

**METODO DE RENORMALIZACION APLICADO  
A UNA CADENA LINEAL DESORDENADA**

**TESIS** que para obtener el grado de

MAESTRO EN CIENCIAS

(FISICA)

presenta

**GERARDO ORTEGA ZARZOSA**

FACULTAD DE CIENCIAS

UNIVERSIDAD AUTONOMA DE SAN LUIS POTOSI

JULIO DE 1993

---

---

DEDICATORIA

---

A mis Padres

A mi Esposa Rocio

A mis Hijos Aixchel y Gerardo

A mis Amigos

---

---

---

## AGRADECIMIENTOS

---

Expreso mi agradecimiento al Dr. Pedro Villaseñor González por las sugerencias y apoyo para la culminación de esta tesis

Agradezco el apoyo y los comentarios ofrecidos por los investigadores y compañeros de este Instituto.

Agradezco el soporte económico ofrecido por CONACyT en el periodo de mis estudios y parte de la tesis como también al ITESM Campus San Luis Potosí por el apoyo brindado para la culminación de este trabajo.

---

# RESUMEN

Se modela una cadena lineal desordenada para una aleación  $A_xB_{1-x}$ , donde  $x$  es la concentración de átomos del tipo  $A$ . Se usa un hamiltoniano de amarre fuerte y se adapta el proceso de renormalización generado para sistemas cuasi-periódicos para determinar la densidad de estados. Las características del desorden están únicamente representados en los elementos diagonales del hamiltoniano. Se calcula la densidad integral de estados para cualquier concentración. Se analizan diferentes sistemas ordenados que pueden formarse con los átomos  $A$  y  $B$  y se define un sistema ordenado *modelo* para el que se calcula la densidad de estados y se determina el cambio de energía entre este sistema y el desordenado. Este cambio de energía de la contribución electrónica, se entiende como cohesión o decohesión en el sólido.

# CONTENIDO

Introducción . . . . .	1
I. Antecedentes. . . . .	4
II. Teoría. . . . .	7
III. Cadena desordenada. . . . .	20
IV. Solución de la cadena infinita y seminfinita. . . . .	23
V. Densidad de estados. . . . .	28
VI. Densidad integral de estados. . . . .	33
VII. Cambio en la energía del sistema. . . . .	37
CONCLUSIONES. . . . .	41
REFERENCIAS. . . . .	42

---

## INTRODUCCION

La época actual es sin lugar a dudas, una época de continuos cambios en todos los ámbitos de la actividad humana. El estudio de los sólidos no es la excepción a estos cambios en el quehacer de los investigadores. El empeño y dedicación de mucha gente, ha logrado considerables avances en aspectos tecnológicos y del conocimiento de los sólidos, en especial los sistemas desordenados siguen siendo objeto de estudio y el presente trabajo pretende contribuir al conocimiento de ellos.

Es importante entender el efecto del desorden en las propiedades de los materiales, en realidad, los sistemas puros u ordenados son solo idealizados, puesto que no encontramos materiales reales libres de impurezas o defectos, por ésto, es motivante la física de sistemas desordenados.

Para interpretar las propiedades de un material, se propone un modelo que remeda el desorden y con la formulación, exploración y evaluación de técnicas matemáticas, que en muchos de los casos tienen que ser inventadas, se obtiene información del efecto que ocasiona el desorden en las propiedades del material.

De manera natural, se proponen modelos unidimensionales y de ellos se consideran las características dinámicas, magnéticas y excitaciones electrónicas [1-6], donde el tratamiento matemático es común. Podemos encontrar un modelo fonónico [3,4] en el cual el tratamiento matemático es paralelo al modelo electrónico.

Siguiendo el patrón establecido, en nuestro trabajo abordamos una técnica matemática y la adecuamos a un modelo de desorden propuesto a una cadena lineal formada por átomos  $A$  y  $B$ , se exploran los resultados y se establece el efecto ocasionado por el desorden en las propiedades electrónicas del sólido que conforma la cadena estudiada.

El desarrollo del trabajo queda dado de la siguiente manera: presentamos en el capítulo I los antecedentes del problema, discutimos brevemente el trabajo de Dyson [3] sobre la dinámica de una cadena lineal desordenada, que es modelada mediante una cadena unidimensional de osciladores armónicos. El tratamiento matemático permite calcular la función de frecuencias de los modos normales de vibración de la cadena y como un caso especial, cuando los osciladores al desordenarlos son distribuidos por una ley que se supone exponencial. En el capítulo II se presentan las técnicas utilizadas para sistemas ordenados y cuasi-ordenados. Se plantea el formalismo de las funciones de Green [7] y junto con la técnica de la matriz de transferencia [8], se aplican al sistema ordenado. Para sistemas cuasi periódicos, es utilizado el proceso de renormalización desarrollado C.Wang y R. Barrio (WB) [9,10]. En el capítulo III, se adapta el proceso de renormalización desarrollado para sistemas cuasi periódicos a sistemas desordenados, tomando dos cadenas *unidad* y renormalizandolas a otra cadena *unidad*, definiendo una cadena *unidad* como aquella que está formada por dos sitios. En este proceso en realidad se renormaliza una cadena de cuatro sitios a una de dos. En esta parte, si el proceso de renormalización

---

se repite un gran número de veces entre cadenas *unidad* ya renormalizadas, entonces, la última cadena *unidad* renormalizada tiene información de una cadena macroscópica ( $9 \times 10^{10}$  átomos ). La densidad de estados corresponde a la del extremo de la cadena. En el capítulo IV se discute la transformación que hay que hacer para conocer la densidad de estados en cualquier sitio de la cadena a partir del conocimiento de la densidad de estados en el extremo de la cadena. En el capítulo V se calcula la densidad de estados y se encuentra que aparecen estados localizados fuera de la banda para las concentraciones cercanas a  $x = 0$  y  $x = 1$ . Estos estados localizados están de acuerdo con los reportados en la literatura [1,2] En el capítulo VI se calcula la densidad integral de estados *DIE* y se comparan con los reportados en la literatura [3] y se encuentra que la *DIE* dada por Dyson solo proporciona un resultado burdo de la densidad de estados. En el capítulo VII, se calcula el cambio en la energía del sistema y se le atribuye el efecto del cambio a fenómenos de cohesión o decohesión. Y en el capítulo VIII se presentan las conclusiones del trabajo.



## ANTECEDENTES

Las propiedades electrónicas de una cadena lineal desordenada, es un tema en la Física del Estado Sólido que aún hoy sigue despertando interés. El problema lo podemos identificar ya formalmente en los años cincuentas [3], cuando no se tenían computadoras veloces a disposición de los investigadores. Y ésto hacía relativamente difícil obtener información más detallada de estos sistemas desordenados. Actualmente con la aparición de las computadoras, el problema se ha abordado más ampliamente, dando lugar a un mejor entendimiento del problema. En particular Freeman J. Dyson en respuesta a los cuestionamientos de C. Kittel sobre las propiedades térmicas del vidrio (el cual es considerado aproximadamente como un arreglo de osciladores armónicos acoplados en 3 dimensiones). El problema de un “vidrio unidimensional”, Dyson lo modeló con un arreglo de átomos desordenados en una cadena lineal. El modelo que él propuso consiste en suponer una cadena de  $N$  masas, las cuales son acopladas por resortes elásticos que obedecen la ley de Hooke. El desorden del sistema puede obtenerse, cambiando las masas de los átomos o bien cambiando las constantes de los resortes. En el primer caso las masas son variables aleatorias independientes con una distribución de probabilidad que se presupone conocida y los resortes de acoplamiento se mantienen todos iguales. En el segundo caso se escogen las masas iguales y los resortes que acoplan las

masas entre átomos vecinos se toman como variables y se distribuyen aleatoriamente. Aunque el problema es resuelto por Dyson en forma analítica, en general no es posible calcular la función de frecuencias características en forma cerrada; esto es, la integral que la define tiene que ser evaluada numéricamente. Con esta suposición, calcula el espectro de frecuencias características y de aquí puede calcular la densidad integral de estados *DIE*.

En la Fig. 1 se muestran las gráficas de la *DIE* para el caso ordenado y para el caso desordenado. Como puede verse, la cadena desordenada se levanta más rápidamente que la cadena ordenada

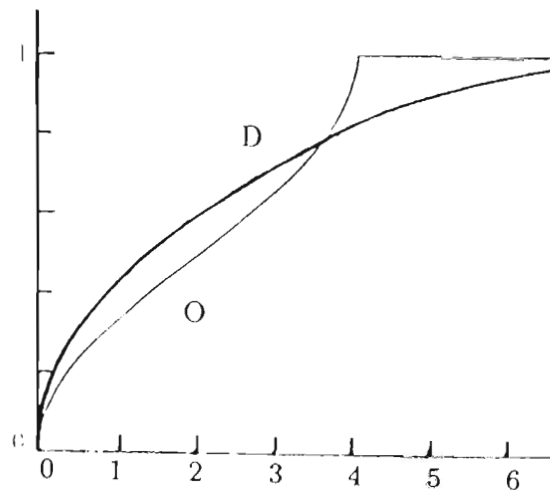


Figura 1. Densidad integral de estados de una cadena ordenada (*O*) y de una cadena desordenada con una distribución exponencial en las constantes de fuerza (*D*). (Dyson 1953)

para bajas frecuencias, después, en el límite de frecuencias altas, ambas gráficas tienden al mismo valor, ya que la *DIE* integrada sobre todo el espacio debe ser igual a uno. La explicación de este hecho en ningún momento se relaciona con estados localizados que aparecen fuera de la banda, como veremos más tarde en este trabajo, y la forma suave de la curva desordenada resulta porque toman una distribución de probabilidad continua para la constante del resorte que se acopla a las masas. En nuestros cálculos veremos que aparece rugosidad y aparecen gaps en el interior de la banda

Apesar de que el trabajo apareció en los años cincuentas el interés de los investigadores por estudiar sistemas, desordenados además de crecer no ha cesado y el porqué debiera parecer obvio.

## TEORIA

Los sistemas unidimensionales perfectamente periódicos, tienen la característica de presentar simetría traslacional, esto hace que las condiciones de contorno puedan incorporarse fácilmente y por lo tanto la solución a estos tipos de problemas puede lograrse con un poco de esfuerzo. Los sistemas cuasi-periódicos y desordenados ya no presentan simetría traslacional, esto hace que las condiciones de contorno resulten difíciles de imponer y cuando se logra, la solución resulta poco confiable, ya que como es sabido, la solución de cualquier problema depende fuertemente de las condiciones de contorno. En este capítulo veremos que con el método de renormalización, las condiciones de contorno quedan incorporadas de manera natural. La organización de este capítulo lo hacemos de la siguiente forma; plantearemos la función de Green asociada a un Hamiltoniano en la aproximación de amarre fuerte, se calcula la función de Green para una cadena ordenada definiendo la matriz de transferencia, por último, se analiza el método de renormalización desarrollado por WB para el estudio de sistemas cuasi-ordenados de una aleación binaria  $(A_x B_{1-x})$ .

## Función de Green

El Hamiltoniano del sistema en la aproximación de amarre fuerte está dado por:

$$H = \sum_i |i\rangle \epsilon_i \langle i| + \sum_{ij} |i\rangle \tau_{ij} \langle j|. \quad (1)$$

Donde  $|i\rangle$  son las funciones de Wannier que son funciones localizadas en el sitio  $i$ ,  $\epsilon_i$  es la autoenergía del electrón en el sitio  $i$  y  $\tau_{ij}$  es la amplitud de probabilidad (hopping) de que el electrón salte del sitio  $i$  al sitio  $j$ . Los sitios  $i$  forman una red y se asume que el conjunto de las funciones de Wannier  $\{|i\rangle\}$  es ortonormal y forman un conjunto completo.

$$\sum_i |i\rangle \langle i| = 1 \quad (2)$$

Especificado el Hamiltoniano del sistema, la función de Green  $G$  asociada a él, puede obtenerse a partir de la ecuación de Dyson,

$$(\omega - H)G = I, \quad (3)$$

donde  $\omega$  es el parámetro energía. Introduciendo entre  $H$  y  $G$  el conjunto completo (Ec. 2), se encuentra que los elementos de matriz

de la función de Green pueden obtenerse por:

$$(\omega - \epsilon_i) G_{im} = \delta_{ij} + \sum_k \tau_{ik} G_{kj} . \quad (4)$$

Conociendo la función de Green, la densidad de estados  $\rho(\omega)$  [7] puede obtenerse a partir de

$$\rho(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}\{ \text{Tr}G(\omega) \} . \quad (5)$$

Los elementos de matriz de la función de Green quedan sujetos al tipo de sistema que se tenga. Resultan relativamente fácil determinarlos cuando se tiene una cadena lineal y ordenada.

## Métodos

Para determinar la densidad de estados de una cadena unidimensional, distinguiremos tres casos por motivos de la técnica matemática utilizada y son; ordenado, cuasi ordenado y desordenado.

## MATRIZ DE TRANSFERENCIA

El sistema ordenado está caracterizado porque todos los átomos son iguales y están igualmente espaciados, de esta manera la autoenergía es la misma en todos los sitios  $\epsilon_i = \epsilon$ , lo mismo que el hopping  $\tau_{ij} = \tau$ . En este caso las ecuaciones de movimiento en el sitio medio  $m$  están dadas por;

$$\begin{aligned}
 (\omega - \epsilon)G_{m,m} &= 1 + 2\tau G_{m,1} \\
 (\omega - \epsilon)G_{m,1} &= \tau G_{m,m} + \tau G_{m,2} \\
 (\omega - \epsilon)G_{m,2} &= \tau G_{m,1} + \tau G_{m,3} \\
 &\vdots \\
 (\omega - \epsilon)G_{m,n} &= \tau G_{m,n-1} + \tau G_{m,n+1} \\
 &\vdots
 \end{aligned} \tag{6}$$

Del sistema de ecuaciones, por su estructura regular, se puede resolver por el método de la matriz de transferencia [8], definiéndola como

$$G_{m,n} = \gamma G_{m,n-1} . \quad (7)$$

Con esta definición se encuentra que

$$G_{m,m} = \frac{1}{(\omega - \epsilon - 2\gamma\tau)} , \quad (8)$$

y  $\gamma$  satisface la ecuación cuadrática

$$\gamma^2 - \frac{(\omega - \epsilon)}{\tau} \gamma + 1 = 0 , \quad (9)$$

la cual se obtiene del sistema de ecuaciones expresadas en la Ec. (6).

La densidad de estados se muestra en la Fig. 2, el ancho de la banda es  $4\tau$  y se encuentra centrada en  $\epsilon_i = 0$ . Este método de solución, que es empleado en el caso ordenado, resulta inaplicable para sistemas cuasi-ordenados o desordenados, ya que la solución definiendo una matriz de transferencia sólo puede hacerse en sistemas que son periódicos. Algunos trabajos [11,12] se han hecho partiendo de una cadena desordenada finita y saturando sus extremos con una red de Bethe ordenada con un número de coordinación  $z \neq 2$ . Al hacer esto se tienen dos problemas, el primero, tratar de entender el desorden y el segundo, aislar el efecto que causa la red de Bethe en el sistema.



Un método que puede ser empleado para sistemas que no son periódicos es el método de renormalización desarrollado por WB quienes lo aplicaron a sistemas cuasi-periódicos.

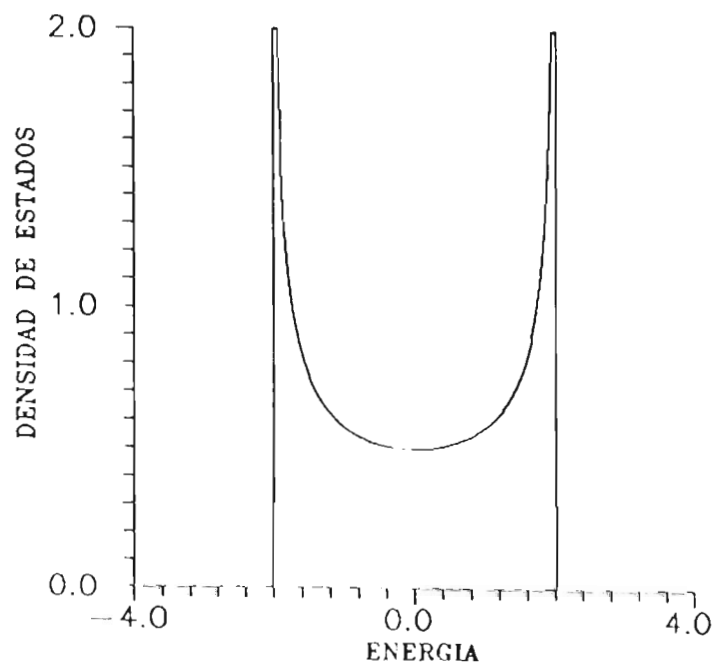


Figura 2. Densidad de estados de una cadena ordenada como una función de la energía  $\omega/2\tau$ .

## RENORMALIZACION DE CADENAS CUASI-ORDENADAS

La construcción de una cadena cuasi-ordenada puede hacerse partiendo de la palabra  $A$  seguida de la palabra  $AB$  y se forman las subsiguientes palabras uniendo la última con la penúltima. En la Fig. 3 se muestran como ejemplo las primeras palabras.

$A$   
 $A B$   
 $A B A$   
 $A B A A B$   
 $A B A A B A B A$   
 $A B A A B A B A A B A A B$   
 $A B A A B A B A A B A A B A B A A B A B A$

Figura 3. Secuencia que muestra el ordenamiento de las letras  $A$  y  $B$  que representan átomos en la construcción de cadenas cuasi ordenadas, observe que a excepción de las dos primeras palabras, las demás se construyen pegando la última con la antepenúltima.

De esta manera se puede construir la palabra tan grande como se quiera. Partiendo de esta idea el método de renormalización puede entenderse más fácilmente.

En el método desarrollado por WB, se utiliza un Hamiltoniano de enlace fuerte para electrones con interacciones sólo a primeros vecinos (Ec. 1). Se definen dos problemas; uno referente al desorden diagonal en el hamiltoniano, que corresponde al problema de sitios, donde se les asigna a los sitios una de las dos autoenergías  $\epsilon_A$  o  $\epsilon_B$ , manteniendo el hopping igual para todos los sitios. El otro es referente al desorden fuera de la diagonal, que corresponde al problema de enlaces, donde asignan dos hopping  $\tau_\ell$  o  $\tau_c$ , dependiendo del acomodo de los átomos  $A$  y  $B$  y se mantiene constante el valor de la autoenergía para todos los átomos.

El proceso de renormalización para el caso de sitios consiste en determinar una cadena de generación  $n$  de dos sitios, que es obtenida al unir las cadenas de generación  $n-1$  y  $n-2$  mediante un hopping efectivo vea Fig. 4.

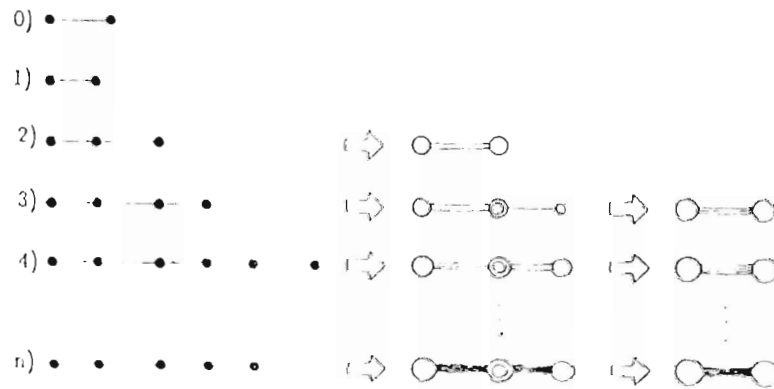


Figura 4. Ilustración del proceso de renormalización de la cadena cuasi-ordenada con átomos de dos tipos.

El proceso se inicia dando las cadenas de generación  $n = 0$  y  $n = 1$ , para obtener la cadena de generación  $n = 2$ , se une la cadena de generación 0 a la derecha de la de generación 1 mediante un hopping efectivo y esta cadena de 4 sitios se renormaliza a una de 2, vea Fig. 5, el proceso se repite cuantas veces se requiera y en cada renormalización de los 4 sitios se obtienen 2 sitios. En la Fig 5 se representa esquemáticamente este proceso.

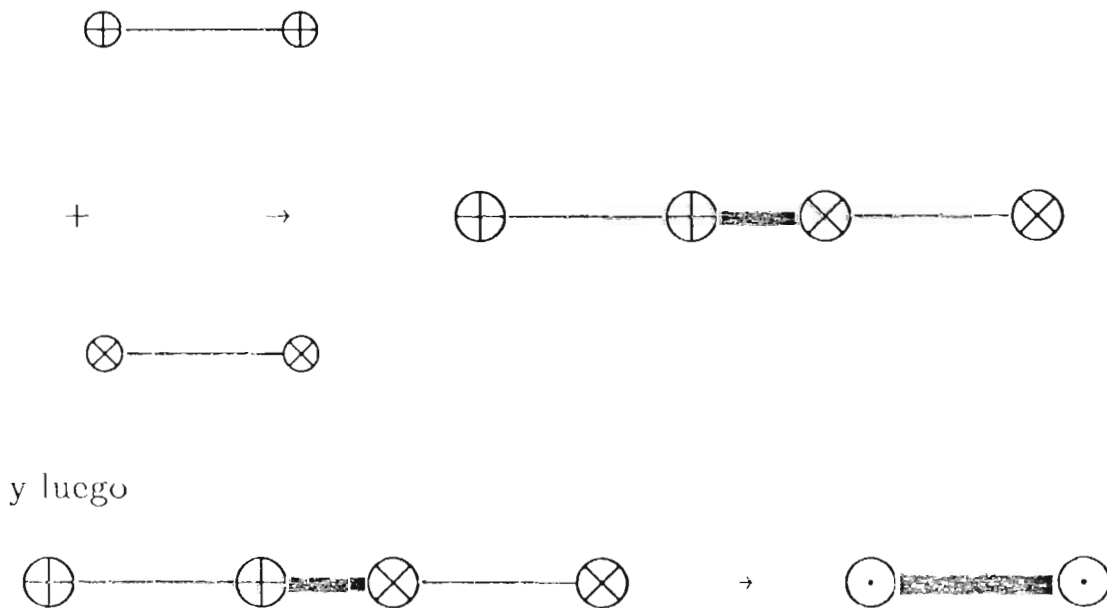


Figura 5. Representación del proceso de renormalización, en una primera parte, se pegan dos cadenas *unidad* mediante un hopping efectivo, formando una cadena de cuatro sitios y luego esta cadena de cuatro sitios se renormaliza a una cadena *unidad* de dos sitios.

Plantean en forma general la renormalización de una cadena de cuatro sitios a una cadena de dos. Con esto, se está en condiciones de mirar cualquier par de cadenas. Al sitio de la izquierda se le

indentifica con el subíndice  $i$ , a los de en medio  $j$  que es el derecho de la primer cadena y  $k$  izquierdo de la segunda cadena, y al último  $d$  vea Fig. 6. Las ecuaciones de movimiento de las funciones de Green para los sitios izquierdo y derecho son:

$$\begin{aligned}
 (\omega - \epsilon_i)G_{i,i} &= 1 + \tau_1 G_{j,i} & (\omega - \epsilon_d)G_{d,d} &= 1 + \tau_2 G_{k,d} \\
 (\omega - \epsilon_j)G_{j,i} &= \tau_1 G_{i,i} + \tau_0 G_{k,i} & (\omega - \epsilon_i)G_{i,d} &= \tau_1 G_{j,d} \\
 (\omega - \epsilon_k)G_{k,i} &= \tau_0 G_{j,i} + \tau_2 G_{d,i} & (\omega - \epsilon_j)G_{j,d} &= \tau_1 G_{i,d} + \tau_0 G_{k,d} \\
 (\omega - \epsilon_d)G_{d,i} &= \tau_2 G_{k,i} & (\omega - \epsilon_k)G_{k,d} &= \tau_0 G_{j,d} + \tau_2 G_{d,d}
 \end{aligned} \tag{10}$$

donde  $\epsilon_i$ ,  $\epsilon_j$ ,  $\epsilon_k$  y  $\epsilon_d$  son las auto-energías de los sitios respectivos,  $\tau_1$  y  $\tau_2$  son los hopping de las cadenas izquierda y derecha respectivamente.



Figura 6. Para llevar a cabo la generalización de la renormalización de dos cadenas *unidad*, se etiqueta a los cuatro sitios que forman esta cadena, así siempre que se renormalicen dos cadenas *unidad*, se identifican como  $i$  y  $j$  a los sitios de la primer cadena,  $k$  y  $d$  a los de la segunda cadena.

Reescriben las funciones de Green en los sitios extremos dándoles forma de una cadena renormalizada de dos sitios.

$$\begin{aligned}
 (\omega - \xi_i)G_{i,i} &= 1 + \Gamma G_{d,i} & (\omega - \xi_d)G_{d,d} &= 1 + \Gamma G_{i,d} \\
 (\omega - \xi_d)G_{d,i} &= \Gamma G_{i,i} & (\omega - \xi_i)G_{i,d} &= \Gamma G_{d,d}
 \end{aligned} \tag{11}$$

donde  $\xi_i$  y  $\xi_d$  son las autoenergías y  $\Gamma$  es el hopping de la cadena renormalizada y estan dados por:

$$\xi_i = \epsilon_i + \frac{(\omega - \epsilon_k)\tau_1^2}{(\omega - \epsilon_j)(\omega - \epsilon_k)\tau_0^2} \quad (12)$$

$$\xi_d = \epsilon_d + \frac{(\omega - \epsilon_j)\tau_2^2}{(\omega - \epsilon_j)(\omega - \epsilon_k) - \tau_0^2} \quad (13)$$

$$\Gamma = \frac{\tau_0 \tau_1 \tau_2}{(\omega - \epsilon_j)(\omega - \epsilon_k) - \tau_0^2} \quad (14)$$

El proceso se repite en el orden previamente mencionado cuantas veces se requiera renormalizar dos cadenas para construir la cadena cuasi-ordenada.

Resuelven el problema de enlaces de manera análoga al de sitios, excepto que en el último paso del proceso de renormalización tienen tres sitios en lugar de cuatro. Porque a los sitios de enmedio de la cadena unida, los expresan mediante un solo sitio con autoenergía la suma de los dos.

El procedimiento lo pueden efectuar tantas veces quieran y pueden calcular la densidad local de estados para el sitio medio en una generación dada. Reportan la densidad local de estados electrónicos en el sitio medio de una cadena de generación  $n = 50$  con los valores  $\tau_\ell = -1.0$  y  $\tau_c = -1.5$  en unidades arbitrarias de energía, vea Fig. 7 .

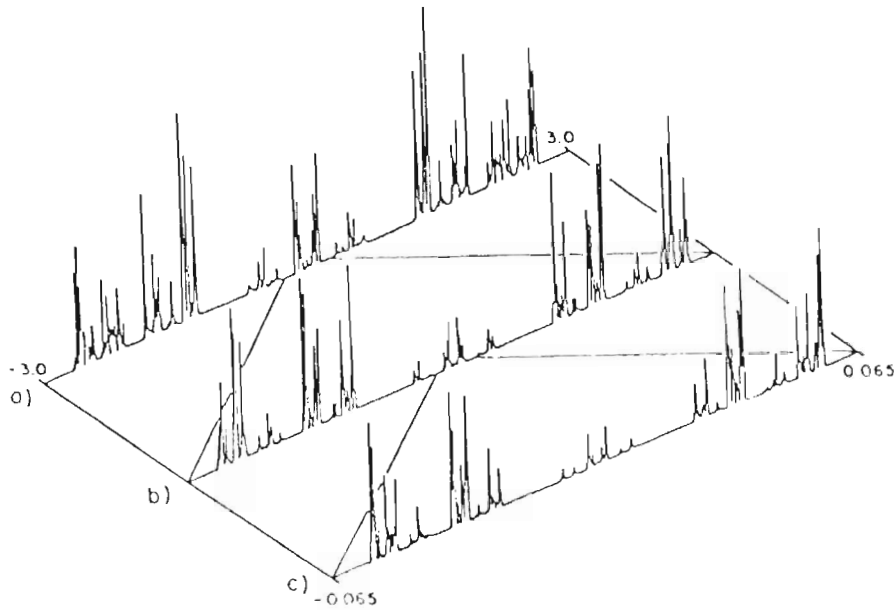


Figura 7. Densidad local de estados del sitio central en una cadena de Fibonacci de generación  $n = 50$ , podemos apreciar el comportamiento auto-similar en la doble amplificación de la porción central, la primera de  $-0.15$  a  $0.15$  y la segunda de  $-0.065$  a  $0.065$  (Tesis doctoral de C. Wang 1989)

Discutiremos en el siguiente capítulo, la incorporación del desorden al proceso de renormalización de sitios que adaptaremos para el caso de una cadena desordenada.



## CADENA DESORDENADA

Partiremos de una cadena de  $N$  átomos de una aleación binaria  $A_x B_{1-x}$  donde  $N_A$  es el número de átomos del tipo  $A$  y  $N_B = N - N_A$  es el número de átomos del tipo  $B$ . Especificado  $N$  y  $N_A$  la concentración de átomos de tipo  $A$  queda determinado  $x = N_A/N$ . El acomodo de los átomos en la cadena lo hacemos como sigue vea Fig. 8: En una cadena de  $N$  sitios primero acomodamos los  $N_A$  átomos del tipo  $A$  y los restantes  $N_B$  sitios son ocupados por los átomos del tipo  $B$ .

A A A A A ... A A B B B B ... B B B

Figura 8. Se representa mediante esta palabra una cadena de  $N$  átomos, que forman una aleación binaria unidimensional  $A_x B_{1-x}$ , donde  $x$  es la concentración de átomos del tipo  $A$ . Dada la concentración, se acomodan primero los átomos  $A$  y luego los  $B$ , luego, intercámbiamos aleatoriamente de lugar dos letras y repetimos el proceso de intercambio un número de veces muy grande para incorporar el desorden a la cadena.

Cada uno de estos átomos ocupa un lugar bien definido en la cadena. La manera de producir el desorden es como sigue: generamos dos números aleatorios entre 1 y  $N$  y los asociamos a los sitios

de la cadena y procedemos a intercambiar los átomos de esos sitios. Este proceso lo repetimos del orden de  $1000N$  veces. Debido a que el número de intercambios de los átomos es muy grande tenemos confianza de que después de tantos cambios generados, los átomos quedan distribuidos completamente al azar.

Renormalizamos ahora la cadena desordenada a una de dos sitios (cadena *unidad*) implementando el proceso de WB; dividimos primeramente a la cadena desordenada en  $N/2$  cadenas *unidad* y procedemos a renormalizarlas en forma consecutiva hasta obtener una sola cadena *unidad* que contiene la información de los  $N$  átomos desordenados. A esta cadena *unidad* renormalizada le llamamos *primera configuración renormalizada*. Posteriormente, producimos otra cadena desordenada de  $N$  átomos que tenga la misma concentración de los átomos  $A$  que la cadena anterior y nuevamente la renormalizamos a otra cadena *unidad* y ésta será la *segunda configuración renormalizada*. El proceso lo volvemos a repetir  $k$  veces hasta obtener  $k$  *configuraciones renormalizadas*, identificándolas por el lugar de aparición en su construcción, ver Fig. 9. Una característica de estas  $k$  *configuraciones* es que conservan la fracción de átomos  $A$  y  $B$ , además de que cada una se desordenó de manera diferente, entonces podemos seguir renormalizando a las *configuraciones renormalizadas* cuantas veces queramos y seguirán conservando estas propiedades.

El siguiente paso consiste en tomar al azar dos *configuraciones renormalizadas* y unir las para formar una nueva *configuración renormalizada* con el mismo proceso de WB. Desechamos la *primera configuración* y recorremos a las demás *configuraciones* y la nueva la colocamos como  $k$  *ésima configuración renormalizada*. Repetimos el proceso  $100k$  veces, donde  $k$  es el número de *configuraciones renormalizadas*, con esto estamos logrando obtener cadenas renormalizadas que representen casi a una cadena infinita de átomos desordenados.

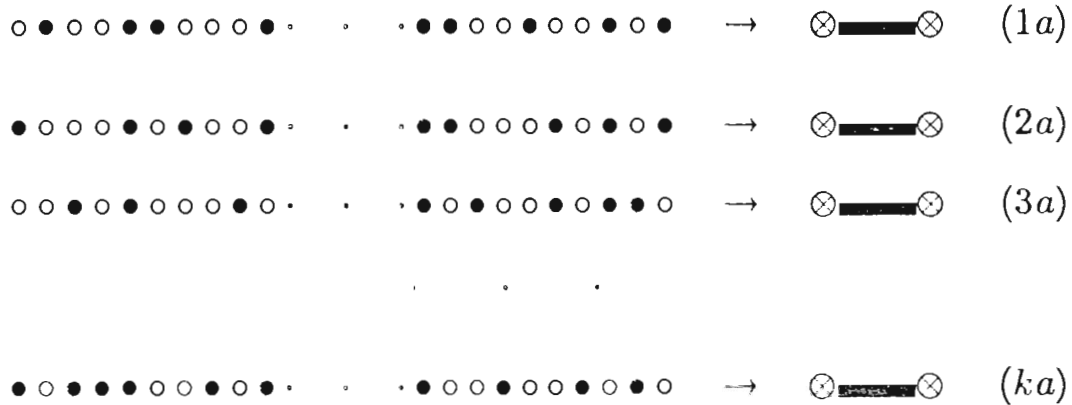


Figura 9. El esquema muestra  $k$  cadenas desordenadas de la aleación unidimensional  $A_x B_{1-x}$  con la misma concentración que son renormalizadas a una cadena *unidad* o a una *configuración*, estas  $k$  *configuraciones* son las que llevan el desorden en la construcción de la cadena infinita desordenada en el proceso de renormalización

Con la información de la última *configuración renormalizada*, que es una cadena *unidad*, podemos calcular la densidad de estados en cualquiera de los dos sitios renormalizados, y en realidad se calcula en un sitio extremo de una cadena finita pero debido al número de renormalizaciones realizadas, la consideramos seminfinita, entonces tendremos que introducir el cálculo para sitios interiores de la cadena seminfinita mediante una transformación de la cadena seminfinita a la cadena infinita, cuestiones que discutiremos en el siguiente capítulo.

## SOLUCION DE LA CADENA INFINITA Y SEMINFINITA

El formalismo matemático utilizado en el capítulo II para determinar la densidad de estados de una una cadena ordenada infinita, lo usaremos para determinar ahora, la densidad local de estados en cualquier sitio de una cadena de seminfinita.

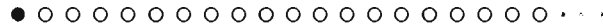
Como se recordará, la función de Green en el sitio medio de la cadena ordenada es:

$$G_{m,m} = \frac{1}{(\omega - \epsilon) - 2\tau\gamma} \quad (15)$$

donde  $\gamma$  es la matriz de transferencia que para este caso es un escalar y satisface la (Ec. 9).

Para la cadena seminfinita vea Fig. 10, tomaremos de igual

manera, átomos con la misma autoenergía  $\epsilon_i = \epsilon$  y el mismo hopping  $\tau_i = \tau$ .



Con las ecuaciones de movimiento para este caso y la introducción de la matriz de transferencia, obtenemos la función de Green en el sitio uno que es el círculo marcado en la Fig. 10.

$$G_{1,1} = \frac{1}{(\omega - \epsilon) - \tau\gamma} \quad (16)$$

Como se podrá observar, esta función difiere de la del sitio medio por un dos que acompaña a la matriz de transferencia.

Para determinar la función de Green en el sitio  $j$ , se procede de forma análoga; planteando primeramente las ecuaciones de movimiento, se introduce un transfer y se obtiene la función de Green que está dada por:

$$G_{jj} = \frac{1}{q_j - \tau\gamma} \quad (17)$$

donde  $q_j$  está dado por la relación de recurrencia :

$$q_j = \omega - \epsilon - \frac{\tau^2}{q_{j-1}} \quad \text{con } q_1 = \omega - \epsilon \quad (18)$$

Calculamos la densidad de estados en varios sitios y encontramos que conforme la calculamos en sitios interiores de la cadena, la densidad local empieza a oscilar alrededor de la densidad de estados de la cadena infinita vea Fig. 11, ésto ha sido reportado en la literatura [12] y las oscilaciones son debidas a que los calculos realizados son de una cadena finita.

Tambien en este ejemplo veremos que las condiciones de contorno modifican sustancialmente la densidad de estados para un punto muy adentro de la cadena, tan adentro que pudiera considerarse como una cadena infinita. Aunque visualmente la densidad de estados oscilante se ve que promedia a la densidad de la cadena infinita, esto tendría que demostrarse.

Como vimos en los capítulos II y III, en el proceso de renormalización lo que encontramos es la densidad de estados en el extremo de la cadena. Si queremos la densidad local de estados en un punto medio de la cadena necesitamos hacer una transformación que nos conecte la función de Green del extremo  $G_{1,1}$  en la función

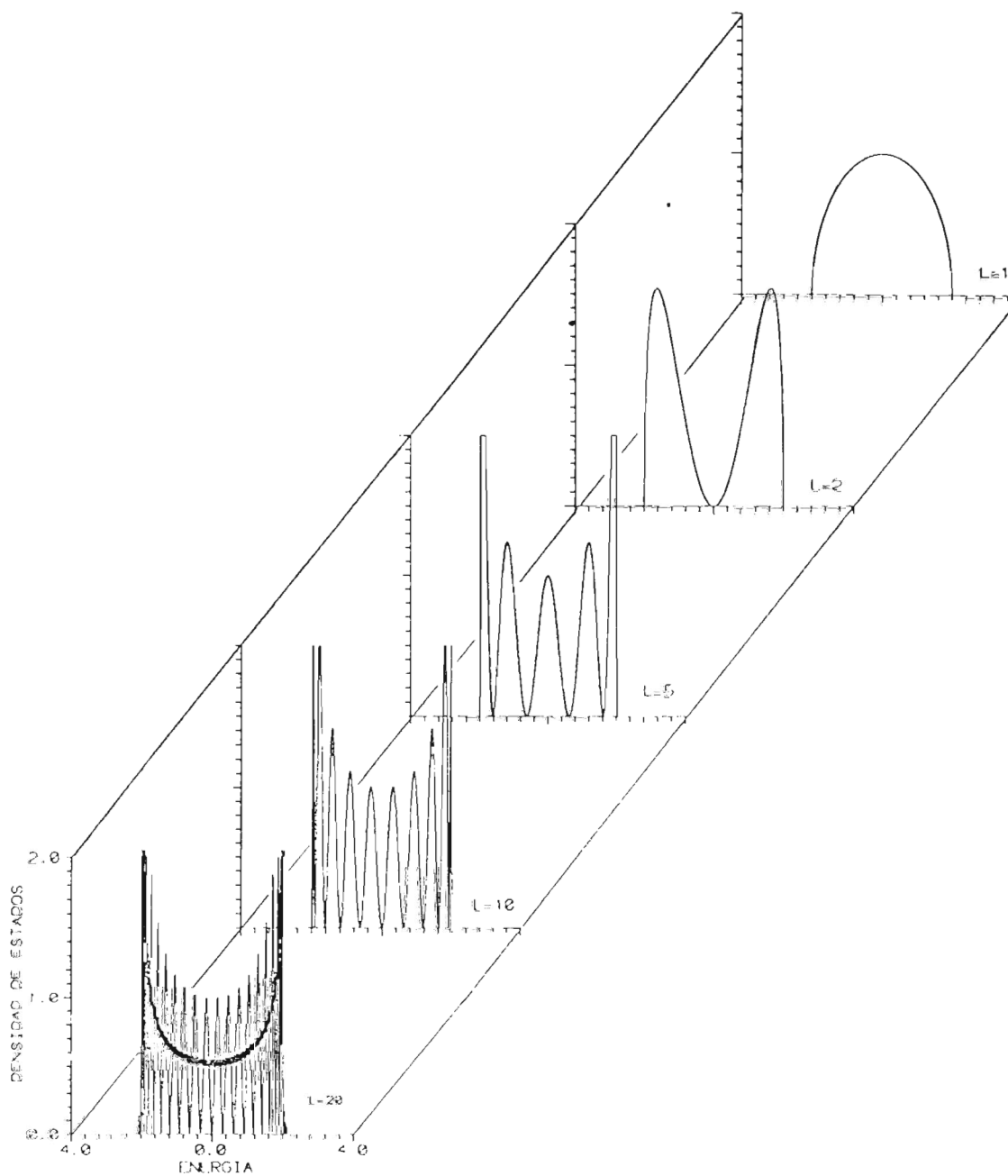


Figura 11. Se grafica la densidad local de estados contra la energía en eV para una cadena seminfinita de átomos con autoenergía  $\epsilon = 0$ . La gráfica con  $L = 1$  corresponde al extremo de la cadena, con  $L = 2$  corresponde al segundo sitio contado a partir del extremo, etc. En  $L = 20$  se sobrepone la densidad de estados de una cadena infinita.

de Green en el punto medio  $G_{m,m}$  de una cadena  $G_{m,m}$  de una cadena infinita. De las Ecs. 15 y 16 obtenemos

$$G_{m,m} = \frac{G_{1,1}}{2 - (\omega - \epsilon)G_{1,1}}. \quad (19)$$

Esta transformación que la obtuvimos apartir de una cadena ordenada también la usamos en el caso desordenado, solo tomamos la autoenergía como  $\epsilon = x\epsilon_A + (1 - x)\epsilon_B$ . Podemos argumentar a favor de esta transformación. Un sistema desordenado puede considerarse como un sistema ordenado con una autoenergía y un hopping efectivo. La autoenergía y el hopping efectivo los proporciona el método de renormalización. En el siguiente capítulo se muestran los resultados obtenidos para diferentes concentraciones.



## DENSIDAD DE ESTADOS

La densidad de estados, juega un papel importante en las propiedades electrónicas de cualquier sistema y sobre todo en sistemas desordenados. Con el proceso de renormalización que ya hemos planteado en la construcción de cadenas desordenadas, podemos calcular, la densidad de estados de una aleación binaria unidimensional  $A_x B_{1-x}$  para cualquier concentración  $x$  de átomos.

Como se recordará en el capítulo IV, para iniciar el proceso de renormalización, se toman  $k$  cadenas de  $N$  átomos cada una, con  $N_A$  átomos del tipo  $A$  y  $N - N_A$  átomos del tipo  $B$ . Cada una de estas cadenas se desordena y cada una de ellas es una *configuración* que se renormaliza a una cadena *unidad*, luego entre las cadenas *unidad* se sigue el proceso de renormalización hasta parar en un cierto número de veces, de tal manera que se tiene una cadena *unidad* renormalizada, producto de un gran número de renormalizaciones, esta es la cadena que nos proporciona la densidad de estados en uno de sus extremos y mediante la transformación que planteamos en el capítulo anterior, calculamos la densidad de estados en el sitio medio de una cadena infinita desordenada.

La generación de números al azar para formar las cadenas desordenadas, inician con una semilla que se le da al programa.

Con esto se generan las  $k$ -configuraciones diferentes y se realiza el proceso de renormalización descrito en los capítulos III y IV y al final obtenemos la densidad de estados del sistema desordenado. Si partimos de otra semilla, obtenemos otra densidad de estados diferente. Si se comparan estas dos densidades encontramos que difieren muy poco entre ellas. Con el fin de obtener un resultado más representativo de la densidad de estados, promediamos sobre 1000 densidades generadas con semillas diferentes.

En la Fig. 12 graficamos la densidad de estados contra la energía para una cadena desordenada y a diferentes fracciones de llenado. Tomamos  $\epsilon_A = 0$ ,  $\epsilon_B = 1$  y  $\tau = 1$  eV. Para  $x = 0.02$  podemos ver una banda que presenta una estructura que oscila alrededor de la densidad de estados de la cadena pura. En la gráfica hemos sobrepuesto la densidad de estados de una cadena pura formada por átomos con autoenergía  $\epsilon_B = 1$  eV. Para  $x = 0.03$  aparecen unos puntos en la base izquierda de la banda, que para  $x = 0.04$  se convierten en estados localizados bien definidos. Al mismo tiempo que se da la aparición de estos estados localizados se observa un ligero ensanchamiento en la banda. Para  $x = 0.1$  siguen estando presentes estados localizados y la banda al correrse ha absorbido a los estados localizados que le quedaban próximos.

En la Fig. 13 presentamos una continuación de la Fig. 12. Para  $x = 0.25$  la banda se ensancha y tiende a atrapar al nuevo estado localizado que existe y para  $x = 0.5$  no aparece ningún estado localizado, solo una banda que da la impresión que tiene gaps en su interior, para concentraciones mayores que  $x = 0.5$  el proceso se repite solo que ahora los estados localizados aparecen en el otro extremo de la banda, dado que ahora los átomos  $B$  pueden considerarse como las impurezas.

Con este comportamiento podemos decir que a bajas concentraciones  $x = 0.02$  el sistema de átomos  $B$  toma como impurezas a los átomos  $A$  y estas impurezas distribuidas al azar producen una

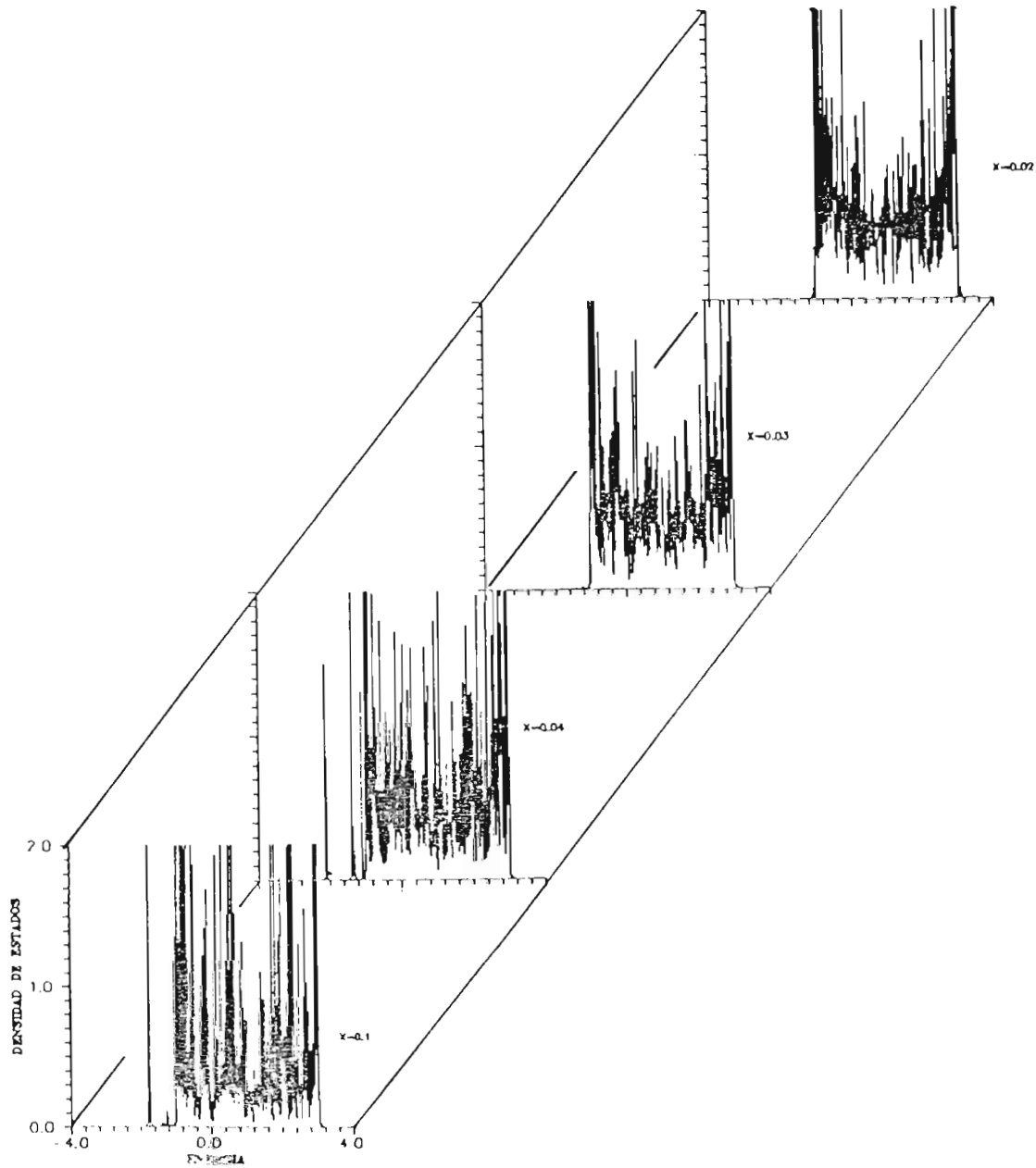


Figura 12. Se grafica la densidad de estados contra la energía en  $eV$  para bajas concentraciones. Se pueden apreciar estados localizados fuera de la banda para concentraciones de  $x = 0.04$  y  $x = 0.1$  se se nota para  $x = 0.03$  empieza a aparecer un estado localizado.

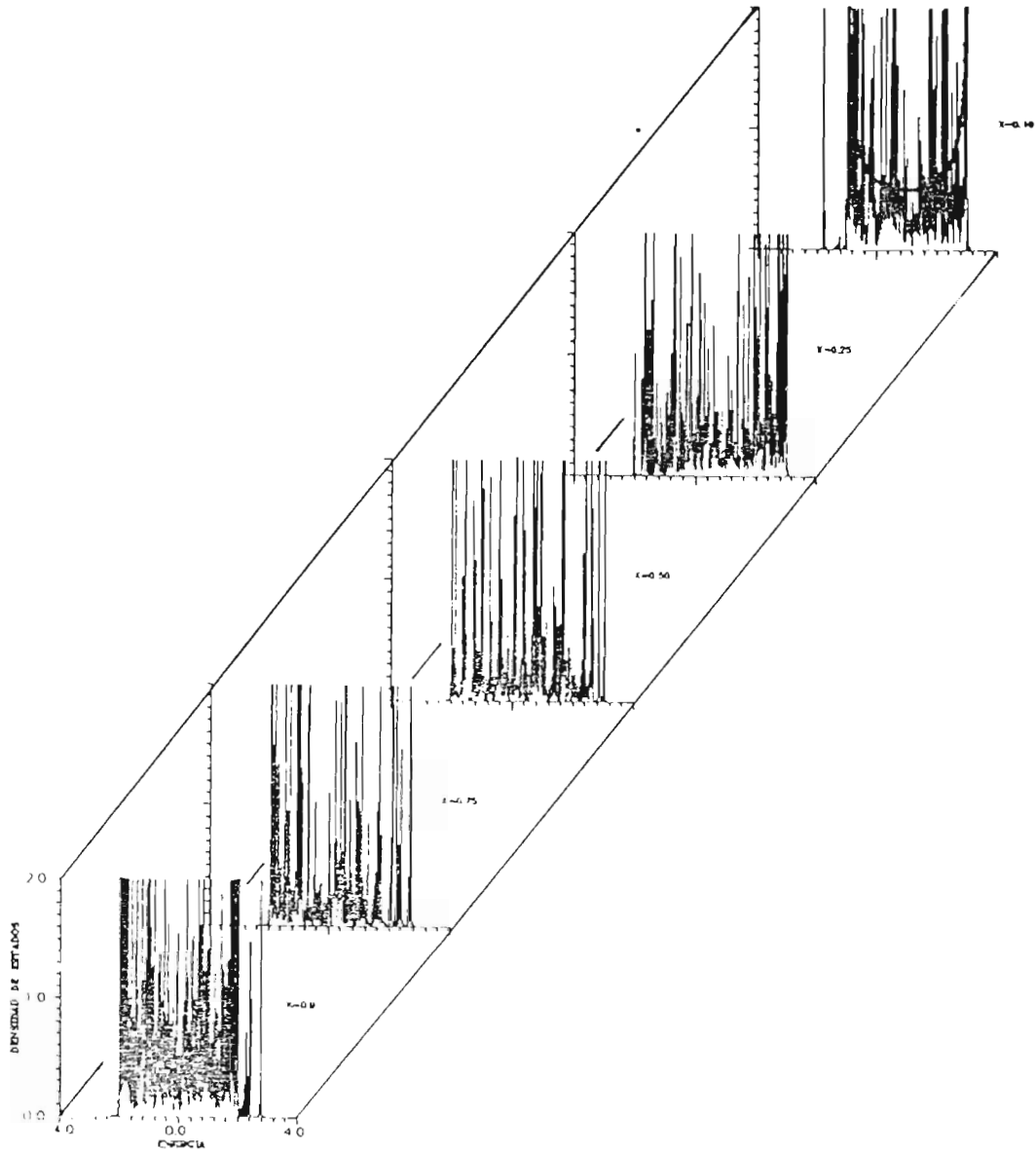


Figura 13. Se muestra la densidad de estados para diferentes concentraciones. Se puede observar que para bajas y altas concentraciones, aparecen estados localizados fuera de la banda, para  $x = 0.1$  y  $x = 0.9$ . Se sobrepone en la figura la densidad de estados de la cadena para centrada en las autoenergías  $\epsilon_B = 1$  y  $\epsilon_A = 0$  respectivamente.

modificación a la densidad de estados del sistema puro. Para  $x = 0.1$  los átomos  $A$  empiezan a ser una cantidad importante y como tal su banda energética tenderá a ser centrada en  $\epsilon_A = 0$  es por esto que se desplaza y absorbe los estados localizados.

En los dos siguientes capítulos, haremos uso de la densidad de estados, para: calcular la densidad integral de estados, la cuál comparamos con otro trabajo y por último, para calcular el cambio de la energía del sistema ordenado al desordenado, con el conocimiento del cambio de la energía, podemos saber si hay decohesión en el sólido.

## DENSIDAD INTEGRAL DE ESTADOS

La determinación de los niveles de energía en un sistema desordenado requiere la solución de un problema de eigenvalores, si se está interesado en determinar de una manera tosca la localización de los eigenvalores o la densidad de estados, se puede calcular el número de niveles de energía abajo de  $E_f$  o la densidad integral de estados  $DIE$ ;

$$DIE = \int_{-\infty}^{E_f} \rho(\omega) d\omega \quad (20)$$

En realidad la  $DIE$ , es el número total de nodos en la función de onda a la energía  $E_f$  y se puede obtener mediante un proceso de cómputo o en algunos casos analíticamente [1-4], para obtener la densidad de estados, se deriva numéricamente la  $DIE$ , esto implica que la gráfica de la densidad de estados sea un histograma en lugar de una curva, debido a que no se tiene información de como varía la  $\rho(\omega)$  entre los puntos a los cuales los nodos fueron contados [2,11]. El procedimiento anterior, quiere decir que la densidad de estados

es calculada de manera indirecta y es por eso que la gráfica sea un histograma, no es factible con este método que se tenga buena resolución de la densidad de estados, pero si se calcula la densidad de estados en forma directa, como lo hemos hecho, se tiene más resolución.

Nosotros calculamos mediante un proceso de integración la densidad integral de estados para las cadenas desordenadas a diferente concentración y obtenemos los siguientes resultados como pueden verse en la Fig. 14; para  $x = 0.01$  tenemos una *DIE* que practicamente coincide con la de la cadena pura con un valor de la autoenergía  $\epsilon_B = 1$ ; así, la *DIE* toma el valor de cero para energías menores que  $-1 eV$ , toma valores continuos desde 0 hasta 1 para valores de la energía entre  $-1 eV$  y  $3 eV$  y toma el valor de 1 para valores de la energía mayores que  $3 eV$ . La única diferencia entre la *DIE* de la cadena pura, centrada en uno y la cadena desordenada con  $x = 0.01$  es la aparición de una ligera rugosidad, pero mantiene la forma.

Al aumentar la concentración,  $x = 0.1$ , el dominio de la *DIE* comienza a crecer con la aparición de un gapp en la parte izquierda, y se levanta más rápidamente para valores más bajos de la energía, y se acerca lentamente a uno para valores más grandes de la energía, aquí se pierde la forma suave de la *DIE* pura, apareciendo rugosidad.

Para la concentración  $x = 0.25$ , es marcado un cúmulo de gaps en la parte izquierda y mucho más rápido el levantamiento para valores más bajos de la energía y aumenta la rugosidad

Para la concentración  $x = 0.5$ , aparece la mayor rugosidad, se pueden identificar varios gaps, el dominio de definición aumentó de longitud a 5 unidades de la energía empezando en el valor de  $-2$  y termina en 3 unidades de energía, se mantiene un mayor levantamiento, excepto para algunos valores grandes de la energía.

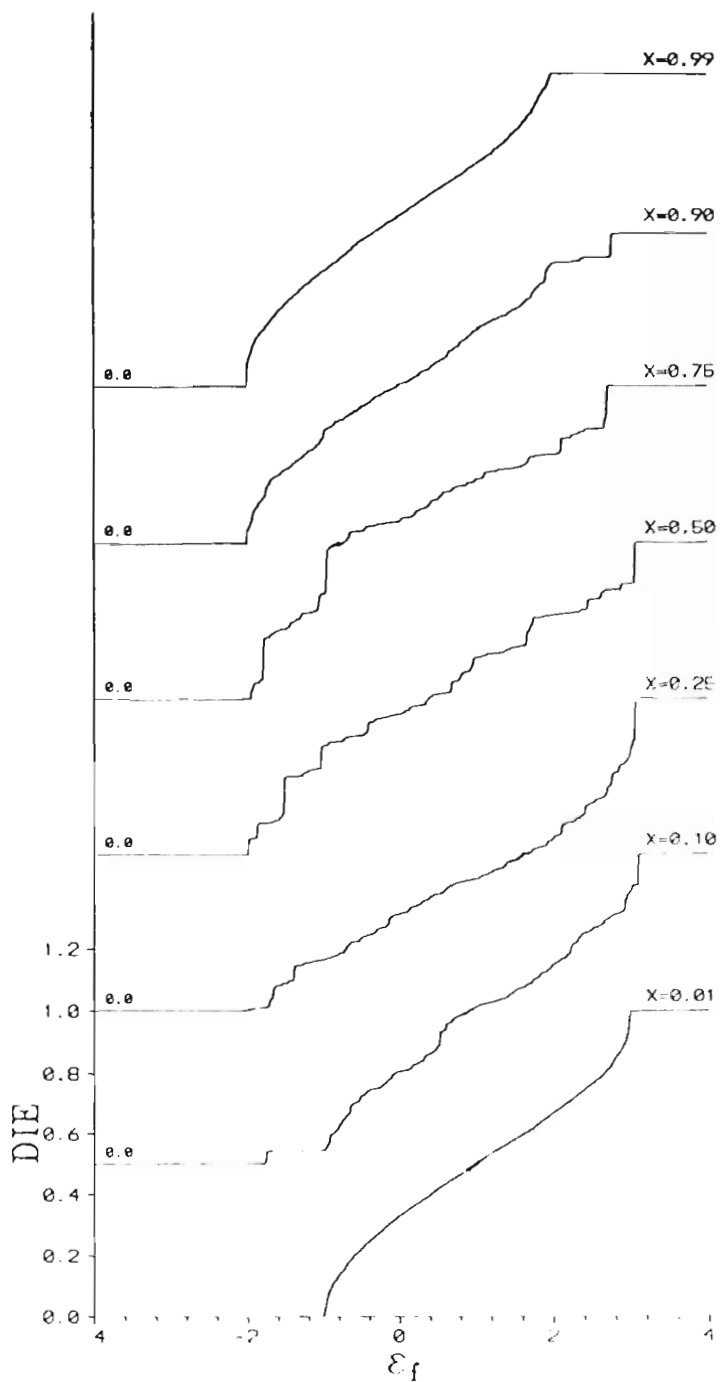


Figura 14 Se grafica la densidad integral de estados contra la energía en eV para diferentes concentraciones, se puede observar en algunas de ellas la aparición de gaps y casi la recuperación de las cadenas puras,  $x = 0.01$  y  $x = 0.99$ .



Para mayores concentraciones se lleva a cabo un proceso de ajuste a la *DIE* de una cadena pura, pero ahora centrada en  $\epsilon_A = 0$ , conforme la concentración crece, la rugosidad paulatinamente disminuye y aparecen gaps en la parte derecha . Como podemos apreciar en las gráficas de la *DIE*, estas no dan información tan detallada como la densidad de estados, como puede verse por ejemplo la *DIE* para  $x = 0.01$  y la densidad de estados para la misma concentración

## CAMBIO EN LA ENERGIA DEL SISTEMA

Estudiamos los efectos electrónicos producidos en una cadena lineal desordenada. Estos efectos están relacionados con el cambio en la energía  $\Delta E$  del sistema ordenado al sistema desordenado.

Dependiendo de los parámetros electrónicos de la cadena desordenada, uno puede saber si se produce cohesión o decohesión en el sólido [13,14].

El cambio en la energía, se define en términos de la densidad de estados de la cadena desordenada  $\rho$  y la densidad de estados de la cadena ordenada  $\rho_0$  mediante:

$$\Delta E = \int_{-\infty}^{E_f} [\rho(\omega) - \rho_0(\omega)] \omega d\omega \quad (21)$$

donde  $\omega$  es la energía. La densidad de estados de la cadena desordenada ya la hemos calculado, el problema ahora es el cálculo de la densidad de estados de la cadena ordenada el cual consiste en determinar que tipo de arreglo es el que tomamos para una concentración

$x$ , ya que existe un número infinito de arreglos que satisfacen ser cadenas ordenadas, vea Fig. 15, así, tendremos un número infinito de densidades de estados distintas para la misma concentración  $x$ .

$A \ B \ A \ B \ A \ B \ A \ B \ A \ \cdot \ \cdot \ \cdot$   
 $A \ A \ B \ B \ A \ A \ B \ B \ A \ \cdot \ \cdot \ \cdot$   
 $A \ A \ A \ B \ B \ B \ A \ A \ A \ \cdot \ \cdot \ \cdot$   
 $\cdot \ \cdot \ \cdot$

Figura 15. Representación de algunos ejemplos de cadenas ordenadas diferentes pero de concentración igual a 0.5.

Definimos entonces, una cadena ordenada *modelo* como aquella que en su parte periódica es de menor longitud. En la Fig. 16 se muestran las cadenas ordenadas *modelo* de concentración 0.25, 0.5 y 0.75.

$\cdot \ \cdot \ \cdot \ A \ B \ B \ B \ A \ B \ B \ B \ A \ \cdot \ \cdot \ \cdot$   
 $\cdot \ \cdot \ \cdot \ A \ B \ A \ B \ A \ B \ A \ B \ A \ \cdot \ \cdot \ \cdot$   
 $\cdot \ \cdot \ \cdot \ A \ A \ A \ B \ A \ A \ A \ B \ A \ \cdot \ \cdot \ \cdot$

Figura 16. Representación de cadenas ordenadas *modelo* de concentraciones 0.25, 0.5 y 0.75 respectivamente.

En la Fig.17 presentamos el cambio de energía en función del

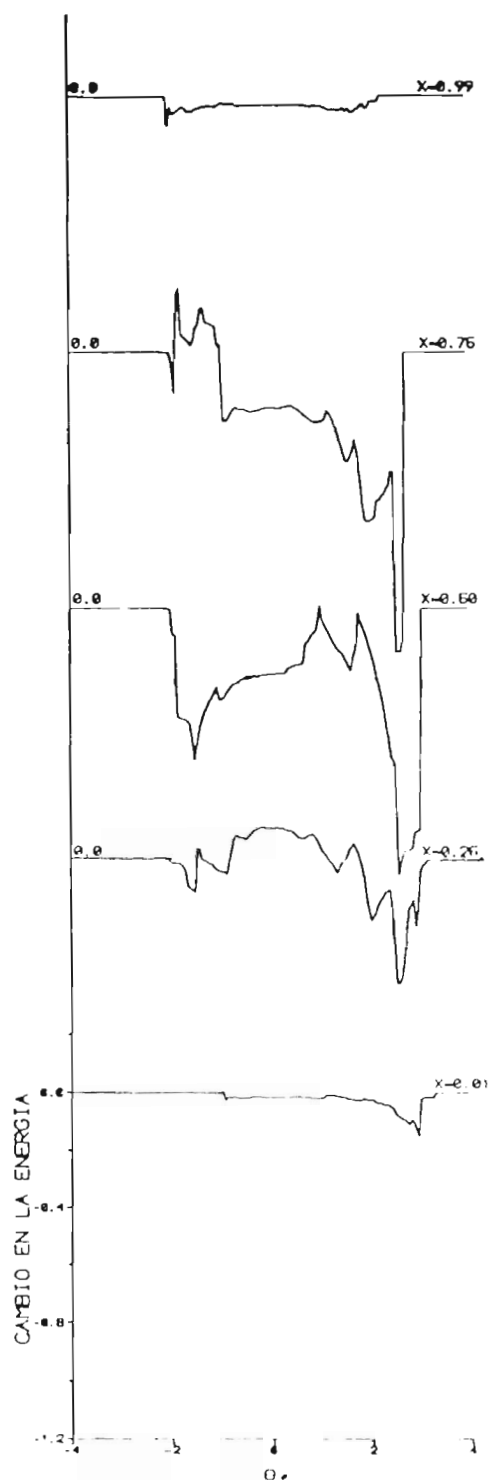


Figura 17. Se muestra el cambio en la energía como función del llenado de bandas, se observa que para  $x = 0.1$ ,  $x = 0.5$  y  $x = 0.99$  el cambio en la energía es negativa, y para  $x = 0.25$  y  $x = 0.75$  existen intervalos donde el cambio en la energía es positiva.

llenado de banda para diferentes concentraciones. Podemos ver que para  $x = 0.01$ ,  $x = 0.99$  y  $x = 0.5$ , el cambio en la energía es siempre negativo, esto implica que tenemos un sistema que produce cohesión en el sólido, para concentración  $x = 0.25$  tenemos variación en el signo del cambio de la energía, es notorio que para valores de la energía cercanos a cero, aparece la  $\Delta E > 0$  en una buena proporción, en esta región, como en las otras donde  $\Delta E > 0$  el sistema produce decohesión en el sólido, y por último, para la concentración  $x = 0.75$  aparece una región en la energía de menores dimensiones cargada hacia los valores más bajos de la energía donde la  $\Delta E$  es positiva produciéndose en estos valores decohesión y en el resto de los valores de la energía se produce cohesión.

## CONCLUSIONES

El método de renormalización para calcular la densidad de estados de la cadena ordenada y cuasi-ordenada fué extendido para el caso de cadenas desordenadas, este método puede recuperar los casos límites que son la cadena ordenada y la cuasi-ordenada.

Calculamos la densidad de estados para diferentes concentraciones y encontramos para bajas y altas concentraciones, la aparición de estados localizados fuera de la banda como es reportado en la literatura [1,2]

Se puede calcular la *DIE* a partir del conocimiento de la densidad de estados y en nuestros resultados, los estados localizados que aparecen, son los responsables del rápido levantamiento en la *DIE* que reporta Dyson

Podemos saber, para todos los intervalos de energía, si el sistema desordenado coexiste o no en el sólido, una vez conocido el cambio en la energía  $\Delta E$

## REFERENCIAS

- [1] J. M. Ziman, *Models of Disorder*, Cambridge University Press 1979.
- [2] M. Plischke y B. Bergersen, *Equilibrium Statistical Physics*, Prentice Hall, Advanced Reference Series, 1989.
- [3] Freeman J. Dyson, *Phys. Rev.*, **92**, 1331(1953)
- [4] Helmut Schmidt, *Phys. Rev.*, **105** 425(1956)
- [5] Herbert B. Rosentock and Richard E. McGill, *Journal of mathematical Phys.*, **3**, 200(1962)
- [6] Herbert B. Rosentock and Richard E. McGill, *Phys. Rev.*, **176**, 1004(1968)
- [7] Economou E.N., *Green's Functions in Quantum Physics*, (Springer Series en Solid-State Sciences, Vol 7, Segunda Edición, 1983)
- [8] Matsuda H., *Prog. Theor. Phys., Suppl.* **23**, 23(1962)

- [9] Chumin Wang, Ph.D. Tesis, Instituto de Investigación de Materiales, U.N.A.M., (1989)
- [10] Chumin Wang y R.A. Barrio, Phys. Rev. Lett. **61**, 191, (1988)
- [11] E. Marx-Pérez y F. Aguilera-Granja, Revista Mexicana de Física **38**, No. 4,664 (1992)
- [12] Felix Yndurain and R. Barrio, Phys. Rev. B, **28**, 3576 (1983)
- [13] Villaseñor-González P, Uriás J, Morán-Lopez J L, J.Phys. F: Met. Phys. **14**, 381-385, (1984)
- [14] Reidinger R, Dreysse H, Phys. Rev., B **27**, 2073-81, (1983)

EX LIBRIS



SISTEMA DE  
BIBLIOTECAS  
U.A.S.I.P.

No. DE REG.



111

111

111