

CENTRO DE INVESTIGACION CIENTIFICA Y DE
EDUCACION SUPERIOR DE ENSENADA

DIVISION DE FISICA APLICADA

DEPARTAMENTO DE OPTICA

EFFECTOS NO LINEALES SOBRE LAS PROPIEDADES
DE LOCALIZACION EN SISTEMAS DE BAJA DIMENSIONALIDAD

TESIS

que para cubrir parcialmente los requisitos necesarios para
obtener el grado de MAESTRO EN CIENCIAS presenta:

JESUS ALBERTO MAYTORENA CORDOVA

Ensenada, Baja California. Noviembre de 1991.

RESUMEN de la Tesis de Jesús Alberto Maytorena Córdova presentada como requisito parcial para la obtención del grado de MAESTRO EN CIENCIAS en FÍSICA DE MATERIALES. Ensenada, Baja California, México. Noviembre 1991.

EFFECTOS NO LINEALES SOBRE LAS PROPIEDADES DE LOCALIZACIÓN EN SISTEMAS DE BAJA DIMENSIONALIDAD

Resumen aprobado por:

Se realizó un estudio numérico sobre las propiedades de localización de un sistema unidimensional desordenado y no lineal descrito por una ecuación de Schrödinger no lineal estacionaria. El potencial aleatorio considerado consiste en una cadena de funciones δ de Dirac, igualmente espaciadas, cada una de intensidad $\beta_n + \alpha|\psi(x)|^2$ en donde los valores β_n son tomados de una distribución uniforme de ancho Q , y α es el parámetro de no linealidad el cual puede ser positivo o negativo. Se estudió el problema de transmisión electrónica asociado en el cual nos interesaba conocer el coeficiente de transmisión T como función del tamaño L del sistema; específicamente, se investigó el comportamiento estadístico de la variable $\lambda = -\frac{1}{L} \log T$ por medio de la representación del mapeo de Poincaré de la ecuación de Schrödinger. Se encontró que la no linealidad conduce a una localización más débil que la localización exponencial característica de un medio lineal desordenado. Se observó que el efecto de las no linealidades presentes en el modelo es el de dar lugar a tres zonas de comportamiento diferente para $\alpha < 0$: 1) un régimen lineal para α o L suficientemente pequeños y para el cual los estados decaen en forma exponencial con L ; 2) un régimen de decaimiento polinomial $T \propto L^{-\gamma(\alpha)}$ para valores intermedios de L y donde $\gamma(\alpha)$ decrece monótonamente cuando α crece en valor absoluto; y 3) un régimen de localización fuerte de la forma $T \propto e^{-3L}$ para α o L grandes, para el que prácticamente no hay transmisión. Las fronteras entre estas regiones dependen de la no linealidad α . Se observa que la desviación estándar σ_λ de la variable λ sufre una transición drástica del comportamiento $\sigma_\lambda \propto L^{-1/2}$, propio del caso lineal, a uno del tipo $\sigma_\lambda \propto L^{-\nu(\alpha)}$ aún para α pequeñas. Para el caso $\alpha > 0$ resultó imposible distinguir algún régimen de localización. Estos resultados se comparan con otros existentes en la literatura, obtenidos en base a otros modelos.

CENTRO DE INVESTIGACION CIENTIFICA Y DE
EDUCACION SUPERIOR DE ENSENADA

DIVISION DE FISICA APLICADA

DEPARTAMENTO DE OPTICA

**EFFECTOS NO LINEALES SOBRE LAS PROPIEDADES
DE LOCALIZACION EN SISTEMAS DE BAJA DIMENSIONALIDAD**

TESIS

que para cubrir parcialmente los requisitos necesarios para
obtener el grado de **MAESTRO EN CIENCIAS** presenta:

JESUS ALBERTO MAYTORENA CORDOVA

Ensenada, Baja California. Noviembre de 1991.

AGRADECIMIENTOS

Al Dr. Ernesto Cota Araiza por su constante apoyo en la dirección de este trabajo.

A los investigadores del Instituto de Física , Laboratorio Enseñada, de la UNAM, por su apoyo en mis estudios de Maestría.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por la beca que me otorgó para realizar mis estudios.

A la memoria de mi Padre

A mi Madre y mis Hermanos

A Catalina

CONTENIDO

	<u>Página</u>
I INTRODUCCION	1
II ANTECEDENTES	4
II.1 CONSIDERACIONES GENERALES	4
II.1.1 Sistemas Desordenados	4
II.1.2 Conductividad Eléctrica	5
II.1.3 Localización de Anderson	7
II.1.4 No Linealidad y Desorden	10
II.2 CASO LINEAL DESORDENADO	11
II.3 CASO NO LINEAL SIN DESORDEN	13
II.3.1 La Ecuación de Schrödinger No Lineal	13
II.3.2 El Problema de Transmisión	15
III CASO NO LINEAL DESORDENADO	19
III.1 EL PROBLEMA DE TRANSMISION	19
III.2 EL METODO DEL MAPEO DE POINCARE	20
III.3 CALCULOS NUMERICOS	21
IV RESULTADOS	24
V DISCUSION	32
VI CONCLUSIONES	39
BIBLIOGRAFIA	41
APENDICE	43



LISTA DE FIGURAS

<u>Figura</u>	<u>Página</u>
1 (a) Intensidad transmitida $ t ^2$ vs. intensidad incidente $ r_0 ^2$ que ilustra la multiestabilidad; (b) diagrama k vs. $ t ^2$ que muestra las regiones permitidas (zonas sombreadas) y prohibidas (zonas claras) para la transmisión de la ecuación de Schrödinger (4) considerada por Delyon et al. (1986).	18
2 (a) Transmisión no lineal definida por las ecuaciones (7); (b) en $x = n$, $\psi_n(x = n^+) = \psi_{n-1}(x = n^-)$; (c) distribución rectangular cuyo ancho Q mide el grado de desorden en el sistema.	23
3 (a) Localización exponencial $T \propto e^{-\lambda L}$, la pendiente de la recta es $\simeq 0.011$, por lo tanto $\xi = 39$; (b) gráfica de $\log \sigma_\lambda$ vs. $\log L$, la pendiente de la recta es $\simeq 0.5$, esto implica $\sigma_\lambda \propto L^{-1/2}$; (c) distribución de la variable $x = -\log T / < -\log T >$ para $N = 200$ y $L = 2000$ (véase Capítulo V).	26
4 Gráfica de $< -\log T >$ vs. $\log L$ para distintos valores negativos de α . El régimen lineal se observa para L y α pequeños.	27
5 Localización polinomial. (a) Gráfica de $< -\log T >$ vs. $\log L$ para distintos valores del parámetro α que muestra la desviación del régimen lineal; (b) la pendiente γ como función de α .	28
6 Gráfica de $-\log \sigma_\lambda$ vs. $\log L$ para distintos valores de α . Se observa un cambio hacia un régimen en el que $\sigma_\lambda \propto L^{-\nu(\alpha)}$ para L grande y donde $\nu(\alpha) \simeq 0.8$ cuando L o α son grandes.	29

LISTA DE FIGURAS (Continuación)

- 7 (a) Efecto de α sobre la distribución de $z = -\log T$, y (b) desviación del comportamiento gaussiano para $L = 2000$. Las curvas punteadas indican la distribución gaussiana con la cual se realiza la prueba de χ^2 , (véase Capítulo V). 30
- 8 Gráfica de $\langle \log(-\log T) \rangle$ vs. L para $\alpha = +10^{-10}$. El comportamiento rectilíneo indica que $T \propto e^{-3^L}$. 31

CAPITULO I

INTRODUCCION

Debido al desarrollo de técnicas avanzadas en la ciencia de materiales, tales como el crecimiento epitaxial de películas delgadas, y de la tecnología de fabricación de dispositivos microscópicos a escala nanométrica (nanolitografía), existe un gran interés en estudiar las propiedades de transmisión electrónica de las llamadas estructuras de baja dimensionalidad, las cuales tienen la característica de que la propagación sucede esencialmente en una sola dirección. En estas estructuras los efectos cuánticos de la materia son cruciales para su funcionamiento (Capasso y Datta, 1990) y ofrecen nuevas posibilidades para la microelectrónica. Estos sistemas son dispositivos grandes a escala atómica, pero suficientemente pequeños como para que la función de onda electrónica mantenga su coherencia a lo largo de la estructura entera (*mesoscópicos*). Muchas de las propiedades y fenómenos nuevos observados en ellos se deben a la presencia de desorden y de no linealidades existentes en el medio. En muchos sistemas las interacciones existentes conducen a términos no lineales en las ecuaciones. Estos pueden surgir por ejemplo al considerar interacción electrón-fonón la cual conduce a la formación de polarones, o bien al tomar en cuenta la interacción electrón-electrón o electrón-hoyo que surge en varios modelos. La no linealidad provoca que se pierda la relación uno-uno entre las intensidades de entrada y de salida en un problema de transmisión electrónica, conduciendo así al fenómeno de multiestabilidad. Por otra parte, el desorden en sistemas electrónicos conduce a localizar los estados extendidos provocando un decaimiento exponencial en el coeficiente de transmisión como función del tamaño del sistema. Este cambio en la naturaleza de los estados es la base de las transiciones metal-aislante.

En el presente trabajo se estudia la acción conjunta de desorden y no linealidad sobre las propiedades de localización de un modelo unidimensional que consiste en una cadena de potenciales δ de Dirac igualmente espaciadas descrita por la ecuación de Schrödinger no lineal:

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + \sum_{n=0}^N (\beta_n + \alpha |\psi(x)|^2) \delta(x - na)\right] \psi(x) = E \psi(x), \quad (1)$$

donde a es la separación entre potenciales y $L = Na$ es la longitud del sistema. Los valores β_n varían en forma aleatoria de acuerdo a una distribución uniforme de ancho Q y el parámetro $\alpha \neq 0$ para x en el intervalo $(0, L)$. Así, Q es una medida del desorden en el sistema y α representa la no linealidad del medio. La función $\psi(x)$ es la amplitud de onda electrónica que pasa a través de este sistema, y E es la energía del electrón incidente en el medio. Se investiga numéricamente el coeficiente de transmisión T como función de L , por medio del método del mapeo de Poincaré de la ecuación (1).

Aunque existe una gran cantidad de trabajos teóricos y experimentales sobre el fenómeno de localización de ondas y sobre los efectos de la no linealidad de un medio en la propagación de éstas, hay pocos estudios que tomen en cuenta tanto el desorden como el carácter no lineal de un sistema. Nuestro trabajo se sitúa en esta dirección y tiene como antecedente solamente al estudio de Devillard y Souillard (1986). Estos autores consideraron la ecuación de Schrödinger con un término cúbico de la forma $\alpha |\psi(x)|^2 \psi(x)$ y demostraron matemáticamente que el coeficiente de transmisión no puede tender a cero más rápido que L^{-2} para $L \rightarrow \infty$, y numéricamente que $T \propto L^{-1}$ para L o α grandes. En el presente trabajo tendremos oportunidad de comparar éstos resultados con los nuestros.

Una parte importante en la realización de este trabajo fue la revisión de la bibliografía acerca del tema. En el siguiente Capítulo se presentan algunos antecedentes sobre desorden y no linealidad. La sección II.1 contiene consideraciones generales sobre los sistemas desordenados, la conductividad eléctrica, el fenómeno de localización de Anderson y no linealidad. En la sección II.2 se describe el trabajo de Andereck

y Abrahams (1980), en el que se verifica numéricamente la localización en un medio unidimensional predicha por Anderson (1958) y por Mott y Twose (1961). En la sección II.3 se resumen los trabajos de algunos autores en los cuales se estudia la transmisión a través de medios periódicos (i. e. sin desorden) no lineales descritos por una ecuación de Schrödinger con un término cúbico como el mencionado anteriormente. El Capítulo III presenta el problema de transmisión asociado a la ecuación (1) y en el cual se toman en cuenta algunas consideraciones y resultados mencionados en las secciones II.2 y II.3. Se muestra también el método usado para calcular el coeficiente T y se describe la forma de efectuar los cálculos numéricos. En el Capítulo IV están los resultados y en el V su discusión. El capítulo VI contiene las conclusiones. Se incluye también un Apéndice en el que se obtiene el mapeo de Poincaré para la ecuación (1).

CAPITULO II

ANTECEDENTES

II.1 CONSIDERACIONES GENERALES

II.1.1 Sistemas Desordenados

Una parte importante de la física del estado sólido es el estudio de los sólidos cristalinos en los que existe un arreglo ordenado de átomos tal que si se conoce el comportamiento de una celdilla unitaria es posible determinar el de todo el material. Tomando en cuenta esta periodicidad, llamada simetría de traslación, que indica la estructura cristalina del sólido, y las interacciones entre los átomos, se ha podido explicar muchas de las propiedades observadas de los cristales.

Un cristal real tiene imperfecciones que rompen la periodicidad de la estructura debido a las condiciones del medio en que se forman. Se entiende por desorden el conjunto de estos defectos que rompe la simetría traslacional. Así, en el estudio de un sistema desordenado sucede que ya no pueden usarse los métodos físicos y matemáticos comunes en el estudio de cristales que están basados en dicha periodicidad. Sólo en algunos casos es posible estudiar las propiedades de estos materiales apoyándose en los modelos del cristal ideal. Mientras en éstos se habla de orden a largo alcance, en los materiales desordenados sólo se puede hablar en ocasiones de orden a corto alcance. En una primera aproximación, el desorden puede clasificarse en dos grandes grupos: 1) desorden sustitucional, en donde es posible definir todavía una red cristalina, pero no se sabe qué tipo de átomo se encontrará en cada lugar;

y 2) desorden topológico, que es el de los materiales amorfos, en donde no hay nada parecido a una red cristalina.

El estudio de los sistemas desordenados puede ser dividido en tres áreas: la descripción de las estructuras desordenadas, el estudio de los procesos de relajación asociados con tales estructuras y el tratamiento cuántico de sistemas electrónicos en la presencia de desorden. Las investigaciones en esta última área están directamente ligadas al problema general de propagación de ondas en medios desordenados y han permitido un mayor entendimiento de las propiedades de transporte electrónico tales como la conductividad eléctrica.

II.1.2 Conductividad Eléctrica

Cualquier material puede ser caracterizado como un metal o un aislante de acuerdo a lo siguiente: si al extrapolar a una temperatura absoluta igual a cero ($T = 0^\circ K$) la conductividad (σ) permanece finita, entonces es un metal, y si la conductividad se anula, entonces es un aislante.

La conductividad a temperatura cero de un metal puede explicarse en términos de la dispersión de los electrones de conducción. Los electrones forman un mar de Fermi de ondas planas moduladas por la periodicidad de la red cristalina (ondas de Bloch). De acuerdo a la estadística de Fermi-Dirac, sólo los que están próximos a la energía de Fermi, en un intervalo del orden de $k_B T$, contribuirán a la conductividad (k_B es la constante de Boltzmann y T la temperatura absoluta). A temperatura ambiente estos electrones son dispersados por las vibraciones de la red (fonones), ésto provoca que pierdan velocidad y dan lugar a una resistividad $\rho(T)$ ($= \frac{1}{\sigma(T)}$) distinta de cero (σ disminuye). A bajas temperaturas, la interacción electrón-electrón es el mecanismo de dispersión dominante. Como hemos dicho, en el caso límite de temperatura cero hay una resistividad residual (conductividad finita) ρ_0 debida a la dispersión de los electrones en la energía de Fermi por imperfecciones de la red tales como impurezas y vacancias. Así, la conductividad es convencionalmente descrita

por la ecuación

$$\sigma(T) = \sigma_0 - AT^n. \quad (2)$$

La potencia n es 2 para dispersión electrón-electrón y es generalmente mayor (3–5) si otro tipo de proceso, como la interacción electrón-fonón, es el que domina. Esta descripción se basa en el modelo del electrón libre según el cual los electrones de las capas más externas de los átomos que forman el cristal están débilmente ligados, y así, bajo la acción de un campo eléctrico, pueden vagar más o menos libremente, de modo que, los estados con la energía de Fermi son descritos por funciones de onda de una partícula en un potencial externo. Para poder hablar de electrones individuales (en un estado bien definido) es necesario ignorar la interacción de Coulomb entre electrones. Esto no modifica sustancialmente el modelo: las excitaciones de baja energía (cuasipartículas) de un sistema de Fermi de electrones que interactúan están en correspondencia uno-a-uno con aquéllas de un sistema donde no hay interacción.

Las investigaciones teóricas de los últimos años, junto con algunos experimentos relacionados, han mostrado que casi toda la descripción mencionada anteriormente acerca de la conductividad de los metales es errónea en el límite de bajas temperaturas (Al'tshuler y Aronov, 1985). La potencia n en la ecuación (2) es $\frac{1}{2}$ en lugar de 2 y el signo del coeficiente A es a menudo negativo de modo que la conductividad puede aumentar al subir la temperatura. Para metales ordinarios estos efectos se hacen observables únicamente a temperaturas extremadamente bajas; sin embargo, conforme el desorden crece, estas consideraciones son las que dominan.

Estas investigaciones permiten un mejor entendimiento del proceso mediante el cual un metal es transformado en un aislante al cambiar un parámetro del material tal como la concentración de dopantes en un metal semiconductor (transición metal-aislante). Por ejemplo, si se agrega germanio (Ge) a una muestra de oro, la resistividad residual ρ_0 crece hasta que domina sobre la contribución de la dispersión por fonones aún a temperatura ambiente. Para tal material las correcciones mencionadas anteriormente, que son pequeñas para metales ordinarios, se convierten en el aspecto dominante de la resistividad $\rho(T)$. Cuando la concentración de Ge alcanza

un cierto valor (82%, la aleación es Ge_xAu_{1-x} con $x = 0.82$) la conductividad a $T = 0$ desaparece. Para mayores concentraciones de Ge la resistividad se hace mayor al bajar la temperatura y la aleación se convierte en un aislante. Como la transición ocurre a $T = 0$ en función de un parámetro que describe la cantidad de desorden (x en este caso) el problema reside en un conocimiento del estado base del sistema electrónico desordenado.

Los recientes avances se han basado en una mejor comprensión de dos aspectos del problema: los efectos de la interacción electrón-electrón y el fenómeno de la localización de Anderson en un medio desordenado. Nos referiremos sobre todo, por lo que aquí nos interesa, a este último.

II.1.3. Localización de Anderson

Considérese un modelo de electrones que no interaccionan entre sí dispersados por un potencial aleatorio debido al desorden. ¿Cuál es la naturaleza de los eigenestados de una sola partícula moviéndose en tal potencial aleatorio? Este es el problema de la localización de Anderson.

La idea es introducir desorden en una red periódica y analizar la función de onda electrónica. Pensemos por simplicidad, en un potencial dispersor como el modelo de Kronig-Penney. El desorden puede ser introducido ya sea cambiando arbitrariamente la distancia entre los pozos de potencial y por tanto cambiando también el traslape entre las funciones de onda, o bien, cambiando la profundidad de los pozos de acuerdo a cierta distribución. Este último caso corresponde al modelo de Anderson: se tiene un potencial aleatorio porque en cada punto en el espacio el potencial puede tomar un rango de valores y sólo la probabilidad de los distintos valores es especificado. Si el desorden es débil, la función de onda es extendida, esto es, es como una onda plana excepto que, como la onda ha sufrido múltiples dispersiones, su fase se hace aleatoria en una escala de longitud definida como el camino libre medio (es decir, éste se define como la distancia sobre la cual la fase de la función de onda se desvía de aquella que correspondería a una onda plana). Anderson (1958) señaló que debería

esperarse un cambio en la naturaleza de la función de onda conforme la distribución del potencial se hace más grande (un mayor ancho de la distribución corresponde a un desorden mayor). En el límite de desorden muy grande la función de onda está localizada, esto es, la envolvente de la función de onda decae exponencialmente desde un centro dispersor. Los estados cuyas amplitudes decaen en forma exponencial desde un sitio son llamados *estados localizados*. La longitud de decaimiento es la longitud de localización y puede llegar a ser mucho mayor que el camino libre medio. Físicamente se espera que un estado se vuelva localizado cuando el camino libre medio se haga comparable con la longitud de onda.

La cuestión central en el problema de localización es: ¿cómo es que los estados localizados evolucionan desde estados extendidos conforme el desorden aumenta? La idea básica, intuitiva, es que cuando el potencial tiene una distribución ancha, existe una probabilidad significativa de que existan pozos de potencial profundos en los cuales pueda quedar atrapado un electrón; éstos son los estados localizados. Cuando la función de onda con la energía de Fermi se vuelve localizada, tenemos un aislante. Si el desorden es gradualmente reducido, la longitud de localización aumenta y eventualmente tendremos un estado extendido, entonces una transición aislante-metal ocurre. Poco después del trabajo de Anderson, Mott y Twose (1961) sugirieron que en sistemas unidimensionales todos los estados están localizados sin importar la cantidad de desorden. Este resultado está ahora bien establecido, probado en forma rigurosa (Kimball, 1981) R. Landauer (1970) había predicho que la resistencia crece exponencialmente con el tamaño L del sistema. Este crecimiento está relacionado con el decaimiento exponencial del coeficiente de transmisión T (Anderson et. al. 1980; Andereck y Abrahams, 1980; Sak y Kramer, 1981) que expresa al fenómeno de localización:

$$T \propto e^{-L/\xi} \quad (3)$$

donde ξ es un parámetro independiente de L llamado *longitud de localización*. La conexión entre resistencia (más precisamente, entre la conductancia G) y el coeficiente de transmisión puede establecerse por medio de la teoría de respuesta lineal

(*fórmula de Kubo*). Ya Landauer (1970) había obtenido esta relación de otra forma, indicando con ello que la conducción en sólidos podía ser pensada como un problema de dispersión y no solamente en términos de propiedades de eigenestados y su respuesta a condiciones de frontera.

Entre las distintas teorías de localización, la llamada teoría de escalamiento ha permitido un mayor entendimiento de muchos aspectos del problema. En ella se utilizan ideas de escalamiento análogas a las de la teoría de fenómenos críticos. En una serie de trabajos (Abrahams et al., 1979; Anderson et al., 1980) se formuló una teoría donde se demuestra que las propiedades de escalamiento de la conductancia adimensional $g = G/(e^2/h)$ (e es la carga del electrón y h la constante de Planck) al variar las dimensiones del sistema (longitud, en un sistema unidimensional) son las que determinan si los estados están localizados o no. En particular, teniendo en cuenta que la conductancia y el coeficiente de transmisión están relacionados por la fórmula de Landauer ($g = T/1 - T$), resulta importante conocer expresiones como la ecuación (3) que indican la forma como depende la transmisión con el tamaño del sistema, ya que el coeficiente T puede ser obtenido con relativa facilidad en sistemas unidimensionales desordenados (véase por ejemplo Andereck y Abrahams, 1980). La teoría de escalamiento es difícil en sus detalles y no se estudia en esta tesis. Como ya se mencionó en la introducción, en este trabajo se investiga la forma en que la no linealidad de un medio desordenado puede afectar la localización exponencial característica del caso lineal. Esto puede constituir un primer paso hacia el estudio de aquella teoría y la forma como es afectada por la presencia de no linealidades.

B. Andereck y E. Abrahams (1980), enfatizando el cuidado estadístico que debe tenerse al tratar con desorden, realizaron un estudio numérico en el que demuestran que variables como T o G no son físicamente significativas ya que sus distribuciones divergen al aumentar la longitud L y las desviaciones siempre exceden al valor promedio. En cambio, la cantidad estadística apropiada es la magnitud $\lambda = -(\frac{1}{L}) \log T$, como había sido sugerido por Anderson et al. (1980).

En la sección II.2 se muestra el problema de transmisión en un medio desorde-

nado lineal, siguiendo el enfoque numérico realizado por Andereck y Abrahams, en el que se muestra el decaimiento exponencial y el comportamiento estadístico de λ . Se presenta el trabajo de estos autores ya que para el problema que en esta tesis se discute (véase capítulo III) se procede de manera análoga.

I.1.4. No Linealidad y Desorden

Hasta ahora sólo se ha comentado acerca del desorden y de su importancia en el estudio de los sistemas electrónicos en los sólidos. Similarmente, existe otro factor que surge en muchas disciplinas y cuya consideración, inevitable muchas veces, resulta primordial en el estudio de muchos sistemas físicos: la no linealidad. Esta representa una situación muy común, ya el estudio del péndulo simple nos pone ante un problema de carácter no lineal. Los llamados fenómenos no lineales involucran aquellos conjuntos de variables tales que un cambio en una variable de “entrada” no produce un cambio proporcional en el comportamiento de la variable de “salida”; en otras palabras la razón “entrada/salida” (o “acción/reacción”) no es constante.

En diversas circunstancias el desorden y no linealidad coexisten y sus efectos separados pueden acoplarse o anularse mutuamente. Distinguir los efectos que surgen debido al desorden de aquéllos que se deben a la no linealidad de los materiales resulta ser muy importante en la interpretación de experimentos. Las no linealidades pueden surgir, por ejemplo, de acoplamientos entre electrones y fonones y pueden producir estados electrónicos localizados correspondientes a polarones.

Recientemente, diversos autores (Chen y Mills, 1987; Hawrylak y Grabowsky, 1989) han analizado la propagación de ondas a través de superredes hechas de materiales no lineales, y ponen de manifiesto los efectos de la no linealidad y la periodicidad espacial sobre la transmisión. En la sección II.3 se presentan algunos modelos utilizados.

Por otra parte se sabe que, en ausencia de desorden, algunos sistemas no lineales muestran excitaciones en forma de paquete de ondas localizados (*solitones*) que se propagan sin cambio en su forma o velocidad. Kivshar et al. (1990) estudiaron la

propagación de un solitón a través de un medio desordenado unidimensional. Los efectos conjuntos de no linealidad y desorden determinan las propiedades de localización del sistema: si la no linealidad es suficientemente fuerte no hay efectos de localización y el paquete puede propagarse sin distorsión.

El problema de dispersión por un medio no lineal es a priori mucho más difícil que para un medio lineal: el principio de superposición ya no es válido, y todas las técnicas usadas en problemas lineales parecen fallar completamente. Debido a que la relación entrada-salida ya no es uno-a-uno, es necesario precisar el problema de transmisión. Esto se comentará con más detalle en la sección II.3 en donde se presenta el trabajo de Delyon et al. acerca de las características de un problema de transmisión no lineal.

Hemos mencionado que desorden en una cadena lineal generalmente origina un decaimiento exponencial del coeficiente de transmisión T , es decir que, los estados están exponencialmente localizados. ¿Cómo se modifica este comportamiento cuando está presente la no linealidad?

Nuestro propósito, en el presente trabajo, es investigar los efectos combinados de desorden y no linealidad sobre las propiedades de localización en un sistema unidimensional descrito por la ecuación de Schrödinger (1).

II.2. CASO LINEAL DESORDENADO

El sistema unidimensional desordenado considerado por Anderson et al. (1980) consiste de una serie de barreras de potencial de altura aleatoria igualmente espaciadas. Puede pensarse en forma equivalente que el sistema está hecho de barreras con coeficientes de transmisión T y reflexión R aleatorios. Con ayuda de la relación entre la conductancia G y el coeficiente T encontrada por Landauer en un modelo similar, $G = \frac{e^2}{h} \frac{T}{R}$ (e es la carga del electrón y h la constante de Planck), estos autores establecieron que el promedio de la resistencia tomado sobre un ensemble de sistemas

desordenados dá como resultado

$$\langle \frac{1}{G} \rangle \propto e^{2\lambda L} - 1,$$

donde λ es un parámetro independiente de L . Por otra parte, al promediar G se encontró que $\langle \frac{1}{G} \rangle \neq \frac{1}{\langle G \rangle}$, lo cual indica que la resistencia promedio y la conductancia promedio no son cantidades físicamente representativas del ensemble. Mediante argumentos de escalamiento determinaron una cantidad con las propiedades requeridas en su teoría y además con sentido estadístico. Tal cantidad es:

$$\lambda = \frac{1}{L} \log(1 + \frac{1}{g}) = -\frac{1}{L} \log T,$$

donde $g = G/(\frac{e^2}{h}) = T/R$ es la conductancia sin dimensiones. Argumentaron que la distribución de λ obedece el teorema de límite central para L grande.

Andereck y Abraham (1980) realizaron un estudio numérico basado en estas ideas, verificando que las cantidades tales como la resistencia o la conductancia, que varían exponencialmente con L , tienen distribuciones divergentes al aumentar L , lo que hace que pierdan sentido físico. Comprobaron también la naturaleza gaussiana de la distribución de λ , (véase la figura 3c).

El sistema considerado por estos autores fué el de una cadena de funciones δ de Dirac, de intensidad β y separación a , descrito por la ecuación de Schrödinger

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \sum_{n=1}^L \beta_n \delta(x - na) \right] \psi(x) = E \psi(x),$$

donde las β_n son tomadas de una distribución uniforme de ancho Q , de tal manera que Q es el parámetro de desorden, y donde E es la energía.

El coeficiente T fué calculado mediante el método de la matriz de transferencia M . Si la función de onda incidente sobre la izquierda es $\psi_i(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$ y la función de onda transmitida a la derecha es $\psi_t = C \exp(ikx) + D \exp(-ikx)$, la matriz M (2×2) relaciona los coeficientes A , B , C y D en la forma $\psi_t = M(k, L) \psi_i$, de modo que el efecto del potencial queda descrito completamente

por M . Esta matriz tiene un conjunto de propiedades generales para una amplia clase de potenciales (los de tipo δ entre ellos), y es posible demostrar que el coeficiente de transmisión puede obtenerse de ella por medio de la expresión $T = 1/|M_{11}|^2$, donde M_{11} es el primer elemento del primer renglón y de la primera columna de M (Erdős y Herndon, 1982).

Específicamente se generó en una computadora un ensemble de cadenas con potenciales aleatorios, con un desorden Q fijo, para diferentes valores de L . El número de elementos en la colección fué el suficiente para obtener una estadística confiable. T fué calculado para cada cadena y se tomó un promedio sobre el ensemble. Los promedios de la resistencia y la conductancia no resultaron útiles pues las desviaciones estándar de sus distribuciones fueron siempre mayores que sus valores medios. Por otra parte, λ probó ser la cantidad estadísticamente aceptable, la desviación estándar σ_λ de la distribución de λ fué consistentemente menor que el promedio $\langle \lambda \rangle$. Para energía E y desorden Q dados, $\langle \lambda \rangle$ es independiente de L , indicando que no hay dependencia de L en el coeficiente de la exponencial que describe el comportamiento del coeficiente de transmisión (ecuación (3)). La desviación $\sigma_\lambda \propto L^{-1/2}$ para L suficientemente grande, como se espera de una distribución gaussiana, (véase figura 3b).

II.3. CASO NO LINEAL SIN DESORDEN

II.3.1. La Ecuación de Schrödinger No Lineal

La sección anterior se enfocaba sobre los efectos del desorden en un sistema lineal unidimensional. Ahora se comentará sobre algunos aspectos generales de la transmisión en sistemas periódicos (i.e. sin desorden) representados por la ecuación de Schrödinger con un término no lineal.

Ecuaciones como (1) con un término de la forma $\alpha|\psi(x)|^2$ aparecen frecuentemente en muchos modelos teóricos (por ejemplo, Cohen et al., 1983; Abrikosov et

al.,1989) de la física de materia condensada; se les denomina, genéricamente, como ecuaciones de Schrödinger no lineal, si bien es cierto este nombre se reserva propiamente para la ecuación

$$iu_t + u_{xx} + 2|u|^2 = 0$$

donde $u_{xx} = \partial^2 u / \partial x^2$ y $u_t = \partial u / \partial t$ la cual ha sido objeto de mucho estudio ya que muestra solitones como soluciones (Hasegawa,1990). Por ejemplo, ya en el formalismo de Hartree, el potencial efectivo debido a un potencial de dos cuerpos de la forma $V(x-y) = \alpha\delta(x-y)$ conduce a un término en la ecuación de eigenvalores de la mencionada forma $\alpha|\psi(x)|^2$, (Calogero y Degasperis, 1975). Términos como éste surgen también, por ejemplo, en el modelo del cristal molecular de Holstein (Turkevich y Holstein, 1987) y en teorías adiabáticas que involucran interacción electrón-fonón de corto alcance en sistemas unidimensionales (Cohen et al,1983).

Chen y Mills (1987) analizaron teóricamente la propagación de radiación electromagnética a través de superredes, normal a las interfaces. Dado que la constante dieléctrica varía en forma escalonada al recorrerse la estructura, aparecen bandas prohibidas, de manera similar a como ocurre en la teoría de propagación en estructuras periódicas. Si una superred es iluminada con radiación dentro de una banda prohibida (*brecha*), la envolvente de la amplitud del campo decae exponencialmente con la profundidad dentro de la estructura, y así la transmitividad de ésta es exponencialmente pequeña. Estos autores estudiaron la posibilidad de transmisión de la radiación en la banda prohibida en una superred finita hecha de pares de capas en cada celda unitaria; una tiene constante dieléctrica $\varepsilon_1^{(0)}$ independiente del campo, y la otra $\varepsilon_2 = \varepsilon_2^{(0)}[1 + \alpha|E(z)|^2]$, donde $|E(z)|$ es la amplitud del campo en un punto sobre el eje z normal a las interfaces. En las capas no lineales el campo eléctrico obedece, precisamente, la ec. $[\frac{d^2}{dz^2} + k_2^2(1 + \alpha|E(z)|^2)]E = 0$ con $k_2^2 = \omega\varepsilon_2^{(0)}/c^2$, c es la velocidad de la luz y ω la frecuencia de la onda electromagnética. En particular, un término cuadrático como $\alpha|E_0|^2$ mide el cambio fraccional en la constante dieléctrica de la superred no lineal cuando el campo en ésta tiene una magnitud E_0 igual a la del campo eléctrico incidente. Encontraron que cuando el sistema es iluminado

con radiación de frecuencia en una brecha, un incremento suficiente en la potencia incidente $\alpha|E_0|^2$ puede llevar el sistema de un estado con baja transmitividad a un estado con transmitividad igual a 1. Este efecto se debe al carácter no lineal del problema.

Por otra parte, Hawrylak y Grabowsky (1989), analizaron un modelo de superred parecido al de Chen y Mills; donde la ecuación de onda estacionaria que describe la propagación de la radiación es

$$\frac{d^2 E}{dz^2} + k^2 E = -\alpha k^2 E |E|^2 \sum_{n=1}^N \delta(z - na), \quad k^2 = \frac{\varepsilon^{(0)} \omega^2}{c^2};$$

y enfatizaron la importancia de la periodicidad espacial y la no linealidad en la producción de biestabilidad óptica (Delyon et. al., 1986), la cual se definirá más adelante.

Efectos novedosos debidos al comportamiento no lineal de superredes han sido investigados en diversos contextos, por ejemplo, en el estudio de magnones en ferromagnetos (Almeida y Mills, 1987), y de solitones en conductores cuasiunidimensionales (Benedek et al., 1983).

II.3.2. El Problema de Transmisión

En la situación representada por la ecuación (1) está presente, además del desorden y la no linealidad (Q y α), una periodicidad espacial subyacente (por el término $\delta(x - n)$). Ignoremos el desorden y estaremos ante la situación descrita por varios autores (por ejemplo, Hawrylak et al., 1989) acerca del importante papel que juega la combinación entre la no linealidad y dicha periodicidad en el problema de transmisión en un medio no lineal, sobre el cual comentaremos aquí algunas de sus características generales, lo cual será importante para plantear el problema de transmisión asociado a la mencionada ec. (1) en forma correcta.

Consideremos un medio $0 \leq x \leq L$ de longitud L en un régimen estacionario. Una onda plana $r_0 e^{ikx}$ incide sobre la izquierda ($x \leq 0$). Se producen entonces, una

onda transmitida te^{ikx} a la derecha ($x \geq L$) y una reflejada r_1e^{-ikx} ($x \leq 0$). Si el medio es no lineal, la intensidad transmitida es una función no lineal de la intensidad incidente, es decir, el coeficiente de transmisión $|t|^2$ como función de $|r_0|^2$ no es una constante. Sucede entonces que para un valor dado de la intensidad incidente puede haber varios de $|r_1|$ y de $|t|$; esto se conoce como biestabilidad.

Este comportamiento es descrito normalmente en términos de perturbaciones a la teoría lineal (Winful et al., 1979). Delyon et al. (1986) describen un nuevo mecanismo que conduce a comportamiento biestable. La razón de éste se debe a la presencia de una modulación periódica espacial en adición a la no linealidad. Trabajando en la aproximación de amarre fuerte, consideraron la ec. de Schrödinger no lineal estacionaria discreta:

$$-\psi_{n+1} - \psi_{n-1} + \alpha|\psi_n|^2\psi_n = E\psi_n \quad (4),$$

donde n es entero, $\alpha > 0$ cuando $0 \leq n \leq L$ y $\alpha = 0$ para $n < 0$ y $n > L$; y el problema de transmisión:

$$\begin{aligned} \psi_n &= r_0e^{ikn} + r_1e^{-ikn}, \quad n \leq 0 \\ \psi_n &= te^{ikn}, \quad n \geq L \end{aligned} \quad (5)$$

con $E = -2\cos(k)$; aquí la modulación periódica se debe a la discretización del medio. La ec. (4) es una aproximación para la amplitud de probabilidad de un electrón en una red deformable (*polarón*).

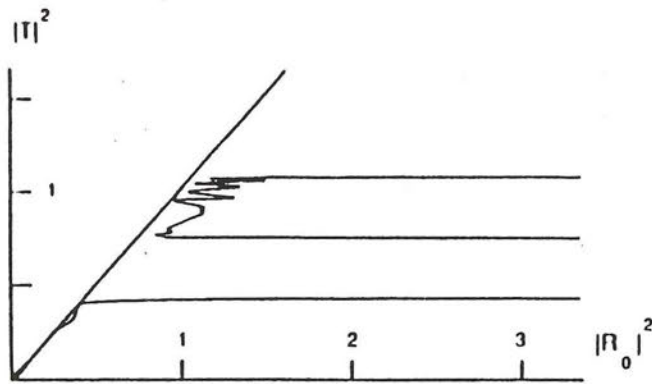
Para un valor dado de k se puede resolver (5) paso por paso desde $n = L$ hasta $n = 0$ para una salida dada te^{ikn} y encontrar r_0 y r_1 . Sus resultados se condensan en la figura 1. En la figura 1a se puede observar la manifestación de la biestabilidad. Notamos que para un valor dado de $|t|^2$ hay uno y sólo un valor de $|r_0|^2$, la solución al problema (5) es única; mientras que para $|r_0|^2$ fijo pueden corresponder varios valores de la salida $|t|^2$ (*multiestabilidad*). Si r_0 resulta del mismo orden que t entonces el punto $(k, |t|^2)$ sobre el diagrama de transmisión (figura 1b) se encuentra en una región de transmisión permitida (zona sombreada), es decir, la función de onda (con

número de onda k y energía transmitida $|t|^2$) permanece acotada y contribuye a la transmisión; mientras que las zonas prohibidas (en blanco) corresponden a funciones de onda divergentes que no contribuyen a la transmisión (de acuerdo a estos autores r_0 diverge como e^{3L}). Demuestran que la frontera que separa estas zonas tiene una estructura fractal. Explican este diagrama observando que la ecuación (4) implica una relación de recurrencia de la forma $(\psi_{n-1}, \psi_n) = F(\psi_n, \psi_{n+1})$ donde F es un mapeo no lineal. Analizando el sistema dinámico inducido por éste encuentran que la zona sombreada (figura 1b) corresponde a órbitas acotadas de modo que r_0 oscila al aumentar L y así permanece del mismo orden que T , mientras que las zonas claras corresponden a órbitas caóticas y r_0 diverge en la forma mencionada. Las líneas rectas de la figura 1a se ven horizontales debido, precisamente, a que r_0 diverge rápidamente con L . Debe pues, tenerse cuidado pues no es lo mismo el problema con entrada fija que con salida dada.

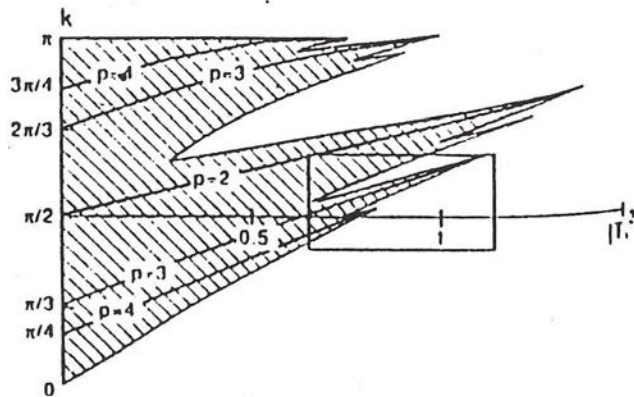
Se han citado aquí, brevemente, en este capítulo varios ejemplos para mostrar algunos modelos concretos de sistemas descritos por una ecuación de Schrödinger no lineal y los efectos que la no linealidad puede causar sobre la propagación a través de tales sistemas.

En nuestro modelo problema (1) están implicados desorden y no linealidad con una periodicidad espacial subyacente, de modo que podemos distinguir tres casos: 1) $\alpha = 0$, $Q \neq 0$, que nos relaciona con el fenómeno de localización debido al desorden en el sistema; 2) $\alpha \neq 0$, $Q = 0$, situación que, debido a la no linealidad, induce multiestabilidad y por lo cual debe tomarse cuidado al definir el problema de transmisión; y 3) $\alpha \neq 0$, $Q \neq 0$, en el que nos interesa saber el efecto combinado de estos dos factores sobre las propiedades de localización, específicamente, verificar si $T \rightarrow 0$ cuando $L \rightarrow \infty$ y determinar la forma como tiende a cero en función de L .

En las secciones III.2 y III.3 se describen el método utilizado para investigar el caso 3 y los cálculos numéricos correspondientes.



(a)



(b)

Figura 1. (a) Intensidad transmitida $|t|^2$ vs. intensidad incidente $|r_0|^2$ que ilustra la multiestabilidad; (b) diagrama k vs. $|t|^2$ que muestra las regiones permitidas (zonas sombreadas) y prohibidas (zonas claras) para la transmisión de la ec. de Schrödinger discreta (4) considerada por Delyon et al. (1986).

CAPITULO III

CASO NO LINEAL DESORDENADO

III.1. El Problema de Transmisión.

Este trabajo de tesis se refiere al estudio del transporte electrónico en un medio no lineal y con desorden. El problema consiste en determinar el coeficiente de transmisión T como función de la longitud L de una cadena unidimensional con un potencial aleatorio constituido por una serie de potenciales δ igualmente espaciadas, de acuerdo a la ecuación de Schrödinger no lineal (1), que aquí repetimos por conveniencia:

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + \sum_{n=0}^N (\beta_n + \alpha|\psi(x)|^2)\delta(x - na)\right]\psi(x) = E\psi(x) \quad (6)$$

donde tomamos la constante de red $a = 1$ ($L = N$); el parámetro α , al que llamaremos “la no linealidad” del sistema puede ser positivo o negativo para $0 \leq n \leq L$ y es cero fuera de ese intervalo. El medio es desordenado ya que los valores β_n varían aleatoriamente de acuerdo a una distribución rectangular de ancho Q : $P(\beta_n) = 1/Q$ si $|\beta_n| \leq Q/2$ y $P(\beta_n) = 0$ para otros valores. Si Q crece, el rango de valores (cada uno igualmente probable) que cada β_n puede tomar es mayor, y así la cadena es más desordenada; por el contrario, al disminuir Q los distintos valores de $|\beta_n|$ se aproximan entre sí y nos aproximamos al caso periódico; así pues Q es el parámetro que mide la cantidad de desorden en el sistema.

Nuestro problema de transmisión asociado a la ecuación (6) (véase figura 2) es

el siguiente

$$\begin{aligned}\psi(x) &= r_0 e^{-ik(x-L)} + r_1 e^{ik(x-L)}, \quad x \geq L \\ \psi(x) &= t e^{-ikx}, \quad x \leq 0.\end{aligned}\tag{7}$$

donde $k = \sqrt{E}$ y E es la energía de la onda plana incidente. Las amplitudes r_1 y t dependen de k y L ; para energía E (o k) fija deseamos calcular el coeficiente de transmisión $T = \frac{|t|^2}{|r_0|^2}$. La idea es fijar la energía E , el desorden Q y calcular T como función de L para distintos valores de α .

III.2. El Método del Mapeo de Poincaré.

Hasta aquí el enfoque de la transmisión es similar a aquel presentado por Andereck y Abrahams (1980), y aunque seguiremos trabajando en forma análoga a ellos, el método para calcular T en función de L es diferente. Es difícil sacar ventaja del método de la matriz de transferencia ya que resulta muy complicada su aplicación dado el carácter no lineal del problema. En su lugar, y con ello el estudio numérico se simplifica, usamos la representación del mapeo de Poincaré (Bellisard et al., 1982) de la ecuación (6). Esta consiste en una relación de recurrencia entre las amplitudes de la función de onda en diferentes sitios del sistema $x = n, n = 0, 1, 2, \dots, N = L$.

Entre los sitios $x = n$ y $x = n + 1$ tenemos (véase fig. 2):

$$\psi_n(x) = A_n e^{ikx} + B_n e^{-ikx}, \quad n \leq x \leq n + 1,\tag{8}$$

y junto con las condiciones de frontera

$$\begin{aligned}\lim_{\epsilon \rightarrow 0} [\psi_n(n + \epsilon) - \psi_{n-1}(n - \epsilon)] &= 0 \\ \lim_{\epsilon \rightarrow 0} [\psi'_n(n + \epsilon) - \psi'_{n-1}(n - \epsilon)] &= (\beta_n + \alpha |\psi_n|^2) \psi_n(n);\end{aligned}\tag{9}$$

es posible obtener la ecuación buscada

$$\psi_{n+1} = \left[2 \cos k + \frac{\sin k}{k} (\beta_n + \alpha |\psi_n|^2) \right] \psi_n - \psi_{n-1},\tag{10}$$

donde ψ_n representa la amplitud en el sitio $x = n$. Por conveniencia, hacemos la deducción de esta ecuación para nuestro problema (ecuación (6)) en el Apéndice.

De acuerdo a como se señaló en II.3.2, para tener un problema unívocamente definido debemos fijar $|t|^2$ y calcular la correspondiente entrada r_0 (si es que existe, pues podría diverger). Tomamos como condiciones iniciales $\psi_0 = t$ y $\psi_{-1} = te^{ik}$, y se obtiene (ver Apéndice)

$$r_0 = e^{3ik} \left(\frac{\psi_{L+1} - e^{-ik}\psi_{L+2}}{e^{2ik} - 1} \right),$$

y de aquí podemos escribir inmediatamente la expresión que se utiliza en los cálculos numéricos:

$$T = \frac{|t|^2 |e^{2ik} - 1|^2}{|\psi_{L+1} - e^{-ik}\psi_{L+2}|^2}. \quad (11)$$

La representación (10) de la ecuación (6) resulta útil numéricamente ya que permite tratar con sistemas largos, la limitación proviene sólo del tiempo invertido por la computadora en el cálculo.

Antes de continuar con la descripción del procedimiento computacional debemos llamar la atención sobre el hecho de que realmente el factor de no linealidad importante es el producto $\alpha|t|^2$: variar $|t|^2$ dejando α fija es lo mismo que variar α manteniendo $|t|^2$ fijo. Aquí por simplicidad fijamos $|t|^2 = 1$, y se varía el parámetro α .

En nuestro caso, a diferencia de lo señalado en la sección II.3 acerca del trabajo de Delyon et al., los cuales trabajaron en la aproximación de amarre fuerte, es posible analizar más de una banda.

III.3. Cálculos Numéricos.

De acuerdo a (11), con $|t|^2 = 1$, para obtener T debe calcularse primero las amplitudes en los sitios $x = L + 1$ y $x = L + 2$, ψ_{L+1} y ψ_{L+2} respectivamente. Esto se logra con la relación de recurrencia (10) a partir de las condiciones iniciales señaladas ψ_0 y ψ_{-1} .

Por lo señalado en la sección II.2 referente al trabajo de Andereck y Abrahams debe ponerse cuidado al tratar numéricamente con el desorden: al menos en el caso lineal, la magnitud física significativa que prueba ser la correcta estadísticamente es $\lambda = -\frac{1}{L} \log T$. Aquí se estudia ésta misma cantidad aleatoria a fin de observar el efecto de la no linealidad sobre el desorden.

Para valores dados de la energía E , desorden Q y no linealidad α , se genera un ensemble de sistemas de longitud L dada; la configuración de potenciales en cada cadena se obtiene con la ayuda de un generador de números aleatorios, y para cada una de ellas se calcula $-\log T$. Se toma el promedio sobre el ensemble y su desviación estándar $\sigma_{-\log T}$. A continuación se varía el valor de L , y se repite el procedimiento tantas veces como tan largo sea el intervalo considerado de longitudes, obteniendo así, finalmente, un conjunto de puntos $(L, \langle -\log T \rangle)$ para valores dados de E , α y Q . Por último, se repite todo el algoritmo para distintos valores de α .

Con estos datos calculados se construyen las figuras que se presentan en el Capítulo IV. Hasta aquí únicamente se ha descrito la forma de hacer los cálculos; los números precisos de los distintos parámetros, del tamaño del ensemble, de intervalos de longitud y de los datos calculados se presentan y discuten en los siguientes capítulos.

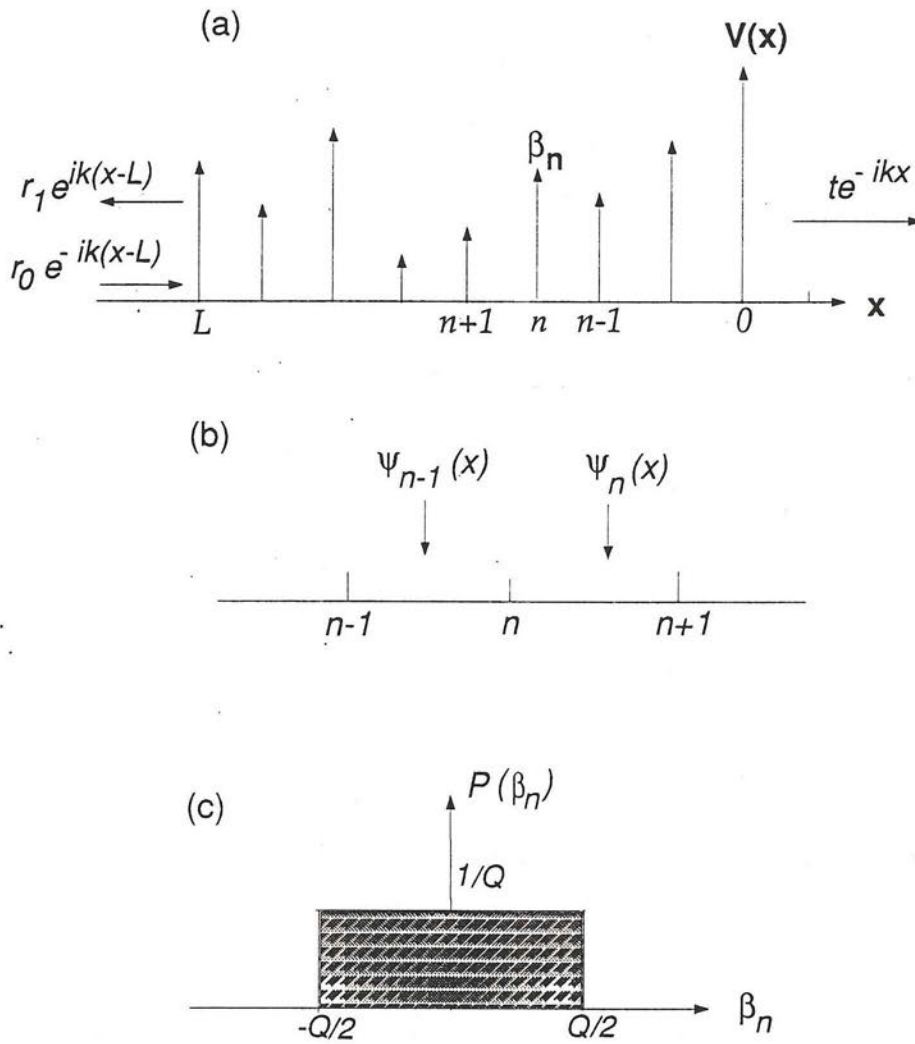


Figura 2. (a) Transmisión no lineal definida por las ecuaciones (7); (b) en $x = n$, $\psi_n(x = n^+) = \psi_{n-1}(x = n^-)$; (c) distribución rectangular cuyo ancho Q mide el grado de desorden en el sistema.

CAPITULO IV

RESULTADOS

En todo el trabajo se considera $E = 5$ y $Q = \sqrt{12}$; estos valores se tomaron así para propósito de comparación con resultados publicados (Soukoulis et al., 1983; Cota et al., 1985). El número N de miembros del ensemble sobre el cual se tomaron los promedios fué siempre igual a 200. Más adelante, se discutirá acerca de este tamaño para el ensemble y sobre las incertidumbres asociadas a las distintas magnitudes calculadas.

Primeramente, para comprobar el algoritmo de cálculo se consideró el caso lineal $\alpha = 0$. En la figura 3a se observa la localización exponencial: el promedio de la variable $z \equiv -\log T$ varía linealmente con la longitud. La figura 3b muestra la relación entre la desviación estándar σ_z de la variable z y la longitud L verificándose el comportamiento $\sigma_z \propto L^{-1/2}$. En la figura 3c se observa que la variable $x \equiv z / < z >$ sigue una distribución gaussiana como corresponde a una variable que cumple con el teorema del límite central. En el siguiente Capítulo se hará un comentario mas detallado de estas figuras.

En la figura 4 se grafica $< z >$ como función de L para distintos valores de $\alpha < 0$, en la cual se observa claramente la desviación del comportamiento lineal, que es el efecto de la no linealidad. La localización deja de ser exponencial dependiendo de los valores de α y L . Posteriormente se consideraron valores más grandes de L para observar la desviación del régimen lineal. En la figura 5a se grafica $< z >$ contra $\log L$ también para distintos valores negativos de α . En esta figura se tomaron en cuenta los valores de L y de α para los cuales no existen divergencias en la amplitud

de entrada r_0 , como ya se explicó en la sección III.2 . Se observa que existe un intervalo finito de longitudes (que depende de α) para las cuales z varía linealmente con L , lo que corresponde a un decaimiento polinomial del coeficiente de transmisión, mas allá del cual las amplitudes calculadas divergen. En la figura 5b se ve que conforme α crece (en valor absoluto) la pendiente (γ) de la recta sobre los puntos de la figura 5a disminuye. Las rectas fueron obtenidas por medio del método de mínimos cuadrados. Esto contrasta con el resultado reportado por Devillard y Souillard acerca del comportamiento de ley de potencias $T \propto L^{-1}$, es decir, que γ debería ser igual a 1. La incertidumbre en esta gráfica se discutirá más adelante.

En la figura 6 se encuentra la relación entre la desviación estándar σ_λ de la variable $\lambda = -\frac{1}{L} \log T$ ($z = \lambda L$) con L , para distintos valores negativos de α . Se observa la desviación del comportamiento $\propto L^{-1/2}$ característico del caso lineal, hacia una dependencia más general del tipo $T \propto L^{-\nu(\alpha)}$. Este cambio es pequeño para L y α pequeñas, pero es drástico para L grandes aún con valores de α pequeños. Esta transición se ilustra en la figura 7a en la que se observa el efecto de la no linealidad sobre la distribución de z . En la figura 7b se muestra cómo los histogramas dejan de ajustarse a una curva gaussiana, de acuerdo al criterio de la prueba de χ^2 .

El caso $\alpha > 0$ resultó ser difícil de analizar. Para valores pequeños de α y L se identifica una zona de decaimiento exponencial, pero al crecer estos valores hay un cambio abrupto y las magnitudes calculadas divergen siendo imposible analizar el efecto de las no linealidades en algún intervalo intermedio de longitudes antes de que tales divergencias ocurran. En la figura 8 se grafica $\langle \log(-\log T) \rangle$ vs. L y se hace evidente un comportamiento divergente del tipo e^{3L} de la amplitud de entrada.

$$\alpha = 0 \quad Q = \sqrt{12} \quad E = 5$$

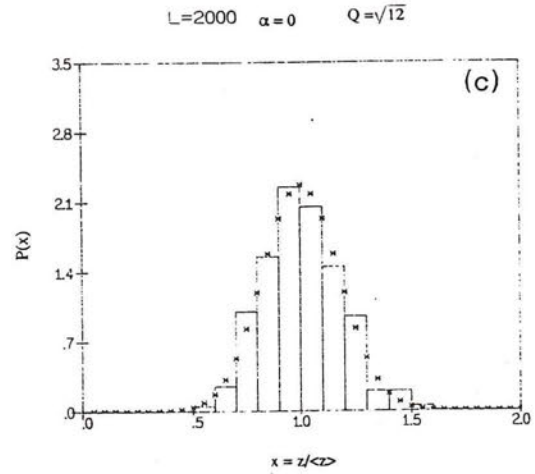
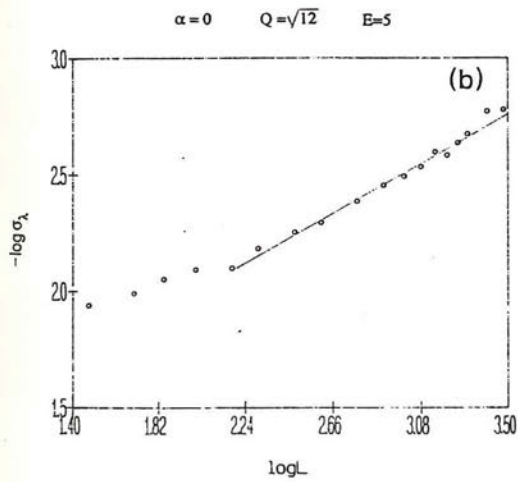
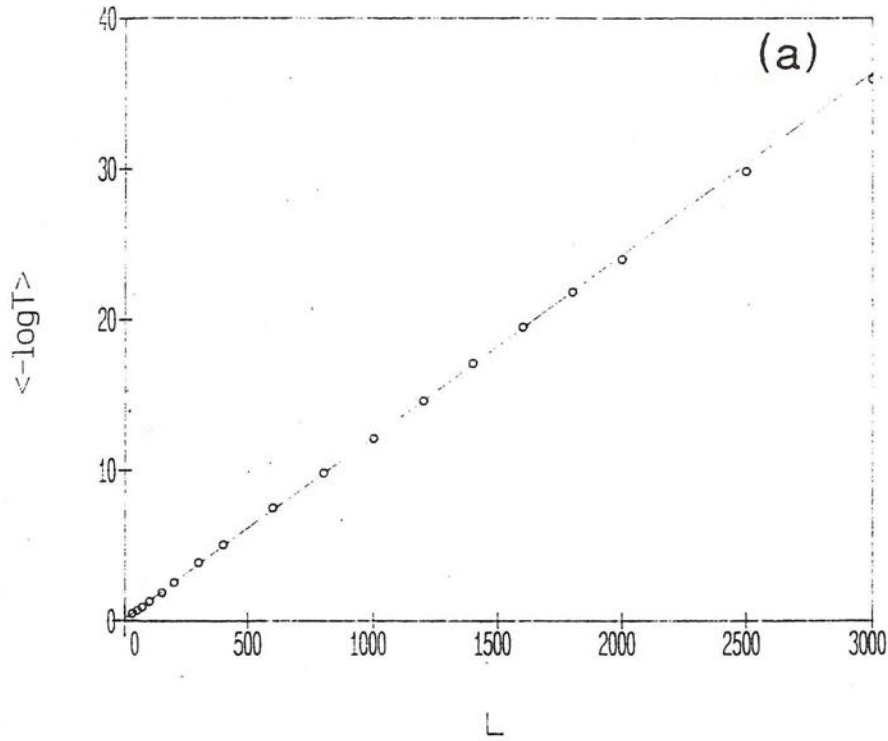


Figura 3. (a) Localización exponencial $T \propto e^{-\lambda L}$, la pendiente de la recta es $\simeq .011$ por lo tanto $\xi = 39$; (b) gráfica de $\log \sigma_\lambda$ vs. $\log L$, la pendiente de la recta es $\simeq 0.5$ esto implica $\sigma_\lambda \propto L^{-1/2}$; (c) distribución de la variable $x = -\log T / \langle -\log T \rangle$ para $N = 200$ y $L = 2000$ (véase Capítulo V).

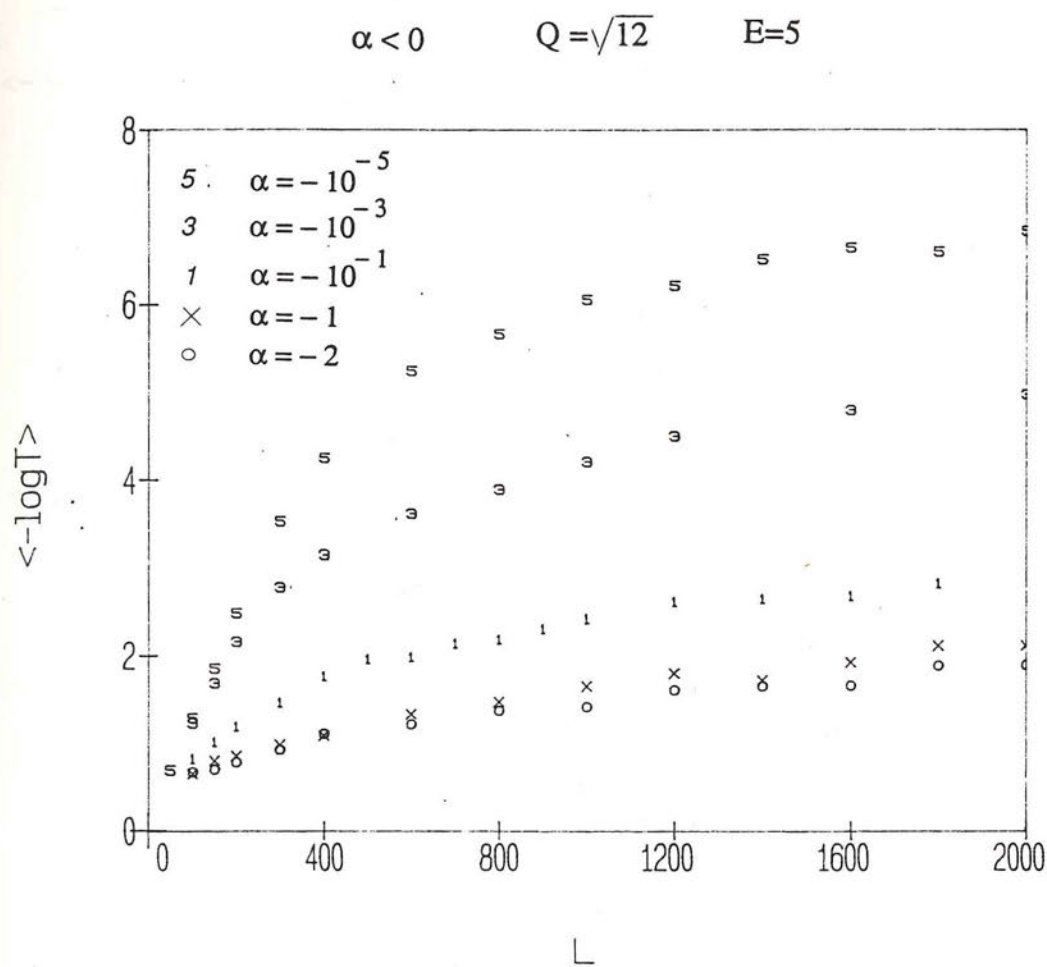


Figura 4. Gráfica de $\langle -\log T \rangle$ vs. L , para distintos valores negativos de α . El régimen lineal se observa para L o α pequeños.

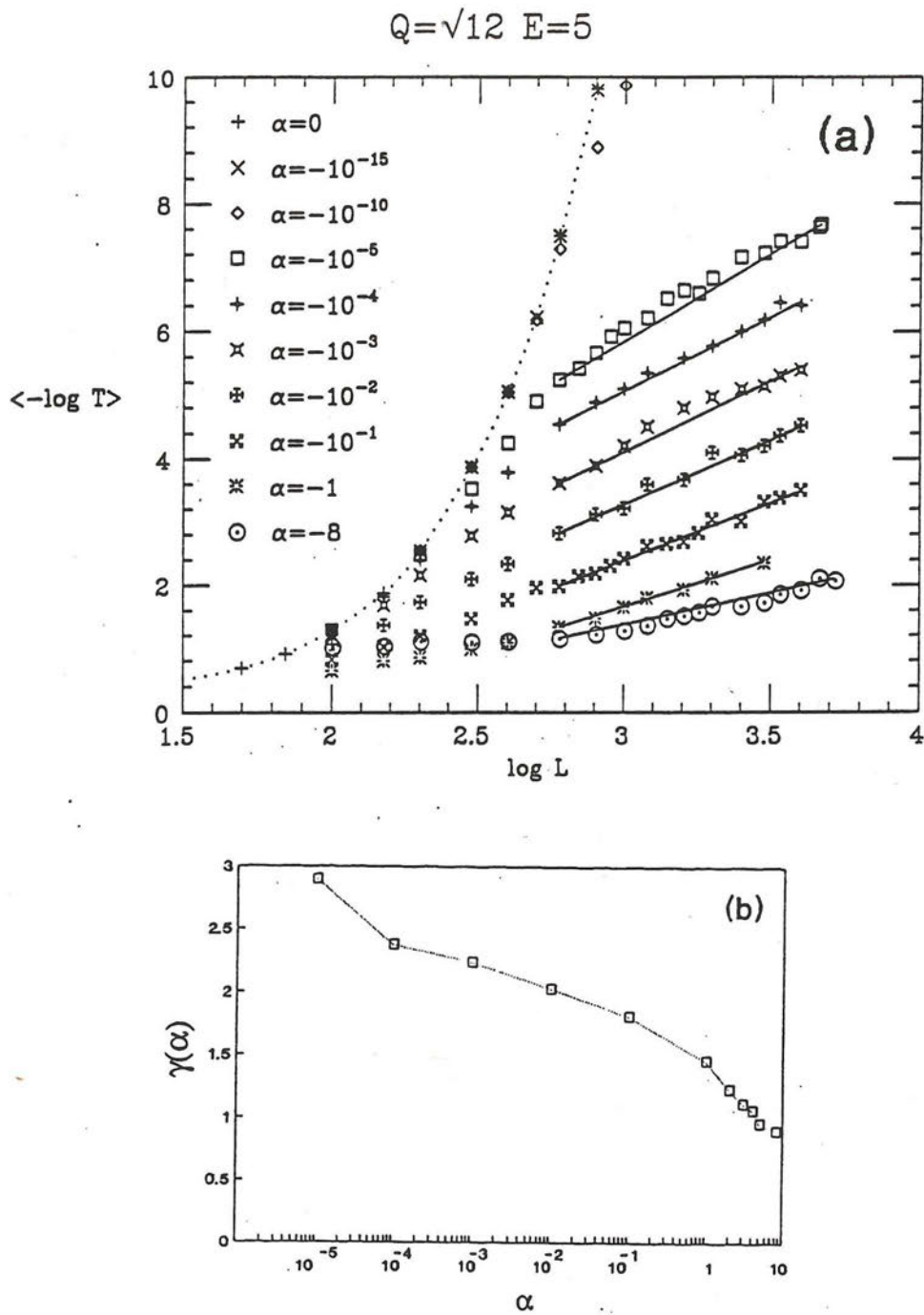


Figura 5. Localización polinomial. (a) Gráfica de $\langle -\log T \rangle$ vs. $\log L$ para distintos valores del parámetro α que muestra la desviación del régimen lineal; (b) la pendiente γ como función de α .

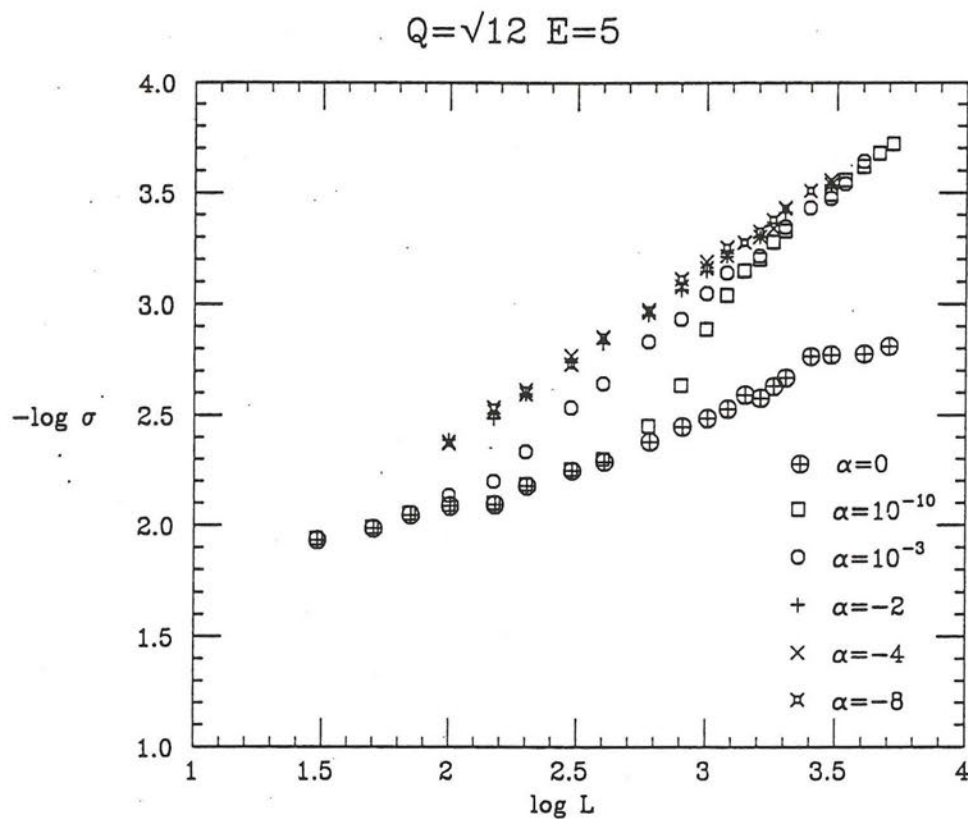


Figura 6. Gráfica de $-\log \sigma_\lambda$ vs. $\log L$ para distintos valores de α , se observa un cambio hacia un régimen en el que $\sigma_\lambda \propto L^{-\nu(\alpha)}$ para L grande y donde $\nu \simeq 0.8$ cuando α o L son grandes.

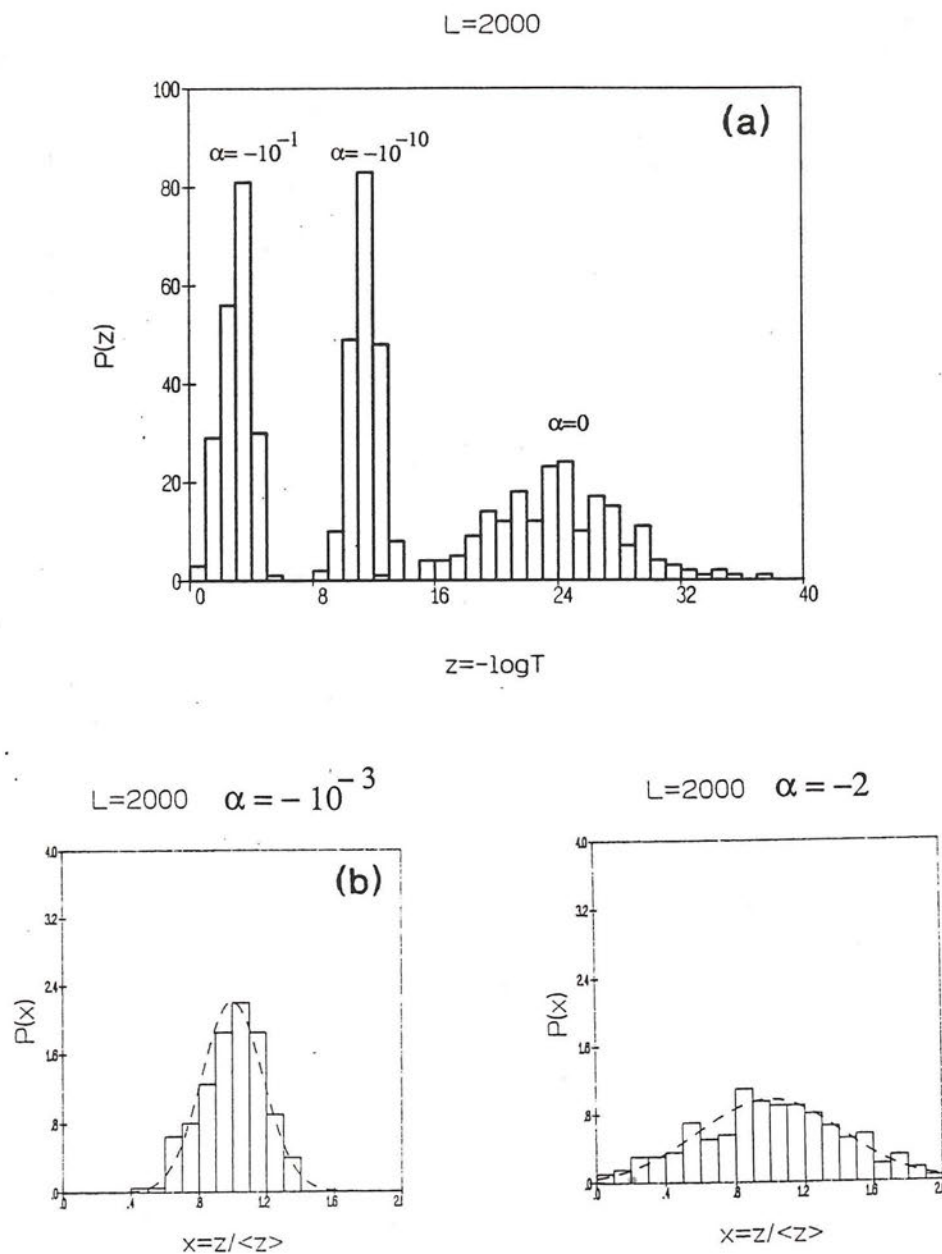


Figura 7. (a) Efecto de α sobre la distribución de $z = -\log T$, y (b) desviación del comportamiento gaussiano para $L = 2000$. Las curvas punteadas indican la distribución gaussiana con la cual se realiza la prueba de χ^2 (véase Capítulo V).

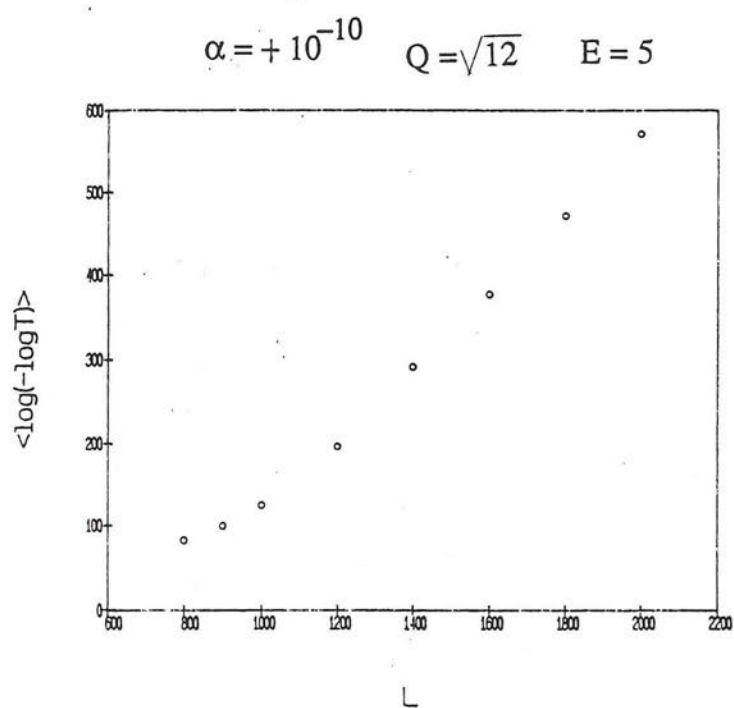


Figura 8. Gráfica de $\langle \log(-\log T) \rangle$ vs. L para $\alpha = +10^{-10}$. El comportamiento rectilíneo indica que $T \propto e^{-3^L}$.

CAPITULO V

DISCUSION

En este capítulo se comentan los resultados. Se empieza por verificar los resultados ya conocidos en la literatura acerca del caso lineal; a continuación se extraen conclusiones sobre localización de las gráficas 4, 5, y 6 para $\alpha < 0$, y luego se presenta la situación para $\alpha > 0$. Se discuten las incertidumbres de las magnitudes calculadas y sobre la estadística de la variable $z \equiv -\log T$.

En las gráficas de la figura 3 se muestran los resultados para el caso lineal. Con $\alpha = 0$ en la ecuación (10) y con ayuda de (11) se calculó $\langle z \rangle$ como función de L . En la figura 3c se presenta la distribución de z , medida en unidades del promedio ($x \equiv z / \langle z \rangle$) para $L = 4000$; un ajuste por medio de una curva gaussiana en la variable x (con $\langle x \rangle = 1$ y $\sigma_x \equiv \sigma_z / \langle z \rangle$) arroja una $\chi^2 \simeq 2.6$ lo cual corresponde a una confiabilidad de 99% y por lo tanto se acepta la hipótesis de que la distribución de x es normal. La pendiente de la recta de la figura 3b, obtenida por mínimos cuadrados, permite concluir que la desviación estándar σ_λ de $\lambda = -\frac{1}{L} \log T$ se comporta como L^{-n} con $n \simeq 0.5$, como correspondería a una distribución normal. Estas gráficas verifican numéricamente, de acuerdo a Andereck y Abrahams, la predicción teórica acerca del comportamiento estadístico de λ y la localización exponencial.

Consideraremos primero el caso $\alpha < 0$. En la figura 4 se observa que, por ejemplo para $\alpha = -10^{-5}$ y $L \leq 400$, $\langle -\log T \rangle$ varía en forma lineal con la longitud, lo cual corresponde a estados exponencialmente localizados, es decir que la no linealidad es todavía pequeña para esas longitudes y la transmisión ocurre esencialmente dentro

del régimen lineal. Para valores más grandes de L la dependencia ya no es lineal y se pasa a otro régimen de comportamiento. Al crecer $|\alpha|$ la región lineal ocurre para valores más pequeños de L , hasta que los efectos no lineales son los que dominan.

Los resultados principales de este trabajo se resumen en la figura 5a. Para determinar el carácter de los estados cuando L toma valores más grandes, se grafica $\langle -\log T \rangle$ contra $\log L$. Notamos que si la longitud del sistema es pequeña, las curvas crecen en forma exponencial (régimen lineal) para los distintos valores no muy grandes (en valor absoluto) de α , y empiezan a desviarse de este comportamiento al aumentar L . Para cierto intervalo de valores de L , para cada α , es posible ajustar una línea recta de pendiente $\gamma(\alpha)$ sobre los puntos, es decir que para los valores de α considerados $\langle -\log T \rangle$ varía linealmente con $\log L$, lo cual corresponde a un decaimiento polinomial $T \propto L^{-\gamma(\alpha)}$. Este comportamiento implica que los estados están ahora localizados en una forma mas débil. La pendiente γ decrece monótonamente con α como se observa en la figura 5b. Devillard y Souillard (1986) reportan una dependencia del tipo L^{-1} , en nuestro caso se observa algo diferente pues γ depende de α , y sólo para valores grandes de ésta se recupera su resultado.

Si se consideran valores de L mayores que los considerados en la figura 5a, sucede que en el ensemble sobre el cual se toman los promedios empiezan a aparecer cadenas que contribuyen con valores muy grandes de $-\log T$ (i. e., valores muy pequeños de T o muy grandes de r_0), lo cual indica que hemos llegado a una zona prohibida para la transmisión, es decir, nos encontramos en una zona clara del diagrama E vs. α (o k vs. $|t|^2$ en la figura 1a), y por lo tanto los promedios ya no tienen ningún sentido. Esta situación ocurre para valores menores de L al aumentar α ; de modo que, eventualmente para α o L grandes pasamos a un régimen donde T se va a cero tan rápido como e^{-3^L} .

Para valores de α positivos la situación es difícil de estudiar, pues resulta imposible identificar algún régimen de decaimiento para determinado intervalo de longitudes. Cuando L crece más allá del régimen lineal y la no linealidad empieza a dominar se observa un drástico cambio: los valores de $-\log T$ en todas las cadenas

del ensemble resultan ser arbitrariamente grandes (por ejemplo $\simeq 10^{500}$), es decir que la magnitud r_0 era divergente. Este caso de $\alpha > 0$ fué el que inicialmente se estudió, y se hicieron varios esfuerzos por estudiar este régimen trabajando con un programa para manipular números grandes junto con una aproximación de la ecuación (10) hasta que se atendió a la explicación dada por por diversos autores en términos de estabilidad y órbitas caóticas: $\alpha > 0$ corresponde a una situación muy inestable (caótica) (Delyon et al., 1986; Wan y Soukoulis, 1989). La figura 8 muestra la forma de esta divergencia; $\langle \log(-\log T) \rangle$ varía en forma lineal con L ; para $L > 800$ digamos, la pendiente estimada de la recta es $\simeq \log 3$ lo cual corresponde a $T \propto 10^{-3^L}$. Este mismo tipo de decaimiento es el que se mencionó al final del párrafo anterior cuando $\alpha < 0$ y r_0 diverge; lo escribimos en esa forma de acuerdo a Delyon et al. (1986).

Así pues, encontramos que la no linealidad da origen a tres zonas distintas de comportamiento cualitativamente diferentes para el coeficiente de transmisión: 1) para α y L suficientemente pequeños la localización es exponencial, éste es el régimen lineal; 2) para valores intermedios de L , la localización es del tipo de ley de potencias $T \propto L^{-\gamma(\alpha)}$ y 3) para α ó L grandes tenemos una localización que denominamos fuerte $T \propto e^{-3^L}$. Las fronteras que separan a estas tres regiones dependen de α . Para nuestro sistema, la longitud de localización para el caso lineal, dada por la relación $\xi \simeq 96E/Q^2$ (Soukoulis et al., 1983), es igual a 40, de modo que el régimen de decaimiento polinomial ocurre a partir de $L \simeq 10\lambda$. (La pendiente estimada para la recta de la figura 3a implica una $\xi \simeq 39$).

Un problema interesante que queda por estudiar es el efecto de estos resultados sobre la teoría de escalamiento de localización de estados electrónicos, las cuales pueden llegar a ser muy importantes desde el punto de vista físico ya que estas teorías estan directamente relacionadas con el fenómeno de transición metal-aislante y con experimentos sobre resistencia eléctrica en sistemas de baja dimensionalidad (Giordano, 1979; Masden y Giordano, 1982). Este trabajo, como el de otros autores (Andereck y Abrahams, 1980; Sak y Kramer, 1981), estudia, específicamente, en

forma numérica, la transmisión a través de un sistema desordenado pero en el que además hay un término no lineal en la ecuación de Schrödinger y constituye un primer paso hacia el estudio de la teoría de localización.

Para cada valor promedio de z calculado se obtiene una desviación estándar σ_λ de la cantidad $\lambda = -\frac{1}{L} \log T$. La figura 6 muestra el comportamiento de σ_λ en función de L ; es análoga a la figura 3b. En el caso lineal $\alpha = 0$ y para L suficientemente grande, se obtiene el comportamiento esperado $L^{-1/2}$ de acuerdo con el teorema de límite central como fue demostrado por Anderson et al. (1980); pero al aumentar $|\alpha|$ (α se hace más negativa) σ_λ se desvía de éste comportamiento y se observa claramente una transición a una línea recta de pendiente $\simeq 0.8$ de modo que σ_λ disminuye más rápido con L que para el caso lineal; esta transición es más drástica para valores más grandes de L . Así, el efecto de las no linealidades es dar lugar a un decaimiento polinomial de T (la potencia depende de α) y a una desviación estándar $\sigma_\lambda \propto L^{-\nu}$ ($\nu \simeq 0.8$), para cierto intervalo de longitudes.

Para tener una estimación de las incertidumbres que deben asociarse a los puntos de las gráficas 5 y 6 se procedió de la siguiente manera: se generó una colección de N sistemas (ecuación (6), figura 2) de la misma longitud L para una α dada, en la que cada uno de éstos presentaba una configuración particular de potenciales (las configuraciones en el ensemble se generaron a partir de una "semilla" en un generador de números aleatorios). Se tomaron promedios sobre este ensemble para obtener $\langle z \rangle$ y una desviación σ_z . A continuación, para la misma L , se generó otro ensemble de igual número, N , de cadenas, pero donde ahora las configuraciones de potenciales son distintas a las del primer ensemble (se cambió de semilla), resultando valores calculados de $\langle z \rangle$ y de σ_z diferentes a los anteriores. Así, se repitió este procedimiento cierto número M de veces para obtener un promedio $\langle\langle z \rangle\rangle$ y una desviación $\sigma_{\langle z \rangle}$ de la variable $\langle z \rangle$. Si se considera N más grande, es decir, si aumenta el tamaño del ensemble, resulta que el valor de este promedio, esencialmente no cambia pero la desviación sí disminuye. Específicamente se tomó $N = 200$ y $M = 10$, para distintos valores de L y α , y se obtuvo un valor típico

de $\sigma_{\langle z \rangle} / \langle \langle z \rangle \rangle$ entre el 3-4%. Si asignamos este error a los puntos en la gráfica de la figura 5a, las barras de error serían del tamaño de los puntos mismos, (se consideraron algunos casos, por ejemplo, para $\alpha = -2$ y $L = 1000$, el cambio fraccional en $\langle \langle z \rangle \rangle$ al pasar de $N = 200$ a $N = 1000$ es menor que 1%). Debe decirse que se calcularon desviaciones $\sigma_{\langle z \rangle}$ sólo para algunos valores de L (grandes y pequeños) correspondientes a unos cuantos valores de α suficientemente grandes como para estar dentro del régimen no lineal, y que siempre estuvieron dentro de los valores arriba señalados.

Similarmente, por un procedimiento igual al anterior, se obtienen un promedio $\langle -\log \sigma_\lambda \rangle$ y una desviación $\sigma_{-\log \sigma_\lambda}$ de la variable $-\log \sigma_\lambda$, donde $\lambda = -\frac{1}{L} \log T$, que es la que aparece en la figura 6. En nuestro caso, para distintos valores de α y L , resulta que el error $\sigma_{-\log \sigma_\lambda} / \langle -\log \sigma_\lambda \rangle$ es siempre menor del 1%; este sería el error asignado a los puntos de la figura 6, (por ejemplo, al pasar de $N = 200$ a $N = 1000$ cuando $\alpha = -2$ y $L = 1000$, el cambio fraccional en $\langle \sigma_{-\log \sigma_\lambda} \rangle$ es menor que 0.5%).

Regresando a la figura 5a, en ella el ajuste de las rectas (por mínimos cuadrados) empieza en $L \geq 600$, para todos los valores de α , y para el cual se tomaron en cuenta las desviaciones $\sigma_{\langle z \rangle}$ señaladas anteriormente. La figura 5b muestra la dependencia del exponente γ con el parámetro α . La incertidumbre estimada para las pendientes resulta ser del tamaño del símbolo utilizado en la gráfica en todos los casos. Debe aclararse, sin embargo, que el resultado que se observa en la figura 5b depende del intervalo de longitudes escogido; ciertamente, si el ajuste de las rectas empezara a partir de $L = 400$ digamos, para algunos valores de α , la curva γ vs. α no sería exactamente la misma, pero lo que se observa es que γ disminuye.

Las gráficas de la figura 7 ilustran el efecto de α sobre la distribución de la variable $z = -\log T$, en el caso de una L grande, $L = 2000$, (la forma de la distribución no cambiaría si en vez de z se considerara λ , sólo se reescalaría el eje horizontal. En la figura 7a se observa que conforme α crece la distribución se hace más estrecha y se recorre hacia el origen, lo cual era de esperarse de acuerdo al comportamiento

observado en las figuras 5 y 6, de las que se infiere que tanto $\langle z \rangle$ como σ_z disminuyen al aumentar α . Los histogramas de la figura 7b muestran la distribución de la variable normalizada $x = z / \langle z \rangle$, de promedio 1 y desviación $\sigma_x = \sigma_z / \langle z \rangle$. Para $\alpha = 0$ la distribución se ajusta a una curva gaussiana (fig. 3c), pero para valores de $\alpha \neq 0$ esto deja de ser cierto; la prueba de χ^2 permite concluir que éstos histogramas no se ajustan a una distribución normal. Las curvas punteadas representan distribuciones gaussianas en la variable x , es decir que se obtienen a partir de los datos calculados.

Si el desorden se aumenta observamos esencialmente el mismo tipo de comportamiento del coeficiente de transmisión, es decir que no depende de la distribución de potenciales, se debe esencialmente al tipo de término no lineal considerado en la ecuación de Schrödinger (6).

Devillard y Souillard (1986) analizaron la ecuación

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} - \alpha|\psi|^2\psi + V(x)\psi = E\psi,$$

donde V es un potencial tipo escalón. En cada intervalo $(x, x+s)$, V sólo toma dos valores V_{min} y V_{max} ; la longitud de cada escalón se escoge aleatoriamente, con peso dado, del intervalo $(0, \infty)$. Demostraron matemáticamente un decaimiento polinomial del coeficiente de transmisión: T no puede tender a cero más rápido que L^{-2} para $L \rightarrow \infty$, y numéricamente, de hecho que $T \propto L^{-1}$ para L o no linealidad muy grande. La demostración matemática que dieron estos autores supone que tanto ψ como $\frac{d\psi}{dx}$ son continuas en los bordes de cada escalón. En nuestro caso esta suposición no se cumple, ya que existe una discontinuidad en la primera derivada debido a los potenciales δ como puede observarse en la ecuación (8). Tanto el potencial como las condiciones de frontera de nuestro modelo (6) difieren del considerado por ellos. Esta es la razón por la que nuestros resultados no coinciden con los suyos. Hasta donde sabemos no existen mas trabajos al respecto.

La localización de ley de potencias y el comportamiento de la desviación como función de L también ha sido encontrada en el estudio de sistemas desordenados en

presencia de un campo eléctrico F : $T \propto L^{-\mu(F)}$ donde $\mu(F) = 2E\lambda/F$ y E es la energía (Soukoulis et al., 1983). Flores et al. (1987) investigaron la forma precisa de la distribución estadística del coeficiente de transmisión para este caso y encontraron una fórmula complicada, difícil de manipular, pero que reproduce los resultados. Esto nos sugiere explorar la analogía entre el caso cuando hay no linealidades y el caso cuando está presente un campo F , en particular, en lo referente a la distribución estadística de T dentro del régimen no lineal. Una diferencia importante es que en el caso no lineal, el comportamiento polinomial observado se restringe a un intervalo finito de valores de L .

CAPITULO VI

CONCLUSIONES

En este trabajo se estudiaron los efectos no lineales sobre las propiedades de localización en un sistema unidimensional que consiste en una cadena de potenciales δ igualmente espaciadas con intensidades distribuidas aleatoriamente. El modelo considerado se describe por la ecuación de Schrödinger estacionaria con un potencial

$$V(x) = \sum_{n=0}^N (\beta_n + \alpha |\psi(x)|^2) \delta(x - n).$$

El sistema presenta desorden ya que los valores β_n varían aleatoriamente de acuerdo a una distribución rectangular y es no lineal debido al término cuadrático $\alpha |\psi(x)|^2$. Este tipo de no linealidad aparece en diversos modelos en física de materia condensada y admite varias interpretaciones, como se mencionó en la sección II.3.1.

Específicamente se investiga la forma en que el coeficiente de transmisión T depende de la longitud del sistema. Debido a la presencia del desorden, debe hacerse un estudio estadístico. Esto se hace numéricamente discretizando el modelo mediante el mapeo de Poincaré de la ecuación de Schrödinger.

Se encontró que la no linealidad conduce a una localización más débil que la localización exponencial característica de un medio desordenado unidimensional. Observamos que el efecto de las no linealidades presentes en el modelo es el de dar lugar a tres zonas de comportamiento diferente para $\alpha < 0$:

- 1) localización exponencial $T \propto e^{-\lambda L}$ para α y L suficientemente pequeños;

- 2) localización polinomial $T \propto L^{-\gamma(\alpha)}$ para valores intermedios de L ; donde $\gamma(\alpha)$ decrece monótonamente cuando α crece (en valor absoluto); este resultado difiere del único publicado hasta ahora (Devillard y Souillard, 1986), el cual establece que $T \propto L^{-1}$ para L o α grandes; y
- 3) localización fuerte $T \propto e^{-3L}$ para α o L grandes.

Las fronteras que separan a estas regiones dependen de α .

Al estudiar el comportamiento de la desviación estándar σ_λ de la variable $\lambda = -\frac{1}{L} \log T$ se observa que para $|\alpha|$ grande ($\alpha < -1$) hay una transición del comportamiento $\sigma_\lambda \propto L^{-1/2}$ a uno del tipo $\sigma_\lambda \propto L^{-\nu(\alpha)}$ con $\nu \simeq 0.8$ como límite. Este cambio es drástico para L grande aún con una α pequeña como -10^{-10} .

Para $\alpha > 0$ pasamos abruptamente al régimen donde la función de onda diverge y no hay transmisión posible.

Algunas perspectivas a futuro serían por ejemplo, investigar con detalle la forma funcional de $\gamma(\alpha)$ y $\nu(\alpha)$, investigar la forma precisa de la distribución de λ cuando la no linealidad es importante, explotando la analogía con el caso lineal con campo eléctrico para el cual ya se conoce tal distribución; además del desorden y no linealidad se podría investigar la aplicación de un campo eléctrico F , ya que se sabe que el efecto de éste sobre una cadena lineal, es el de conducir a una localización del tipo de ley de potencias $T \propto L^{-\mu(F)}$, de modo que sería posible analizar el balance entre este comportamiento y el de tipo polinomial $T \propto L^{-\gamma(\alpha)}$ aquí observado. Finalmente, sería importante analizar las implicaciones de estos efectos en las propiedades de localización en 2 y 3 dimensiones a partir de los enfoques existentes en términos de teoría de escalamiento.

BIBLIOGRAFIA

- Abrikosov, A. A., A. F. Buzdin y M. L. Kulić, *Supercond. Sci. Technol.* **1**, 260 (1989).
- Almeida, N. S. y D. L. Mills, *Phys. Rev. B.* **36**, 2015 (1987).
- Al'tshuler B. L. y A. G. Aronov, en *Electron-Electron Interaction in Disordered Systems* editado por M. Pollak y A. L. Efros (North Holland, Amsterdam, 1985).
- Andereck, B. y E. Abrahams, *J. Phys. C.* **13**, L383 (1980).
- Anderson, P. W. , *Phys Rev.* **109**, 1492 (1958).
- Anderson, P. W., D. J. Thouless, E. Abrahams y D. S. Fisher, *Phys. Rev. B.* **22**, 3519 (1980).
- Bellisard, J., A. Formoso, R. Lima y D. Testard, *Phys. Rev. B.* **26**, 3024 (1982).
- Benedeck, G., H. Bilz y R. Zeyher, *Statics and Dynamics of Nonlinear Systems* (Springer-Verlag, Berlin, 1983).
- Calogero, F. y A. Degasperis, *Phys. Rev. A.* **11**, 265 (1975).
- Capasso, F. y S. Datta, *Physics Today* **43**(2), 74 Feb. (1990).
- Chen, W. y D. L. Mills, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 160 (1987).
- Cohen, M. H., E. N. Economou y C. M. Soukoulis, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 1202 (1983).

- Cota, E., J. José y M. Y. Azbel, Phys. Rev. B. **32**, 6157 (1985).
- Delyon, F., Y. E. Lévy y B. Souillard, Phys. Rev. Lett. **57**, 2010 (1986).
- Devillard, P. y B. Souillard, J. Stat. Phys. **43**, 423 (1986).
- Erdős, P. y R. C. Herndon, Adv. Phys. **31**, 65 (1982).
- Flores, J., P. A. Mello y G. Monsiváis, Phys. Rev. B. **35**, 2144 (1987).
- Giordano, N., Phys. Rev. B. **22**, 5635 (1980).
- Hasegawa, A., *Optical Solitons in Fibers* (Springer-Verlag, Berlin, 1990).
- Hawrylak, P. y M. Grabowsky, Phys. Rev. B. **40**, 8013 (1989).
- Hawrylak, P., M. Grabowsky y P. Wilson, Phys. Rev. B. **40**, 6398 (1989).
- Kimball, J. C., Phys. Rev. B. **24**, 2964 (1981).
- Kivshar, Y. S., S. A. Gredeskul, A. Sánchez y L. Vázquez, Phys. Rev. Lett. **64**, 1693 (1990).
- Landauer, R., Phil. Mag. **21**, 863 (1970).
- Masden, J. T. y N. Giordano, Phys. Rev. Lett. **49**, 819 (1982).
- Mott, N. F. y W. D. Twose, Adv. Phys. **10**, 107 (1961).
- Sak, J. y B. Kramer, Phys. Rev. B. **24**, 1761 (1981).
- Soukoulis, C. M., J. V. José, E. N. Economou y P. Sheng, Phys. Rev. Lett. **50**, 764 (1983).
- Turkevich, L. A. y T. D. Holstein, Phys. Rev. B. **35**, 7474 (1987).
- Wan, Y. y C. M. Soukoulis, Phys. Rev. B. **40**, 12264 (1989).

APENDICE

El Método del Mapeo de Poincaré de la ecuación (6).

El objetivo en este apéndice es deducir la ecuación (10) a partir de las condiciones de frontera (9).

Sea $y = e^{ik}$, de modo que la solución entre los sitios $x = n$ y $x = n + 1$ se escribe como

$$\psi_n(x) = A_n y^x + B_n y^{-x}, \quad n \leq x \leq n + 1. \quad (A1)$$

Se definen las cantidades

$$\psi_n^+ \equiv \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \psi_n(n + \epsilon) = \psi_n$$

$$\psi_n^- \equiv \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \psi_{n-1}(n - \epsilon)$$

y así las condiciones de frontera (9) se reescriben como

$$\begin{aligned} \psi_n^+ &= \psi_n^- \\ \psi_n^{+'} - \psi_n^{-'} &= (\beta_n + \alpha |\psi_n|^2) \psi_n; \end{aligned}$$

con ayuda de (A1) la discontinuidad en la derivada se puede escribir como

$$\psi_n^{'} - ik(A_{n-1}y^n - B_{n-1}y^{-n}) = (\beta_n + \alpha |\psi_n|^2) \psi_n. \quad (A2)$$

Considerando el sitio $x = n - 1$, y usando las identidades $2\cos k = y + y^{-1}$ y $2i\sin k = y - y^{-1}$, escribimos

$$(2\cos k)\psi_{n-1} = (y + y^{-1})(A_{n-1}y^{n-1} + B_{n-1}y^{-(n-1)}) \quad (A4)$$

$$\psi_{n-1}^{'} = ik(A_{n-1}y^{n-1} - B_{n-1}y^{-(n-1)}), \quad (A5)$$

las cuales nos permiten obtener

$$A_{n-1}y^n + B_{n-1}y^{-n} = (2\cos k)\psi_{n-1} - (A_{n-1}y^{n-2} + B_{n-1}y^{-(n-2)}) \quad (A6)$$

$$-(A_{n-1}y^{n-2} + B_{n-1}y^{-(n-2)}) = \left(\frac{2\operatorname{sen} k}{k}\right)\psi'_{n-1} - \psi_n \quad (A7)$$

donde ψ_n representa la amplitud en el sitio $x = n$. Combinando (A1), (A6) y (A7) se encuentra, después de simplificar y reorganizar términos, que

$$\psi_{n+1} = (\cos k)\psi_n + \left(\frac{\operatorname{sen} k}{k}\right)\psi'_n. \quad (A8)$$

Por otra parte la expresión

$$-(2k\operatorname{sen} k)\psi_{n-1} = ik(A_{n-1}y^n - B_{n-1}y^{-n}) - ik(A_{n-1}y^{n-2} - B_{n-1}y^{-(n-2)})$$

y la ec. (A3) implican

$$\psi'_n + (2k\operatorname{sen} k)\psi_{n-1} - [ik(A_{n-1}y^{n-2} - B_{n-1}y^{-(n-2)})] = (\beta_n + \alpha|\psi_n|^2)\psi_n. \quad (A9)$$

Similarmente, no es difícil ver que

$$(2\cos k)\psi'_{n-1} = \psi_n^{-'} + [ik(A_{n-1}y^{n-2} - B_{n-1}y^{-(n-2)})],$$

y como, de acuerdo a (9) $\psi_n^{-'} = \psi'_n - (\beta_n + \alpha|\psi_n|^2)\psi_n$, se encuentra que

$$\psi'_n - (2\cos k)\psi'_{n-1} + [ik(A_{n-1}y^{n-2} - B_{n-1}y^{-(n-2)})] = (\beta_n + \alpha|\psi_n|^2)\psi_n. \quad (A10)$$

Si sumamos (A9) y (A10) se obtiene

$$\psi'_n - (\cos k)\psi'_{n-1} + (k\operatorname{sen} k)\psi_{n-1} = (\beta_n + \alpha|\psi_n|^2)\psi_n; \quad (A11)$$

al sustituir (A8) en (A11) se encuentra que

$$\begin{aligned} \left(\frac{k}{\operatorname{sen} k}\right)\psi_{n+1} - \left(\frac{k\cos k}{\operatorname{sen} k}\right)\psi_n - (\cos k)\left[\left(\frac{k}{\operatorname{sen} k}\right)\psi_n - \left(\frac{k\cos k}{\operatorname{sen} k}\right)\psi_{n-1}\right] \\ + (k\operatorname{sen} k)\psi_{n-1} = (\beta_n + \alpha|\psi_n|^2)\psi_n; \end{aligned}$$

esta ecuación se simplifica inmediatamente a la expresión

$$\psi_{n+1} = [2\cos k + \frac{\operatorname{sen} k}{k}(\beta_n + \alpha|\psi_n|^2)]\psi_n - \psi_{n-1},$$

que es la ecuación (10) buscada.

A partir de la ecuación (7) podemos escribir

$$\begin{aligned}\psi_{L+1} &= r_0 y^{-1} + r_1 y \\ \psi_{L+2} &= r_0 y^{-2} + r_1 y^2,\end{aligned}$$

si se resuelve este sistema para r_0 , encontraremos la ecuación

$$r_0 = y^3 \left(\frac{\psi_{L+1} - y^{-1}\psi_{L+2}}{y^2 - 1} \right),$$

a partir de la cual podemos escribir la ecuación (11), $T = |t|^2/|r_0|^2$.

Nótese que en el caso periódico, donde $\beta_n = \beta_0 \forall n$, y lineal $\alpha = 0$, se recupera el modelo de Kronig-Penney y si ponemos $\alpha \neq 0$ y $\beta_n = 0$ la ecuación (10) es esencialmente de la misma forma que la ecuación (4) estudiada por Delyon et al. (1986).