

El método que hemos seguido para calcular las correspondientes masas efectivas  $m_A$  y  $m_B$  consiste en ajustar tanto la anchura como la posición de las resonancias

de transmisión con las obtenidas a partir de la función envolvente. El algoritmo de cálculo comienza por asignar a  $m_A$  y  $m_B$  los valores obtenidos mediante un ajuste parabólico de la relación de dispersión  $E(k)$ , es decir, los valores de la masa efectiva obtenidos para los materiales  $A$  y  $B$  cuando ambos son infinitos (que llamaremos  $m_A^*$  y  $m_B^*$ ). El ajuste se hace de manera muy precisa variando iterativamente  $m_A$  y  $m_B$  hasta ajustar exactamente la posición energética de la resonancia, que es controlada principalmente por  $m_A$ , y su anchura, controlada fundamentalmente por  $m_B$ . Cuando esto se consigue, tal y como se muestra con línea discontinua en la figura 6.4, encontramos los valores de  $m_A$  y  $m_B$  **para la energía a la que ocurre la resonancia**. Si este proceso se repite para resonancias de transmisión diferentes, lo que conseguimos obtener es la dependencia con la energía tanto de  $m_A$  como de  $m_B$ . Si además se hace para diferentes anchuras de barreras o pozos, podemos intentar comprender la influencia de estos factores en el comportamiento de la masa efectiva.

### 6.4.2 La transmisión en modelos multicapa

Como hemos comentado más arriba, necesitamos calcular el coeficiente de transmisión a través de las dos estructuras, la real y la aproximada, para poder obtener la masa efectiva de ambos materiales. Los dos materiales están contruidos por sistemas multicapas. La diferencia entre ellos es que, en el cristal real, cada material está formado por un cristal periódico, mientras que en el aproximado, el material se modela como si fuera una capa de potencial constante. La diferencia entre ambos está contenida en sus funciones de Green correspondientes, dadas por (6.14) y (6.16) para el cristal real, y por (6.18) y (6.19) para el material aproximado. Sin embargo, a lo largo de esta memoria no hemos utilizado hasta ahora el coeficiente de transmisión en modelos multicapa. En el capítulo 3, dedicado a la transmisión electrónica, nos limitamos a secuencias de funciones  $\delta$ , porque eran suficientes para el estudio de las propiedades cualitativas de  $T$ . En esta breve sección, vamos a describir como obtener el coeficiente de transmisión para el determinante en modelos

multicapas.

En el capítulo 2, ya definimos el determinante característico para sistemas multicapa, llamado allí  $D_N^0$ . Dicho determinante ha sido utilizado previamente en esta memoria para el cálculo del espectro discreto en sistemas multicapa con y sin campo eléctrico en los capítulos 4 y 5. Sin embargo, el coeficiente de transmisión  $T$  no se obtiene de manera tan directa a partir del determinante en este modelo como ocurre en el caso de secuencias de funciones  $\delta$ , en las que tenemos que  $T = |D|^{-2}$ . La razón es que en el caso de funciones  $\delta$ , las barreras carecen de anchura y por lo tanto no hay que incluir el comportamiento de la función de onda dentro de la barrera. Por el contrario, es necesario hacerlo en el caso de modelos multicapa. Para ello, basta con definir un determinante auxiliar a partir de  $D_N^0$ , que llamaremos  $D_N$ , a través de la ecuación (Aronov, Gasparian & Gummich, 1991):

$$D_N = D_N^0 \left( \lambda_{1N} \prod_{n=1}^N (1 - r_{n,n-1}) (1 - r_{n-1,n}) \right)^{-1/2} \quad (6.20)$$

donde las magnitudes  $\lambda_{ij}$  y  $r_{i,j}$  son las mismas que se definieron en el capítulo 2 (ecuaciones (2.76) y (2.75)). A partir de este determinante auxiliar  $D_N$ , ya es posible obtener el coeficiente de transmisión de manera compacta a través de la ecuación:

$$T = |D_N|^{-2} \quad (6.21)$$

que es formalmente equivalente a la usada para calcular  $T$  en el caso de funciones  $\delta$ .

### 6.4.3 Condiciones de contorno

La obtención de  $T$  en el cristal real y en el modelo aproximado, que incluye la masa efectiva, se realiza a través de la ecuación (6.21).

El uso del determinante característico para el cálculo de la transmisión conlleva la imposición implícita de condiciones de contorno para la función de Green en las intercaras de dos materiales diferentes consecutivos. Dichas condiciones de



contorno implícitamente asumidas por el método son, considerando que la intercara está en el punto  $x$ ,

$$G_A(x, x) = G_B(x, x) \quad (6.22)$$

y

$$\frac{\partial G_A(x, x)}{\partial x} = \frac{\partial G_B(x, x)}{\partial x} \quad (6.23)$$

en el caso del cristal exacto. En estas ecuaciones,  $G_A$  corresponde a (6.14) y  $G_B$ , a (6.16). En el caso del cristal aproximado, las condiciones de contorno en una intercara entre el material  $A$  y el  $B$ , situada en el punto  $x$ , están dadas por

$$G_A(x, x) = G_B(x, x) \quad (6.24)$$

y

$$\frac{1}{m_A} \frac{\partial G_A(x, x)}{\partial x} = \frac{1}{m_B} \frac{\partial G_B(x, x)}{\partial x} \quad (6.25)$$

donde ahora,  $G_A$  corresponde a (6.18), y  $G_B$  a (6.19). Como podemos apreciar, en el caso del cristal aproximado, las condiciones de contorno usadas para la función de Green son equivalentes a las condiciones estándar usadas en el método de la función envolvente, dadas por (6.12) y (6.13), y que son apropiadas para estudiar problemas de transmisión (Ando *et al.*, 1989).

## 6.5 Resultados

A la hora de describir los resultados obtenidos con el método descrito más arriba conviene comentar primero el objetivo de los mismos. Las cuestiones fundamentales que dichos resultados han de responder son las siguientes:

- En primer lugar, poder definir una masa efectiva dentro del gap de un material
- En segundo lugar, determinar si la masa efectiva, tanto en el material del pozo como en el material de barrera, es constante en el rango energético de la

barrera, como se considera normalmente en la bibliografía, o depende de la misma. Si esto último es cierto, conviene saber si la masa efectiva aumenta o disminuye con la energía.

- En tercer lugar, determinar si existe una dependencia de la masa efectiva, cuando se considera que estamos en el gap de un material, con la longitud del material correspondiente. En caso afirmativo, trataremos de obtener los efectos del tamaño de la barrera sobre la masa efectiva.

Queremos detallar algo más la tercera de estas cuestiones. En el método estándar de la masa efectiva, cuando hay que dar un valor para la masa en el gap  $m_B$ , normalmente se utiliza el valor obtenido para el fondo de la banda de conducción del material  $B$  (que llamaremos posteriormente  $m_B^*$ ). Este procedimiento es cuestionable por dos motivos. El primero de ellos, que ya comentamos antes en la introducción, es que estamos considerando la masa efectiva para energías correspondientes a un gap, y no tiene por qué ser la correspondiente a energías más altas situadas en la banda de conducción. El segundo es que, aunque el valor de  $m_B$  en el gap se parezca al del fondo de la banda de conducción, dicho valor de  $m_B$  en este fondo se obtiene considerando que el material  $m_B$  es infinito. Sin embargo, en las dobles barreras reales, la anchura de las barreras es pequeña en comparación con el tamaño del pozo central, para favorecer el túnel. Debido a esta pequeñez de las barreras, no parece adecuado suponer que  $m_B$  tiene el valor deducido del sistema infinito, sino que es posible que el tamaño de la barrera influya sobre el valor de  $m_B$  que se obtiene en un sistema macroscópico,  $m_B^*$ .

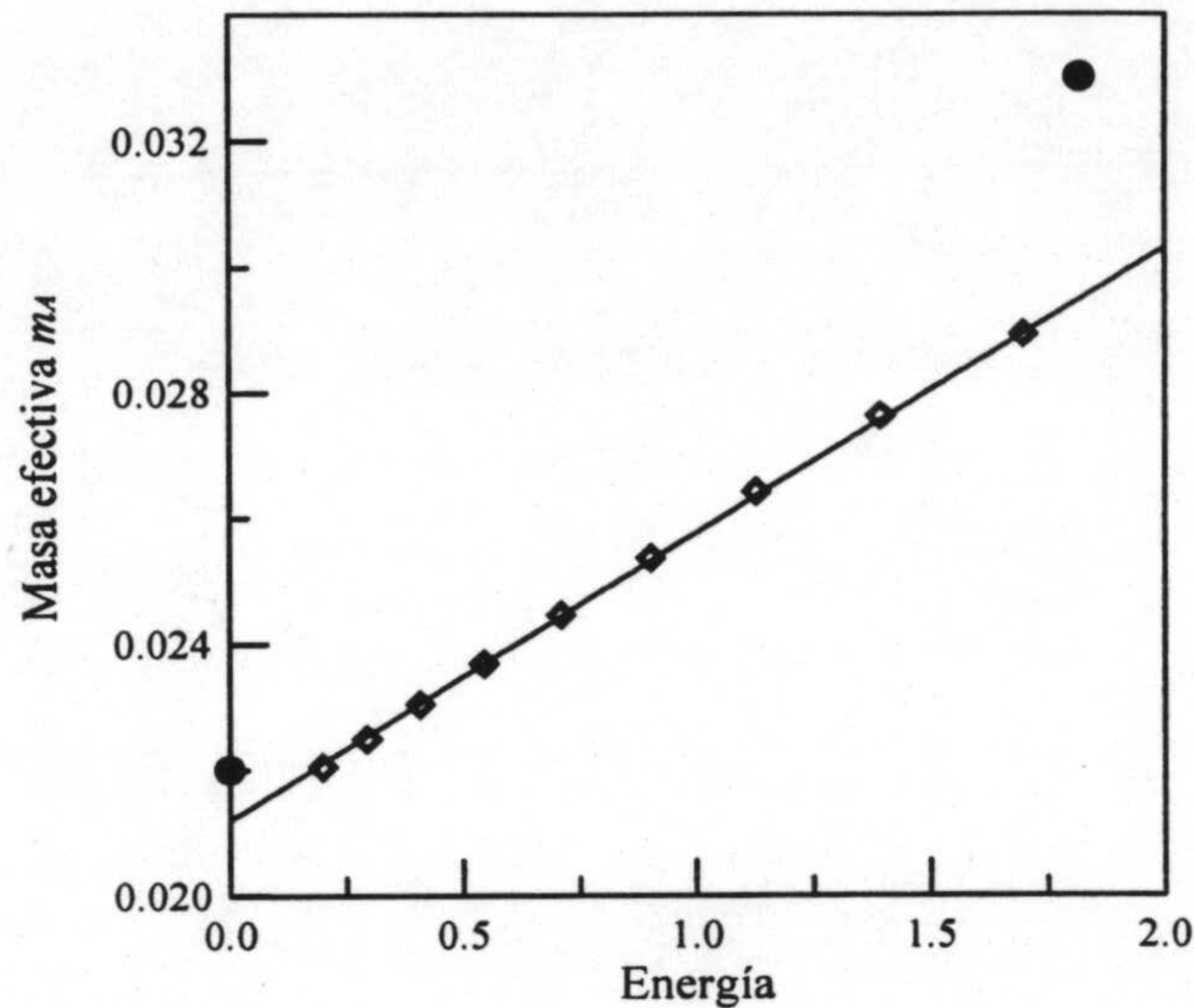
A continuación presentamos los resultados de las masas efectivas obtenidos por el método de ajuste definido anteriormente.

### 6.5.1 Masa efectiva del material $A$

Los resultados obtenidos para la masa efectiva  $m_A$  del material  $A$  que forma el pozo en función de la energía se presentan en la figura 6.5. Los datos de dicha figura

se han obtenido mediante la variación de los valores de  $m_A$  y  $m_B$  en el caso de la función envolvente hasta encontrar los valores de ambos que ajustan las resonancias en la transmisión de la doble barrera real. Para construir la doble barrera real, se han usado dos cristales de Kronig-Penney de funciones  $\delta$  construidos con dos amplitudes diferentes,  $V_A = 2$  y  $V_B = 3$ . Con ellos, se construye la secuencia *ABABA*, donde consideramos que el material *A* de los laterales es de tamaño infinito. La anchura del material *A* que forma el pozo central es de 10 periodos, y las barreras tienen una anchura de 3 periodos. Las mismas anchuras se utilizan en los trozos de potencial constante usados en el método de la función envolvente. El cálculo de las masas efectivas se realiza en la tercera banda de ambos materiales. La diferencia energética entre el fondo de la banda de conducción del material *A* ( $V_A = 2$ ) y el fondo de la banda del material *B* ( $V_B = 3$ ) es  $V_g = 1.83$  (en unidades atómicas), y ese mismo valor es el que se usa como altura de la barrera en el método de la función envolvente. Con las unidades atómicas utilizadas para propósitos numéricos, la masa efectiva representada en 6.5 viene dada en unidades de la masa del electrón. El rango energético de dicha figura es el correspondiente a la altura de la barrera. También representamos en la misma figura (círculos) las masas efectivas del material *A* y el *B* obtenidas por ajuste parabólico de la relación de dispersión (6.15) en el fondo de sus respectivas bandas de conducción, lo que equivale a considerar que ambos materiales son infinitos. A dichos valores de masa efectiva obtenidos para los materiales infinitos los llamaremos  $m_A^*$  y  $m_B^*$  respectivamente.

Los resultados son concluyentes. Cuando la energía tiende a cero, el valor de  $m_A$  tiende al valor calculado en el fondo de la banda del material infinito *A*,  $m_A^*$ . Esta tendencia es razonable, y muestra la coherencia del método de ajuste. Al margen del comportamiento para bajas energías, se observa un incremento prácticamente lineal de la masa efectiva con la energía en el rango estudiado. La variación observada para  $m_A$  en este rango se mueve entre los valores  $m_A = 0.022m_0 = m_A^*$  para  $E = 0$  hasta aproximadamente  $m_A = 0.029m_0$  para la cima de la barrera. Es



**Figura 6.5:** La masa efectiva en el material de pozo  $m_A$  en función de la energía (diamantes). También representamos con círculos  $m_A^*$  y  $m_B^*$ . La línea continua corresponde a un ajuste por mínimos cuadrados, que resalta el incremento lineal de  $m_A$ . El rango de energía corresponde a la altura de la barrera.

decir, se observa una variación de  $m_A$  en el rango de la barrera del orden del 30%. Consideramos que dicha variación es suficientemente significativa como para invalidar, al menos parcialmente, el procedimiento común usado en la bibliografía, comentado a continuación.

Usualmente, para el estudio de la transmisión se utiliza un valor constante de  $m_A$  en todo el rango energético, correspondiente al fondo de la banda, e igual a  $m_A^*$ . Debido a la variación obtenida aquí, podemos concluir que sería mucho más correcto asumir un valor de  $m_A$  variable con la energía,  $m_A(E)$ , porque, a la vista de nuestros resultados, el error inducido al considerar constante la masa puede ser bastante considerable. El error cometido será especialmente significativo si se considera la transmisión en un rango energético cercano a la cima de la barrera, donde la desviación con respecto al fondo es mayor.

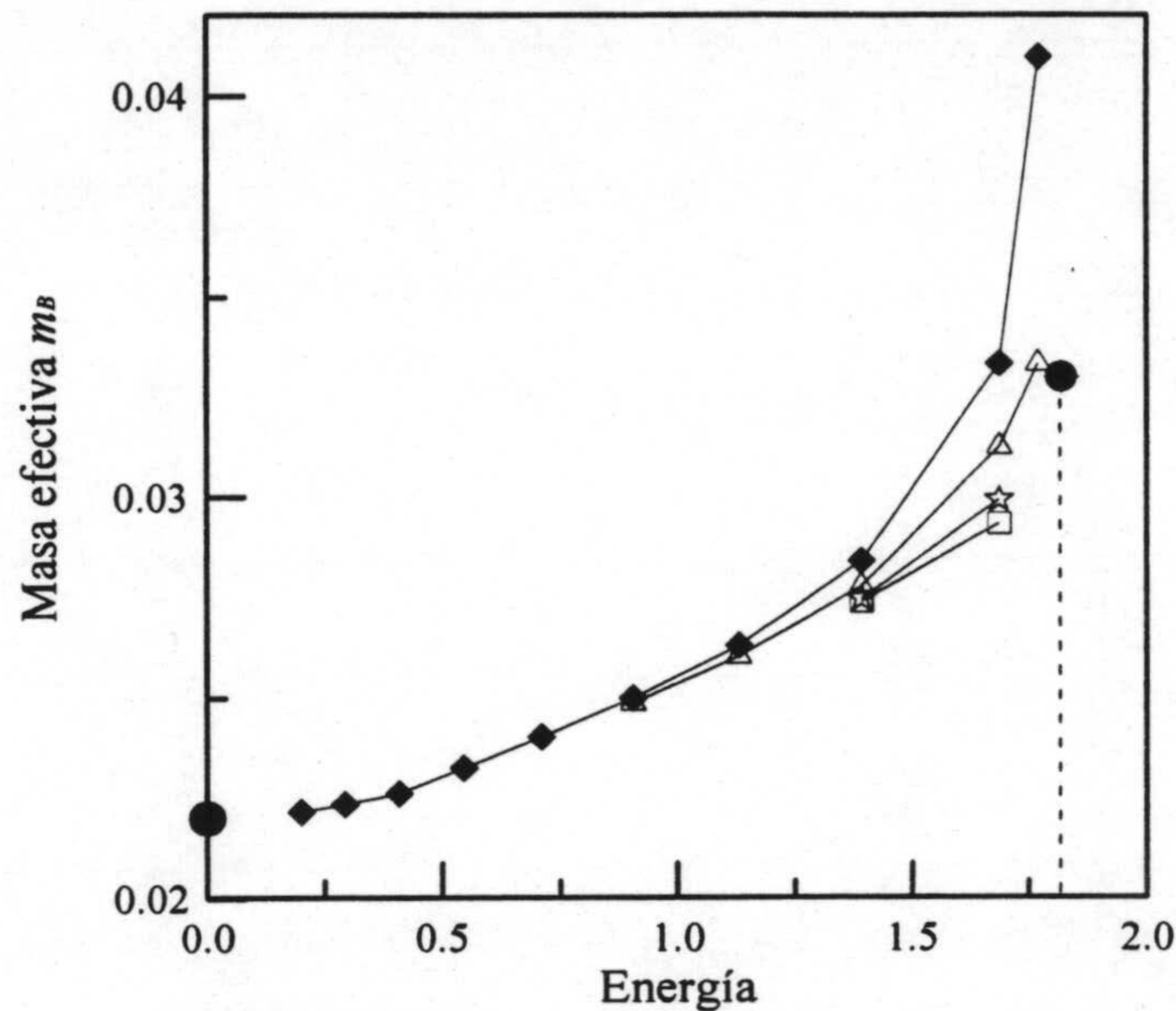
Por último, nos gustaría comentar que los resultados obtenidos para  $m_A$  siguen

coincidiendo perfectamente con los representados en la figura 6.5 si variamos la anchura de las barreras de material  $B$  o del pozo central. Ello se debe a que  $m_A$ , independientemente del tamaño de la parte central del sistema, estará más fuertemente controlada por los medios  $A$  laterales, que son infinitos.

### 6.5.2 Masa efectiva del material $B$

Los resultados para el material de barrera  $B$  son más interesantes que en el caso anterior. Ello se debe a que estamos obteniendo la masa efectiva dentro de un gap, donde parece paradójico poder hacerlo. Los resultados para  $m_B$  se muestran en la figura 6.6. En ella representamos el comportamiento de  $m_B$ , medida en unidades de la masa del electrón, frente a la energía, medida en unidades atómicas. En dicha figura, presentamos conjuntamente los resultados obtenidos para diferentes valores de la anchura de las barreras, medida en periodos cristalinos. Los materiales usados son idénticos a los empleados anteriormente en el caso de  $m_A$ . Las anchuras de las barreras utilizadas, medidas en periodos, son 2 (rombos), 3 (triángulos), 4 (estrellas) y 6 (cuadrados). Junto a estos valores, representamos también (círculos) los valores de  $m_A^*$  y  $m_B^*$ , ambos obtenidos de la relación de dispersión de los materiales  $A$  y  $B$  cuando son infinitos.

La interpretación de los resultados es sencilla. En primer lugar, y sin centrarnos en la influencia de la longitud de las barreras sobre  $m_B$ , cabe comentar que se detecta inmediatamente un incremento de la masa efectiva con la energía (Carpena, López-Villanueva & Gasparian, 1997d). En la bibliografía se utilizan habitualmente dos aproximaciones diferentes para el valor de  $m_B$  (Lunz *et al.*, 1996; Zhu *et al.*, 1996). La primera es considerar que, puesto que el electrón parte del material  $A$  y llega al mismo material, es razonable asignar a  $m_B$  el mismo valor que a  $m_A$ , dado por  $m_A^*$ . Dicho valor se considera constante y no dependiente de la energía. La segunda asume que la energía a la que el electrón atraviesa la barrera, aunque está situada en el gap de  $B$ , no dista demasiado del fondo de la banda de conducción del material  $B$  y le asigna a  $m_B$  el valor obtenido para dicha energía,

$m_B^*$ .

**Figura 6.6:** La masa efectiva del material de barrera  $m_B$  en función de la energía calculada para diferentes longitudes de las barreras, medidas en periodos. Las longitudes son 2 (rombos), 3 (triángulos), 4 (estrellas) y 6 (cuadrados) periodos. Con círculos se representan  $m_A^*$  y  $m_B^*$ . El rango de energía corresponde a la altura de la barrera.

Nuestros resultados justifican en cierto sentido ambas aproximaciones. Para la zona baja de energía, se observa como el valor de la masa efectiva  $m_B$  parece estar controlado por el material  $A$ , y así, vemos como  $m_B$  tiende al valor de  $m_A^*$ , obtenido de la relación de dispersión del material  $A$ . Esto hace que la aproximación usual de considerar a  $m_B$  como  $m_B^*$  no sea válida para la región de baja energía, porque se observan realmente valores mucho menores, más cercanos a  $m_A^*$ . Este hecho ha sido verificado experimentalmente en el trabajo de Brozak *et al.* (1990), donde se obtiene la masa efectiva en el material de barrera mediante el análisis de corrientes por túnel. En dicha referencia, y para la región de baja energía, se obtiene un valor de la masa efectiva del material de barrera (AAs) del orden del 40 % menor que la masa efectiva en el fondo de la banda de conducción. Dicho

resultado experimental avala nuestros resultados numéricos. Sin embargo, para energías mayores, y conforme nos aproximamos a la cima de la barrera, podemos observar, especialmente para anchuras de barrera suficientemente grandes, como el valor de  $m_B$  tiende a  $m_B^*$ , la masa efectiva en el fondo de la banda de conducción del material  $B$ . Dicha tendencia es razonable, porque para las zonas altas de energía estamos ya muy cerca del fondo de la banda de conducción del material  $B$ . Así, podemos concluir que el efecto del material  $A$  predomina en la zona de baja energía, mientras que el efecto del material  $B$  predomina en la región de alta energía.

La otra cuestión interesante se refiere a la dependencia de la masa efectiva  $m_B$  con la anchura de la barreras. En la figura 6.6 es posible observar como para la región de baja energía, donde como hemos visto anteriormente dominan los efectos del material  $A$ , todos los resultados de  $m_B$  coinciden siempre entre sí, independientemente de la anchura de las barreras. Sin embargo, para energías altas, ya cercanas al fondo de la banda del material  $B$ , y cuando la anchura de la barrera es pequeña, es posible observar como se produce un gran incremento del valor de la masa efectiva  $m_B$ , que resulta ser incluso mucho mayor que  $m_B^*$  en el caso de considerar unas barreras de dos periodos (rombos en la figura 6.6). Este efecto anómalo se debe a que, cuando las barreras son estrechas, las minibandas de conducción que se forman por encima de la barrera de potencial son también más estrechas, lo que, de acuerdo con la teoría de un electrón, hace que la masa efectiva en esa región, que es inversamente proporcional a la anchura de la banda, sea mucho más grande. Este efecto es muy importante, porque en casos reales, en los que la anchura de las barreras suele ser muy pequeña, será necesario considerar valores de la masa efectiva mucho mayores que  $m_B^*$  cuando se estudie la transmisión en la zona alta de la barrera.

Por otra parte, el estudio que hemos realizado con respecto a la longitud nos permite obtener un resultado para el comportamiento de  $m_B$  con la energía del

tipo:

$$\frac{1}{m_B(E)} = \frac{1}{V_g} \left[ \frac{V_g - E}{m_A^*} + \frac{E}{m_B^*} \right]. \quad (6.26)$$

La ecuación anterior nos da una variación no lineal de  $m_B$  con la energía, de manera que para  $E = 0$  (origen de la barrera), obtenemos  $m_B(0) = m_A^*$ , y para la energía de la cima de la barrera ( $E = V_g$ ), tenemos que  $m_B(V_g) = m_B^*$ . La ecuación anterior sólo tiene validez para anchuras grandes de la barrera. Dicha región de validez es razonable, en primer lugar, porque para anchuras grandes no aparecen los efectos comentados más arriba relacionados con la anchura de las minibandas, y en segundo lugar, porque si la anchura de la barrera de material  $B$  no es grande, no tendría sentido que el valor al que tiende  $m_B$  fuera  $m_B^*$ , ya que este último valor está obtenido considerando que el material  $B$  es infinito.

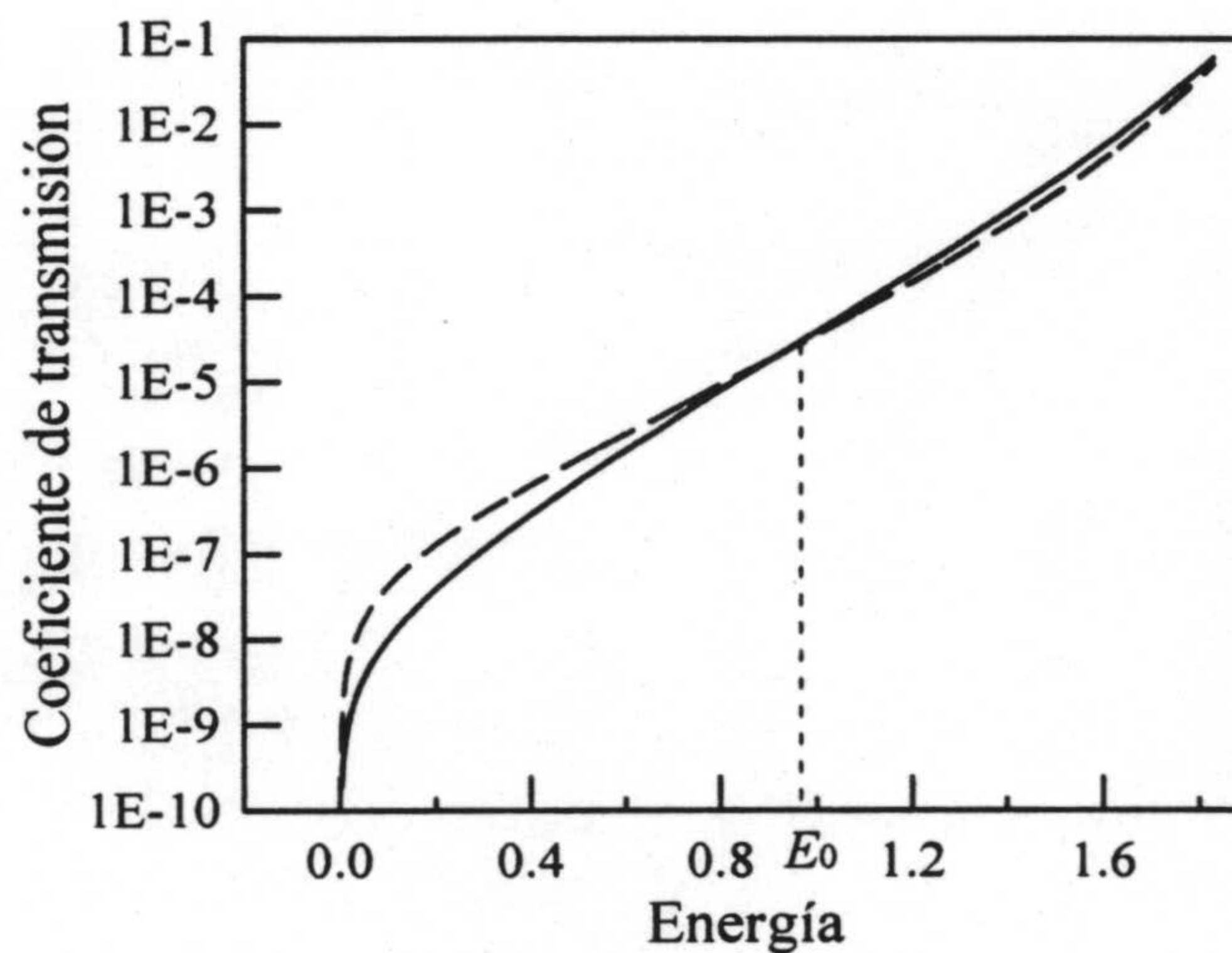
Queda por dilucidar cuándo podemos considerar que las anchuras de las barreras, formadas por el material  $B$ , son suficientemente grandes como para asumir que el valor límite de  $m_B$  es  $m_B^*$ . Nuestros resultados numéricos parecen indicar que el material  $B$  se comporta como si fuese 'infinito' cuando el número de periodos de cada barrera es mayor de seis. Para barreras más anchas que este valor, que es el último representado en la figura 6.6, los valores numéricos obtenidos para  $m_B$  ya no se desvían de los obtenidos para seis periodos.

### 6.5.3 Coherencia de los resultados

Hasta ahora, hemos calculado numéricamente el valor de las masas efectivas  $m_A$  y  $m_B$  en función de la energía y de la anchura de las barreras para un caso concreto: la doble barrera. Cabe preguntarse si es posible validar los resultados obtenidos de alguna manera que asegurara su coherencia. Una forma muy sencilla de hacerlo es estudiar la transmisión a través de una estructura diferente a la usada para el cálculo de las masas efectivas. Para ello, primero se construye la estructura real (con cristales de Kronig-Penney) y la aproximada (con trozos de potencial constante, que corresponde a usar el método de la función envolvente). Luego se



calcula el coeficiente de transmisión en el cristal real, y se calcula  $T$  en el modelo aproximado, pero utilizando unos valores particulares de  $m_A$  y  $m_B$  obtenidos para una cierta energía (que vamos a llamar  $E_0$ ) en el cálculo descrito anteriormente para la doble barrera. Si el coeficiente de transmisión real y el aproximado se ajustan bien en la región energética donde está  $E_0$ , ello significa que los valores de las masas efectivas obtenidos para esa energía son correctos.



**Figura 6.7:** Coeficientes de transmisión real (línea continua) y el obtenido con el método de la función envolvente (línea a trozos), ambos calculados para una única barrera. En el método de la función envolvente, se utilizan los valores de  $m_A$  y  $m_B$  obtenidas previamente para la energía  $E_0$ , marcada también en la figura.

La forma más simple de verificar los resultados es calcular los resultados para una estructura del tipo  $ABA$ , es decir, para una única barrera de potencial. Los resultados obtenidos se presentan en la figura 6.7. En ella, con línea continua aparece el coeficiente de transmisión de la barrera real, y con línea discontinua el correspondiente a la barrera en el método de la función envolvente. La energía  $E_0$ , correspondiente a las dos masas efectivas utilizadas, está marcada con una línea vertical. Podemos apreciar que los dos coeficientes de transmisión, tanto el de la barrera real como el obtenido con la función envolvente, coinciden perfectamente

en un entorno centrado en  $E_0$ . Esto indica que, efectivamente, las dos masas efectivas, obtenidas para esa energía mediante la doble barrera, son correctas.

## 6.6 Efectos del campo eléctrico

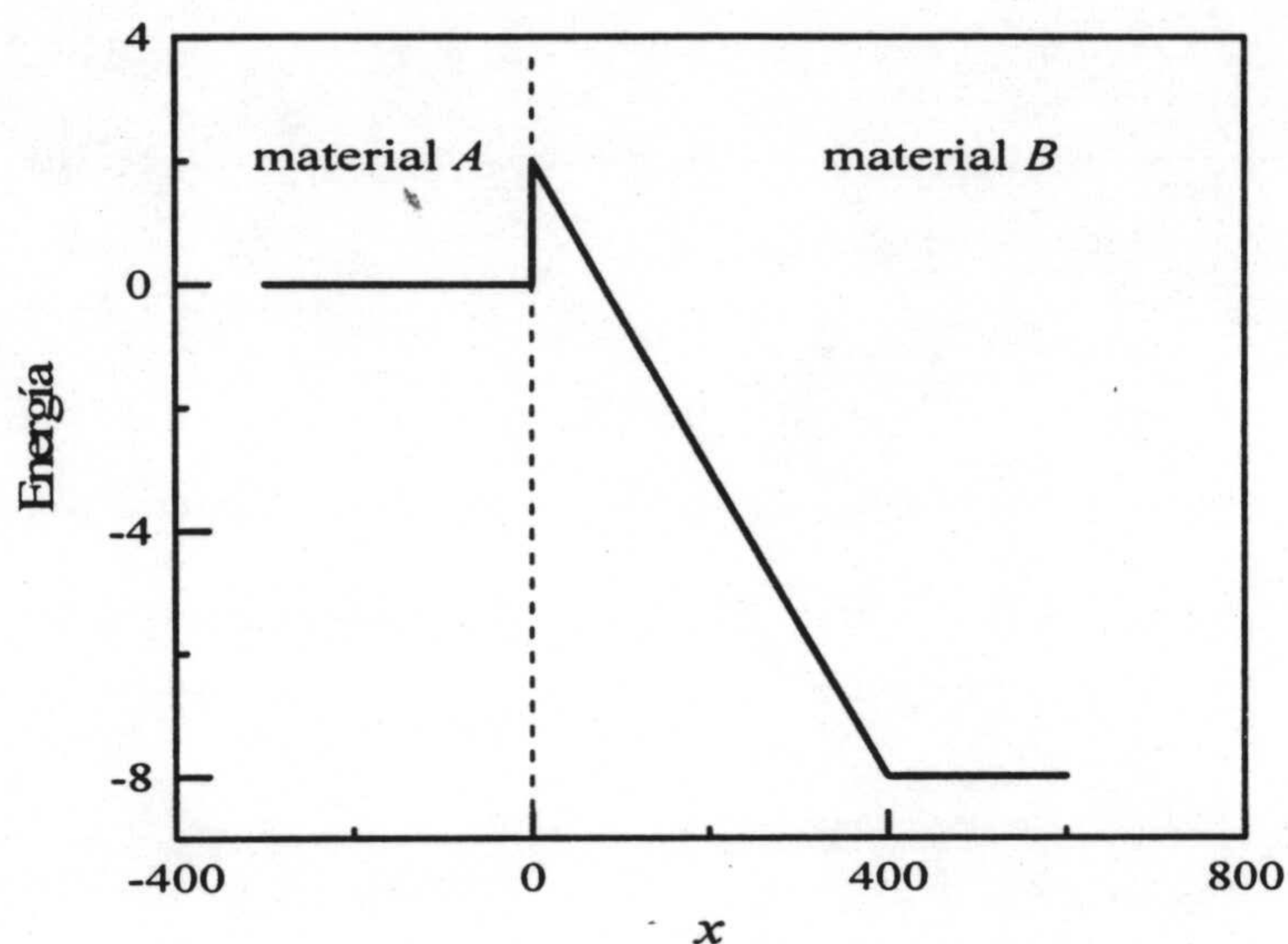
Para discutir el comportamiento de la masa efectiva cuando existe un campo eléctrico homogéneo aplicado, y de esa forma completar nuestro estudio de la masa efectiva, vamos a usar un método similar al usado en la doble barrera, pero aplicado a una barrera de potencial triangular. La barrera triangular corresponde simplemente a considerar la secuencia  $AB$ , pero donde existe un campo eléctrico uniforme  $F$  aplicado en el material  $B$ . La energía potencial presentaría un perfil como el esquematizado en la figura 6.8.

Para construir la barrera triangular en el cristal real, en lugar de usar el decrecimiento lineal exacto de energía potencial mostrado en la figura 6.8, usamos la aproximación de escalera, de manera que discretizamos la caída en pequeños escalones. Cada escalón está formado por capas delgadas (dos periodos en todos los casos) de material  $B$ , pero cuyo origen de energía potencial se desplaza en cada escalón por una cantidad que depende del valor del campo eléctrico aplicado. Para ello, basta con considerar diferentes valores de  $k$  en cada capa en la ecuación (6.16). El valor de  $k$  correspondiente al escalón número  $i$  será:

$$k_i = \sqrt{E + L(i - 1)F} \quad (6.27)$$

donde  $E$  es la energía,  $F$  el campo eléctrico, y  $L$  es la longitud del escalón  $i$ . Es necesario incluir el término  $i - 1$ , porque para el primer escalón ( $i = 1$ ) el origen de energía permanece inalterado, y así la barrera en esta posición posee la misma altura ( $V_g$ ) que tenía en el caso  $F = 0$ .

Para construir la estructura de barrera triangular en el método de la función envolvente, el procedimiento es todavía más sencillo. Se utiliza también la aproximación de escalera, pero cada escalón no es más que un trozo de potencial constante, que tendrá la misma anchura que en la estructura real. El valor del poten-



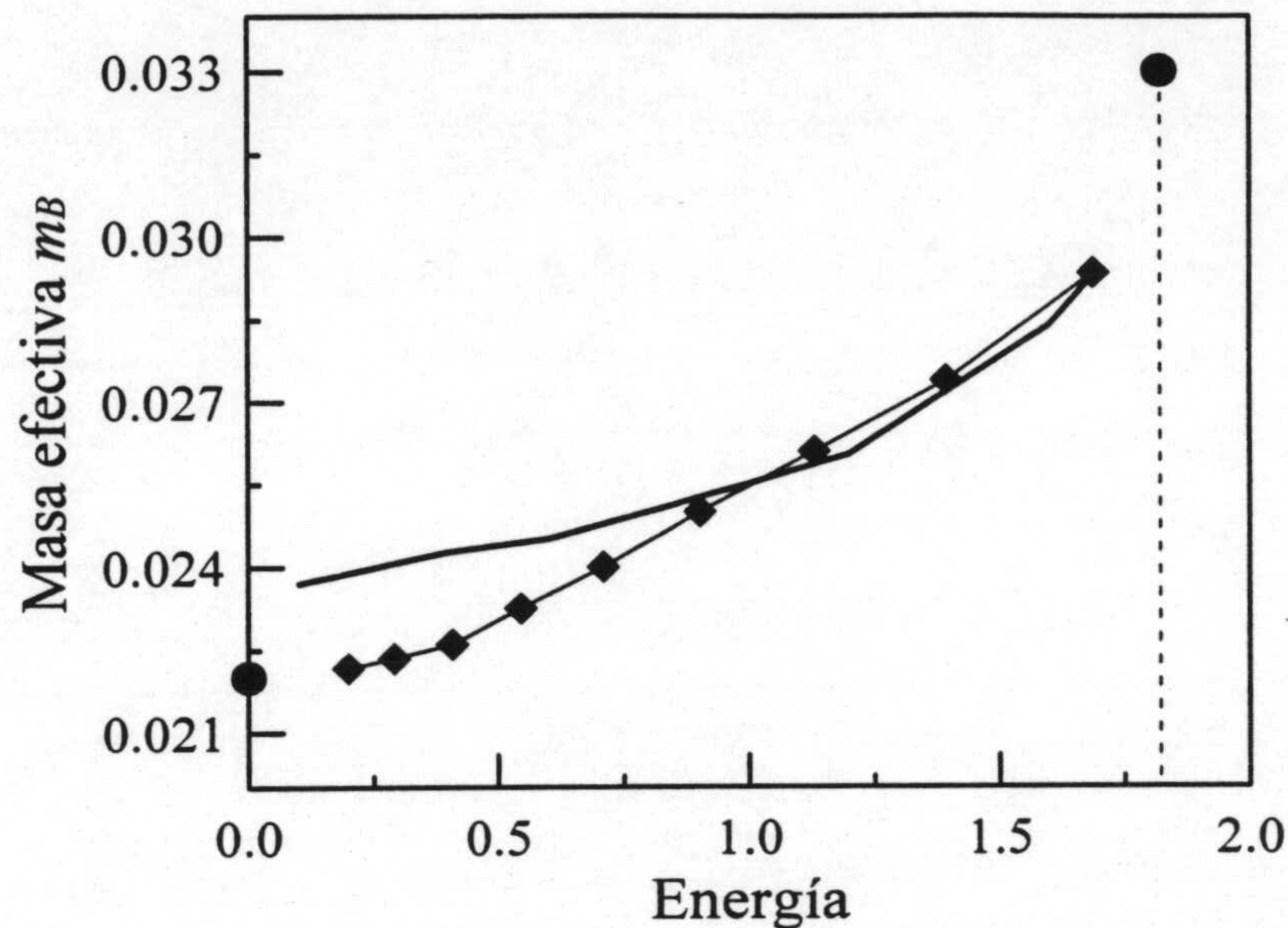
**Figura 6.8:** Esquema del perfil energético en forma de barrera triangular que resulta al construir la secuencia  $AB$ , y aplicar un campo eléctrico al material  $B$ .

cial de cada escalón decrece en el sentido del campo eléctrico aplicado. Además de estar caracterizado por su longitud, en este caso cada trozo también estará caracterizado por su masa efectiva.

### 6.6.1 Resultados

Los resultados obtenidos para  $m_B$  con la barrera triangular, correspondiente a aplicar un campo eléctrico, se presentan en la figura 6.9 con línea continua. Junto a ella, también representamos el valor obtenido para  $m_B$  utilizando la doble barrera, en el caso en que la anchura de la barrera es de 6 periodos (rombos). El rango energético estudiado es de nueve  $V_g$ . Con círculos, también representamos  $m_A^*$  y  $m_B^*$ .

El resultado más destacado es que se obtiene, igual que antes, es un incremento de la masa efectiva  $m_B$  con la energía. Sin embargo, y como se aprecia en la



**Figura 6.9:** La masa efectiva  $m_B$  (línea continua) obtenida para una barrera triangular en función de la energía. Junto a ella, representamos con rombos la masa  $m_B$  obtenida para la doble barrera, en el caso en el que la anchura de cada barrera es de 6 periodos. Con círculos, se representan  $m_A^*$  y  $m_B^*$ .

figura 6.9, la pendiente en este caso es menor que si  $F = 0$ . Este resultado es completamente razonable, porque en la barrera triangular siempre estamos en una energía cercana al borde de la banda de conducción del material  $B$  (Carpena, López-Villanueva & Gasparian, 1997d).

Es conveniente destacar la gran influencia que el material  $A$  tiene en  $m_B$ , la cual no siempre es tomada en cuenta. Un ejemplo actual lo constituye el caso de una barrera triangular (o trapezoidal), que presenta un alto interés tecnológico. Este interés es debido a que dicha barrera aparece en estructuras Metal-Oxido-Semiconductor, en las que hay que tener en cuenta que se observan tanto el túnel directo como el túnel de Fowler-Nordheim. La masa efectiva en el óxido se mide con frecuencia analizando resultados de túnel (Yoshida *et al.*, 1995; Brar *et al.*, 1996). En la mayoría de los estudios, la masa efectiva del electrón usada para el

$\text{SiO}_2$  (equivalente a nuestro material  $B$ ) en el método de la función envolvente es atribuida sólo a él mismo, sin tener en cuenta el otro(s) material(es). Sin embargo, nuestros resultados parecen indicar que la masa efectiva del material emisor, normalmente silicio, y equivalente al material  $A$  de nuestra barrera triangular, debe ser tomada en cuenta. Es más, debido a la gran altura de la barrera que se forma en la intercara entre el silicio y el  $\text{SiO}_2$ , es posible que el efecto del silicio sobre la masa efectiva, que no se tiene en cuenta normalmente, sea el dominante.

## Conclusiones

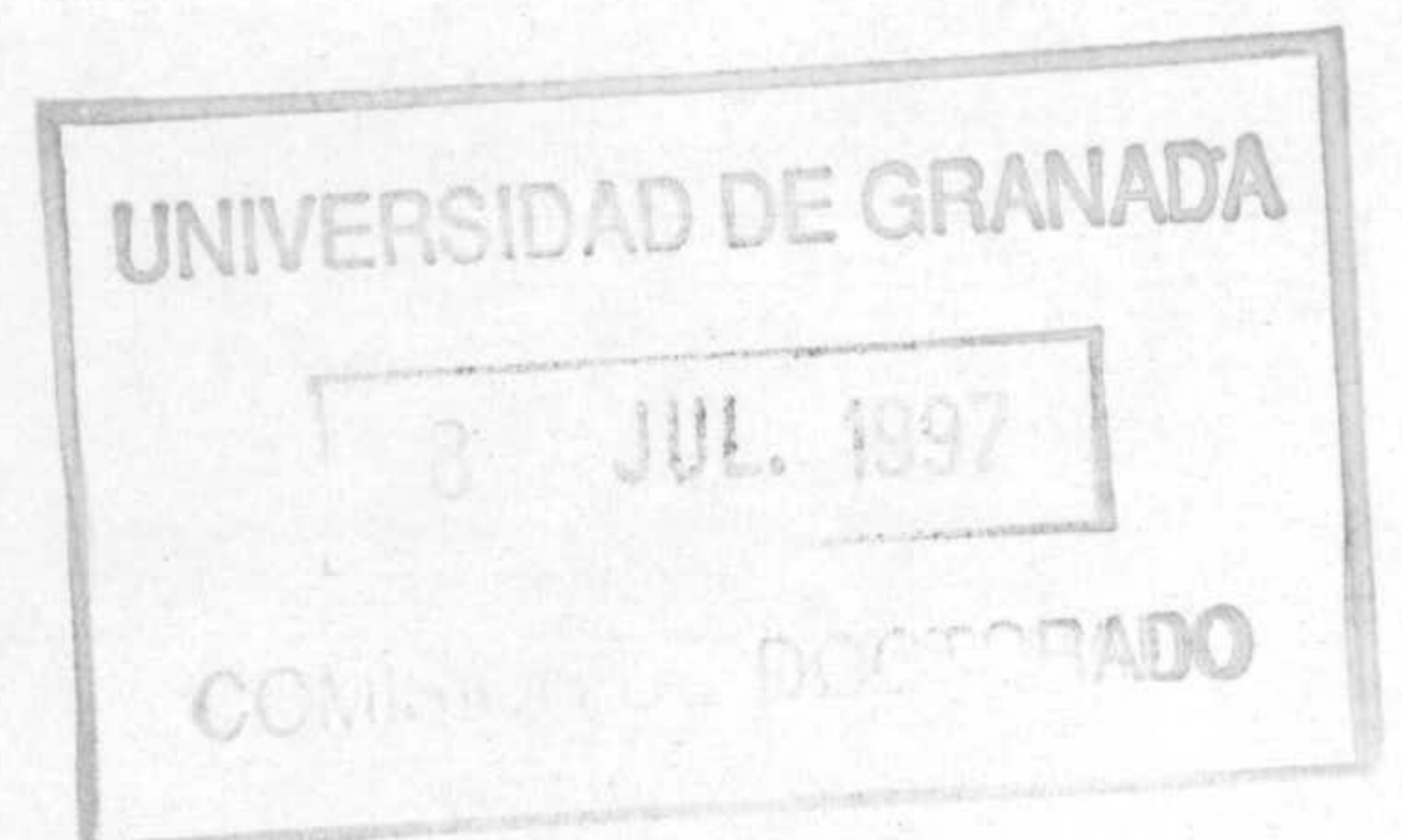
Las principales conclusiones que hemos obtenido en esta memoria son las siguientes:

- El número de estados ligados presentes en el espectro discreto de sistemas periódicos finitos está controlado por condiciones en las que intervienen la profundidad de los pozos cuánticos y la distancia entre ellos. Dichas condiciones han sido obtenidas analíticamente.
- El espectro energético de las secuencias cuasiperiódicas presenta estructura fractal. La dimensión fractal, que sirve para caracterizar el espectro, revela que el espectro de las secuencias de Fibonacci es más regular que el de las de Thue-Morse.
- La diferencia energética entre los dos bloques básicos usados para construir las secuencias cuasiperiódicas actúa como parámetro de desorden. Si la diferencia es pequeña, la estadística de niveles revela que los sistemas se comportan como si fueran débilmente desordenados. Si dicha diferencia es grande, el comportamiento es análogo al de sistemas fuertemente desordenados.
- Un campo eléctrico uniforme produce la aparición de cuasiestados y resonancias en el espectro. Las energías de estos estados depende del campo eléctrico aplicado, pero existe un campo crítico para el cual cuasiestados y resonancias desaparecen, y el espectro queda reducido a la parte continua del mismo.

- Los niveles energéticos en un campo eléctrico nunca son degenerados. Esto se manifiesta en una repulsión de niveles que evita dicha degeneración, y que puede producir una gran dependencia en el espectro de absorción de los sistemas como función del campo eléctrico aplicado.
- El campo eléctrico introduce orden en las secuencias cuasiperiódicas: hace que aparezca la escalera de Wannier-Stark, incrementa la dimensión fractal del espectro y produce una estadística de niveles de tipo Wigner, similar al desorden débil.
- El coeficiente de transmisión en secuencias cuasiperiódicas depende de la longitud de la secuencia en forma de ley de potencias. El exponente de dicha ley de potencias es menor en el caso de Fibonacci que en el de Thue-Morse. De ello se deduce que la estructura de gaps de éste último es más irregular.
- La densidad de estados y el coeficiente de transmisión se corresponden exactamente, lo que indica que, al no haber estados que contribuyan a la densidad de estados y no al coeficiente de transmisión, o bien no hay localización, o bien dicha localización es mayor que la longitud de los sistemas considerados, lo que la hace indetectable en este modelo.
- Los sistemas cuasiperiódicos modelados con pozos cuadrados presentan localización, pues su tamaño crece más lentamente que el sistema al aumentar el tamaño de éste. La localización es mayor en las secuencias de Fibonacci que en las de Thue-Morse.
- La localización inducida por el campo eléctrico, que es uniforme en el caso de sistemas periódicos, presenta una propiedad exótica en el caso cuasiperiódico. Existen valores del campo especiales que hacen que disminuya la localización electrónica, produciendo una localización anómala. En el caso de Fibonacci, estos valores especiales se comportan de forma autosimilar, con estructura invariante frente a cambios de escala. Esto hace que la localización en función

del campo pueda considerarse como un fractal. En el caso de Thue-Morse, sólo se detecta un valor del campo para el que se produce la deslocalización, lo que indica que, para esta propiedad, las secuencias de Thue-Morse son más similares a las periódicas que las de Fibonacci.

- Cuando se utiliza la aproximación de masa efectiva en el método de la función envolvente, no es válido considerar a la masa efectiva del material de barrera para energías situadas en el gap del mismo como una constante. Dicha masa, que está influenciada tanto por el material de barrera como por el de pozo, es una función que depende de la energía y del espesor que tenga la barrera. Dicha dependencia no se tiene en cuenta habitualmente.





## Referencias

- Handbook of Mathematical Functions* (1965), editado por M. Abramovitz y I. A. Stegun (Dover, New York).
- Akkermans, E. y G. Montanboux (1992), *Physical Review Letters* **68**, p. 642.
- Altshuler, B. y B. Shklovskii (1986), *Zh. Exsp. Teor. Fiz.* **91**, p. 220 (1980) (*Sov. Phys.-JETP* **64**, p.127).
- Anderson, P.W. (1958), *Physical Review* **109**, p. 1492.
- Anderson, P.W. (1969), *Journal of Physical Chemistry of Solids* **11**, p. 26.
- Anderson, P.W. (1978), *Reviews of Modern Physics.* **50**, p.191.
- Ando, T., S. Wakahara y H. Akera (1989), *Physical Review B* **40**, p. 11609.
- Ando, T., y H. Akera (1989), *Physical Review B* **40**, p. 11619.
- Aronov, A.G., V.M. Gasparian & U. Gummich (1991), *Jahreshelchte der PTB, 1990: wiss kurzberichte 1991.*
- Aronov, A.G., V.M. Gasparian y U. Gummich (1991), *Journal of Physics.: Condensed Matter* **3**, p. 3023.
- Ashcroft, N.V. y N.D. Mermin (1976), *Solid State Physics* (Holt-Saunders, London).
- Ashraff, J.A. y R.B. Stinchcombe (1988), *Physical Review B* **37**, p. 5723.

- Austin, E. J., y M. Jaros (1987), *Journal of Applied Physics* **62**, p. 15.
- Avishai, Y. y D. Berend (1990), *Physical Review B* **41**, p. 5492.
- Avishai, Y. y D. Berend (1992), *Physical Review B* **45**, p. 2717.
- Bak, P., y R. Bruinsma (1982), *Physical Review Letters* **49**, p. 249.
- Bastard, G., E. E. Méndez, L. L. Chang, y L. Esaki (1983), *Physical Review B* **28**, p. 3241.
- Bohigas, O., M.J. Giannoni y C. Schmit (1986), en *Quantum Chaos and Statistical Nuclear Physics*, ed. T.H. Seligman y H. Nishioka (Springer-Verlag, Berlín).
- Brar, B., G. D. Wilk y A. C. Seabaugh (1996), *Applied Physics Letters* **69**, p. 2728.
- Brody, T.A., J. Flores, J.B. French, P.A. Mello, A. Pandey y S.S.M. Wong (1981), *Reviews of Modern Physics*. **53**, p. 385.
- Brozak, G., E. A. de Andrada e Silva, L. J. Sham, F. DeRosa, P. Miceli, S. A. Schwarz, J. P. Harbison, L. T. Florez, y S. J. Allen (1990), *Physical Review Letters* **64**, p. 471.
- Carpena, P., V. Gasparian y M. Ortuño (1995), *Physical Review B* **51**, p. 12813.
- Carpena, P., V. Gasparian y M. Ortuño (1997a), *Zeitschrift fur Physik B: Condensed Matter* **102**, p. 425.
- Carpena, P. (1997b), aceptado en *Physics Letters A*.
- Carpena, P., V. Gasparian, y M. Ortuño (1997c), aceptado en *Physical Review B*.

- Carpena, P., J.A. López-Villanueva y V. Gasparian (1997d), enviado a *Journal of Physics: Condensed Matter*.
- Carpena, P., V. Gasparian, y M.Ortuño (1997e), en preparación.
- Casati, G., I. Guarnieri, F. Izrailev, S. Fishman y L. Molinari (1992), *Journal of Physics.: Condensed Matter* **4**, p. 149.
- Chakrabarti, S.N. Karmakar, y R.K. Moitra (1995), *Physical Review Letters* **74**, p. 1403.
- Chen Y., M.E.H. Ismail y K.A. Muttalib (1992), *Journal of Physics: Condensed Matter* **4**, p. 417.
- Chen Y., M.E.H. Ismail y K.A. Muttalib (1993), *Journal of Physics: Condensed Matter* **5**, p. 177.
- Cheon T. y T.D. Cohen (1989), *Physical Review Letters* **62**, p. 2769.
- Cota, E., J. V. José y G. Monsiváis (1987), *Physical Review B* **35**, p. 8929.
- Czycholl, G., B. Kramer y A.MacKinnon (1981), *Zeitschrift fur Physik B: Condensed Matter* **43**, p. 5.
- Dyson, F.J. (1962a), *Journal of Mathematical Physics* **3**, p. 140.
- Dyson, F.J. (1962b), *Journal of Mathematical Physics* **3**, p. 1199.
- Economou, E.N. (1983), *Green's Functions in Quantum Physics* (Springer-Verlag, Berlín).
- Economou, E.N., C.M. Soukoulis y A.D. Zdetsis (1984), *Physical Review B* **30**, p. 1686.
- Esaki, L., y R. Tsu (1970), *IBM Journal of Research Development* **14**, p. 61.

- Evangelou, S.N. (1989), *Physical Review B* **39**, p. 12895.
- Farchioni, R., G. Grosso y G. P. Parravicini (1992), *Physical Review B* **45**, p. 6383.
- Ferreira, R., y G. Bastard (1997), *Reports on Progress in Physics* **60**, p. 345..
- Fishman S., D.R. Grempel y R.E. Prange (1982), *Physical Review Letters* **49**, p. 509.
- Fujiwara, T., T. Mitsui, y Susumu Yamamoto (1996), *Physical Review B* **53**, p. 2910.
- Fyodorov, Y.V. y A.D. Mirlin (1993), *Physical Review Letters* **71**, p. 412.
- García-Moliner, F. y J. Rubio (1969), *Journal of Physics C: Solid State Physics* **2**, p. 1789.
- García-Moliner, F. y V. R. Velasco (1986), *Physica Scripta* **34**, p. 257.
- García-Moliner, F. y V. R. Velasco (1987), *Surface Science* **175**, p. 9.
- García-Moliner, F., y V. R. Velasco (1992), *Theory of Single and Multiple Interfaces* (World Scientific).
- Gasparian, V.M., B.L. Altshuler, A.G. Aronov y Z.A. Kasamanian (1988), *Physics Letters A* **132**, p. 201.
- Gasparian, V.M. (1989), *Soviet Physics: Solid State* **31**, p. 266.
- Gasparian, V., U. Gummich, E. Jódar, J. Ruiz y M. Ortuño (1997), *Physica B* **233**, p. 72.
- Ghosh, P.K. (1991), *Physics Letters A* **161**, p. 153.
- Glasser, M. L., W. Jaskólski, F. García-Moliner y V. R. Velasco (1990), *Physical Review B* **42**, p. 7630.

- Goda M. (1987), *Journal of the Physical Society of Japan* **56**, p. 1924.
- Gumbs, G. y M.K. Ali (1988), *Physical Review Letters* **60**, p. 1081.
- Gumbs, G., G.S. Dubey, A. Salman, B.S. Mahmoud, y D. Huang (1995), *Physical Review B* **52**, p. 210.
- Hattori, T., T. Noriaki, S. Kawato y H. Nakatsuka (1994), *Physical Review B* **50**, p. 4220.
- Haug, H., y S. W. Koch (1994), *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors*, (World Scientific, tercera edición).
- Hikami, S. (1986), *Progress in Theoretical Physics* **76**, p. 1210.
- Hiramoto, H. y M. Kohmoto (1992), *International Journal of Modern Physics B* **6**, p. 281.
- Hofsteter, E. y M. Schreiber (1993), *Physical Review B* **48**, p. 16979.
- International Mathematical and Statistical Libraries (IMSL)* (1983), Houston, Texas.
- James, H.M. (1949), *Physical Review* **76**, p. 1611.
- Kohmoto, M., C. Tang, y L.P. Kadanoff (1983), *Physical Review Letters* **50**, p. 1871.
- Kohmoto, M., B. Sutherland y C. Tang (1987), *Physical Review B* **35**, p. 1024.
- Kolar, M., M.K. Ali y F. Nori (1991), *Physical Review B* **43**, p. 1034.
- Kramer, B. y A. MacKinnon (1993), *Reports of Progress in Physics*. **56**, p. 1469.
- Kronig, R. de L. y W.G. Penney (1931), *Proceedings of the Royal Society of London Ser A* **130**, p. 499.

- Kumar, V. (1990), *Journal of Physics: Condensed Matter* **2**, p. 1349.
- Landau, L.D. y E.M. Lifshitz (1972), *Curso de Física teórica*, Volumen 3, (Ed. Reverté).
- Landauer, R. (1981), *Physics Letters A* **85**, p. 91.
- Laruelle, F., D. Paquet, M.C. Jonquier, B. Jusserand, J. Barrau, F. Mollot, y B. Etienne (1990), en *Localization and Confinement of Electrons in Semiconductors* (eds. F. Kuchar, H. Heinrich, y G. Bauer, Springer-Verlag, Berlín).
- Li, W. (1992), *International Journal of Bifurcation and Chaos* **2**, p. 137.
- López-Villanueva, J.A., I. Melchor, P. Cartujo y J. E. Carceller (1993), *Physical Review B* **48**, p. 1626.
- Lunz, U., M. Keim, G. Reuscher, F. Fischer, K. Schull, A. Waag y G. Landwehr (1996), *Journal of Applied Physics* **80**, p. 6329.
- MacKinnon, A. y B. Kramer (1981), *Physical Review Letters* **47**, p. 1546.
- Madelung, O. (1978), *Introduction to Solid State Theory* (Springer-Verlag, Berlín).
- Maleev, S. V. (1965), *Soviet Physics Solid State* **7**, p. 2990.
- Mandelbrot, B.B. (1982), *The fractal geometry of nature*, (W.H. Freeman, New York).
- Mehta, M.L. (1967), *Random matrices and the statistical theory of energy levels*, (Academic Press, Nueva York).
- Méndez, E.E., F. Agulló-Rueda, y J.M. Hong (1988), *Physical Review Letters* **60**, p. 2426.
- Méndez, E.E., y G. Bastard (1993), *Physics Today*, Número de Junio.

- Merlin, R., K. Bajema, R. Clarke, F.Y. Juang y P.K. Bhattacharya (1985), *Physical Review Letters* **55**, p.1768.
- Morifuji, M., M. Yamaguchi, K. Taniguchi, y C. Hamaguchi (1994), *Physical Review B* **50**, p. 8358.
- Mott, N.F. (1968), *Journal of Non-Crystalline Solids* **1**, p. 1.
- Mott, N.F. y W.D. Twose (1960), *Advanced Physics* **10**, p. 107.
- Muttalib, K.A., Y. Chen, M.E.H. Ismail y V.N. Nicopoulos (1993), *Physical Review Letters* **71**, p. 471.
- Nagasawa, H., K. Murayama, M. Morifuji, A. Di Carlo, P. Vogl, G. Böhm, G.Tränkle, G. Weimann, y C. Hamaguchi (1996), *Physica B* **227**, p. 206.
- Nenciu, G. (1990), *Reviews of Modern Physics* **63**, p. 91.
- Nicomiya, T. (1986), *Journal of the Physical Society of Japan* **55**, p. 3709.
- Niu Q., y F. Nori (1986), *Physical Review Letters* **57**, p. 2057.
- Ostlund, S., R. Pandit, D. Rand, H.J. Schellnhuber y E.D. Siggia (1983), *Physical Review Letters* **50**, p. 1873.
- Ostlund, S. y R. Pandit (1984), *Physical Review B* **29**, p. 1394.
- Pichard, J.L. y G. Sarma (1981), *Journal of Physics C* **14**, p. 127..
- Piéchon, F., M. Benakli, y A. Jagannathan (1995), *Physical Review Letters* **74**, p. 5248.
- Rikiund, R., M. Severin y Y. Liu (1987), *International Journal of Modern Physics B* **1**, p. 121.
- Rosenzweig, N., C. E. Porter (1960), *Physical Review* **120**, p. 1698.

- Rousseau, K. V., K.L. Wang y J. N. Schulman (1989), *Applied Physics Letters* **54**, p. 1341.
- Ruiz, J., M. Ortuño, E. Cuevas y V. Gasparian (1997), *Journal de Physique I France* **7**, p. 653.
- Ryu, C.S., G.Y. Oh y M.H. Lee (1993), *Physical Review B* **48**, p. 132.
- Sánchez, A, E. Maciá y F. Domínguez-Adame (1994), *Physical Review B* **49**, p. 147.
- Santaló, L.A. (1994), *La matemática: una filosofía y una técnica*. (Ed. Ariel, Barcelona).
- Shechtman, D., I. Blech, D. Gratias, y J.W. Cahn (1984), *Physical Review Letters* **53**, p. 1951.
- Sivan, U. y Y, Imry (1987), *Physical Review B* **35**, p. 6074.
- Smith, B.T., J. M. Boyle, J. J. Dongarra, B. S. Garbow, Y. Ikebe, V.C. Kleba y C.B. Moler (1976), *Matrix Eigensystems Routines, EISPACK guide*, segunda edición, *Lecture Notes in Computer Science* (Springer, New York).
- Soukoulis, C.M., I. Webman, G.S. Grest y E.N. Economou (1982), *Physical Review B* **26**, p. 1838.
- Stone, A.D., P.A. Mello, K.A. Muttalib y J.L. Pichard (1991), en *Mesoscopic Phenomena in Solids*; Eds. B.L. Altshuler, P.A. Lee y R.A. Webb (Elsevier Science Publishers).
- Thornton, T.J. (1994), *Reports on Progress in Physics* **57**, p. 311.
- Tong, P. (1996), *Physical Review B* **53**, p. 1795.
- Velický V. y I. Bartôs (1971), *Journal of Physics C: Solid State Physics* **4**, p. L104.



- Voisin, P., J. Bleuse, C. Bouche, S. Gaillard, C. Alibert, y A. Regreny (1988), *Physical Review Letters* **61**, p. 1639.
- Wannier, G.H. (1959), *Elements of Solid State Theory* (Cambridge University Press, Cambridge).
- Wegner, F. (1980), *Zeitschrift fur Physik B: Condensed Matter* **36**, p. 209.
- Wigner, E.P. (1952), *Annals of Mathematics* **55**, p. 7.
- Wigner, E.P. (1955), *Annals of Mathematics* **62**, p. 548.
- Wischmann, B. y E. Müller-Hartman (1990), *Zeitschrift fur Physik B: Condensed Matter* **79**, p. 91.
- Yamaguchi, M., M. Morifuji, H. Kubo, K. Taniguchi, C. Hamaguchi, C. Gmachl, y E. Gornik (1994), *Solid State Electronics* **37**, p. 839.
- Yoshida, T., D. Imafuku, J. L. Alay, S. Miyazaki y M. Hirose (1995), *Japan Journal of Applied Physics* **34**, p. L903.
- Zekri, N., M. Schreiber, R. Ouasti, R. Bouamrane y A. Brezini (1996), *Zeitschrift fur Physik B: Condensed Matter* **99**, p. 381.
- Zhong, J.X., J.R. Yan y J.Q. You (1991), *Journal of Physics: Condensed Matter* **3**, p. 6293.
- Zhu, J. X., Z. D. Wang y C. D. Gong (1996), *Journal of Applied Physics* **80**, p. 2291.
- Ziman, J.M. (1979), *Models of disorder*, (Cambridge University Press, London).
- Zimmermann, Th., H. Köppel, L.S. Cederbaum, G. Persch y W. Demtröder (1988), *Physical Review Letters* **61**, p. 3.