



**Casa abierta al tiempo**  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

**Partícula en una estructura localmente  
periódica: evolución con el tamaño  
del sistema**

Tesis que para obtener el grado de  
Doctor en Ciencias (Física)  
presenta

**Víctor Domínguez Rocha**

Asesor de Tesis:  
**Dr. Moisés Martínez Mares**

Jurado:

Presidente: Dr. Eleuterio Castaño Tostado

Secretario: Dr. Moisés Martínez Mares

Vocal: Dr. Salvador Antonio Cruz Jiménez

Vocal: Dr. Rafael Alberto Méndez Sánchez

Vocal: Dr. Emerson Leao Sadurní Hernández

México D. F., 18 de julio de 2014



**Partícula en una estructura localmente  
periódica: evolución con el tamaño  
del sistema**

*Tesis que para obtener el grado de Doctor en Ciencias (Física)  
presenta*

**Víctor Domínguez Rocha**

Departamento de Física  
Ciencias Básicas e Ingeniería  
Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa



A mi familia,  
A mi mariposa,  
A *nuestra* América.



# Agradecimientos

Agradezco a mi madre, Leticia Rocha, a mi padre, Mario Domínguez, y a mi hermana, Samantha Domínguez, por todo el tiempo que me han apoyado en este proyecto; por toda su dedicación, paciencia y ayuda incondicional que ha ido más allá de su deber; sobre todo porque siempre han creído en mí de la misma manera, o más, en que yo he creído en ustedes. Los amo.

Para el gran amor de mi vida, Anaid Flores, no me queda más que decirle gracias por todo. Gracias por tantas enseñanzas, por todo el tiempo, por la dedicación, por los cuidados, por el empuje, la motivación y el ánimo, por mostrarme que este mundo es distinto, por tomar mi mano y llevarme por el mundo redescubriendo sus cosas, por abrir mis sentidos a nuevas sensaciones, por escuchar, apoyar y por ser severa cuando fue necesario. En resumen, gracias por hacer de mí una mejor persona. Te amo mosa.

A Gilberto, Francisco, Lidia, Eliuth, Fernando, Pepe, Malka, Ricardo, Marcel, David, Juan, Elías, Ernesto, Daniel, Kenya, Jazmín, Carlos y a mi *manicagua* Chung por todas esas charlas y rescates emocionales cuando la cólera me mordía, por todas las gozosas tardes y noches que pasamos charlando, trabajando, discutiendo, compartiendo ideas, cafés y demás.

A todos los profesores que siempre estuvieron ahí en el arduo proceso de mi formación académica con paciencia y severidad, particularmente a todos aquellos que me han compartido sus consejos y experiencias para mi superación personal. Mi gratitud infinita para todos ustedes.

A Elías Castellanos, Juan Rivas, Rafael Méndez, Antonio Juárez, Jesús Flores y Argelia Pérez quienes depositaron su confianza en mí para la generación de conocimientos nuevos.

Agradezco profundamente a la Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa por acogerme en este tiempo. Al Departamento de Física y a su cuerpo de administrativos

---

quienes hicieron más ligero mi paso por esta universidad. En particular agradezco al Posgrado en Física de esta casa de estudios y a su coordinador, Abel Camacho, por permitirme un espacio de trabajo y las condiciones para sacar adelante este proyecto.

Agradezco el apoyo económico del CONACyT, del Dr. Christof Jung y del Dr. Antonio Juárez ya que sin éstos no hubiera sido posible completar de forma adecuada los estudios realizados.

Finalmente agradezco a mi asesor de tesis por todo el tiempo que hemos compartido juntos, por mostrarme su manera de trabajar, por dirigir mi camino, por corregir actitudes y empujar cuando ha sido necesario y por su enorme paciencia. Mil gracias.

# Índice general

<b>Resumen</b>	<b>1</b>
<b>Abstract</b>	<b>3</b>
<b>Introducción</b>	<b>5</b>
<b>1. Una cadena localmente periódica</b>	<b>9</b>
<i>Formalismo dispersivo para la cadena finita</i> . . . . .	10
<i>La función de onda del sistema</i> . . . . .	12
<i>Sensibilidad a las condiciones iniciales</i> . . . . .	14
<i>Las bandas en el límite cristalino</i> . . . . .	15
<b>2. Dispersión y dinámica de mapas no lineales</b>	<b>19</b>
<i>La matriz de dispersión</i> . . . . .	20
<i>La matriz de dispersión para la cadena finita</i> . . . . .	20
<i>Reducción a un mapa no lineal</i> . . . . .	22
<i>La evolución con el número de celdas</i> . . . . .	28
<b>3. Comportamiento de la función de onda</b>	<b>33</b>
<i>La evolución con el tamaño del sistema</i> . . . . .	34
Comportamiento espacial de la función de onda . . . . .	35
<b>4. Propuesta teórico-experimental en una barra elástica</b>	<b>39</b>
<i>Condiciones a la frontera de la celda unitaria</i> . . . . .	40
<i>La matriz de dispersión de una muesca <math>S_M</math></i> . . . . .	42
<i>Varilla elástica rectangular con <math>N</math> muescas</i> . . . . .	44
<b>Conclusiones</b>	<b>51</b>

<b>A. Un par de potenciales analíticamente solubles</b>	<b>55</b>
<i>Potencial escalón</i> . . . . .	56
<i>Potencial delta</i> . . . . .	58
<b>B. La estructura cristalina en una dimensión</b>	<b>63</b>
<i>Proceso iterativo por medio de la matriz de transferencia</i> . . . . .	64
<i>Valores propios de la matriz de transferencia</i> . . . . .	65
 <b>Bibliografía</b>	 <b>67</b>

# Resumen

En este trabajo estudiamos una cadena lineal de dispersores, de forma arbitraria, cuyo número es finito y están dispuestos en forma ordenada; es decir, es un sistema localmente periódico. Por simplicidad, sin perder generalidad, nos enfocamos en el caso en que la cadena está abierta sólo por un lado, el otro está bloqueado por un potencial escalón. Por medio de las matrices de transferencia  $M$  y de dispersión  $S$ , estudiamos cómo cambian las propiedades del sistema cuando el número de dispersores va aumentando. En particular estudiamos la evolución de la función de onda con el tamaño del sistema, la formación de las bandas en el límite cristalino ideal y logramos entender las longitudes típicas en el sistema. Para la matriz  $S$  encontramos una relación de recurrencia en el número de dispersores, para la cual tomamos ventaja de la teoría de mapas. Demostramos que el comportamiento de la función de onda con el tamaño del sistema está dado por la sensibilidad a las condiciones iniciales. Para un número suficientemente grande de dispersores encontramos cómo se forman las bandas del sistema. En su evolución hacia el sistema infinito encontramos que la función de onda decae exponencialmente en la banda prohibida, oscila en la banda permitida y decae como una exponencial  $q$  cerca de la transición entre las bandas, por el lado de la banda permitida. También, estudiamos las propiedades espaciales del sistema cuando el número de dispersores se mantiene fijo. Encontramos que la longitud de decaimiento en la transición es el camino libre medio dividido por dos, donde éste es mayor que la constante de la red, en completo acuerdo con resultados conocidos en la literatura para una superred. Finalmente, damos las bases teóricas para una realización experimental en un sistema elástico, el cual consiste en excitar y detectar la amplitud de vibraciones torsionales en una barra elástica de sección transversal cuadrada, con una serie de muescas cuyo número va aumentando.

---

# Abstract

We study a linear chain of scatterers, of arbitrary shape, whose number is finite and are disposed in an ordered array; *i.e.*, it is a locally periodic system. For simplicity, without loss of generality, we focus in the case where the chain is open only by one side, the other one is blocked by a potential step. By means of the transfer  $M$  and scattering  $S$  matrices, we study how the properties of the system change when the number of scatterers increases. In particular we study the evolution of the wave function with the system size, the formation of the bands in the ideal crystalline limit, and we understand the typical lengths of the system. For the  $S$  matrix we find a recursive relation with the number of scatterers, for which we take advantage of the map theory. We show that the behaviour of the wave function with the system size is given by the sensitivity to initial conditions. For a large enough number of scatterers we find how the bands of the system are formed. In its evolution towards the infinite system we find that the wave function decays exponentially in the bandgap, oscillates in the allowed band and decays as an  $q$ -exponential near the transition between bands from the the allowed band side. Also, we study the spatial properties of the system when the number of scatterers is fixed. We find that the decay length at the transition is just the mean free path divided by two, which is larger than the lattice constant, in complete agreement with known results in the literature for a superlattice. Finally, we give the theoretical bases for an experimental realization of an elastic system, which consists of exciting and detecting the amplitude of torsional vibrations in an elastic rod of square cross section with a series of notches whose number increases.



# Introducción

El abismo no nos detiene, el agua  
es más bella despeñándose.  
Ricardo Flores Magón

En teoría, los cristales ideales se definen como la repetición periódica e infinita de un solo elemento constituyente, el cuál se compone de una *celda unitaria primitiva* más una *base*<sup>1</sup> [1–3] (ver figura 1). Estos han sido estudiados en forma exhaustiva por muchos autores desde el modelo original de Bloch [4]. La teoría de bandas describe perfectamente cómo los niveles de energía del cristal ideal se agrupan en algunas regiones mientras que en otras no lo hacen; estas son las bandas permitidas y prohibidas.<sup>2</sup> Aunque esta idea surgió inicialmente en sistemas cuánticos [5], la teoría de bandas se puede aplicar en forma natural a cualquier sistema que acepte una descripción ondulatoria, como en la teoría electromagnética [6, 7], en la acústica [8] o en la elástica [9, 10]. Si bien los cristales ideales nos ayudan a comprender muchas de las propiedades de los sólidos finitos, ninguna estructura en la naturaleza es estrictamente un cristal. Más aún, en la actualidad se construyen sistemas ordenados con fines específicos, llamados *localmente periódicos* [11], los cuales se componen de  $N$  elementos base ( $N \in \mathbb{Z} \geq 0$ , donde  $\mathbb{Z}$  representa el conjunto de los números enteros). Ejemplos de sistemas localmente periódicos son las estructuras de capas periódicas [12–14], redes ópticas construidas para modelar sistemas de materia condensada [15–19], materiales quiralmente estructurados [20], sistemas de microondas [6], cristales fotónicos [7, 21, 22], cristales fonónicos [23, 24], cristales acústicos [25] o sistemas elásticos [9, 10].

Usualmente se considera que los sistemas localmente periódicos reproducen las propiedades de los cristales ideales cuando  $N$  es suficientemente grande, es decir, cuando

---

<sup>1</sup>Me voy a referir a la suma de ambos elementos simplemente como *celda unitaria*.

<sup>2</sup>Cuando hacemos propagar electrones con energías en las regiones de las bandas permitidas es posible la transmisión de ellos. En caso contrario, los electrones no se propagarán a través del cristal ideal.

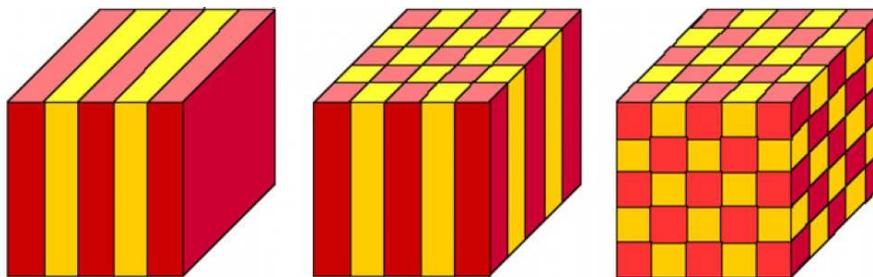


Figura 1: Segmentos de cristales fotónicos ideales en una (izquierda), dos (centro) y tres dimensiones (derecha).

éstas no cambian significativamente. Por lo tanto, muchos de los trabajos existentes sobre sistemas localmente periódicos consideran varios casos de  $N$  fija, cuando intentan reproducir las propiedades de los cristales [11, 26–30]. Por ejemplo, en la figura 2 se observa una estructura para cada  $N$  que se asemeja más a la de bandas en los casos de  $N$  grande. En la región prohibida la transmisión tiende a cero, mientras que en la región permitida no lo hace. En la figura 3 la transmitancia muestra una estructura de bandas en la frecuencia para una guía circular de microondas de 16 celdas de teflón [6].

Un pregunta interesante que surge inmediatamente es cómo o cuándo se alcanzan las propiedades de los sistemas de tamaño infinito; es decir, cuándo y cómo un sistema localmente periódico se transforma en un cristal estrictamente hablando. Para tratar de responder a esta pregunta es necesario estudiar la evolución de las propiedades del sistema conforme  $N$  va aumentando. Como puede apreciarse de la figura 2, las propiedades del sistema evolucionan de manera diferente para energías en las distintas bandas del sistema infinito.

En un primer intento por responder la pregunta anterior, se estudió la conductancia en un árbol de Cayley doble como función del número de veces que se ha ramificado (conocido como generación) que juega el papel de  $N$  [31]. Se ha mostrado una equivalencia directa entre el transporte electrónico y la dinámica de un mapa no lineal, que presenta regiones de caos débil y de periodo 1. En estas regiones los exponentes de Lyapunov correspondientes son nulos y negativos, indicando fases conductoras y aislantes [32] (el exponente de Lyapunov en la ventanas de periodo 1 toma valores negativos y positivos, los primeros nos dan la solución estable, mientras que los valores positivos se relacionan con soluciones inestables, como se explicará más adelante). La conductancia oscila con la generación en los atractores débilmente caóticos del mapa, indicando estados conductores. En los atractores de periodo 1, la conductancia decae exponencialmente con

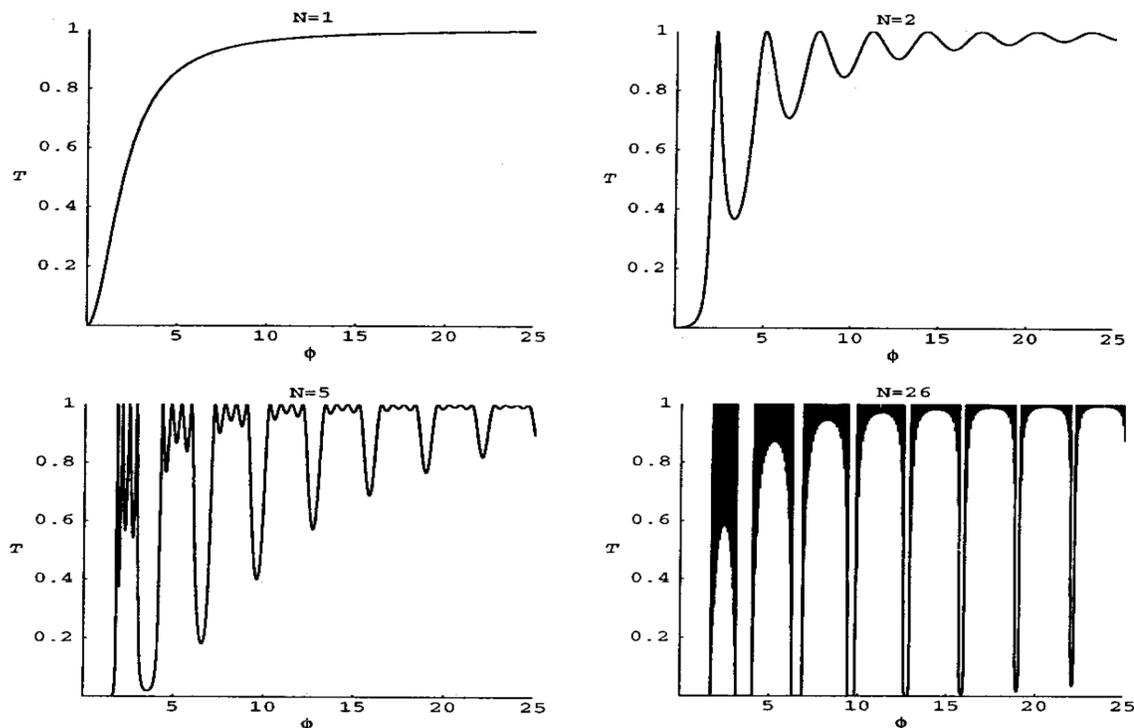


Figura 2: Coeficiente de transmisión  $T$  para una cadena de  $N$  potenciales delta ( $N = 1, 2, 5$  y  $26$ ), como función del número de onda  $\phi = \sqrt{2ME/\hbar^2}$ , donde  $M$  es la masa del electrón y  $E$  su energía [11].

$N$ , como es típico de estados aislantes, pero en la transición la intermitencia del mapa hace que la conductancia alcance la fase aislante en una forma exponencial  $q$ . Entonces, existen escalas de longitud típica en las diferentes regiones de la energía que requieren de ser entendidas.

Una forma de obtener información acerca del comportamiento metálico o aislante de la conductancia es a través de un análisis de escalamiento [33]. Sin embargo, ya que la conductancia es una cantidad global, poco o nada se puede decir del carácter local del sistema. Por lo tanto, es importante estudiar la función de onda directamente, ya que su comportamiento espacial, y su evolución con el tamaño del sistema, nos permitirán entender cuándo el sistema se comporta como conductor o como aislante.

El propósito de esta tesis es realizar un estudio que nos permita comprender el proceso de formación de las bandas, determinar la naturaleza de los estados y entender las longitudes típicas en el sistema. Para lograr este fin, nos centraremos en la evolución de las propiedades del sistema, en particular de la función de onda como función del tamaño del sistema.<sup>3</sup> A continuación estudiaremos las propiedades espaciales de la función

<sup>3</sup>Nos referimos al tamaño del sistema como el número de celdas unitarias del cuál se compone.

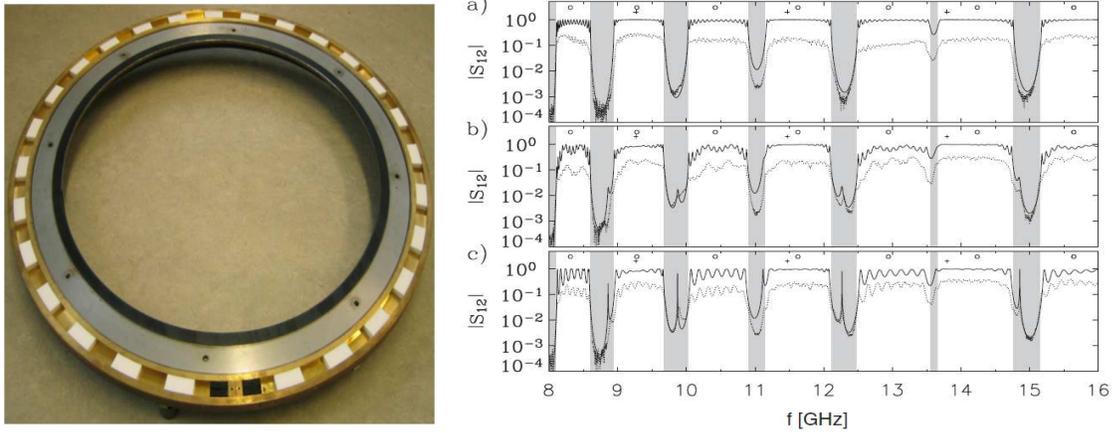


Figura 3: Estructura de bandas de una cadena lineal simulada por una guía circular en un experimento con microondas [6].

de onda cuando el tamaño del sistema se mantiene fijo ( $N$  fija). Para ello, analizaremos el sistema más sencillo posible que nos permita obtener esta información. Este sistema se compone de una cadena lineal ordenada localmente periódica de dispersores arbitrarios, en una dimensión. Por simplicidad, y sin pérdida de generalidad, nos enfocaremos en el caso en que nuestro sistema está abierto sólo por un lado. La información física es la misma que para el caso abierto de ambos lados ya que, en el caso particular de la matriz  $S$ , el sistema se puede diagonalizar y ambas entradas de la matriz resultante son equivalentes.

La tesis está organizada como sigue. En el próximo capítulo presentamos el sistema que se forma al añadir dispersores uno a uno para contruir la cadena lineal; trabajaremos en el formalismo dispersivo, con el enfoque de la matriz de transferencia  $M$ , la cual nos permitirá conocer la dependencia de la función de onda con la condición inicial del sistema a través de la sensibilidad a las condiciones iniciales en el proceso iterativo. En el capítulo que le sigue presentamos el formalismo de la matriz de dispersión  $S$  para la cadena, la que nos permitirá reducir el problema a uno de dinámica de mapas no lineales. Tanto el comportamiento de la función de onda con el tamaño del sistema y como el espacial a tamaño fijo lo presentamos en el penúltimo capítulo. En el último capítulo realizamos una propuesta experimental con sistemas elásticos en el rango acústico. Al final presentamos las conclusiones y las perspectivas de este trabajo.

# 1

## *Una cadena localmente periódica*

Las victorias nacen de la lucha,

para morir para trascender.

Nuestro fin será renacer,

extender las alas del águila,

para tener un nuevo y claro amanecer.

Anaid Gabriela Flores Huerta (Me dueles)

### Resumen

Como consecuencia de que el sistema es de tamaño finito, no podemos hacer uso de la teoría de bandas estándar. En vez de esto, usaremos el formalismo de dispersión de ondas por medio de las matrices de transferencia  $M$  o de dispersión  $S$ . Por un lado, el método de la matriz  $M$  es una herramienta poderosa que permite estudiar sistemas que crecen linealmente, gracias a la simplicidad de la regla de combinar las matrices asociadas a dos elementos dispersores [7, 11, 28, 34–36]. Por otro lado, cuando el arreglo geométrico ya no es unidimensional es más conveniente usar la matriz de dispersión  $S$ . En el caso particular del presente problema, la matriz  $S$  revela la conexión con la dinámica de mapas no lineales. Aquí combinamos ambos métodos.

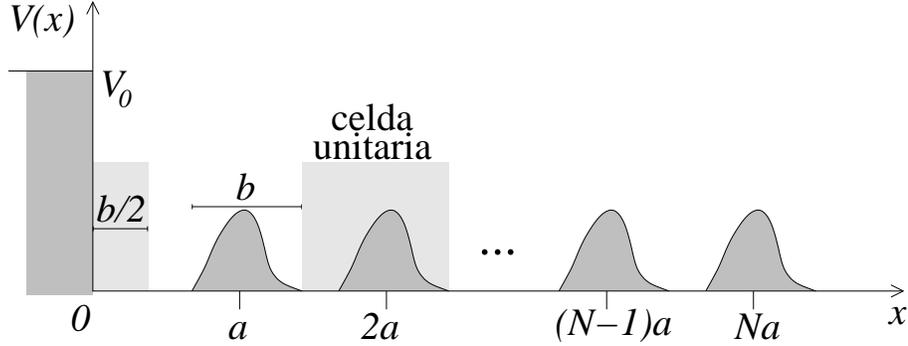


Figura 1.1: Cadena de dispersores idénticos, cada uno representado por el potencial  $V_b(x)$ . La cadena está limitada por la izquierda por un potencial escalón, mientras que está abierta por el lado derecho.

## Formalismo dispersivo para la cadena finita

El sistema que estudiaremos está compuesto por un arreglo lineal localmente periódico cuyos elementos constituyentes son celdas unitarias de ancho  $a$ , a la que llamaremos *constante de la red*.<sup>1</sup> Esta cadena consiste de  $N$  dispersores idénticos, cada uno descrito por el potencial real  $V_b(x)$  de alcance finito  $b$  y forma arbitraria, como se muestra en la figura 1.1. Cada una de las celdas se compone de dos regiones, una de potencial constante (que tomamos igual a cero) de tamaño  $a - b$ , más la del potencial de ancho  $b$ , con excepción de la primera cuya región libre mide  $a - b/2$ .

La cadena está dispuesta en el semiespacio a la derecha del origen, limitada por la izquierda (en  $x = 0$ ) por un potencial escalón de altura  $V_0 \gg E$ , donde  $E$  es la energía de la partícula cuántica incidente, mientras que el lado derecho permanece abierto.<sup>2</sup> La función de onda en el espacio libre entre los dispersores  $n$  y  $n + 1$ , que llamaremos región  $n$ , se puede escribir como

$$\psi_n^{(N)}(x) = a_n e^{-ikx} + b_n e^{ikx} \quad \text{para} \quad na + \frac{b}{2} \leq x \leq (n+1)a - \frac{b}{2}, \quad (1.1)$$

donde  $a_n$  ( $b_n$ ) es la amplitud de la onda que se propaga hacia la izquierda (derecha) y  $k$  es el número de onda dado por  $k = \sqrt{2ME/\hbar^2}$ , con  $M$  la masa de la partícula.

La función de onda en la región libre próxima al potencial escalón es  $\psi_0^{(N)}(x) = a_0 e^{-ikx} + b_0 e^{ikx}$ . Las partículas que inciden en el potencial escalón sólo tienen la posibilidad de reflejarse, de manera que  $b_0 = e^{i\theta_{\text{esc}}} a_0$ , donde  $\theta_{\text{esc}}$  es el cambio en la

<sup>1</sup>Estrictamente hablando, en un sistema localmente periódico no se tiene una constante de red pero seguiremos usando los términos como en la física del estado sólido.

<sup>2</sup>El sistema sin dispersores es análogo a un sistema en el que inciden ondas electromagnéticas por un dieléctrico en un metal semi infinito, solo que sin las pérdidas [37].

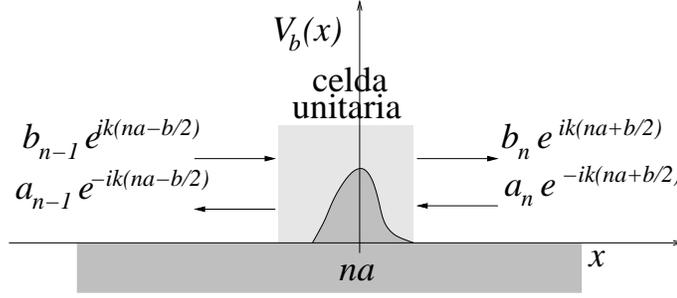


Figura 1.2: Elemento dispersor arbitrario representado por la función potencial  $V_b$ .

fase de la función de onda (ver apéndice A). En el punto  $x = b/2$ , las amplitudes se relacionan como

$$b_0 e^{ikb/2} = e^{i\theta_0} e^{-ikb/2} a_0, \quad (1.2)$$

donde  $\theta_0 = \theta_{\text{esc}} + kb$ . Entonces, la función de onda en la región justo después del potencial escalón se reduce a

$$\psi_0^{(N)}(x) = 2a_0 e^{i\theta_0/2} e^{-ikb/2} \cos [k(x - b/2) + \theta_0/2]. \quad (1.3)$$

De manera similar, la función de onda en la región  $n$  se puede escribir como

$$\psi_n^{(N)}(x) = 2a_n e^{i\theta_n/2} e^{-i(nka+kb/2)} \cos [k(x - nka - b/2) + \theta_n/2], \quad (1.4)$$

donde hemos usado que

$$b_n e^{ik(na+b/2)} = e^{i\theta_n} a_n e^{-ik(na+b/2)}; \quad (1.5)$$

es decir,  $\theta_n$  es el cambio en la fase de la función onda debido a la reflexión en las  $n$  celdas unitarias y el potencial escalón;  $a_n$  y  $b_n$  son las amplitudes de las ondas incidente y reflejada en esa región, respectivamente.

Esto indica que si deseamos conocer la función de onda del sistema completo, y su evolución con el número de dispersores, es necesario determinar todas las amplitudes  $a_n$  en términos de una de ellas, para la cual elegimos un valor particular tal que la amplitud de la onda incidente en la cadena es igual a 1. Para esto nos serviremos de la matriz de transferencia.

## Matriz de transferencia

Supongamos que cada dispersor está descrito por una matriz de transferencia, que denotaremos por  $M_b$  y que tiene la forma general siguiente:

$$M_b = \begin{pmatrix} \alpha_b & \beta_b \\ \gamma_b & \delta_b \end{pmatrix}. \quad (1.6)$$

Por definición,  $M_b$  relaciona las amplitudes de las ondas planas del lado derecho de la barrera de potencial con las del lado izquierdo de la siguiente manera (ver la figura 1.2):

$$\begin{bmatrix} b_n e^{ik(na+b/2)} \\ a_n e^{-ik(na+b/2)} \end{bmatrix} = M_b \begin{bmatrix} b_{n-1} e^{ik(na-b/2)} \\ a_{n-1} e^{-ik(na-b/2)} \end{bmatrix}. \quad (1.7)$$

Entonces, la matriz de transferencia asociada a una celda unitaria, que denotaremos simplemente por  $M$ , se compone de la matriz de transferencia asociada al espacio libre entre dispersores y  $M_b$  (ver el apéndice B); esto es,

$$M \equiv \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} = M_b \begin{bmatrix} e^{ik(a-b)} & 0 \\ 0 & e^{-ik(a-b)} \end{bmatrix}. \quad (1.8)$$

La matriz de transferencia satisface una regla de combinación bastante simple de *multiplicatividad serial* [38]. Así, por ejemplo, si  $M_{n-1}$  es la matriz de transferencia asociada a un sistema de  $n - 1$  celdas, la matriz correspondiente al sistema de  $n$  celdas estará dada por

$$M_n = M M_{n-1}. \quad (1.9)$$

Dado que todas las celdas son idénticas, entonces para  $n$  celdas tenemos que

$$M_n = M^n \equiv \begin{pmatrix} \alpha_n & \beta_n \\ \gamma_n & \delta_n \end{pmatrix}, \quad (1.10)$$

donde, por supuesto, para  $n = 1$  se tiene que  $\alpha_1 = \alpha$ ,  $\beta_1 = \beta$ ,  $\gamma_1 = \gamma$  y  $\delta_1 = \delta$ .

## La función de onda del sistema

La matriz  $M_n$  nos permite relacionar las amplitudes de las ondas en la región a la izquierda de la primera celda y las amplitudes del lado derecho de la celda  $n$ ,

$$\begin{bmatrix} b_n e^{ik(na+b/2)} \\ a_n e^{-ik(na+b/2)} \end{bmatrix} = M_n \begin{bmatrix} b_0 e^{ikb/2} \\ a_0 e^{-ikb/2} \end{bmatrix}. \quad (1.11)$$

Esto es, la amplitud  $a_n$  se puede escribir en términos de la amplitud  $a_0$  a través de la ecuación (1.2) y de los elementos de la matriz  $M_n$ . Es decir, la función de onda en cada región dependerá sólo de  $a_0$ . Elegimos  $a_0$  de manera tal que la amplitud de la función de onda en la región a la derecha de la cadena de  $N$  celdas unitarias sea 1; es decir,

$$a_0 = \frac{1}{2} \frac{e^{-i\theta_0/2} e^{-i\theta_N/2} e^{ikb/2}}{\gamma_N e^{i\theta_0/2} + \delta_N e^{-i\theta_0/2}}. \quad (1.12)$$

De esta forma, el módulo al cuadrado de la función de onda en la región entre los dispersores  $n$  y  $n + 1$  se puede escribir como<sup>3</sup>

$$|\psi_n^{(N)}(x)|^2 = \frac{|\gamma_n e^{i\theta_0/2} + \delta_n e^{-i\theta_0/2}|^2}{|\gamma_N e^{i\theta_0/2} + \delta_N e^{-i\theta_0/2}|^2} \cos^2[k(x - na - b/2) + \theta_n/2], \quad (1.13)$$

La fase  $\theta_n$  también se puede determinar de las ecuaciones (1.5) y (1.11), el resultado es

$$e^{i\theta_n} = \frac{\alpha_n e^{i\theta_0/2} + \beta_n e^{-i\theta_0/2}}{\gamma_n e^{i\theta_0/2} + \delta_n e^{-i\theta_0/2}}. \quad (1.14)$$

Así, para  $n = N$  tenemos que

$$e^{i\theta_N} = \frac{\alpha_N e^{i\theta_0/2} + \beta_N e^{-i\theta_0/2}}{\gamma_N e^{i\theta_0/2} + \delta_N e^{-i\theta_0/2}}. \quad (1.15)$$

Las ecuaciones (1.13) y (1.14) muestran el comportamiento espacial de la función de onda y su dependencia con la fase  $\theta_0$  de la región justo después del potencial escalón; esas ecuaciones también muestran la dependencia explícita con la matriz de transferencia asociada a las  $N$  celdas. Es decir, para determinar la función de onda en algún punto del espacio es necesario iterar la matriz de transferencia para un número dado de celdas. En lo que sigue nos concentraremos en la función de onda en un punto  $x$  fijo.

## **Relación de recurrencia de la función de onda**

Para una región dada  $n$ , la expresión (1.13) para la función de onda depende del número total de celdas del sistema sólo a través del factor de amplitud que multiplica la función coseno. Esto quiere decir que podemos encontrar una relación de recurrencia con el número de celdas. La función de onda para una cadena con  $N - 1$  celdas, en la región  $n$  tendrá la misma forma que en la ecuación (1.13) con  $N$  reemplazada por  $N - 1$ , de manera que al dividir  $\psi_n^{(N)}(x)$  por  $\psi_n^{(N-1)}(x)$  encontramos una relación de recurrencia para la función de onda dada por

$$|\psi_n^{(N)}(x)|^2 = \frac{|\gamma_{N-1} e^{i\theta_0/2} + \delta_{N-1} e^{-i\theta_0/2}|^2}{|\gamma_N e^{i\theta_0/2} + \delta_N e^{-i\theta_0/2}|^2} |\psi_n^{(N-1)}(x)|^2 \quad (1.16)$$

---

<sup>3</sup>Tomamos el módulo de la función de onda para evitar un factor de fase global.

Esta expresión nos permite estudiar la evolución del sistema con el número de celdas fijándonos en un punto fijo  $x$  del espacio. Notemos también que la relación de recurrencia (1.16) depende de la energía y de la fase  $\theta_0$ . En la evolución con el número de celdas,  $\theta_0$  puede verse como la fase inicial o de punto de partida para obtener  $\theta_N$  y también  $\psi_n^{(N)}(x)$ . El comportamiento de la función de onda con la fase  $\theta_0$  puede estudiarse a través de la sensibilidad a las condiciones iniciales que definimos a continuación.

## ***Sensibilidad a las condiciones iniciales***

La sensibilidad a las condiciones iniciales para  $N$  finita, se define como [31]

$$\Xi_N = \left| \frac{d\theta_N}{d\theta_0} \right| = e^{N\Lambda_1(N)}, \quad (1.17)$$

donde  $\Lambda_1(N)$  es el exponente de Lyapunov para  $N$  finita.<sup>4</sup>

De la ecuación (1.15) obtenemos una expresión para la sensibilidad que es

$$e^{N\Lambda_1(N)} = \frac{1}{|\gamma_N e^{i\theta_0/2} + \delta_N e^{-i\theta_0/2}|^2} \quad (1.18)$$

y que nos permite escribir la relación de recurrencia del módulo al cuadrado de la función de onda como

$$|\psi_n^{(N)}(x)|^2 = e^{N\Lambda_1(N)} e^{-(N-1)\Lambda_1(N-1)} |\psi_n^{(N-1)}(x)|^2. \quad (1.19)$$

Los factores exponenciales del lado derecho de esta relación de recurrencia no dependen de la  $n$ -ésima región y por lo tanto vale para cualquier punto  $x$  en el espacio unidimensional. Sin embargo, esta relación de recurrencia sí depende del número de celdas total  $N$  y relaciona la función de onda con el sistema de  $N - 1$  celdas. Así, iterando  $N - 1$  veces llegamos a que la función de onda en el punto  $x$  para  $N$  celdas depende de la función de onda en el mismo punto pero sin celda alguna. Es decir,

$$|\psi_n^{(N)}(x)|^2 = e^{N\Lambda_1(N)} |\psi_n^{(0)}(x)|^2. \quad (1.20)$$

Esto quiere decir que la evolución con  $N$  de la función de onda queda determinada por la sensibilidad a las condiciones iniciales, o por el exponente de Lyapunov  $\Lambda_1$ , siendo ambas cantidades reales. Por supuesto, se espera que el comportamiento con  $N$  sea diferente para valores de la energía en las regiones permitidas y prohibidas de la cadena cristalina.

---

<sup>4</sup>El subíndice en  $\Lambda_1$  quedará claro en el siguiente capítulo.

## Las bandas en el límite cristalino

Dado que nuestra cadena de dispersores es finita y además está restringida al subespacio  $x > 0$ , no puede estudiarse desde el punto de vista de la teoría de bandas debido a la ruptura de la simetría traslacional. Sin embargo, en el límite cuando el número de celdas tiende a infinito sus propiedades cuánticas deben depender de la estructura de bandas del cristal formado por el número infinito de celdas.

La estructura de bandas de una cadena abierta por ambos lados se puede obtener al iterar un número infinito de veces la matriz  $M$  de cada celda [39]. La determinación de las bandas se facilita al diagonalizar la matriz  $M$  cuya ecuación característica nos conduce a los valores propios<sup>5</sup>

$$\mu_{\pm} = \frac{1}{2} \operatorname{tr} M \pm \sqrt{\left(\frac{1}{2} \operatorname{tr} M\right)^2 - 1}. \quad (1.21)$$

El tipo de soluciones depende del argumento de la raíz cuadrada que aparece del lado derecho de la ecuación anterior. Por un lado, si

$$\frac{1}{2} |\operatorname{tr} M(k)| > 1, \quad (1.22)$$

donde hemos puesto explícitamente la dependencia en la energía a través de  $k$ , las dos soluciones son reales y una de ellas es el recíproco de la otra. Estas soluciones se pueden escribir como (ver el apéndice B)

$$\mu_{\pm} = \operatorname{sgn}(\operatorname{tr} M) e^{\lambda_1/2}, \quad (1.23)$$

donde  $\operatorname{sgn}(x)$  denota el signo de  $x$  y  $\lambda_1$  es un número real que puede ser positivo o negativo y satisface que

$$\frac{1}{2} \operatorname{tr} M = \operatorname{sgn}(\operatorname{tr} M) \cosh(\lambda_1/2), \quad (1.24)$$

o bien, despejando de la ecuación (1.23) con  $\mu_{\pm}$  dado por la ecuación (1.21), se tiene que

$$\lambda_1 = \ln \left| \frac{1}{2} \operatorname{tr} M \pm \sqrt{\left(\frac{1}{2} \operatorname{tr} M\right)^2 - 1} \right|^2. \quad (1.25)$$

---

<sup>5</sup>El tratamiento de una partícula en un potencial periódico se puede encontrar en las referencias [39, 40], pero para hacer este trabajo autocontenido hemos incluido el apéndice B.

Entonces, en la base donde  $M$  es diagonal  $\beta = 0$  y  $\gamma = 0$ ; si  $\delta = \mu_{\pm}$ , entonces  $\alpha = \mu_{\mp}$ , de manera que  $\alpha$  es el recíproco de  $\delta$ . En ese caso,  $\gamma_N = 0$  y  $\delta_N = \delta^N = \mu_{\pm}^N$  y por tanto, la ecuación (1.18) nos conduce a

$$e^{N\Lambda_1(N)} = e^{N\lambda_1}, \quad (1.26)$$

lo que nos dice que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \Lambda_1(N) = \lambda_1, \quad (1.27)$$

por lo que podemos interpretar a  $\lambda_1$  como el exponente de Lyapunov tradicional [41], el cual está dado por

$$\lambda_1 = \ln \left| \frac{1}{2} [\alpha_b e^{ik(a-b)} + \delta_b e^{-ik(a-b)}] \pm \sqrt{\frac{1}{4} [\alpha_b e^{ik(a-b)} + \delta_b e^{-ik(a-b)}]^2 - 1} \right|^2, \quad (1.28)$$

donde hemos usado la ecuación (1.25), así como las ecuaciones (1.6) y (1.8). De la misma manera,

$$\xi_N = \lim_{N \rightarrow \infty} \Xi_N = e^{N\lambda_1} \quad (1.29)$$

es la sensibilidad a las condiciones iniciales [41].

En el caso en que  $\lambda_1 > 0$  la función exponencial de la ecuación (1.26) diverge en el límite  $N \rightarrow \infty$  lo que implica que la función de onda diverge también en ese límite. Esta solución no es físicamente aceptable. *En el próximo capítulo veremos que esta solución es inestable y depende de la condición inicial  $\theta_0$  en la iteración.* Si en cambio  $\lambda_1$  es negativo entonces la exponencial tiende a cero cuando  $N \rightarrow \infty$ , lo que indica que la función de onda decae exponencialmente con  $N$ . Esto es,

$$|\psi_n^{(N)}(x)|^2 = e^{-N|\lambda_1|} |\psi_n^{(0)}(x)|^2 \quad \text{para } N \rightarrow \infty. \quad (1.30)$$

Por estas dos razones se dice que la condición (1.22) da la región para la cual se tienen *bandas prohibidas de energía*.

Por otro lado, las *bandas permitidas* se obtienen cuando

$$\frac{1}{2} |\text{tr } M(k)| \leq 1, \quad (1.31)$$

en cuyo caso los valores propios  $\mu_{\pm}$  se pueden escribir como números complejos de módulo 1 (ver el apéndice B):

$$\mu_{\pm} = e^{\pm i\phi}, \quad (1.32)$$

donde  $0 \leq \phi \leq \pi$ . Bajo estas condiciones  $\delta_N = e^{\pm iN\phi}$  y por tanto

$$e^{N\Lambda_1(N)} = 1, \quad (1.33)$$

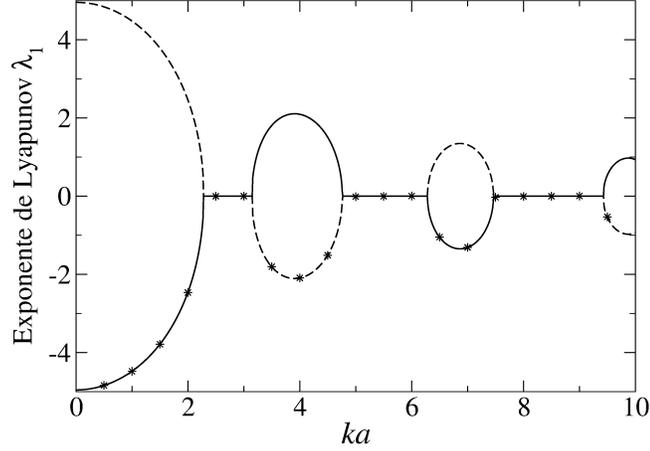


Figura 1.3: El exponente de Lyapunov  $\lambda_1$  para la cadena de potenciales delta muestra claramente las bandas permitidas ( $\lambda_1 = 0$ ) y prohibidas ( $\lambda_1 \neq 0$ ). La línea continua (discontinua) corresponde a la solución  $\lambda_1 = \mu_-$  ( $\lambda_1 = \mu_+$ ) con  $ua = 10$ . Los asteriscos son los resultados de  $\Lambda_1(N)$  obtenidos de la iteración para  $N = 100$  y  $\theta_0 = \pi$ .

de donde concluimos que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \Lambda_1(N) = \lambda_1 = 0. \quad (1.34)$$

En este caso, de acuerdo con la ecuación (1.20), la función de onda nunca decae conforme  $N$  aumenta, como es de esperarse en las bandas permitidas donde el transporte se da en un sistema periódico.

Cabe señalar que las diferentes regiones nos ayudan a saber qué tipo de comportamiento esperar para la función de onda en un sistema finito. A manera de ejemplo, en lo que resta de este capítulo aplicaremos los resultados a la cadena de potenciales delta.

## Cadena de potenciales delta

Un potencial delta está caracterizado por una función de ancho  $b = 0$  e intensidad  $v$  en un punto  $x$  del espacio (ver el apéndice A). Los elementos de su matriz de transferencia asociada están dados en la ecuaciones (A.23), de donde vemos que  $\delta_\delta = \alpha_\delta^*$ , por lo que el exponente de Lyapunov en las bandas prohibidas se escribe como

$$\lambda_1 = \ln \left| \operatorname{Re} (\alpha_\delta e^{ika}) \pm \sqrt{[\operatorname{Re} (\alpha_\delta e^{ika})]^2 - 1} \right|^2, \quad (1.35)$$

con  $\alpha_\delta = 1 + ua/2ika$ . Las bandas de energía se puede observar si graficamos  $\lambda_1$  como función de  $ka$ .

En la figura 1.3 mostramos el exponente de Lyapunov  $\lambda_1$  para  $ka$  entre 0 y 10, para  $ua = 10$ . Las bandas correspondientes se aprecian claramente, donde en las bandas prohibidas se observan las dos soluciones posibles, que corresponden con  $\lambda_1 > 0$  (divergente) y  $\lambda_1 < 0$  (convergente). En la misma gráfica se muestran algunos puntos obtenidos para  $\Lambda_1(N)$  a partir de la ecuación (1.18) para  $N = 100$  y  $\theta_0 = \pi$ . Podemos notar que estos puntos caen en la parte negativa de la gráfica. La pregunta que surge aquí es ¿por qué el sistema evoluciona hacia la solución estable? La respuesta debe estar en la condición inicial  $\theta_0$  elegida.

En el próximo capítulo estudiaremos la estructura finita desde el punto de vista de la dinámica de mapas no lineales.

## 2

# *Dispersión y dinámica de mapas no lineales*

He fled the town  
He went down south and crossed the border  
Left the chaos and disorder  
Back there over his shoulder...  
The Doors (The Celebration Of The Lizard)

### **Resumen**

Ahora analizaremos las propiedades del sistema descrito en el capítulo anterior con el formalismo de la matriz de dispersión,  $S$ . La matriz de dispersión relaciona las ondas que salen del sistema con las que entran en un potencial dado. La ventaja de usar la matriz de dispersión es que se reduce al análisis de un mapa no lineal.

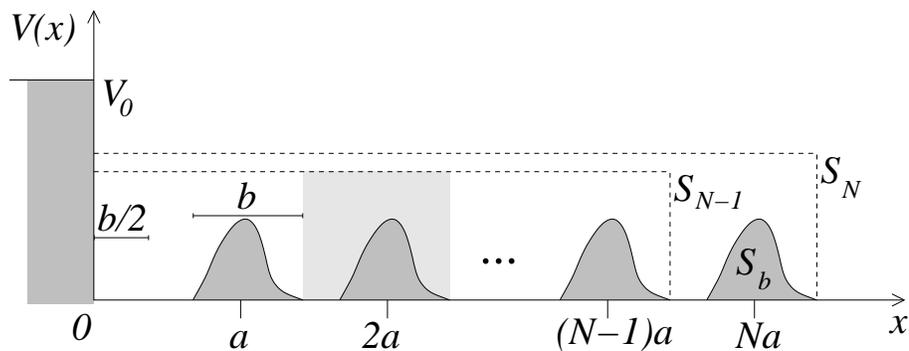


Figura 2.1: Representación esquemática de la construcción de la matriz de dispersión  $S_N$  para un sistema de  $N$  celdas, por medio de un proceso iterativo.

## La matriz de dispersión

Al igual que la matriz de transferencia, la matriz de dispersión es una cantidad que describe la dispersión de ondas debido a un potencial dado. Para el potencial  $V_b$  de la figura 1.2, denotaremos su correspondiente matriz de dispersión por  $S_b$  y por definición relaciona las amplitudes de la siguiente manera:

$$\begin{bmatrix} a_{n-1} e^{-ik(na-b/2)} \\ b_n e^{ik(na+b/2)} \end{bmatrix} = S_b \begin{bmatrix} b_{n-1} e^{ik(na-b/2)} \\ a_n e^{-ik(na+b/2)} \end{bmatrix}. \quad (2.1)$$

La estructura de la matriz  $S_b$  para un potencial de forma arbitraria pero de alcance finito, está dada por

$$S_b = \begin{pmatrix} r_b & t'_b \\ t_b & r'_b \end{pmatrix}, \quad (2.2)$$

donde  $r_b$  ( $r'_b$ ) y  $t_b$  ( $t'_b$ ) son las amplitudes de reflexión y de transmisión cuando la incidencia de las ondas sobre la barrera de potencial viene desde la izquierda (derecha). Debido a la conservación del flujo de probabilidad, la matriz  $S_b$  debe ser unitaria,

$$S_b^\dagger S_b = I_2, \quad (2.3)$$

donde  $I_2$  denota la matriz unidad de  $2 \times 2$ .

## La matriz de dispersión para la cadena finita

En la figura 2.1 podemos ver el sistema compuesto por  $N$  barreras de potencial, descrito por la matriz de dispersión  $S_N$  a través de las amplitudes de las ondas que

entran y salen del sistema,  $a_N$  y  $b_N$ , respectivamente [ver la ecuación (1.1)]. Estas amplitudes se relacionan mediante  $S_N$  por medio de la ecuación

$$b_N e^{ik(Na+b/2)} = S_N a_N e^{-ik(Na+b/2)}. \quad (2.4)$$

Si el sistema sólo estuviese compuesto por  $N - 1$  barreras y las amplitudes que entran y salen del sistema correspondientes fueran  $a_{N-1}$  y  $b_{N-1}$ , éstas se relacionarían a través de la expresión

$$b_{N-1} e^{ik[(N-1)a+b/2]} = S_{N-1} a_{N-1} e^{-ik[(N-1)a+b/2]}. \quad (2.5)$$

Las amplitudes que aparecen en estas dos últimas ecuaciones también se relacionan entre sí por medio de la matriz  $S_b$  a través de la definición (2.1) con  $n$  reemplazada por  $N$ . Realizando un poco de álgebra y juntando estas amplitudes con las ecuaciones (2.2), (2.4) y (2.5) vemos que la matriz que relaciona ambos sistemas, uno con  $N - 1$  dispersores y otro con  $N$ , está dada por

$$S_N = r'_b + t_b \frac{1}{e^{-2ik(a-b)} - S_{N-1} r_b} S_{N-1} t'_b. \quad (2.6)$$

Dado que la cadena está abierta por un sólo lado, la matriz  $S_N$  es de  $1 \times 1$  y por lo tanto, al ser unitaria se puede parametrizar por una fase,  $\theta_N$ :

$$S_N = e^{i\theta_N}. \quad (2.7)$$

Entonces, la ecuación (2.6) es una relación de recurrencia para matrices de dispersión de  $1 \times 1$ . El proceso iterativo comienza con una matriz de dispersión  $S_0$  que describe la dispersión a la derecha del potencial escalón, definida de manera equivalente a  $S_N$ . Esto es,  $S_0$  está definida a través de la ecuación (1.2) donde

$$S_0 = e^{i\theta_0}. \quad (2.8)$$

En términos de las fases, la ecuación (2.6) se puede escribir como

$$e^{i\theta_N} = r'_b + t_b \frac{1}{e^{-2ik(a-b)} - e^{i\theta_{N-1}} r_b} e^{i\theta_{N-1}} t'_b. \quad (2.9)$$

Aunque las ecuaciones (1.15) y (2.9) describen la dispersión del mismo sistema, podemos ver que presentan algunas diferencias entre sí, entre las cuales podemos resaltar las siguientes:

1. La ecuación (1.15) es una una expresión cerrada en el número de dispersores  $N$ , mientras que la ecuación (2.9) es una relación de recurrencia.

2. En la ecuación (1.15) está explícita la dependencia en la condición inicial  $\theta_0$ , mientras que en la ecuación (2.9) no lo está.
3. La expresión (1.15) obtenida vía la matriz  $M$  depende de los elementos de matriz del sistema compuesto de  $N$  celdas. La expresión (2.9) que se obtuvo por medio de la matriz  $S$  depende de los elementos de matriz de un solo dispersor.

La ecuación (2.9) puede tratarse como un mapa no lineal y por tanto analizaremos sus propiedades en lo que sigue.

### ***Forma alternativa para la relación de recurrencia***

Una forma alternativa de escribir la ecuación (2.6) se obtiene proponiendo la siguiente transformación<sup>1</sup>

$$S_N = \kappa \frac{F_{N+1}}{F_N} - \frac{1}{r'_b}, \quad (2.10)$$

donde  $\kappa$  es un parámetro que no depende de  $N$ . Al sustituir en la ecuación (2.6) se llega a una ecuación lineal de segundo orden en  $F_N$  cuya solución se puede escribir como

$$F_{N+1} = -\frac{2\text{Re } z_b}{\kappa r_b'^* z_b} F_N + \frac{r_b'^2 z_b^* - z_b}{\kappa^2 |r_b'|^2 z_b} F_{N-1}, \quad (2.11)$$

donde si  $F_{N+1} = F_N = F_{N-1}$  para  $N \gg 1$ , entonces  $\kappa$  satisface que

$$\kappa^2 + \kappa \frac{2\text{Re } z_b}{r_b'^* z_b} - \frac{r_b'^2 z_b^* - z_b}{|r_b'|^2 z_b} = 0. \quad (2.12)$$

### ***Reducción a un mapa no lineal***

Tomando en cuenta que la matriz de dispersión  $S_b$  es unitaria, la ecuación (2.3) nos permite escribir la relación de recurrencia para la fase de la siguiente manera

$$e^{i\theta_N} = \frac{r'_b z_b^* + z_b e^{i\theta_{N-1}}}{r_b'^* z_b + z_b^* e^{-i\theta_{N-1}}} e^{-i\theta_{N-1}}, \quad (2.13)$$

donde  $z_b = t_b e^{i\phi/2} e^{ik(a-b)}$  con  $e^{i\phi} = t'_b/t_b$ . Esta ecuación puede verse como un mapa no lineal  $\theta_N = f(\theta_{N-1})$ , donde

$$f(\theta_{N-1}) = -\theta_{N-1} + 2 \arctan \frac{\text{Im}(r'_b z_b^* + z_b e^{i\theta_{N-1}})}{\text{Re}(r'_b z_b^* + z_b e^{i\theta_{N-1}})} \quad \text{mód } \pi, \quad (2.14)$$

---

<sup>1</sup>Esta transformación fue sugerida por uno de los sinodales, el Dr. Emerson Leao Sadurní, durante la revisión.

donde  $\text{Re}(\vartheta)$  y  $\text{Im}(\vartheta)$  representan las partes real e imaginaria de  $\vartheta$ , respectivamente.

La dependencia del mapa con la energía (a través de  $k$ ) es explícita e implícita a través de los coeficientes de reflexión y de transmisión  $r_b, r'_b, t_b$  y  $t'_b$ , los cuales también dependen de la energía y del potencial con el que interactúan, como puede verse en los dos ejemplos del apéndice A. Entonces, resulta interesante obtener la matriz de dispersión en las bandas del límite cristalino.

### ***El límite cristalino***

Cuando hacemos que el número de dispersores sea muy grande,  $N \gg 1$ , esperamos que la ecuación (2.9) alcance una solución  $S_\infty$  de punto fijo para  $S_N$  de la forma de la ecuación (2.7). Es decir, esperamos que  $S_N \rightarrow S_\infty$  para  $N \rightarrow \infty$ , que de acuerdo con la ecuación (2.13) debe satisfacer

$$S_\infty = \frac{r'_b z_b^* + z_b S_\infty}{r_b'^* z_b + z_b^* S_\infty} S_\infty^*. \quad (2.15)$$

La solución matemática a esta ecuación se puede escribir como

$$S_\infty(k) = \begin{cases} e^{i\theta_\pm(k)} & \text{para } |\text{Re } z_b(k)| > |t_b(k)|^2 \\ w_\pm(k) & \text{para } |\text{Re } z_b(k)| \leq |t_b(k)|^2 \end{cases}, \quad (2.16)$$

donde

$$e^{i\theta_\pm(k)} = \frac{1}{r_b'^*(k) z_b(k)} \left\{ \pm \sqrt{[\text{Re } z_b(k)]^2 - |t_b(k)|^4} + i \text{Im } z_b(k) \right\} \quad (2.17)$$

y

$$w_\pm(k) = \frac{i}{r_b'^*(k) z_b(k)} \left\{ \pm \sqrt{|t_b(k)|^4 - [\text{Re } z_b(k)]^2} + \text{Im } z_b(k) \right\}. \quad (2.18)$$

Es decir,  $w_\pm(k) = |w_\pm(k)| e^{i\theta(k)}$  con

$$\tan \theta(k) = \frac{\text{Im}[ir_b'(k) z_b^*(k)]}{\text{Re}[ir_b'(k) z_b^*(k)]}. \quad (2.19)$$

Al tomar en cuenta las relaciones entre los elementos de las matrices de dispersión  $S_b$  y de transferencia  $M_b$ , escritas en la ecuación (A.22) del apéndice A, nos damos cuenta de que

$$\frac{1}{2} |\text{tr } M(k)| = \frac{|\text{Re } z_b(k)|}{|t_b(k)|^2}, \quad (2.20)$$

donde  $M(k)$  está dada por la ecuación (1.8). Por tanto, la condición

$$|\text{Re } z_b(k)| > |t_b(k)|^2 \quad (2.21)$$

corresponde a las bandas prohibidas de energía, mientras que

$$|\operatorname{Re} z_b(k)| \leq |t_b(k)|^2 \quad (2.22)$$

a las bandas permitidas. Estas dos regiones de energía están separadas por valores críticos  $k_c$  de  $k$  definidos por la igualdad

$$|\operatorname{Re} z_b(k_c)| = |t_b(k_c)|^2, \quad (2.23)$$

en donde  $\theta$  toma el valor  $\theta(k_c) \equiv \theta_c$ , con

$$\tan \theta_c = \frac{\operatorname{Im}[ir'_b(k_c) z_b^*(k_c)]}{\operatorname{Re}[ir'_b(k_c) z_b^*(k_c)]}. \quad (2.24)$$

La ecuación (2.16) indica que para cada valor de la energía (o de  $k$ ), en cualquiera de las bandas de energía, existen dos soluciones. Si  $k$  está en una banda prohibida,  $S_N$  tiende a dos valores límite dados por  $e^{i\theta_{\pm}(k)}$  cuando  $N \rightarrow \infty$ . En cambio, las soluciones  $w_{\pm}(k)$  en la banda permitida no pueden aceptarse como solución de punto fijo debido a que conducen a una matriz de dispersión cuyo módulo no es 1, es decir, no es de la forma de la ecuación (2.7). Para entender mejor esta situación es necesario analizar la dinámica del mapa expresado en la ecuación (2.14).

### ***Diagrama de bifurcación: potenciales delta***

Aunque el mapa no lineal de la ecuación (2.14) es válido para potenciales individuales de forma arbitraria, es necesario considerar un caso particular que nos ayude a intuir algunas características generales del mismo. Supongamos por un momento que el potencial individual es un potencial delta de intensidad  $v$  y alcance nulo,  $b = 0$ . En este caso,  $r_b = r'_b = -u/(u - 2ik)$  y  $t_b = t'_b = -2ik/(u - 2ik)$ , donde  $u = 2Mv/\hbar^2$  con  $M$  la masa de la partícula. El cálculo explícito de estos coeficientes puede verse en el apéndice A.

Dado que en general se tienen muchas bandas, etiquetaremos una banda permitida por medio de un número  $m$  ( $m = 1, 2, \dots$ ). Los bordes del lado izquierdo de la  $m$ -ésima banda permitida los denotaremos por  $k_{c_m}$  mientras que los bordes del lado derecho por  $k_{c'_m}$ . Para los potenciales delta se pueden determinar las bandas analíticamente. La ecuación (2.17) se puede escribir como

$$e^{i\theta_{\pm}} = -i \frac{2ka}{ua} e^{-ika} [\pm x(ka) + iy(ka)], \quad (2.25)$$

donde

$$\begin{aligned} x(ka) &= \sqrt{\left(\cos ka + \frac{ua}{2ka} \sin ka\right)^2 - 1} \\ y(ka) &= \sin ka - \frac{ua}{2ka} \cos ka \end{aligned} \quad (2.26)$$

para  $|\cos ka + (ua/2ka) \sin ka| > 1$ , mientras que la ecuación (2.18) da

$$w_{\pm} = \frac{2ka}{ua} e^{-ika} [\pm x'(ka) + y(ka)], \quad (2.27)$$

donde

$$x'(ka) = \sqrt{1 - \left(\cos ka + \frac{ua}{2ka} \sin ka\right)^2} \quad (2.28)$$

para

$$\left| \cos ka + \frac{ua}{2ka} \sin ka \right| \leq 1, \quad (2.29)$$

que es la condición para las bandas permitidas en el modelo de Kronig-Penney [5], inspirado en el trabajo de Bloch [4]. De la ecuación (2.27) es fácil ver que la fase de  $w_{\pm}$  viene dada por [ver ecuación (2.19)]

$$\theta = -ka + (m + 1)\pi, \quad m = 1, 2, \dots \quad (2.30)$$

Los bordes de la banda se obtienen de la igualdad en la ecuación (2.29), a saber

$$\tan \frac{k_{c_m} a}{2} = \begin{cases} ua/2k_{c_m} a & \text{para } m \text{ impar} \\ -2k_{c_m} a/ua & \text{para } m \text{ par} \end{cases}, \quad (2.31)$$

mientras que  $k_{c'_m} a = m\pi$ , para  $m$  par e impar. En los bordes de la banda,  $\theta(k_{c_m} a) = \theta_{c_m}$ , con  $\theta_{c_m} = -k_{c_m} a + (m + 1)\pi$ .

En el caso particular de  $ua = 10$ , la primera ventana caótica ( $m = 1$ ) se encuentra entre los valores críticos  $k_{c_1} a = 2.28445\dots$  y  $k_{c'_1} a = \pi$ , para los cuales  $\theta_{c_1} = 3.99873\dots$  y  $\theta_{c'_1} = \pi$ . El diagrama de bifurcación se muestra en la figura 2.2, donde hemos graficado la fase  $\theta_N$  para las últimas treinta iteraciones de  $N = 1000$  cuando la condición inicial es  $\theta_0 = \pi$ . En esta gráfica observamos regiones de  $k$  donde la fase se estaciona alcanzando un punto fijo; estas son ventanas de periodo 1.<sup>2</sup> Existen otras regiones en las que la fase nunca se estaciona y de hecho fluctúa, estas regiones se conocen como ventanas caóticas.<sup>3</sup> En la misma gráfica se observan las dos soluciones de punto fijo (en negro y

---

<sup>2</sup>En realidad existen dos soluciones de punto fijo aunque el resultado numérico muestra solo uno. Las llamamos ventanas de periodo 1 ya que sólo tenemos una solución estable, mientras que la otra es inestable.

<sup>3</sup>Más adelante mostraremos que estas ventanas son en realidad marginalmente o débilmente caóticas.

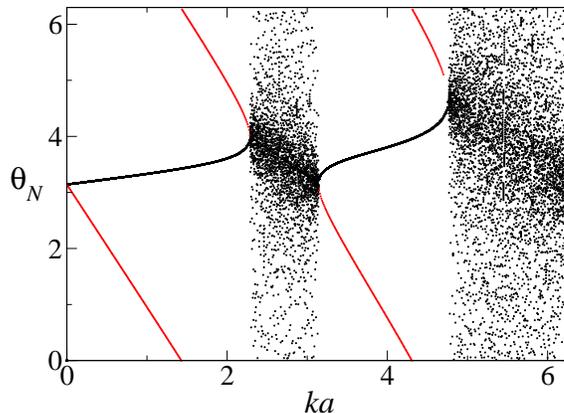


Figura 2.2: Diagrama de bifurcación para una cadena de potenciales delta con  $ua = 10$ . Los puntos representan las últimas treinta iteraciones de un total de  $N = 1000$  para la fase como una función de  $ka$ , empezando con la condición inicial  $\theta_0 = \pi$ . Las líneas en color negro (indistinguible) y en color rojo corresponden a las dos soluciones de punto fijo.

en rojo) en cada región, expresadas en las ecuaciones (2.25) y (2.30), de las cuales sólo una coincide, y de hecho es indistinguible, con los resultados numéricos de la iteración.

En la figura 2.3 se puede apreciar la dependencia de los bordes con la intensidad del potencial delta, donde se muestran las últimas treinta iteraciones de  $N = 1000$  para dos valores de la intensidad del potencial delta: (a)  $ua = 1$  y (b)  $ua = 10$ . Por ejemplo, el borde izquierdo de una banda caótica se mueve hacia la derecha conforme aumentamos la intensidad del potencial mientras que el borde derecho permanece inmóvil, reduciendo el ancho de la banda caótica. El ancho de las ventanas caóticas también depende de la energía a intensidad fija, ya que ésta se hace más ancha cuando aumenta  $ka$ , si la energía aumenta, el efecto del potencial disminuye.

### ***Dinámica del mapa***

Las trayectorias del mapa se ilustran bastante bien con el ejemplo de la cadena de potenciales delta. En la figura 2.4 se muestran dos trayectorias con condiciones iniciales diferentes,  $\theta_0 = 2, 5$ , para algunos valores de  $ka$ . En el panel (a) el valor de  $ka = 2$  está dentro de la ventana de periodo 1 (ver figura 2.2), la recta identidad cruza la función del mapa en dos puntos, llamados puntos fijos:  $\theta_+$  y  $\theta_-$ ; se observa que las trayectorias obtenidas de la iteración convergen a uno de los puntos fijos, que llamaremos *atractor*, y divergen del otro punto fijo llamado *repulsor*. Para la primera banda el atractor corresponde a  $\theta_+ \approx 3.61$  y el repulsor a  $\theta_- \approx 4.95$ ; para la segunda banda  $\theta_+$  corresponde

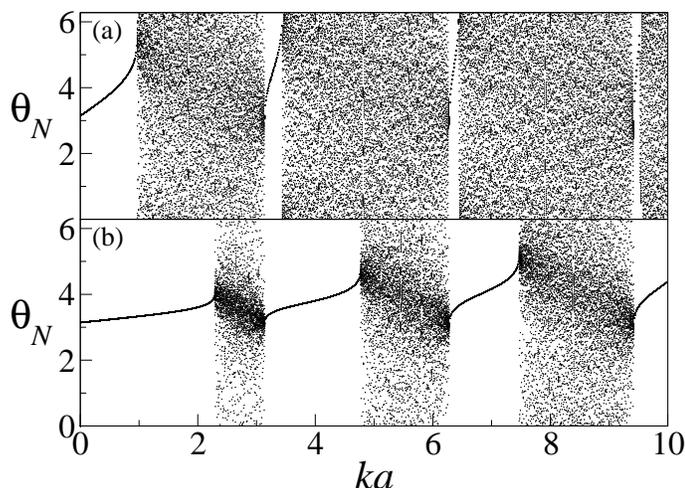


Figura 2.3: (a) Diagrama de bifurcación para una cadena de potenciales delta con  $ua = 1$ . Graficamos sólo las últimas treinta iteraciones de  $N = 1000$  para la fase como una función de  $ka$ , empezando con la condición inicial  $\theta_0 = \pi$ . (b) Mismo diagrama de bifurcación que en (a) pero para  $ua = 10$ . Se observan ventanas caóticas y de periodo 1. Veremos que las ventanas caóticas son en realidad débilmente caóticas. También se puede observar la dependencia del ancho de las bandas de energía con la intensidad del potencial.

al repulsor y  $\theta_-$  al atractor, y así sucesivamente. Entonces, encontramos que una de las dos soluciones  $e^{i\theta_{\pm}}$  es estable (atractor) y la otra inestable (repulsor). Es por esta razón que cuando se elige una condición inicial  $\theta_0$  que no coincide exactamente con el repulsor la iteración siempre convergerá en el atractor (ver las figuras 1.3 y 2.3).

Los paneles (b) y (d) de la figura 2.4 muestran las trayectorias intermitentes en las bifurcaciones tangentes cuando  $ka = 2.2846$  y  $3.14145$ , muy cerca de las transiciones desde el lado caótico. En el panel (c),  $ka$  está muy en medio de la ventana caótica y las trayectorias nunca convergen, la ecuación (2.9) no tiene solución de la forma de la ecuación (2.7), pero sí de la forma  $w_{\pm} = |w_{\pm}|e^{i\theta}$ , siendo  $\theta$  el valor alrededor del cual  $\theta_N$  fluctúa con una densidad invariante, lo que indica que estas soluciones son marginalmente estables [43]. Por lo tanto, se observa que el comportamiento de las trayectorias para dos condiciones iniciales depende fuertemente de la región específica a la que  $ka$  pertenece.

Como ya vimos en el capítulo 1, la dinámica del mapa se puede analizar por medio de la sensibilidad a las condiciones iniciales, o equivalentemente, por medio del exponente de Lyapunov. En lo que sigue analizaremos este exponente con el método de la matriz de dispersión.

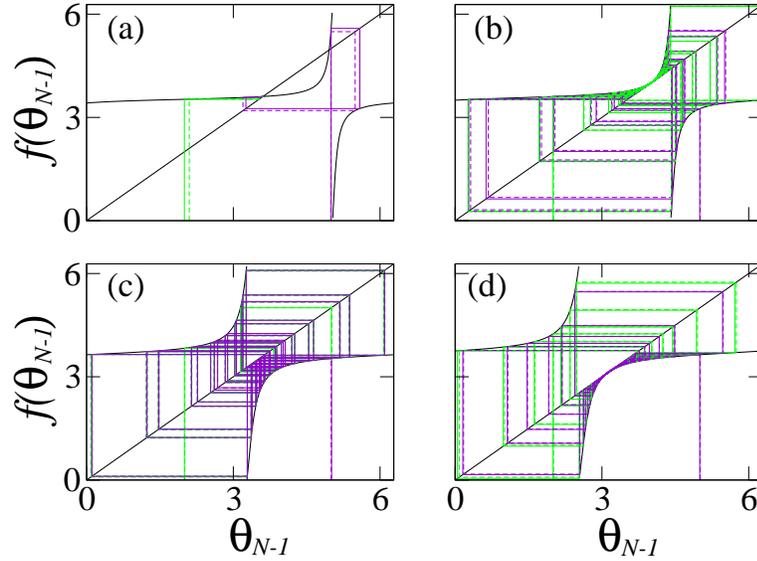


Figura 2.4: Dinámica del mapa (2.14) para el potencial delta con  $ua = 10$  para diferentes valores de  $ka$ : (a) 2, (b) 2.2846, (c) 2.8 y (d) 3.14145. Cada panel muestra las trayectorias para dos condiciones iniciales  $\theta_0 = 2$  y  $5$  [42].

## La evolución con el número de celdas

La evolución de la función de onda con el número de celdas se puede apreciar más claramente con el método de la matriz de dispersión. De acuerdo con la ecuación (1.20), el comportamiento de la función de onda con el número de celdas está dado por la sensibilidad a las condiciones iniciales. La relación de recurrencia (2.13), o el mapa (2.14), nos permite obtener una relación de recurrencia para el exponente de Lyapunov  $\Lambda_1(N)$ ,

$$e^{N\Lambda_1(N)} = \frac{|z_b|^4}{|r'_b z_b^* + z_b S_{N-1}|^2} e^{(N-1)\Lambda_1(N-1)}. \quad (2.32)$$

Mediante un proceso iterativo con la condición inicial  $\theta_0$  podemos obtener el exponente de Lyapunov en función de  $k$ . En la figura 2.5(b) graficamos el resultado de la iteración para  $N = 1000$  con  $\theta_0 = \pi$ , en el caso de potenciales delta con  $ua = 10$ . Por un lado, el resultado de la iteración con esta condición inicial nos dice que  $\Lambda_1(N)$  es negativo en la ventana de periodo 1, lo cual indica que  $\bar{\Xi}_N$  decae exponencialmente cuando  $N$  crece demasiado. Esto significa que cualquier trayectoria en el mapa converge rápidamente a un punto fijo, como es el caso de la figura 2.4(a). En las ventanas caóticas  $\Lambda_1(N) \rightarrow 0$  para  $N \rightarrow \infty$ , por lo que nada podemos decir sobre la convergencia de las trayectorias. Esta situación corresponde a la figura 2.4(c). Para un número finito de iteraciones  $\Lambda_1(N)$  es aún negativo en las ventanas de periodo 1, pero oscila alrededor

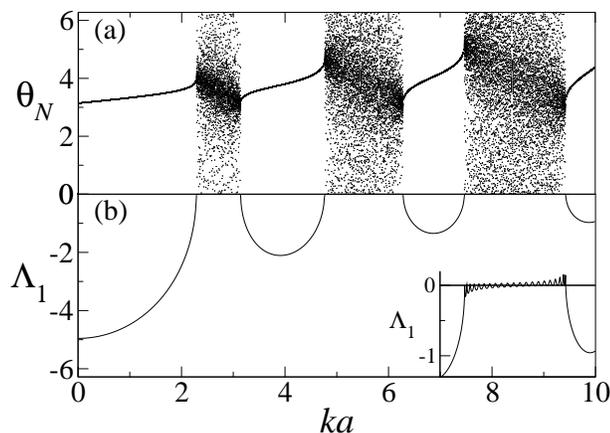


Figura 2.5: Comparación de las distintas regiones energéticas en la fase y en el exponente de Lyapunov para  $N$  finita ( $N = 1000$ ) [42].

de cero en las ventanas caóticas, como puede observarse en el inserto de la figura 2.5(b). La amplitud de las oscilaciones tiende a cero conforme  $N$  aumenta, lo cual es indicativo de *caos débil* [32, 44].

De acuerdo con la ecuación (1.27),  $\Lambda_1(N) \rightarrow \lambda_1$  para  $N \rightarrow \infty$ , de manera que de la ecuación (2.32) tenemos que

$$\lambda_1 = \ln \frac{|z_b|^4}{|r'_b z_b^* + z_b S_\infty|^2}, \quad (2.33)$$

donde  $S_\infty$  está dado por la ecuación (2.16). Para una de las dos raíces expresadas en (2.16) para  $k$  en una ventana de periodo 1,  $\lambda_1 > 0$  como se muestra en la figura 1.3, que corresponde con la solución de punto fijo inestable. La segunda solución es estable pues  $\lambda_1 < 0$ , es la única solución que aparece en la iteración cuando se elige  $\theta_0 = \pi$  (ver figura 2.6). En ese caso

$$\xi_N = e^{-|\lambda_1|N}. \quad (2.34)$$

En las ventanas marginalmente caóticas también existen dos valores de  $\lambda_1$  debido a las dos soluciones  $w_+$  y  $w_-$ , uno es positivo y el otro negativo, ambos a la misma distancia del cero, como puede verse en la figura 2.6. Ambas soluciones son válidas y es el promedio de ambas la que concuerda con el resultado de la iteración:  $\lambda_1 = 0$ . Aquí surge la pregunta: ¿cómo es la sensibilidad en el atractor?

Para ver el comportamiento de la sensibilidad a las condiciones iniciales en los atractores hacemos una expansión de la fase  $\theta_N$  cerca de  $\theta_c$  obteniendo el siguiente resultado:

$$\theta_N - \theta_c = (\theta_{N-1} - \theta_c) \mp |r'_b(k_c)|^2 (\theta_{N-1} - \theta_c)^2 + \dots \quad (2.35)$$

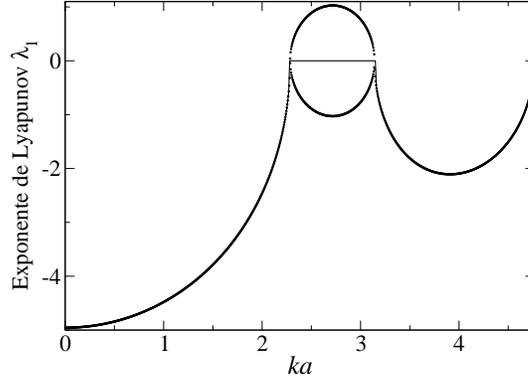


Figura 2.6: Exponente de Lyapunov: la línea continua representa el resultado de la iteración con  $N = 1000$ ,  $ua = 10$  y  $\theta_0 = \pi$ ; la línea punteada es el resultado analítico. En la región marginalmente caótica es el promedio de las soluciones las que representan el valor correcto del exponente de Lyapunov.

Esta expansión es de la forma

$$\phi_N = \phi_{N-1} + u \phi^z + \dots, \quad (2.36)$$

para  $\phi_N$  alrededor de un atractor crítico, y para la cual se sabe que la sensibilidad obedece una ley exponencial  $q$  cuando el tiempo de iteración es muy grande [45];<sup>4</sup> es decir, para  $N \gg 1$ ,

$$\xi_N = \lim_{N \rightarrow \infty} \Xi_N = e_q^{N\lambda_q} \equiv [1 - (q-1)N\lambda_q]^{1/(q-1)}, \quad (2.37)$$

donde  $\lambda_q$  es el exponente de Lyapunov  $q$  generalizado, dado por  $\lambda_q = zu$ , con  $q = 2 - 1/z$ . Entonces, si comparamos las ecuaciones (2.35) y (2.36) tenemos que  $u = \mp |r'_b(k_c)|^2$  y  $z = 2$ , por lo que  $q = 3/2$  y

$$\lambda_{3/2} = \mp 2 |r'_b(k_c)|^2. \quad (2.38)$$

El signo menos y más corresponden a trayectorias a la izquierda y derecha del punto de tangencia  $\theta_c$  (a la izquierda de la ventana caótica), respectivamente.<sup>5</sup> Esto es, cuando  $\theta_{N-1} - \theta_c < 0$ ,  $\xi_N$  decae con  $N$  de acuerdo con la ley de potencias

$$\xi_N = e_{3/2}^{-|\lambda_{3/2}|N} = \frac{1}{[1 + |r'_b(k_c)|^2 N]^2}, \quad (2.39)$$

<sup>4</sup>La exponencial  $q$  se define como  $e_q(x) = [1 + (1-q)x]^{1/(q-1)}$  para  $x, q \in \mathbb{R}$ . La exponencial ordinaria se recupera cuando  $q = 1$ . Por esa razón, era necesario llamar  $\lambda_1$  al exponente de Lyapunov tradicional.

<sup>5</sup>El orden de los signos se invierte para el punto de tangencia  $\theta_{c'}$  a la derecha de la ventana caótica

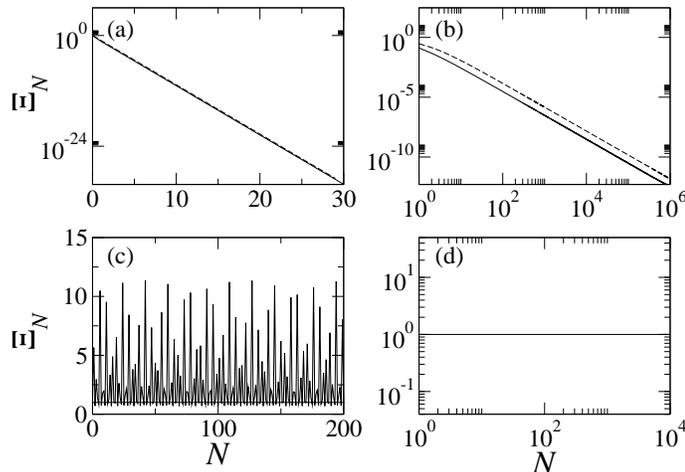


Figura 2.7: Sensibilidad a las condiciones iniciales para  $N$  finita,  $\Xi_N$ . La línea continua representa el resultado de la iteración para los potenciales delta con  $ua = 10$ : en (a)  $ka = 2$ , en (b)  $ka = 2.28445\dots$ , en (c)  $ka = 2.8$ , y en (d)  $ka = 3.14145$ . En los recuadros (a) y (c) la línea punteada representa el resultado de las ecuaciones (1.29) y (2.33), mientras que en (b) corresponde a la ecuación (2.39); en (d)  $\xi_N = 1$  permanece constante con  $N$  [42].

mientras que para  $\theta_{N-1} - \theta_c > 0$  crece más rápido que la exponencial de acuerdo con la ley

$$\xi_N = e^{|\lambda_{3/2}|N} = \frac{1}{[1 - |r'_b(k_c)|^2 N]^2}. \quad (2.40)$$

Estos dos comportamientos explican el fenómeno de intermitencia que puede apreciarse en las gráficas (b) y (d) de la figura 2.4. Una vez que las trayectorias convergentes pasan el cuello de botella, divergen y posteriormente el mapa las reintroduce nuevamente al cuello de botella.

En la figura 2.7 mostramos el comportamiento de la sensibilidad a las condiciones iniciales con el número de iteraciones para diferentes valores de  $k$ , en el caso de la cadena de potenciales delta. En el panel (a) se compara la iteración obtenida con  $ua = 10$  y  $ka = 2$ , dentro de la ventana de periodo 1, con la exponencial decreciente dada por la ecuación (2.34) con  $\lambda_1$  dada por la ecuación (2.33). En el panel (b) se observa que la iteración con  $ka = 2.28445\dots$  concuerda con el decaimiento en ley de potencias dado en la ecuación (2.39). En el panel (c)  $ka = 2.8$  y no existe decaimiento de la sensibilidad, como es de esperarse. El caso  $ka = 3.14145$  en el panel (d) es patológico y propio del potencial delta, ya que en  $ka = \pi$  la función de onda tiene sus nodos justo en las posiciones de los potenciales delta, los cuales coinciden con los del caso sin potencial, haciendo al sistema transparente. Esto quedará claro en el siguiente capítulo.



# 3

## *Comportamiento de la función de onda*

En el mundo ha de haber cierta cantidad de decoro,  
como ha de haber cierta cantidad de luz. Cuando  
hay muchos hombres sin decoro, hay siempre otros  
que tienen en sí el decoro de muchos hombres.

José Martí (Tres héroes)

### Resumen

Ahora analizaremos las propiedades de la función de onda como función tanto del tamaño como de la posición. Mostraremos que el comportamiento de ésta como función de la posición está dado por la sensibilidad a las condiciones iniciales; como función de la posición la función de onda es un factor que depende de la distancia desde la orilla al punto en donde se desea determinar la función de onda veces una función que oscila con la posición. Además, encontramos expresiones para distintas longitudes características del sistema. Estas son la longitud de localización en la ventana de periodo 1, y la otra justo en la transición entre las bandas desde el lado débilmente caótico. Esta última se relaciona directamente con el camino libre medio.

## La evolución con el tamaño del sistema

La función de onda en un punto  $x$  dentro de una región libre de potencial, digamos aquella entre los potenciales  $n$  y  $n + 1$ , se puede escribir como una superposición de ondas planas que viajan a la derecha y a la izquierda. En el capítulo 1 se eligió una normalización de la función de onda de manera que la amplitud del lado derecho de la cadena de dispersores es la unidad. Siguiendo las ecuaciones (1.13) y (1.18) la densidad de probabilidad en  $x$  la podemos entonces escribir en forma más precisa como

$$|\psi_n^{(N)}(x)|^2 = \frac{e^{N\Lambda_q(N)}}{e^{n\Lambda_q(n)}} \cos^2[k(x - na - b/2) + \theta_n/2], \quad (3.1)$$

donde  $q = 1$  para  $k$  en las ventanas de periodo 1 y de caos débil, mientras que  $q = 3/2$  en la transición entre las dos anteriores. Nuevamente, como en el capítulo 1, la relación de la densidad de probabilidad de una cadena con  $N$  dispersores con aquella de  $N - 1$ , se puede escribir como

$$|\psi_n^{(N)}(x)|^2 = \frac{e_q^{N\Lambda_q(N)}}{e_q^{(N-1)\Lambda_q(N-1)}} |\psi_n^{(N-1)}(x)|^2. \quad (3.2)$$

Un proceso iterativo nos conduce a

$$|\psi_n^{(N)}(x)|^2 = e_q^{N\Lambda_q(N)} |\psi_n^{(0)}(x)|^2, \quad (3.3)$$

donde  $\psi_n^{(0)}(x)$  es la función de onda en  $x$  en la ausencia de dispersores, es decir donde sólo existe el potencial escalón en  $x = 0$ .

El factor que se encuentra multiplicando a la densidad de probabilidad en el lado derecho de la ecuación (3.3) es precisamente la sensibilidad a las condiciones iniciales para  $N$  finita, definida en la ecuación (1.17), pero generalizada con la exponencial  $q$  en lugar de la exponencial tradicional. Entonces, la evolución de  $|\psi_n^{(N)}(x)|^2$  con el tamaño del sistema está dado por el comportamiento de  $\Xi_N$  con  $N$ , mostrado en la figura 2.7. Este comportamiento es parecido al de la conductancia en un árbol doble de Cayley [31].

Para energías en las ventanas de periodo 1, cuando  $N$  es muy grande comparado con 1,  $|\psi_n^{(N)}(x)|^2$  decae exponencialmente con  $N$  de la forma siguiente:

$$|\psi_n^{(N)}(x)|^2 = e^{-N\alpha/\zeta_1} |\psi_n^{(0)}(x)|^2, \quad (3.4)$$

donde  $\zeta_1$  es una longitud típica de decaimiento, que identificamos con una longitud de localización debido a la similitud con la forma como se escala la conductancia  $N$  [31]. Esta longitud de localización está dada por

$$\zeta_1 = \frac{a}{|\lambda_1|}. \quad (3.5)$$

Es importante notar que cuando  $|\lambda_1| > 1$ , la longitud de localización es menor que la constante de la red  $a$ , lo cual ocurre lejos de la transición a las ventanas de caos débil; cerca de la transición  $\zeta_1 > a$ . Para energías en las ventanas de caos débil,  $|\psi_n^{(N)}(x)|^2$  nunca decae sino que oscila conforme  $N$  crece, ahí  $\lambda_1 = 0$  de manera que no existe una longitud de localización. Sin embargo, en la transición entre las ventanas desde el lado caótico, la densidad de probabilidad tiene un decaimiento con  $N$  en ley de potencias de la forma<sup>1</sup>

$$|\psi_n^{(N)}(x)|^2 = e_{3/2}^{-Na/\zeta_{3/2}} |\psi_n^{(0)}(x)|^2, \quad (3.6)$$

donde en este caso también podemos identificar una longitud de localización dada por

$$\zeta_{3/2} = \frac{a}{|\lambda_{3/2}|} = \frac{a}{2|r'_b(k_c)|^2}. \quad (3.7)$$

Una cuestión interesante aquí es que el término del lado derecho de la segunda igualdad es un medio del camino libre medio  $\ell$  definido por [46, 47]:

$$\ell = \frac{a}{|r'_b(k_c)|^2}. \quad (3.8)$$

Esta ecuación indica que el camino libre medio es más grande que la constante de la red, lo cual está de acuerdo con lo que encontraron Esaki y Tsu en una superred, donde  $\ell \sim 3a$  [48]. Para nuestro caso particular de un potencial delta con  $ua = 10$ ,  $\ell \approx 1.21a$  para  $k_{c1}a = 2.28445\dots$ , y  $\ell \approx 1.4a$  para  $k_{c1}a = \pi$ .

## Comportamiento espacial de la función de onda

Para cadenas con un número muy grande de dispersores  $\Lambda_q(N)$  se aproxima a  $\lambda_q$ , independiente de  $N$ , y la densidad de probabilidad dada en la ecuación (3.1) puede escribirse como

$$|\psi_n^{(N)}(x)|^2 = \frac{e_q^{N\lambda_q}}{e_q^{n\lambda_q}} \cos^2 [k(x - na - b/2) + \theta_n/2]. \quad (3.9)$$

Para  $k$  en las ventanas periódicas, lejos de los atractores críticos,  $q = 1$  y por tanto la exponencial ordinaria se recupera. En este caso el comportamiento espacial de la función de onda está dado por

$$|\psi_n^{(N)}(x)|^2 = e^{-(N-n)a/\zeta_1} \cos^2 [k(x - na - b/2) + \theta_n/2]. \quad (3.10)$$

---

<sup>1</sup>De aquí en adelante nos concentraremos sólo en la solución estable, pero las conclusiones obtenidas de la solución inestable pueden obtenerse haciendo un análisis equivalente.

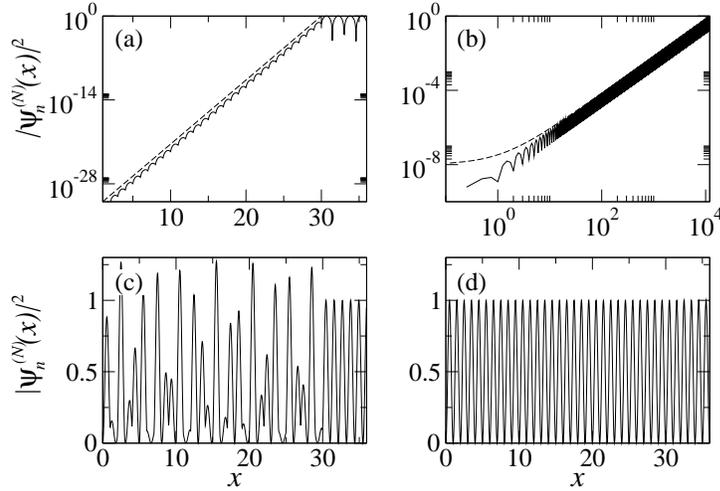


Figura 3.1: Densidad de probabilidad como función de  $x$  para la cadena de potenciales delta con  $ua = 10$ . (a) Comparación de (3.10), en línea continua, con la función exponencial decreciente con longitud de localización dada por (3.5), en línea discontinua, for  $ka = 2$ . (b) Comparación de (3.11) (línea continua) con una exponencial  $q$  decreciente con longitud de localización dada por (3.7), para  $ka = 2.28445\dots$  (c) Para  $ka = 2.8$  la función de onda está completamente extendida en todo el espacio. (d) El sistema es invisible para  $ka = \pi$  que coincide con una resonancia [42].

Esta ecuación nos dice que cuando la energía está en una ventana de periodo 1, la amplitud de la función de onda decrece exponencialmente desde la frontera en  $x = Na + b/2$ , donde vale 1, hacia el interior del sistema ( $n < N$ ). En este caso la partícula cuántica se extiende a lo largo de unas cuantas longitudes  $\zeta_1$ . Es en este sentido que interpretamos  $\zeta_1$  como una longitud de localización, la cual es menor que el periodo de la estructura localmente periódica  $a$ , excepto muy cerca de la región energética de transición. La situación se muestra en la figura 3.1 (a) para la cadena de potenciales delta. En cambio, para energías en las ventanas ergódicas,  $\zeta_1 \rightarrow \infty$  y la función de onda se extiende a lo largo de todo el sistema, como se observa en la figura 3.1 (c).

En la transición, en los atractores débilmente caóticos, la densidad de probabilidad en (3.9) se puede escribir como

$$|\psi_n^{(N)}(x)|^2 = \left( \frac{1 \pm na/2\zeta_{3/2}}{1 \pm Na/2\zeta_{3/2}} \right)^2 \cos^2 [k(x - na - b/2) + \theta_n/2], \quad (3.11)$$

donde hemos usado que  $\lambda_{3/2} = \mp a/\zeta_{3/2}$ . Esta ecuación muestra claramente el decaimiento en ley de potencias desde la frontera. Esto es, la función de onda está aún localizada pero la localización no es en forma de exponencial sino de exponencial  $q = 3/2$ . Es interesante notar que la longitud de localización es  $\zeta_{3/2} = \ell/2$ . El factor  $1/2$  se debe

al hecho de que la longitud de localización se mide desde el máximo de amplitud en la función de onda, el cual está en la frontera del sistema, mientras que el camino libre medio implícitamente da el ancho de un paquete de ondas; de acuerdo con Esaki y Tsu, el camino libre medio en una superred es la incertidumbre en la posición [48]. En la figura 3.1 (b) se puede observar el decaimiento en ley de potencias de la densidad de probabilidad para la cadena de potenciales delta. En la figura 3.1 (d) se muestra el comportamiento de la densidad de probabilidad en el atractor del lado derecho de la ventana caótica. En este caso el sistema es invisible puesto que  $k_{c1} a = \pi$  corresponde a una resonancia y la función de onda tiene nodos en los potenciales delta.



# 4

## *Propuesta teórico-experimental en una barra elástica*

Tengo secretos si revelar  
y como un anticuario, los guardo en el corazón.  
A veces quisiera retroceder, buscarme en el parque  
donde me perdí  
Real de Catorce (El Anticuario)

### Resumen

En este capítulo utilizaremos el conocimiento desarrollado en los capítulos anteriores y lo aplicaremos a un sistema elástico para su posible creación y medición experimental. El sistema se compone de una varilla de sección transversal cuadrada a la que se le maquinarán una serie de muescas de igual forma y equidistantes una de otra. Con esto formaremos un sistema unidimensional similar al descrito en los capítulos precedentes. Calcularemos la matriz  $S$  para una celda unitaria que se compone de la muesca más una región libre. Después aplicaremos la relación de recurrencia para la fase que hemos desarrollado, analizaremos el mapa y encontraremos el exponente de Lyapunov para obtener información sobre la función de onda del sistema. Con esto podremos aplicar nuestra teoría en el caso particular de la elasticidad.

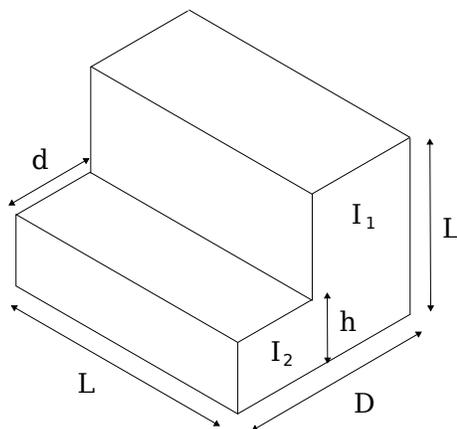


Figura 4.1: Diagrama de la celda unitaria del sistema elástico. Esta se compone de dos cuerpos, uno de longitud  $D - d$ , alto y ancho  $L$ , y momento polar de inercia  $I_1$ ; el otro tiene longitud  $d$ , alto  $h$  y ancho  $L$ , con momento polar de inercia  $I_2$ .

## ***Condiciones a la frontera de la celda unitaria***

En las varillas unidimensionales elásticas hay tres tipos de ondas: las flexionales, las compresionales y las torsionales. Las flexionales obedecen a una ecuación de cuarto orden en la posición, lo cual se aleja del estudio que hemos realizado en este trabajo. Por otro lado, las ecuaciones de onda que describen a las ondas compresionales y a las torsionales son de segundo orden en la posición [49]. Trabajaremos con las torsionales ya que son las que ofrecen un acoplamiento menor con el aire y porque son con las que se tiene un mejor control experimental. El área de la varilla es de sección transversal cuadrada de lado  $L$ . La profundidad de la muesca es  $L - h$  y está maquinada desde el borde superior de la varilla y tiene longitud  $d$ . La longitud de la celda unitaria es  $D$  y se compone de una región libre de longitud  $D - d$ , más la longitud de la muesca  $d$ , como se muestra en la figura 4.1. Como estos dos cuerpos elásticos tienen masas distintas, tendrán momentos de inercia distintos. Esto implica que los números de onda  $k$  de ambos cuerpos sean distintos, pero experimentalmente se trabaja a una sola frecuencia para ambos, lo cual impone una restricción sobre de ellos a través de la velocidad de fase en cada cuerpo. El estudio que realizamos es de forma general para una varilla de sección transversal rectangular y tomamos el caso particular en que el área es cuadrada.

La ecuación de onda que describe a las ondas torsionales en una varilla de longitud infinita y sección transversal rectangular, de ancho  $w$  y alto  $h$ , a la cual se le aplicó una

torsión alrededor de su eje axial, y que se torció un ángulo  $\phi$ , es [49–51]

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2}, \quad (4.1)$$

con  $t$  el tiempo y  $c$  la velocidad de fase dada por

$$c = \sqrt{\frac{G \alpha}{\rho I}}, \quad (4.2)$$

donde  $\rho$  es la densidad de la varilla,  $G$  su módulo de corte,  $I$  su momento polar de inercia y  $\alpha$  está dada por [52]

$$\alpha = \frac{256}{\pi^6} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{(2m+1)^2 (2p+1)^2} \frac{hw}{\left(\frac{2m+1}{h}\right)^2 \left(\frac{2p+1}{w}\right)^2}. \quad (4.3)$$

Las soluciones estacionarias de la ecuación (4.1) son de la forma  $\phi(x, t) = \psi(x)e^{-i\omega t}$ , donde la parte espacial es de la forma

$$\psi(x) = a e^{ikx} + b e^{-ikx}. \quad (4.4)$$

Si la varilla se compone de dos cuerpos de extensión infinita con secciones transversales de la misma forma, pero de tamaño distinto, se deben de cumplir con condiciones a la frontera específicas. Para estos dos cuerpos elásticos de sección transversal rectangular con igual ancho  $w$  y alturas  $h_j$  distintas entre sí, la función de onda y el momento de torsión deben ser continuos; es decir, si en  $x = x'$  se encuentra la frontera entre los dos, se debe cumplir que

$$\psi_1(x) \Big|_{x=x'} = \psi_2(x) \Big|_{x=x'} \quad (4.5)$$

y

$$M_{T_1}(x) \Big|_{x=x'} = M_{T_2}(x) \Big|_{x=x'}, \quad (4.6)$$

donde  $\psi_j(x)$  es la función de onda<sup>1</sup> y  $M_{T_j}(x)$  es el momento de torsión del cuerpo  $j$  dado por

$$M_{T_1}(x) = G\alpha_j \frac{\partial \psi_j(x)}{\partial x}. \quad (4.7)$$

Por tanto, la condición (4.6) se puede escribir como

$$\frac{\partial \psi_1(x)}{\partial x} \Big|_{x=x'} = \eta \frac{\partial \psi_2(x)}{\partial x} \Big|_{x=x'}, \quad (4.8)$$

---

<sup>1</sup>En elasticidad la función de onda es la *amplitud de las vibraciones torsionales*, pero seguiremos usando el término de función de onda.

con  $\eta = \alpha_2/\alpha_1$ , el cociente entre los parámetros  $\alpha$  del cuerpo menor entre el del cuerpo mayor. La relación entre las frecuencias de oscilación de ambos cuerpos implica que experimentalmente la barra debe de oscilar de igual forma. Ya que la frecuencia a la que oscila el cuerpo  $j$  está dada por  $f = k_j c_j / 2\pi$ , los números de onda  $k_1$  y  $k_2$  se relacionan entre sí como

$$k_1 = \frac{c_2}{c_1} k_2 = \sqrt{\frac{\alpha_2/I_2}{\alpha_1/I_1}} k_2, \quad (4.9)$$

donde hemos usado la ecuación (4.2) y supuesto que las densidades de los dos cuerpos es la misma.

Por otro lado, el momento polar de inercia por unidad de longitud  $I_j$  para un rectángulo de ancho  $w_j$  y altura  $h_j$ , que rota respecto a un eje que pasa por su centro axial, perpendicular a su sección transversal, está dado por

$$I_j = \frac{h_j w_j^3 + h_j^3 w_j}{12}. \quad (4.10)$$

Entonces, para el cuerpo 1,  $h_1 = w_1 = L$ , por lo que su momento polar de inercia es

$$I_1 = \frac{1}{6} L^4, \quad (4.11)$$

mientras que para el cuerpo 2,  $w_2 = L$  y  $h_2 = h$ , con lo cual

$$I_2 = \frac{hL^3 + h^3L}{12}. \quad (4.12)$$

Al trasladar el cuerpo 2 hacia la parte más baja del cuerpo 1 una distancia  $d_T = L/2 - h/2$ , el teorema de ejes paralelos nos dice que

$$I_{2T} = \frac{1}{6} L^4 \left( 2\frac{h}{L} + 2\frac{h^3}{L^3} - 3\frac{h^2}{L^2} \right), \quad (4.13)$$

donde  $I_{2T}$  es el momento polar de inercia del cuerpo 2 trasladado hasta la parte más baja del cuerpo 1.

## ***La matriz de dispersión de una muesca $S_M$***

Ya que contamos con las condiciones a la frontera entre dos cuerpos elásticos rectangulares de longitud infinita, y sección transversal distinta, calculemos la matriz de dispersión de una barra elástica de sección transversal uniforme a la que le hacemos una muesca de longitud  $d$ , como se muestra en la figura 4.1.

La matriz de dispersión que estamos buscando tiene la estructura

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} a e^{-ik_1 d'} \\ b' e^{ik_1 D} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} r_M & t'_M \\ t_M & r'_M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b e^{ik_1 d'} \\ a' e^{-ik_1 D} \end{pmatrix} \\ &= S_M \begin{pmatrix} b e^{ik_1 d'} \\ a' e^{-ik_1 D} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4.14)$$

siendo  $a$  ( $a'$ ) y  $b$  ( $b'$ ) las amplitudes de las ondas que entran y salen de la muesca desde la izquierda (derecha). El borde derecho de la muesca está medido desde el origen a una distancia  $D$ , mientras que el izquierdo está a una distancia  $d' = D - d$ ;  $k_1$  es el número de onda de la barra, que es inversamente proporcional a la velocidad fase  $c_1$ .

Para obtener esta matriz es necesario obtener las matrices de dispersión en cada uno de los bordes de la muesca, a saber

$$\begin{pmatrix} a e^{-ik_1 d'} \\ b_M e^{ik_2 d'} \end{pmatrix} = S_{12} \begin{pmatrix} b e^{ik_1 d'} \\ a_M e^{-ik_2 d'} \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \begin{pmatrix} a_M e^{-ik_2 D} \\ b' e^{ik_1 D} \end{pmatrix} = S_{21} \begin{pmatrix} b_M e^{ik_2 D} \\ a' e^{-ik_1 D} \end{pmatrix}, \quad (4.15)$$

donde  $S_{ij}$  ( $ij = 12$  y  $21$ ) tiene la estructura

$$S_{ij} = \begin{pmatrix} r_{ij} & t'_{ij} \\ t_{ij} & r'_{ij} \end{pmatrix}. \quad (4.16)$$

Estas matrices se calculan a partir de las amplitudes de onda elásticas

$$\begin{aligned} \psi_I(x < d') &= a e^{-ik_1 x} + b e^{ik_1 x}, \\ \psi_m(d' < x < D) &= a_m e^{-ik_2 x} + b_m e^{ik_2 x}, \\ \psi_{II}(x > D) &= a' e^{-ik_1 x} + b' e^{ik_1 x}. \end{aligned}$$

Las condiciones de frontera (4.5) y (4.8) nos conducen al siguiente sistema de ecuaciones:

$$\psi_I(x = d') = \psi_m(x = d'), \quad \frac{\partial \psi_I(x = d')}{\partial x} = \eta \frac{\partial \psi_m(x = d')}{\partial x}, \quad (4.17)$$

$$\psi_m(x = D) = \psi_{II}(x = D), \quad \eta \frac{\partial \psi_m(x = D)}{\partial x} = \frac{\partial \psi_{II}(x = D)}{\partial x}. \quad (4.18)$$

Al resolver estas ecuaciones encontramos que las matrices de dispersión  $S_{12}$  y  $S_{21}$  son

$$S_{12} = \begin{pmatrix} \frac{k_1 - \eta k_2}{k_1 + \eta k_2} & \frac{2\eta k_2}{k_1 + \eta k_2} \\ \frac{2k_1}{k_1 + \eta k_2} & \frac{\eta k_2 - k_1}{k_1 + \eta k_2} \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad S_{21} = \begin{pmatrix} \frac{\eta k_2 - k_1}{k_1 + \eta k_2} & \frac{2k_1}{k_1 + \eta k_2} \\ \frac{2\eta k_2}{k_1 + \eta k_2} & \frac{k_1 - \eta k_2}{k_1 + \eta k_2} \end{pmatrix}, \quad (4.19)$$

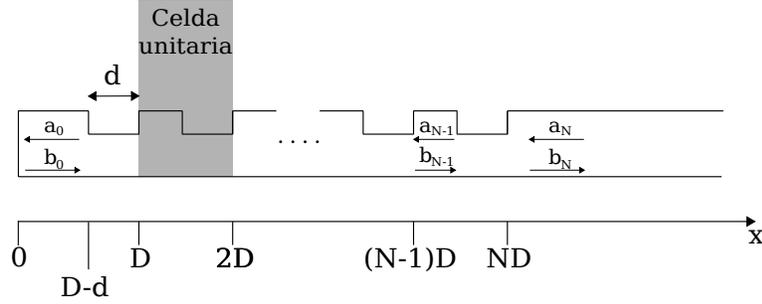


Figura 4.2: Vista bidimensional de una cadena de  $N$  celdas unitarias elásticas de longitud  $D$ . Se escriben de forma explícita las amplitudes de las ondas que se desplazan hacia la izquierda y hacia la derecha en cada una de las celdas.

de las cuales, siguiendo la regla de combinación para matrices  $S$  obtenemos que la matriz  $S_M$  de la muesca es

$$S_M = \begin{pmatrix} r_{12} + \frac{t'_{12} r_{21} t_{12}}{e^{-2ik_2(D-d')} - r'_{12} r_{21}} & \frac{t'_{12} e^{-ik_2(D-d')} t'_{21}}{e^{-2ik_2(D-d')} - r'_{12} r_{21}} \\ \frac{t_{21} e^{-ik_2(D-d')} t_{12}}{e^{-2ik_2(D-d')} - r'_{12} r_{21}} & r'_{21} + \frac{t_{21} r'_{12} t'_{21}}{e^{-2ik_2(D-d')} - r'_{12} r_{21}} \end{pmatrix}, \quad (4.20)$$

cuyos elementos, después de hacer un poco de álgebra, se reducen a que

$$r_M = r'_M = \frac{2i \operatorname{sen}(k_2 d)}{\alpha_M e^{ik_2 d} - \alpha_M^{-1} e^{-ik_2 d}} \quad (4.21)$$

y

$$t_M = t'_M = \frac{\alpha_M - \alpha_M^{-1}}{\alpha_M e^{ik_2 d} - \alpha_M^{-1} e^{-ik_2 d}} \quad (4.22)$$

donde  $\alpha_M = (k_1 - \eta k_2)/(k_1 + \eta k_2)$  para el caso de varillas de sección transversal rectangular.<sup>2</sup> Es muy fácil verificar que  $|r_M|^2 + |t_M|^2 = 1$ , lo cual implica conservación de flujo.

## Varilla elástica rectangular con $N$ muescas

El dispositivo experimental del sistema elástico que proponemos estudiar se compone de una barra de sección transversal cuadrada a la que se le maquinarán muescas de igual

<sup>2</sup>En el caso de una varilla circular de radio  $R$ , a la cual que se le hace una muesca de radio  $r$ ,  $\alpha_M = (\eta_c^4 - 1)/(\eta_c^4 + 1)$ , donde  $\eta_c = r/R$ . Cabe hacer notar que la diferencia en la  $\eta$  entre las varillas cuadrada y circular es de origen más profundo, ya que una depende de la razón entre los radios mayor y menor y la otra en una expresión infinita cuyos elementos son proporcionales a su ancho y alto.

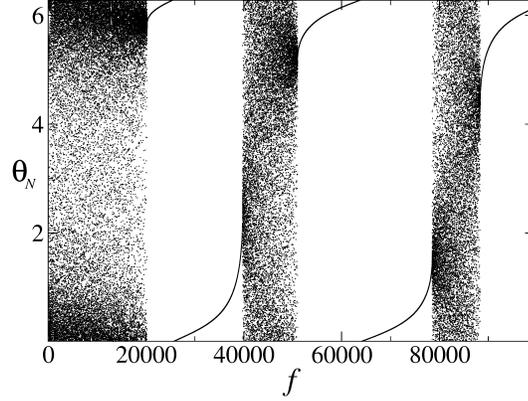


Figura 4.3: Diagrama de bifurcación para una cadena de muescas en una barra elástica de sección transversal cuadrada hecha de aluminio. Graficamos sólo las últimas quince iteraciones de  $N = 100$  para la fase como una función de la frecuencia  $f$  en Hertz, empezando con la condición inicial  $\theta_0 = 2\pi$ .

Símbolo	Nombre de la constante	Valor numérico (aluminio)
$D$	Longitud de la celda unitaria	1 in
$d$	Longitud de la muesca	5/8 in
$w_1 = w_2 = L$	Ancho de la barra	1 in
$h_1 = L$	Alto de la barra	1 in
$h_2 = h$	Altura de la muesca	3/8 in
$G/\rho$	$G$ el módulo de corte y $\rho$ su densidad	9 639 162.09 m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup>
$N$	Número de celdas unitarias	100

Tabla 4.1: Tabla de constantes utilizadas para la barra de aluminio.

grosor y profundidad en forma periódica. Cada una de las celdas unitarias que forman al sistema se compone de dos regiones, la de la muesca de longitud  $d$  más una región libre de longitud  $D - d$ . La barra está limitada en uno de sus extremos por la frontera física dado que su tamaño es finito; mientras que del otro lado el sistema permanece abierto como se muestra en la figura 4.2.

Siguiendo las ideas mostradas en los capítulos 1 y 2, la relación de recurrencia de la matriz de dispersión para un sistema que se compone de  $N$  muescas, en términos de uno de  $N - 1$  está dada por

$$S_N = r_M + t_M \frac{1}{e^{-2ik_1(D-d)} - S_{N-1}r_M} S_{N-1}t_M, \quad (4.23)$$

misma que lleva a la siguiente relación de recurrencia, o mapa, para la fase  $\theta_N$ , aunque

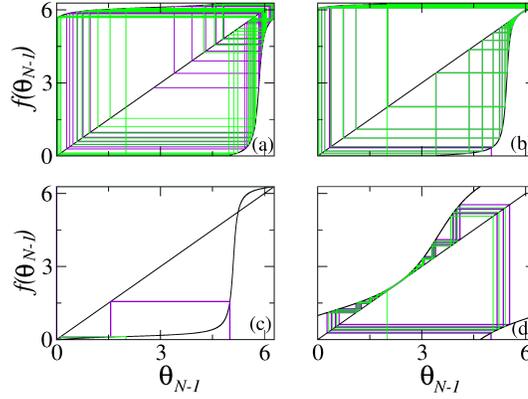


Figura 4.4: Dinámica del mapa (4.24) para una barra elástica de aluminio. Los parámetros de la barra se muestran en la tabla 4.1; se muestran los casos para las frecuencias  $f$ , en Hz, de (a) 15000.0, (b) 20272.824461676, (c) 25180.0, y (d) 39735.6491631850. Cada panel muestra las trayectorias para las condiciones iniciales  $\theta_0 = 2$  y 5.

muy extensa, dada por [ver la ecuación (2.14)]

$$\begin{aligned} \theta_N &= -\theta_{N-1} \\ &+ 2 \arctan \frac{2A_m + (\alpha - \alpha^{-1})B_m \cos k_2 d - (\alpha + \alpha^{-1})B'_m \sin k_2 d}{2A'_m + (\alpha - \alpha^{-1})B'_m \cos k_2 d + (\alpha + \alpha^{-1})B_m \sin k_2 d} \end{aligned} \quad (4.24)$$

donde

$$\begin{aligned} A_m &= \cos[k_2(D - d)] \sin k_2 d, \\ A'_m &= \sin[k_2(D - d)] \sin k_2 d, \\ B_m &= \cos[k_2(D - d)] \sin \theta_{N-1} + \sin[k_2(D - d)] \cos \theta_{N-1}, \\ B'_m &= \cos[k_2(D - d)] \cos \theta_{N-1} - \sin[k_2(D - d)] \sin \theta_{N-1}. \end{aligned} \quad (4.25)$$

Para el caso particular de una varilla hecha de aluminio (en la tabla 4.1 se encuentran las cantidades utilizadas [53]), podemos graficar la fase  $\theta_N$  contra la frecuencia, que es el parámetro que se puede variar experimentalmente. Encontramos de igual manera al caso cuántico una serie de ventanas débilmente caóticas entre ventanas de periodo 1 como puede verse en la figura 4.3 (en esta figura sólo se muestra la solución estable). De modo contrario al cuántico, en el caso elástico la primer ventana es débilmente caótica en vez de ser de periodo 1. En la figura 4.3 podemos observar el mapa de bifuración para una barra elástica hecha de aluminio ( $\sqrt{G/\rho} = 3104.7$  m/s), de sección transversal cuadrada ( $h_1 = w_1 = 2.54$  cm). La cadena consistirá de cien muescas ( $N = 100$ ), de manera que la celda unitaria medirá una pulgada ( $D = 1$  in), la longitud de cada muesca será  $d = 1.58$  cm, la altura de las muescas es de  $h_2 = 0.95$  cm, mientras que su ancho permanece

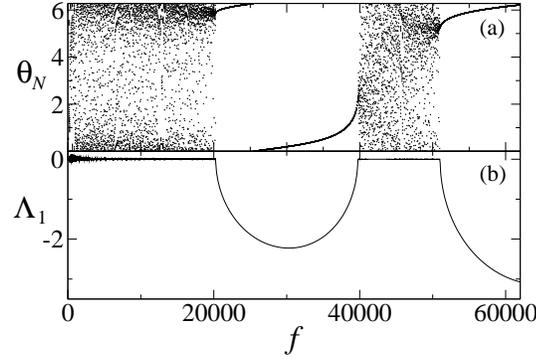


Figura 4.5: Comparación entre (a) la fase  $\theta_N$  y (b) el exponente de Lyapunov  $\Lambda_1$  como función de la frecuencia  $f$ . Podemos observar que los dos casos son completamente equivalentes al variar  $f$ . La primera banda conductora corresponde a que el exponente de Lyapunov oscile alrededor de 0 ya que el número de celdas unitarias es muy pequeño. Al igual que en el caso cuántico, estas oscilaciones tienden a cero conforme el número de celdas tienda a infinito.

constante ( $w_2 = w_1 = 2.54$  cm). Cuando variamos los parámetros de la barra, o los de las muescas, las ventanas de periodo 1 o las débilmente caóticas cambian su ancho. Esto es análogo al caso cuántico mostrado en la figura 2.2. Al variar estos parámetros en forma adecuada podemos predecir en dónde podremos encontrar las bandas, o los bordes de las bandas que nos interese estudiar, de acuerdo a las limitaciones técnicas o del equipo de laboratorio que tengamos a nuestra disposición. En el caso cuántico mientras mayor es el número de onda, menor era el efecto de los potenciales. Por lo tanto, para  $k$  muy altas, el ancho de la ventana débilmente caótica se vuelve muy grande. En el caso elástico, mientras va aumentando la frecuencia, las ventanas débilmente caóticas se vuelven más angostas, es decir, encontraremos resonancias aisladas.

La dinámica del mapa (4.24) se observa en la figura 4.4. Como se esperaba, observamos una correspondencia directa con la fase mostrada en la figura 4.3. Para una frecuencia dentro de una ventana débilmente caótica, la fase nunca se estaciona [figura 4.4 (a)], mientras que para otra frecuencia dentro de la ventana de periodo 1 [figura 4.4 (b)] la fase alcanza una solución de punto fijo para casi cualquier condición inicial que se elija. En los paneles (b) y (d) se observan trayectorias intermitentes para las bifurcaciones tangentes.

Como se vio en el capítulo 2, podemos obtener información de la función de onda, como función del número de celdas, al analizar el exponente de Lyapunov. Si aplicamos el resultado mostrado en la ecuación (2.32) para el caso elástico, observamos una concordancia perfecta en la figura 4.5. En el panel (b) de la figura 4.5 se muestra el resultado de la iteración para  $N = 100$  muescas y los parámetros de la tabla 4.1, para

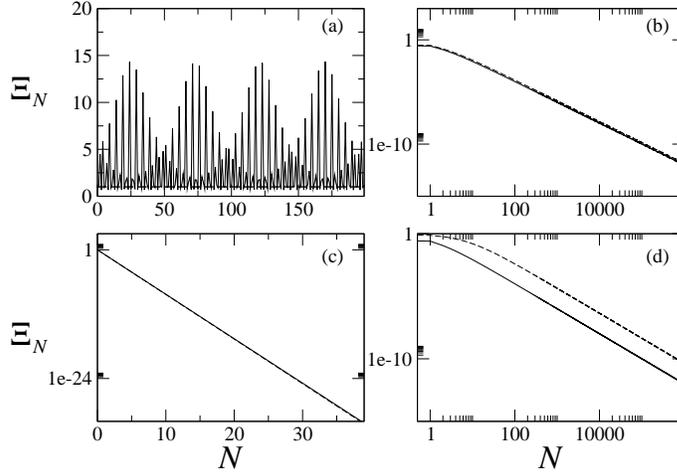


Figura 4.6: Sensibilidad a las condiciones iniciales de una barra elástica de aluminio. Los parámetros de la barra son los mostrados en la tabla 4.1. Se muestran los casos para las frecuencias  $f$ , en hertz, de (a) 15000.0, (b) 20272.824461676, (c) 25180.0, y (d) 39735.6491631850.

una condición inicial  $\theta_0 = \pi$ . Para las ventanas de periodo 1,  $\Lambda_1(N)$  es negativo; mientras que en las ventanas débilmente caóticas  $\Lambda_1(N)$  oscila alrededor del 0. Al igual que en el caso cuántico, estas oscilaciones tienen a 0 para  $N \rightarrow \infty$ .

Para conocer el comportamiento de la función de onda como función de  $N$  debemos elegir algunas frecuencias de interés. Estas son: dentro de la ventana débilmente caótica, en la ventana de periodo 1 y en los bordes de las dos primeras bandas permitidas. En todos los paneles de la figura 4.6 graficamos la solución de la iteración en línea continua que corresponde a la ecuación (1.17), mientras que la línea punteada muestra el resultado del modelo teórico que proponemos. Los paneles (a) y (c) corresponden a las frecuencias  $f = 15000$  y  $f = 25180.0$  Hz, respectivamente. Nuestro modelo expresado en la ecuación (2.33) corresponde a estos paneles, mostrando un decaimiento exponencial en la región prohibida, y que se mantiene constante en la región permitida. Los paneles (b) y (d) corresponden a los bordes derecho de la primera ventana y al borde izquierdo de la segunda ventana, cuyas frecuencias son  $f_{c_1} = 20272.824461676$  Hz y  $f_{c_2} = 39735.6491631850$  Hz, respectivamente. Estos dos resultados muestran un decaimiento en ley de potencias igual al propuesto en las ecuaciones (2.40) y (2.39), respectivamente. Es para este par de frecuencias que nos interesa demostrar experimentalmente dicha ley de potencias.

Dadas las limitaciones técnicas de los aparatos de medición, es importante hacer notar que dichas frecuencias no se pueden elegir dada la resolución del aparato de medición. Si contásemos con un aparato para elegir la frecuencia cuya resolución máxima

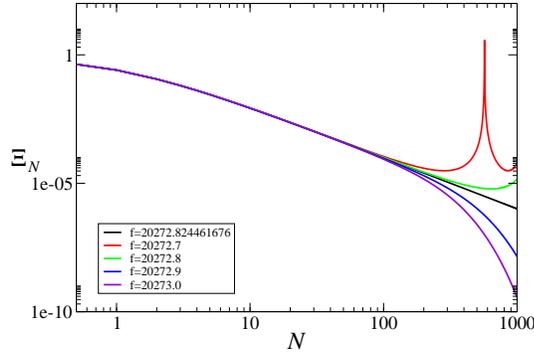


Figura 4.7: Sensibilidad a las condiciones iniciales como función de  $N$ . Se muestra una familia de curvas que podrían medirse experimentalmente con una resolución de 0.1 Hz. La línea negra corresponde al valor del decaimiento en ley de potencias. Las líneas roja y verde corresponden a valores que están dentro de la ventana débilmente caótica y que empiezan a oscilar conforme  $N$  aumenta. Las líneas azul y violeta corresponden a frecuencias dentro de la ventana de periodo 1 y que decaen en forma exponencial.

fuese de 0.1 Hz deberíamos poder al menos, reproducir las curvas mostradas en la figura 4.7. La línea negra corresponde a la frecuencia de la ley de potencias, mientras que las demás curvas corresponden a frecuencias dentro de las ventanas de periodo 1 (azul y violeta) o dentro de la ventana débilmente caótica. Algo análogo sucede para el borde izquierdo de la segunda ventana permitida. Las limitaciones físicas sólo nos permiten trabajar con 100 muescas, es decir, con una barra de 2.54 m, mientras que la barra que podemos conseguir es de 3.60 m. Para simular un sistema de longitud infinita debemos utilizar técnicas que nos permitan realizar esto [54]. La idea en este punto es realizar siempre las mediciones en la región  $N = 0$  para cumplir con lo expresado en la ecuación (1.20).

El comportamiento de la función de onda como función del espacio es análogo al que presenta como función del tamaño del sistema. Es decir, para frecuencias dentro de la ventana de periodo 1, la función de onda decae exponencialmente con el número de muescas y con la distancia desde la orilla, mientras que para frecuencias dentro de la ventana débilmente caótica, está oscila; para frecuencias en el borde de la banda debe de decaer en forma de ley de potencias. Esto se muestra en la figura 4.8.

Uno de los resultados que vale la pena estudiar experimentalmente es el del camino libre medio. Para los parámetros que hemos utilizado, y para las frecuencias que utilizamos para mostrar el decaimiento en ley de potencias, encontramos que el camino libre medio, dado por la ecuación (3.8), es  $\ell \approx 1.2D$  para  $f_{c_1} = 20272.824461\dots$  Hz y  $\ell \approx 6.6D$  para  $f_{c_2} = 39735.64916\dots$  Hz. El primer valor concuerda con los resulta-

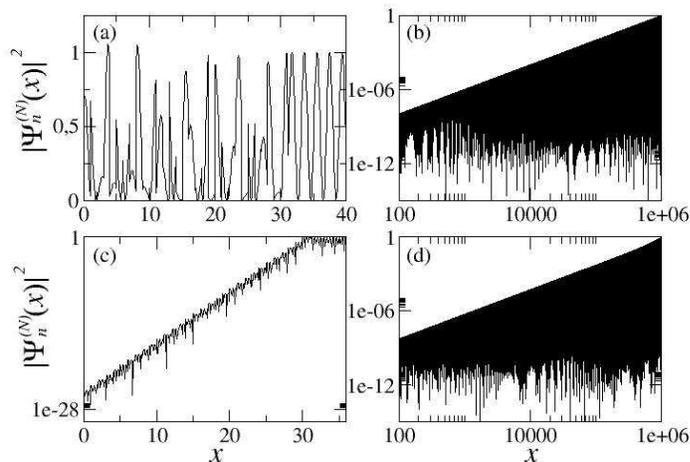


Figura 4.8: Comportamiento de la función de onda con el espacio  $x$ . Se muestran los casos para las frecuencias  $f$ , en hertz, de (a) 15000.0, (b) 20272.824461676, (c) 25180.0, y (d) 39735.6491631850.

dos que reportamos en el capítulo anterior y a los reportados en [48], mientras que el segundo se aleja un poco de los resultados reportados.

Para la excitación y detección de las ondas torsionales proponemos utilizar transductores electromagnético-acústicos (*EMAT's* por sus siglas en inglés) [55, 56]. Estos presentan algunas ventajas como son: no es necesario el contacto físico para excitar o detectar las ondas, distintas configuraciones permiten la excitación y la detección de ondas torsionales, compresionales o flexionales, son selectivos en cuanto a las frecuencias en que trabajan, son de fácil adquisición y bajo costo, etc. Una de las pocas desventajas es que el detector puede medir la señal excitadora si se encuentra muy cerca del excitador. En este sentido, el mejor candidato para medir el camino libre medio es para la frecuencia  $f_{c_2}$ , ya que la distancia entre el detector y el emisor es de al menos seis celdas unitarias.

# Conclusiones

And if the cloud bursts, thunder in your ear  
You shout and no one seems to hear.  
And if the band you're in starts playing different tunes  
I'll see you on the dark side of the moon.  
Pink Floyd (Brain Damage)

Consideramos una estructura localmente periódica en una dimensión, que consiste en una cadena de potenciales de forma arbitraria; estudiamos la evolución de la función de onda de la cadena cuando el tamaño del sistema se incrementa, con el fin de investigar la naturaleza de los diferentes estados del sistema. Este procedimiento de escalamiento nos ayudó a observar el comportamiento de la función de onda en el espacio cuando el tamaño del sistema permanece fijo.

Puesto que el sistema no es totalmente periódico, no hicimos uso de la teoría tradicional de bandas sino que tomamos ventaja del formalismo dispersivo. Por un lado, con la matriz de transferencia es fácil encontrar las bandas prohibidas y permitidas de una manera sencilla a través de su diagonalización, como se hace en tradicionalmente en la literatura. En la banda permitida los valores propios son simplemente números complejos de módulo 1, mientras que en la banda prohibida son números reales que dan lugar a una función de onda con dos componentes, una creciente y otra decreciente con el tamaño del sistema, que en el límite cristalino da lugar a las bandas. En este trabajo mostramos que estos valores propios están relacionados con el exponente de Lyapunov y la función de onda correspondiente con la sensibilidad a las condiciones iniciales en la fase de la onda saliente. Por ser un enfoque nuevo, esperamos su pronta publicación en alguna revista de prestigio en el ámbito de la docencia.

Por otro lado, el formalismo de la matriz de dispersión nos permitió reducir el problema a uno de dinámica de mapas no lineales al escribir la matriz de dispersión del sistema en una relación de recursión en términos del número de dispersores. A través

de este método toda la información sobre el comportamiento del sistema se obtuvo a partir de la dinámica de este mapa. De esta manera, encontramos una equivalencia entre las regiones periódicas y las débilmente caóticas del mapa con las bandas prohibidas y permitidas, respectivamente, de la cadena totalmente periódica. Al analizar la sensibilidad a las condiciones iniciales de la fase de la matriz de dispersión, en la banda prohibida encontramos dos soluciones de punto fijo, una estable (atractor) y una inestable (repulsor). En la región débilmente caótica el exponente de Lyapunov es igual a cero en el límite cristalino haciendo notoria la banda permitida, donde la función de onda oscila con el tamaño del sistema. En las bandas prohibidas el exponente de Lyapunov toma dos posibles valores: uno negativo (solución estable) y uno positivo (solución inestable). La solución inestable, es observable sólo cuando la condición inicial toma un valor específico (repulsor), mientras que para cualquier otro valor, después de algunas iteraciones, la fase converge al atractor. En estas regiones la sensibilidad decae exponencialmente con el número de dispersores, mientras que en la transición entre las regiones periódicas y débilmente caóticas, pero desde el lado caótico, la sensibilidad se escala como una ley de potencias.

El comportamiento de la función de onda es equivalente al observado en la conductancia de un árbol de Cayley doble, donde ésta oscila en regiones de caos débil y es nula en las demás. En una ventana de período 1, lejos de la transición a la ventana caótica la función de onda decae exponencialmente con una escala de longitud típica, que es menor que la constante de la red; muy cerca de la transición desde la ventana de período uno, es mayor que la constante de la red. El comportamiento de este escalamiento nos lleva a interpretar esta escala típica como una longitud de localización. Hemos corroborado esta interpretación para la localización exponencial de la función de onda cerca de la frontera del sistema finito, que puede verse como un defecto. En la región caótica la función de onda no decae y una longitud de localización no puede ser definida. En la transición, desde el lado caótico, la función de onda también se localiza pero con una forma  $q$ -exponencial, con una longitud de localización que es la mitad del camino libre medio.

Aplicamos los resultados generados en la cadena de dispersores cuánticos en una varilla elástica con muescas. Encontramos que este sistema es ideal para comprobar nuestros resultados de forma experimental, en especial los resultados concernientes al decaimiento en ley de potencias y del camino libre medio. Con una resolución de 0.1 Hz es sensato pensar que es posible demostrar este decaimiento experimentalmente. Como

trabajo a futuro se realizará el desarrollo experimental y las mediciones necesarias para demostrar los resultados de nuestro modelo teórico.

Como perspectiva general sobre este modelo que hemos desarrollado, podemos decir que es posible extenderlo a sistemas que presentan impurezas (desorden). El desorden puede ser en la posición de las barreras, en el potencial que las conforma, o ambos. Adicionalmente podemos extender este estudio hacia sistemas ondulatorios clásicos que presentan pérdidas o ganancias. Adicionalmente, es imperativo estudiar la densidad de estados en el sistema cuántico mientras vamos aumentando dispersores a la cadena de potenciales. No queda claro si los resultados aquí obtenidos valen aún el caso de la dispersión en dos dimensiones como, por ejemplo, en estructuras tipo grafeno.



# Apéndice A

## *Un par de potenciales analíticamente solubles*

### Resumen

En este Apéndice resolvemos dos potenciales cuánticos unidimensionales cuya soluciones son analíticas. Esto es con en fin de que esta Tesis sea autocontenida y que sirva como referencia para estudios posteriores, así como a algunos estudiantes. Iniciamos brevemente con la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para despues resolver el Potencial escalón y el potencial Delta de Dirac. En ambos casos el valor de la energía esta por debajo de la altura del potencial en cuestión.

En una dimensión la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad (\text{A.1})$$

donde  $m$  es la masa de la partícula,  $\hbar$  la constante de Planck reducida (o constante de Dirac);  $V(x)$  es el potencial en la posición  $x$ ,  $E$  la energía de las partículas y  $\psi(x)$  es la función de onda, solución de la ecuación (A.1) en el punto  $x$ .

En las siguientes secciones presentamos la solución de la ecuación (A.1) para dos tipos de potenciales: el potencial escalón y un potencial dado por la función delta. Para el primer caso nos concentraremos en energías menores que la altura del potencial escalón. Aunque la solución para ambos potenciales se puede encontrar en muchos libros de mecánica cuántica, aquí presentamos la derivación de las matrices de dispersión para ambos casos y la matriz de transferencia en el último, con el propósito de hacer la Tesis autocontenida.

## **Potencial escalón**

El sistema se muestra en la figura A.1 y se conforma por un escalón de potencial con altura  $V_0$  (región 1) y cuyo rango va desde cero y se extiende hasta menos infinito. Supondremos que la partícula incide con energía  $E$  desde la derecha donde el potencial es nulo (región 2). La función potencial es entonces

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{para } x < 0 \\ 0 & \text{para } x > 0 \end{cases}. \quad (\text{A.2})$$

Para la región 1 del espacio la ecuación (A.1) toma la siguiente forma

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_1(x) - q^2 \psi_1(x) = 0, \quad (\text{A.3})$$

donde

$$q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}. \quad (\text{A.4})$$

cuya solución es una combinación lineal de exponenciales reales crecientes y decrecientes con  $x$ ; es decir, la solución es de la forma

$$\psi_1(x) = a_1 e^{-qx} + b_1 e^{qx}. \quad (\text{A.5})$$

Al evaluar esta solución en menos infinito encontramos que una de las exponenciales diverge, por lo que no es una solución físicamente aceptable; por tanto, debemos hacer

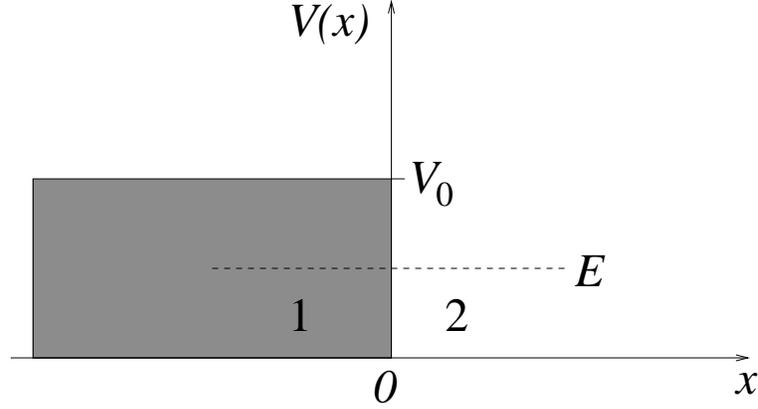


Figura A.1: Potencial con un escalón en el origen.  $V_0$  es la altura del escalón en unidades de energía y  $E$  representa la energía de la partícula cuando llega al escalón desde la derecha.

cero la amplitud que le precede, es decir,  $a_1 = 0$ . Tomando esto en cuenta, la solución queda

$$\psi_1(x) = b_1 e^{qx}. \quad (\text{A.6})$$

En la región 2 el potencial es nulo de manera que la solución a la ecuación de Schrödinger es una superposición de ondas planas que viajan hacia la derecha y hacia la izquierda. La solución es equivalente a la de la ecuación (A.5) con  $q$  reemplazado por  $ik$ ; esto es

$$\psi_2(x) = a_2 e^{-ikx} + b_2 e^{ikx}, \quad (\text{A.7})$$

donde  $a$  ( $b$ ) es la amplitud de la onda que se propaga hacia la izquierda (derecha) y  $k$  es el número de onda dado por

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}. \quad (\text{A.8})$$

Justo en la frontera entre las regiones 1 y 2 ( $x = 0$ ) las funciones de onda  $\psi_1(x)$  y  $\psi_2(x)$ , y sus derivadas, deben de ser iguales. Con esto obtenemos el par de ecuaciones siguientes

$$\begin{aligned} a_2 + b_2 &= b_1, \\ -ik a_2 + ik b_2 &= q b_1, \end{aligned}$$

que al multiplicar la primera de ellas por  $-q$  y sumarla con la segunda obtenemos

$$-(q + ik)a_2 - (q - ik)b_2 = 0,$$

de la que obtenemos directamente

$$b_2 = S_{\text{esc}} a_2, \quad (\text{A.9})$$

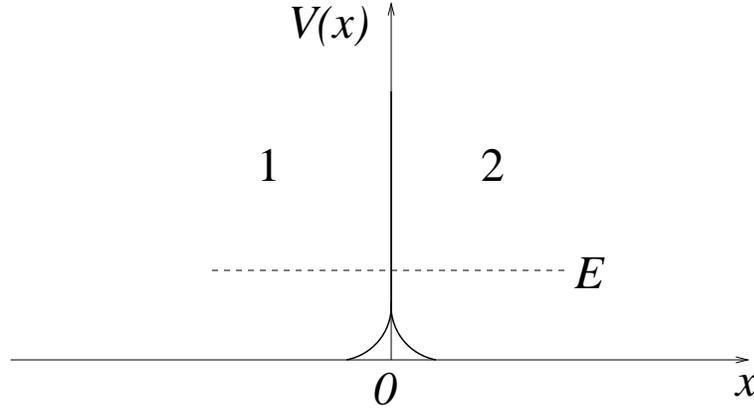


Figura A.2: El potencial delta divide el espacio en dos regiones.

donde  $S_{\text{esc}}$  es la matriz de dispersión asociada a la dispersión debido al potencial escalón; está dada por

$$S_{\text{esc}} = -\frac{q + ik}{q - ik}. \quad (\text{A.10})$$

Como podemos ver  $S^\dagger S = 1$ , por lo que podemos escribir

$$S_{\text{esc}} = e^{i\theta_{\text{esc}}} = -\frac{q + ik}{q - ik}. \quad (\text{A.11})$$

## Potencial delta

El potencial delta es otro de los pocos sistemas que podemos trabajar analíticamente. Este potencial es bastante peculiar dada su conformación ya que tiene ancho cero y altura infinita. Esto ha traído muchas discusiones sobre su interpretación desde los inicios de la mecánica cuántica, aunque ha sido de mucha ayuda para entender, y modelar, sistemas más complejos. Nosotros lo entenderemos como una membrana que separa dos semiespacios cuya intensidad, sintonizable, permitirá, o no, el flujo de partículas a través de ella. Con esto en mente, matemáticamente el potencial delta en el origen de coordenadas se escribe como una función delta de Dirac,

$$V(x) = v \delta(x), \quad (\text{A.12})$$

siendo  $v$  la intensidad del potencial que tiene unidades de energía por longitud. Una ilustración del potencial se muestra en la figura (A.2).

Para este potencial la ecuación (A.1) la podemos escribir como

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + k^2 \psi(x) = u \delta(x) \psi(x), \quad (\text{A.13})$$

donde  $k$  es la misma que en la ecuación (A.8) mientras que

$$u = \frac{2m}{\hbar^2} v. \quad (\text{A.14})$$

Si integramos la ecuación (A.13) en una vecindad del origen, entre  $-\epsilon$  y  $\epsilon$ , con  $0 < \epsilon \ll 1$ , tenemos que

$$\int_{-\epsilon}^{\epsilon} \frac{d}{dx} \frac{d\psi(x)}{dx} dx + k^2 \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \psi(x) dx = u \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \delta(x) \psi(x) dx,$$

de donde al realizar las integrales tenemos que

$$\left. \frac{d\psi(x)}{dx} \right|_{-\epsilon}^{\epsilon} + 2\epsilon k^2 \psi(0) = u \psi(0),$$

donde para obtener el segundo término del lado izquierdo usamos la forma integral del teorema del valor medio y del lado derecho usamos una de las propiedades de la función delta de Dirac. Si denotamos por  $\psi_1(x)$  y  $\psi_2(x)$  la solución para ambos lados del potencial, en el límite  $\epsilon \rightarrow 0$  la ecuación anterior se reduce a

$$\left. \frac{d\psi_2(x)}{dx} \right|_{x=0} - \left. \frac{d\psi_1(x)}{dx} \right|_{x=0} = u \psi_1(0) = u \psi_2(0), \quad (\text{A.15})$$

donde usamos el hecho de que la función debe ser finita y continua en el origen. Es decir, mientras la función de onda es continua en la posición de la delta, su derivada presenta una discontinuidad dada por la intensidad del potencial delta veces la función de onda evaluada en el punto de discontinuidad.

### ***Matriz del dispersión del potencial delta***

Al resolver la ecuación de Schrödinger lejos de la influencia del potencial, encontramos que la función de onda, tanto a la izquierda como a la derecha del potencial delta, se compone de una superposición de ondas planas que se propagan hacia la izquierda y hacia la derecha de ella; esto es

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= a_1 e^{ikx} + b_1 e^{-ikx}, \\ \psi_2(x) &= b_2 e^{ikx} + a_2 e^{-ikx}, \end{aligned}$$

donde los subfijos 1 y 2 son los mismos que hemos usado para denotar las soluciones a la izquierda y derecha del origen.

Ahora que tenemos las condiciones impuestas para la continuidad de la función de onda y la discontinuidad en su derivada, obtenemos el siguiente conjunto de ecuaciones

$$\begin{aligned} a_1 + b_1 &= b_2 + a_2, \\ ik b_2 - ik a_2 - ik a_1 + ik b_1 &= u(b_2 + a_2). \end{aligned}$$

La solución de estas ecuaciones para  $b_1$  y  $b_2$  en términos de  $a_1$  y  $a_2$  se pueden escribir en forma matricial como

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = S_\delta \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \quad (\text{A.16})$$

donde

$$S_\delta = \begin{pmatrix} r_\delta & t'_\delta \\ t_\delta & r'_\delta \end{pmatrix} \quad (\text{A.17})$$

es la matriz de dispersión asociada al potencial delta, con

$$r_\delta = r'_\delta = \frac{u/2ik}{1 - u/2ik} \quad \text{y} \quad t_\delta = t'_\delta = \frac{1}{1 - u/2ik} \quad (\text{A.18})$$

que son las amplitudes de reflexión y de transmisión, respectivamente.

Es fácil darse cuenta de que  $S_\delta$  satisface la condición de unitaridad como resultado de la conservación del flujo de probabilidad,

$$S_\delta^\dagger S_\delta = I_2, \quad (\text{A.19})$$

donde  $I_2$  representa la matriz unidad de  $2 \times 2$ .

### ***Matriz de transferencia para el potencial delta***

La matriz de transferencia nos permite obtener las amplitudes de las ondas del lado derecho del potencial con respecto a las del lado izquierdo. Es decir, su definición establece que

$$\begin{pmatrix} b_2 \\ a_2 \end{pmatrix} = M_\delta \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.20})$$

donde  $M_\delta$  tiene la estructura de la ecuación (1.6),

$$M_\delta = \begin{pmatrix} \alpha_\delta & \beta_\delta \\ \gamma_\delta & \delta_\delta \end{pmatrix} \quad (\text{A.21})$$

Partiendo de la definición (A.16) para la matriz  $S_\delta$  con la estructura (A.17),  $\alpha_\delta$  y  $\gamma_\delta$  se obtienen de elegir  $b_1 = 0$  para obtener  $b_2$  y  $a_2$  en términos de  $a_1$ . En forma similar,

eligiendo  $a_1 = 0$  tenemos  $b_2$  y  $a_2$  en términos de  $b_1$  dando como resultado  $\beta$  y  $\delta$ . El resultado para los elementos de  $M_\delta$  es

$$\alpha_\delta = \frac{1}{t_\delta^*}, \quad \beta_\delta = \frac{r'_\delta}{t'_\delta}, \quad \gamma_\delta = -\frac{r_\delta}{t'_\delta} \quad \text{y} \quad \delta_\delta = \frac{1}{t'_\delta}. \quad (\text{A.22})$$

Explícitamente, para el potencial delta tenemos

$$\alpha_\delta = 1 + \frac{u}{2ik}, \quad \beta_\delta = \frac{u}{2ik}, \quad \gamma_\delta = -\frac{u}{2ik} \quad \text{y} \quad \delta_\delta = 1 - \frac{u}{2ik}. \quad (\text{A.23})$$

La conservación del flujo de probabilidad impone la restricción de que el determinante de toda matriz de transferencia debe valer la unidad. Por cálculo directo podemos verificar que

$$\det M_\delta = 1. \quad (\text{A.24})$$



# Apéndice B

## *La estructura cristalina en una dimensión*

### Resumen

El objetivo de este Apéndice es presentar la estructura de bandas a través de un proceso iterativo por medio de la matriz de transferencia. Es decir, considerar primero una cadena con un número finito de potenciales y después tomar el límite cuando este número tiende al infinito. Seguiremos muy de cerca el tratamiento presentado en las referencias [39, 40].

## ***Proceso iterativo por medio de la matriz de transferencia***

Si las amplitudes de la función de onda en cada región de potencial nulo se definen de acuerdo a la ecuación (1.1), la matriz de transferencia  $M_b$  asociada al potencial  $V_b$  relaciona las amplitudes de las ondas en la región 1 con las de la región 0, de la siguiente manera:

$$\begin{bmatrix} b_1 e^{ik(a+b/2)} \\ a_1 e^{-ik(a+b/2)} \end{bmatrix} = M_b \begin{bmatrix} b_0 e^{ik(a-b/2)} \\ a_0 e^{-ik(a-b/2)} \end{bmatrix}, \quad (\text{B.1})$$

que también se puede escribir como

$$\begin{bmatrix} b_1 e^{ik(a+b/2)} \\ a_1 e^{-ik(a+b/2)} \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} b_0 e^{ikb/2} \\ a_0 e^{-ikb} \end{bmatrix}, \quad (\text{B.2})$$

donde

$$M = M_b \begin{bmatrix} e^{ik(a-b)} & 0 \\ 0 & e^{-ik(a-b)} \end{bmatrix}. \quad (\text{B.3})$$

Esta matriz  $M$  puede interpretarse como la matriz de transferencia de una celda unitaria y constituida del producto de dos matrices de transferencia. Basándonos en la figura B.1 la primera de ellas es la matriz diagonal que aparece en (B.3) y que nos relaciona las amplitudes de las ondas en el punto  $x = b/2$  con las amplitudes en  $x = a - b/2$ ; la segunda matriz,  $M_b$ , relaciona las amplitudes en  $x = a - b/2$  con aquellas en  $x = a + b/2$ . Esta forma de combinar matrices de transferencia se conoce como *propiedad de multiplicatividad serial* [38] y sigue el orden de derecha a izquierda mientras que los potenciales aparece de izquierda a derecha.

Para una cadena de  $N$  potenciales, como se muestra en la figura B.1, la regla de multiplicidad serial de  $M$  nos permite obtener las amplitudes de las ondas en la región justo después de las  $N$  celdas unitarias. De acuerdo con la ecuación (1.11)

$$\begin{bmatrix} b_N e^{ik(Na+b/2)} \\ a_N e^{-ik(Na+b/2)} \end{bmatrix} = M_N \begin{bmatrix} b_0 e^{ikb/2} \\ a_0 e^{-ikb} \end{bmatrix}, \quad (\text{B.4})$$

donde

$$M_N = M^N. \quad (\text{B.5})$$

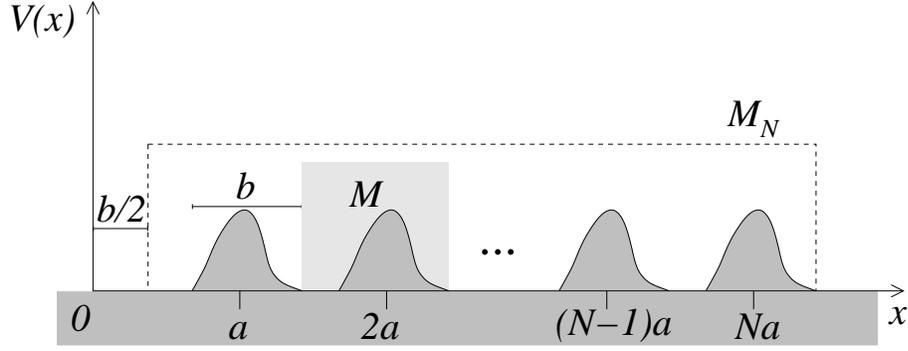


Figura B.1: Cadena de dispersores idénticos, cada uno representado por el potencial  $V_b(x)$ .  $M$  es la matriz de transferencia de una celda unitaria mientras que  $M_N$  representa la matriz de transferencia de  $N$  celdas.

## Valores propios de la matriz de transferencia

Dado que  $M_N$  conecta las regiones a la izquierda y derecha de la cadena de  $N$  celdas unitarias, en el límite cuando  $N \rightarrow \infty$  las dos regiones quedarán conectadas dependiendo de las propiedades de  $M$ . Por tanto, resulta conveniente diagonalizar esta última. La ecuación característica es

$$\det(M - \mu I_2) = 0, \quad (\text{B.6})$$

donde  $\mu$  es el valor propio de  $M$ . Esta ecuación se puede escribir como

$$\mu^2 - \mu \operatorname{tr} M + 1 = 0, \quad (\text{B.7})$$

donde hemos tomado en cuenta la propiedad (A.24), cuya solución es

$$\mu_{\pm} = \frac{1}{2} \operatorname{tr} M \pm \sqrt{\left(\frac{1}{2} \operatorname{tr} M\right)^2 - 1}. \quad (\text{B.8})$$

El tipo de soluciones depende del argumento de la raíz cuadrada que aparece del lado derecho de la ecuación anterior. Por un lado, si

$$\frac{1}{2} |\operatorname{tr} M(k)| > 1, \quad (\text{B.9})$$

donde hemos puesto explícitamente la dependencia en la energía a través de  $k$ , las dos soluciones son reales y una de ellas es el recíproco de la otra. Estas soluciones se pueden escribir como

$$\mu_{\pm} = \operatorname{sgn}(\operatorname{tr} M) e^{\lambda_{\pm}/2}, \quad (\text{B.10})$$

donde  $\text{sgn}(x)$  denota el signo de  $x$  y  $\lambda_1$  es un número real definido por la relación

$$\frac{1}{2}\text{tr } M = \text{sgn}(\text{tr } M) \cosh(\lambda_1/2), \quad (\text{B.11})$$

que puede ser positivo o negativo.

En la base en que  $M$  es diagonal, también lo será  $M_N$  con valores propios dados por  $\mu_{\pm}^N$ . Entonces, la función de onda en la región de la derecha consiste de una superposición de ondas que viajan hacia la izquierda y derecha, cuyas amplitudes crecen si  $\lambda_1 > 0$ , o decrecen si  $\lambda_1 < 0$ , conforme  $N$  aumenta. En el límite  $N \rightarrow \infty$  la solución con  $\lambda_1 < 0$  no contribuye pero la de  $\lambda_1 > 0$  diverge, lo cual no es físicamente aceptable. Esta solución es la que da lugar a las *bandas prohibidas de energía* a través de la condición (B.9).

Por otro lado, las *bandas permitidas* se obtienen cuando

$$\frac{1}{2} |\text{tr } M(k)| \leq 1, \quad (\text{B.12})$$

en cuyo caso los valores propios  $\mu_{\pm}$  se pueden escribir como números complejos de módulo 1:

$$\mu_{\pm} = e^{\pm i\phi}, \quad (\text{B.13})$$

donde  $0 \leq \phi \leq \pi$  y satisface que

$$\frac{1}{2}\text{tr } M = \cos \phi. \quad (\text{B.14})$$

En este caso, la función de onda nunca diverge ni evanesce, su amplitud es constante en el límite  $N \rightarrow \infty$ .

# *Bibliografía*

- [1] C. Kittel,  
*Introduction to Solid State Physics*  
(John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, NJ, eighth ed., 2005).
  
- [2] N. W. Ashcroft y N. D. Mermin,  
*Solid State Physics*  
(Brooks/Cole, Thomson Learning, Glendale, CA, 1976), cap. 8.
  
- [3] J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, J. N. Winn y R. D. Meade,  
*Photonic Crystals: Molding the Flow of Light*  
(Princeton University Press, Singapore, 2008).
  
- [4] F. Bloch,  
*Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern*,  
Z. Physik **52**, 555 (1929).
  
- [5] R. de L. Kronig y W. G. Penney,  
*Quantum Mechanics of Electrons in Crystal Lattices*,  
Proc. R. Soc. London, Series A **130**, 499 (1931).
  
- [6] G. A. Luna-Acosta, H. Schanze, U. Kuhl y H.-J. Stöckmann,  
*Impurity effects on the band structure of one-dimensional photonic crystals: experiment and theory*,  
New J. Phys. **10**, 043005 (2008).

- [7] R. Archuleta-Garcia, D. Moctezuma-Enriquez y J. Manzanares-Martinez, *Enlargement of Photonic Band Gap in Porous Silicon Dielectric Mirrors*, J. Electromagn. Waves and Appl. **24**, 351 (2010).
- [8] V. M. García-Chocano y J. Sánchez-Dehesa, *Optimum control of broadband noise by arrays of cylindrical units made of a recycled material*, Appl. Acoustics, **74**, 58 (2013).
- [9] M. M. Sigalas and E. N. Economou, *Elastic waves in plates with periodically placed inclusions*, J. Appl. Phys. **75**, 2845 (1994).
- [10] A. Morales, J. Flores, L. Gutiérrez y R. A. Méndez-Sánchez, *Compressional and torsional wave amplitudes in rods with periodic structures*, J. Acoust. Soc. Am. **112**, 1961 (2002).
- [11] D. J. Griffiths y C. A. Steinke, *Waves in locally periodic media*, Am. J. Phys. **69**, 137 (2001).
- [12] C. Pacher, C. Rauch, G. Strasser, E. Gornik, F. Elsholz, A. Wacker, G. Kießlich y E. Schöll, *Antireflection coating for miniband transport and Fabry-Pérot resonances in GaAs/AlGaAs superlattices*, App. Phys. Lett. **79**, 1486 (2001).
- [13] G. V. Morozov, D. W. L. Sprung y J. Martorell, *Optimal band-pass filter for electrons in semiconductor superlattices*, J. Phys. D: Appl. Phys. **35**, 2091 (2002).
- [14] G. V. Morozov, D. W. L. Sprung y J. Martorell, *Design of electron band-pass filters for semiconductor superlattices*, J. Phys. D: Appl. Phys. **35**, 3052 (2002).
- [15] E. Courtade, O. Houde, J.-F. Clément, P. Verkerk y D. Hennequin, *Dark optical lattice of ring traps for cold atoms*, Phys. Rev. A **74**, 031403(R) (2006).

- 
- [16] A. V. Ponomarev, J. Madroñero, A. R. Kolovsky y A. Buchleitner,  
*Atomic Current across an Optical Lattice*,  
Phys. Rev. Lett. **96**, 050404 (2006).
- [17] T. Wang, J. Javanainen y S. F. Yelin,  
*Supercurrents in an atom-molecule gas in an optical ring lattice*,  
Phys. Rev. A **76**, 011601(R) (2007).
- [18] S. E. Olson, M. L. Terraciano, M. Bashkansky y F. K. Fatemi,  
*Cold-atom confinement in an all-optical dark ring trap*,  
Phys. Rev. A **76**, 061404(R) (2007).
- [19] N. Houston, E. Riis y A. S. Arnold,  
*Reproducible dynamic dark ring lattices for ultracold atoms*,  
J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **41**, 211001 (2008).
- [20] J. A. Reyes y A. Lakhtakia,  
*Electrically controlled optical bandgap in a structurally chiral material*,  
Optics Comm. **259**, 164 (2006).
- [21] R. H. Lipson y C. Lu,  
*Photonic crystals: a unique partnership between light and matter*,  
Eur. J. Phys. **30**, S33 (2009).
- [22] J. O. Estevez, J. Arriaga, A. Méndez Blas y V. Agarwal,  
*Enlargement of omnidirectional photonic bandgap in porous silicon dielectric mirrors with a Gaussian profile refractive index*,  
Appl. Phys. Lett. **94**, 061914 (2009).
- [23] J. O. Vasseur, A.-C. Hladky-Hennion, B. Djafari-Rouhani, F. Duval, B. Dubus, Y. Pennec y P. A. Deymier,  
*Waveguiding in two-dimensional piezoelectric phononic crystal plates*,  
J. Appl. Phys **10**, 114904 (2007).
- [24] J. O. Vasseur, P. A. Deymier, B. Djafari-Rouhani y Y. Pennec,  
*Absolute forbidden bands and waveguiding in two-dimensional phononic crystal plates*,  
Phys. Rev. B **77**, 085415 (2008).

- [25] J. V. Sánchez-Pérez, D. Caballero, R. Martínez-Sala, C. Rubio, J. Sánchez-Dehesa, F. Meseguer, J. Llinares y F. Gálvez,  
*Sound Attenuation by a Two-Dimensional Array of Rigid Cylinders*,  
Phys. Rev. Lett. **80**, 5325 (1998).
- [26] L. P. Kouwenhoven, F. W. J. Hekking, B. J. van Wees, C. J. P. M. Harmans, C. E. Timmering y C. T. Foxon,  
*Transport through a finite one-dimensional crystal*,  
Phys. Rev. Lett. **65**, 361 (1990).
- [27] D. W. L. Sprung, H. Wu y J. Martorell,  
*Scattering by a finite periodic potential*,  
Am. J. Phys. **61**, 1118 (1993).
- [28] P. Pereyra,  
*Resonant Tunneling and Band Mixing in Multichannel Superlattices*,  
Phys. Rev. Lett. **80**, 2677 (1998).
- [29] P. Exner, M. Tater y D. Vaněk,  
*A single-mode quantum transport in serial-structure geometric scatterers*,  
J. Math. Phys. **42**, 4050 (2001).
- [30] Y. Avishai y J. M. Luck,  
*Quantum percolation and ballistic conductance on a lattice of wires*,  
Phys. Rev. B **45**, 1074 (1992).
- [31] M. Martínez-Mares y A. Robledo,  
*Equivalence between the mobility edge of electronic transport on disorderless networks and the onset of chaos via intermittency in deterministic maps*,  
Phys. Rev. E **80**, 045201(R) (2009).
- [32] Yu Jiang, M. Martínez-Mares, E. Castaño y A. Robledo,  
*Möbius transformations and electronic transport properties of large disorderless networks*,  
Phys. Rev. E **85**, 057202 (2012).
- [33] P. A. Lee y T. V. Ramakrishnan,  
*Disordered electronic systems*,  
Rev. Mod. Phys. **57**, 287 (1985).

- 
- [34] R. Gilmore,  
*Elementary Quantum Mechanics in One Dimension*  
(The Johns Hopkins University Press, Baltimore, MD, 2004), pág. 15.
- [35] M. Y. Azbel,  
*Random elastic scattering: Long-range correlation and localization*,  
Phys. Rev. B **25**, 849 (1982).
- [36] P. Pereyra Padilla,  
*Fundamentos de física cuántica*  
(Universidad Autónoma Metropolitana/Reverté, México, DF, 2011).
- [37] V. Domínguez-Rocha, C. Zagoya y M. Martínez-Mares, *Poynting's theorem for plane waves at an interface: A scattering matrix approach*,  
Am. J. Phys. **76**, 621 (2008).
- [38] P. A. Mello y N. Kumar,  
*Quantum Transport in Mesoscopic Systems: Complexity and Statistical Fluctuations*  
(Oxford University Press, New York, 2005), page 53.
- [39] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu y F. Laloë,  
*Quantum Mechanics*  
(Wiley Interscience, Paris, 1977) Vol. 1, pág. 367.
- [40] E. Merzbacher,  
*Quantum Mechanics*  
(John Wiley & Sons, Inc., 1998), third edition, page 101.
- [41] H. G. Schuster,  
*Deterministic Chaos, An Introduction*  
(VCH, Weinheim, 1989), pág. 24.
- [42] V. Domínguez-Rocha y M. Martínez-Mares  
*Locally periodic systems*, J. Phys. A: Math. Theor.
- [43] A. Wolf, J. B. Swift, H. L. Swinney y J. A. Vastano,  
*Determining Lyapunov exponents from a time series*,  
Physica D **16**, 285 (1985).

- [44] S. Heiligenthal, T. Dahms, S. Yanchuk, T. Jüngling, V. Flunkert, I. Kanter, E. Schöll y W. Kinzel,  
*Strong and Weak Chaos in Nonlinear Networks with Time-Delayed Couplings*  
Phys. Rev. Lett. **107**, 234102 (2011).
- [45] F. Baldovin y A. Robledo,  
*Sensitivity to initial conditions at bifurcations in one-dimensional nonlinear maps: Rigorous nonextensive solutions,*  
Europhys. Lett. **60**, 518 (2002).
- [46] P. A. Mello,  
*Macroscopic Approach to Universal Conductance Fluctuations in Disordered Metals,*  
Phys. Rev. Lett. **60**, 1089 (1988).
- [47] P. A. Mello y A. D. Stone,  
*Maximum-entropy model for quantum-mechanical interference effects in metallic conductors,*  
Phys. Rev. B **44**, 3559 (1991).
- [48] L. Esaki y R. Tsu,  
*Superlattice and Negative Differential Conductivity in Semiconductors,*  
IBM J. Res. Dev. **14**, 61 (1970).
- [49] K. F. Graff,  
*Wave Motion In Elastic Solids,*  
(Dover, New York, 1991), cap. 2.
- [50] L. Gutiérrez,  
*Escaleras de Wannier-Stark en sistemas elásticos unidimensionales,*  
Tesis de Maestría, Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México.
- [51] P. Mora Nardi,  
*Localización de Anderson en varillas elásticas desordenadas,*  
Tesis de Maestría, Posgrado en Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México.

- 
- [52] L. Gutiérrez, A. Díaz-de-Anda, J. Flores, R. A. Méndez-Sánchez, G. Monsivais y A. Morales,  
*Wannier-Stark Ladders in One-Dimensional Elastic Systems*,  
Phys. Rev. Lett. **97**, 114301 (2006).
- [53] T. D. Rossing y N. H. Fletcher  
*Principles of Sound and Vibration*,  
(Springer-Verlag, New York, 1995).
- [54] G. Báez, M. Cobián-Suárez, A. M. Martínez-Argüello, M. Martínez-Mares, R. A. Méndez-Sánchez,  
*Scattering of Elastic Waves in a Quasi-One-Dimensional Cavity: Theory and Experiment*,  
Acta Physica Polonica A **124**, 1069 (2013).
- [55] A. Díaz-de-Anda, J. Flores, L. Gutiérrez, R. A. Méndez-Sánchez, G. Monsivais y A. Morales,  
*Experimental study of the Timoshenko beam theory predictions*,  
J. Sound Vib. **83**, 508 (2005).
- [56] F. Ramírez Ramírez,  
*Diseño, fabricación y caracterización de transductores electromagnéticos-acústicos*,  
Tesis de Licenciatura, Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco.