



Universidad Nacional Mayor de San Marcos

Universidad del Perú. Decana de América

Dirección General de Estudios de Posgrado

Facultad de Ciencias Físicas

Unidad de Posgrado

**Medida estadística de complejidad LMC en el modelo
de Kronig-Penney con desorden estructural**

TESIS

Para optar el Grado Académico de Magíster en Física con
mención en Física del Estado Sólido

AUTOR

Alejandro Ariel HEREDIA GUEVARA

ASESOR

Dr. Carlos Vladimir LANDAURO SÁENZ

Lima, Perú

2019



Reconocimiento - No Comercial - Compartir Igual - Sin restricciones adicionales

<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/>

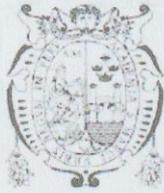
Usted puede distribuir, remezclar, retocar, y crear a partir del documento original de modo no comercial, siempre y cuando se dé crédito al autor del documento y se licencien las nuevas creaciones bajo las mismas condiciones. No se permite aplicar términos legales o medidas tecnológicas que restrinjan legalmente a otros a hacer cualquier cosa que permita esta licencia.

Referencia bibliográfica

Heredia, A. (2019). *Medida estadística de complejidad LMC en el modelo de Kronig-Penney con desorden estructural*. Tesis para optar el grado de Magíster en Física con mención en Física del Estado Sólido. Unidad de Posgrado, Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Lima, Perú.

Hoja de metadatos complementarios

Código ORCID del asesor (es)	0000-0002-1361-7355
Autor DNI (Obligatorio) Pasaporte /carnet de extranjería (sólo extranjeros)	40540158
Asesor DNI (Obligatorio)	09613168
Código ORCID del autor	0000-0002-1032-205X
Grupo de investigación	Grupo de investigación de sistemas complejos funcionalizados (GISICOF)
Financiamiento	—
Ubicación geográfica donde se desarrolló la investigación (incluirse localidades y/o coordenadas geográficas).	Ciudad Universitaria, Pabellón de Ciencias Físicas Calle Germán Amézaga 375, Cercado de Lima, Lima, Perú Latitud: -11.85 Longitud: -76.45
Año o rango de años que la investigación abarcó.	2018



UNIVERSIDAD NACIONAL MAYOR DE SAN MARCOS
(Universidad del Perú, Decana de América)
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS
Vicedecanato de Investigación y Posgrado

UNIDAD DE POSGRADO
"Año de la lucha contra la Corrupción y la Impunidad"

ACTA DE SUSTENTACIÓN DE TESIS PARA OPTAR EL GRADO ACADÉMICO DE MAGÍSTER EN FÍSICA CON MENCIÓN EN FÍSICA DEL ESTADO SÓLIDO

A los veintisiete días del mes de mayo de 2019, siendo las seis de la tarde, se reunió el Jurado Examinador, en el auditorio 304 de la Unidad de Posgrado de la Facultad de Ciencias Físicas de la Universidad Nacional Mayor de San Marcos, presidido por el señor Dr. Jaime Francisco Vento Flores como presidente, y con la asistencia de los siguientes miembros del Jurado Examinador:

Dr. Jaime Francisco Vento Flores	(Presidente)
Dr. Juan Torres Vega	(Miembro integrante)
Dr. Hans Nowak	(Miembro integrante)
Dr. Héctor Loro Ramírez	(Miembro integrante)
Dr. Carlos Vladimir Landauro Sáenz	(Asesor)

Para la sustentación oral y pública del trabajo de Tesis para optar el Grado Académico de Magíster en Física con mención en Física del Estado Sólido, del Bachiller **Alejandro Ariel Heredia Guevara** con matrícula N° 13137007.

Después de darse lectura al expediente de Grado en el que consta haberse cumplido con todas las disposiciones reglamentarias, los señores Miembros del Jurado Examinador, atendieron a la exposición de la Tesis titulada:

"Medida estadística de complejidad LMC en el modelo de Kronig- Penney con desorden estructural"

Y formuladas las preguntas, éstas fueron absueltas por el graduando.

Acto seguido, en privado, el Jurado Examinador procedió a la calificación. El Presidente determinó el promedio de la calificación, obteniendo como resultado de:

Mag. bueno (17) Excelente

A continuación el Presidente del Jurado Examinador recomienda que la Facultad de Ciencias Físicas proponga que se le otorgue el Grado Académico de Magíster en Física con mención en Física del Estado Sólido al bachiller **Alejandro Ariel Heredia Guevara**.

Siendo las *19:47*, se levantó la sesión; recibiendo el graduando las felicitaciones de los señores Miembros del Jurado Examinador y público asistente.

Los Miembros del Jurado Examinador suscriben el Acta de sustentación de tesis en Lima, a los veintisiete días del mes de mayo de 2019.

Dirección: Ciudad Universitaria, Pabellón de Ciencias Físicas
Calle Germán Amézaga 375 – Cercado de Lima
Apartado Postal: 14-0149 – Lima 14 Perú

Unidad de Posgrado
Teléfono: 619-7000 Anexo 3802
E-mail: postfis@unmsm.edu.pe

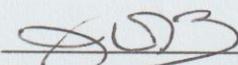


UNIVERSIDAD NACIONAL MAYOR DE SAN MARCOS
(Universidad del Perú, Decana de América)
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS
Vicedecanato de Investigación y Posgrado

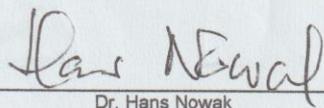
UNIDAD DE POSGRADO
"Año de la lucha contra la Corrupción y la Impunidad"

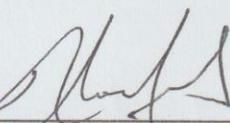
Lima, 27 de mayo de 2019

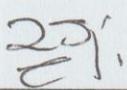
... Acta de sustentación de Tesis del Bach. Alejandro Ariel Heredia Guevara....


Dr. Jaime Francisco Vento Flores
Presidente


Dr. Juan Torres Vega
Miembro integrante


Dr. Hans Nowak
Miembro integrante


Dr. Héctor Loro Ramírez
Miembro Integrante


Dr. Carlos Vladimir Landauro Sáenz
Asesor

Agradecimientos

Este trabajo no hubiera alcanzado esta etapa de desarrollo sin la orientación, apoyo y paciencia del Dr. Carlos V. Landauro Sáenz. Asimismo, la orientación, amistad y apoyo tanto personal como académico brindadas por el Dr. Hans Nowak han sido imprescindibles para la formulación, desarrollo y culminación del presente trabajo. Danke schön!

Expreso mi agradecimiento al Grupo de Investigación de Sistemas Complejos Funcionalizados (GISICOF) de la Facultad de Ciencias Físicas de la Universidad Nacional Mayor de San Marcos (UNMSM), por las facilidades brindadas y por el soporte tanto académico como profesional en las reuniones y charlas que organizaron y que permitieron aclarar dudas asociadas al trabajo así como formular perspectivas de posibles trabajos de investigación. Agradezco también a los profesores de la Unidad de Posgrado de la Facultad de Ciencias Físicas de la UNMSM que compartieron sus conocimientos en los cursos que dictaron en el programa de Maestría y que complementaron mi formación profesional.

Aunque la *presentación final* de un trabajo de investigación, la realiza en general un solo individuo, la realidad es que involucra a un cúmulo de personas, tanto del ámbito profesional y técnico, como del ámbito familiar y personal. En este último aspecto, el apoyo y comprensión de mi familia también ha sido y sigue siendo importante para continuar *divirtiéndome* en el patio de juegos de la física, así como también para superar las dificultades de diversa índole que surgen cuando uno trata de incursionar en la investigación.

Índice general

Agradecimientos	III
Resumen	X
Abstract	XII
1. Introducción	1
1.1. Objetivo general	2
1.2. Objetivos específicos	3
2. Conceptos básicos	5
2.1. Complejidad o ciencia de los sistemas complejos	5
2.1.1. Complejidad: un poco de historia	6
2.1.2. La complejidad y su medida	7
2.2. Una medida estadística de la complejidad	10
2.2.1. Definición de complejidad para un sistema discreto	11
2.2.2. Definición de complejidad para un sistema continuo	15
2.3. Resumen del capítulo	18
3. Complejidad en el modelo de Kronig-Penney periódico	19
3.1. Cálculo de la complejidad mediante la función de Bloch	20
3.2. Método de la matriz de transferencia	25
3.3. Cálculo de la complejidad mediante el método de la matriz de transferencia	27
3.4. Conductancia mediante el método de la matriz de transferencia	32
3.5. Conclusiones del capítulo	33
4. Complejidad en el modelo de Kronig-Penney con desorden estructural	35
4.1. Tipos de desorden	35

4.2. Complejidad en el modelo con inclusión de desorden	36
4.3. Conclusiones del capítulo	41
5. Influencia del desorden sobre la complejidad de los estados electrónicos	43
5.1. Efectos sobre la transmisión electrónica	43
5.2. Efectos sobre la complejidad de los estados electrónicos	48
5.2.1. Caracterización mediante el desequilibrio	48
5.2.2. Caracterización mediante la complejidad	51
5.3. Análisis de la corriente de probabilidad	54
6. Conclusiones y perspectivas	59
6.1. Conclusiones	59
6.2. Perspectivas	60
A. Propiedades de la matriz de transferencia	61
A.1. Invarianza por reversibilidad temporal	61
A.2. Conservación de la corriente de probabilidad	62
B. Matrices de transferencia del potencial delta y nulo	65
B.1. Matriz de transferencia para el potencial delta	65
B.2. Matriz de transferencia para el potencial nulo	66

Índice de figuras

2.1. Patrones de referencia de sistemas no complejos (extremos) y complejo (centro). Figura tomada de la Ref. [37].	10
2.2. Comportamiento esperado para la información (H), el desequilibrio (D) y la medida estadística de complejidad (C). Figura adaptada de la Ref. [11].	12
2.3. (a) Entropía de Shannon normalizada (línea color magenta) y desequilibrio nor- malizado (línea color cian) en función de la probabilidad de uno de los posibles estados para un sistema de 2 estados. (b) Complejidad normalizada como función de la entropía normalizada.	13
2.4. Complejidad normalizada c en función de la entropía normalizada h para un sistema discreto con $N = 3$ estados. Se muestra también la complejidad máxima c_{max} (línea color azul) y la complejidad mínima c_{min} (línea color rojo).	14
2.5. (a) Caracterización de la tendencia de la distribución normal para $\sigma = 0,05$ (curva en rojo), $\sigma = 0,5$ (curva en verde). (b) Comportamiento de H, D, C en función de σ	17
3.1. Representación del potencial de interacción electrón-cristal periódico del mo- delo de Kronig-Penney a través de una cadena de potenciales tipo delta. Los potenciales equidistantes están separados una distancia a . Para los cálculos se considerará $a = 1,0 \text{ \AA}$	20
3.2. Distribución de las energías permitidas y prohibidas (E) en función del número de onda adimensional (ka) para $\Omega = 4,0 \text{ \AA}^{-1}$ y $a = 1,0 \text{ \AA}$	23
3.3. (a) Entropía de Shannon, (b) desequilibrio y (c) complejidad, en función del número de onda adimensional. El cálculo de las eigenfunciones se realizó me- diante el teorema de Bloch considerando $\Omega = 4,0 \text{ \AA}^{-1}$ y $a = 1,0 \text{ \AA}$	24
3.4. Potencial acotado definido en el intervalo $a < x < b$ que representa la interac- ción de una partícula cuántica con un sistema finito.	25

3.5.	Representación del potencial de interacción y de las eigenfunciones correspondientes al intervalo de interés de longitud $L = na$	27
3.6.	(a) Entropía de Shannon, (b) desequilibrio y (c) complejidad, en función del número de onda adimensional. El cálculo de las eigenfunciones se realizó utilizando el método de la matriz de transferencia para $\Omega = 4,0 \text{ \AA}^{-1}$, $a = 1,0 \text{ \AA}$ y normalizando en el intervalo $\langle 0, a \rangle$	30
3.7.	(a) Entropía de Shannon, (b) Desequilibrio y (c) Complejidad, en función del número de onda adimensional. El cálculo de las eigenfunciones se realizó utilizando el método de la matriz de transferencia para $\Omega = 4,0 \text{ \AA}^{-1}$, $a = 1,0 \text{ \AA}$ y normalizando en el intervalo $\langle 0, 100a \rangle$	31
3.8.	Conductancia normalizada en función del número de onda adimensional: (a) primeras seis bandas, (b) ampliación de la tercera banda. Cálculo realizado considerando $\Omega = 4,0 \text{ \AA}^{-1}$, $a = 1,0 \text{ \AA}$ y $n = 100$	33
4.1.	Representación de la super-celda en el modelo de Kronig-Penney con desorden estructural.	36
4.2.	Complejidad en función del número de onda adimensional para diferentes niveles de desorden: (a) $W = 0,0005$, (b) $W = 0,05$, (c) $W = 0,10$, (d) $W = 0,30$. El promedio se ha realizado con 100 configuraciones diferentes y considerando: $\Omega = 4,0 \text{ \AA}^{-1}$, $a = 1,0 \text{ \AA}$ y $n = 100$	38
4.3.	Conductancia relativa en función del número de onda adimensional para diferentes niveles de desorden: $W = 0,0005$ (rojo), $W = 0,05$ (verde), $W = 0,10$ (azul), $W = 0,30$ (cian). El promedio se ha realizado con 100 configuraciones diferentes y considerando: $\Omega = 4,0 \text{ \AA}^{-1}$, $a = 1,0 \text{ \AA}$ y $n = 100$	39
4.4.	(a) Complejidad y (b) Conductancia normalizada en función del número de onda adimensional correspondiente a la banda 4 con: $W = 0,01$ (rojo), $W = 0,10$ (verde), $W = 0,20$ (azul), $W = 0,30$ (cian). El promedio se ha realizado con 100 configuraciones diferentes y considerando: $\Omega = 4,0 \text{ \AA}^{-1}$, $a = 1,0 \text{ \AA}$ y $n = 100$	40
5.1.	$-\ln\langle T \rangle$ y α vs L/a correspondiente al estado electrónico del centro de la banda 3 para diferentes niveles de desorden: $W = 0,00$ (rojo), $W = 0,10$ (verde), $W = 0,20$ (azul), $W = 0,30$ (cian).	44
5.2.	$-\ln\langle T \rangle$ y α vs L/a correspondiente al estado electrónico del borde de la banda 3 y para diferentes niveles de desorden: $W = 0,00$ (rojo), $W = 0,10$ (verde), $W = 0,20$ (azul), $W = 0,30$ (cian).	46

5.3. $-\ln\langle T \rangle$ vs W para los estados electrónicos de la banda 3: (a) centro y (b) borde. Las longitudes de la cadena corresponden a: $L/a = 100$ (magenta), $L/a = 200$ (verde), $L/a = 300$ (anaranjado), $L/a = 400$ (violeta). 47

5.4. $1/\langle D \rangle$ en función de L/a para los estados electrónicos del: (a) centro y (b) borde, de la banda 3. Los niveles de desorden corresponden a: $W = 0,00$ (rojo), $W = 0,10$ (verde), $W = 0,20$ (azul), $W = 0,30$ (cian) para el: (a) centro, y (b) borde de la banda 3. 49

5.5. $1/\langle D \rangle$ en función del desorden para los estados electrónicos del: (a) centro y (b) borde de la banda 3. Las longitudes de cadena corresponden a: $L/a = 100$ (magenta), $L/a = 200$ (verde), $L/a = 300$ (anaranjado) para estados electrónicos del: (a) centro y (b) borde, de la banda 3. 50

5.6. $\langle D \rangle$ en función del desorden para los estados electrónicos del: (a) centro y (b) borde, de la banda 3. Las longitudes de cadena corresponden a: $L/a = 100$ (magenta), $L/a = 200$ (verde), $L/a = 300$ (anaranjado), $L/a = 400$ (violeta). 51

5.7. $\langle C \rangle$ en función de L/a para el: (a) centro y (b) borde, de la banda 3. Los niveles de desorden corresponden a: $W = 0,00$ (rojo), $W = 0,10$ (verde), $W = 0,20$ (azul), $W = 0,30$ (cian). 52

5.8. $\langle C \rangle$ vs W para el: (a) centro y (b) borde, de la banda 3. Las longitudes de cadena corresponden a: $L/a = 100$ (magenta), $L/a = 200$ (verde), $L/a = 300$ (anaranjado). 53

5.9. Distribución de probabilidad p asociada a $|u|$ conforme se varía el nivel de desorden para una longitud de cadena $L/a = 300$. Aunque existen valores para $3 < |u| < 4$ la escala se reduce a la mostrada para una mejor visualización. 55

5.10. Diagramas de dispersión de las partes real e imaginaria de u para una cadena de longitud $L/a = 300$ y diferentes niveles de desorden: (a) $W = 0,012$, (b) $W = 0,10$, (c) $W = 0,20$, (d) $W = 0,30$, (e) $W = 0,40$, (f) $W = 0,50$. La escala se reduce a la mostrada para una mejor visualización. 57

Resumen

Los efectos del desorden estructural en las propiedades de transporte electrónico en un modelo de sólido unidimensional (1D) desordenado son analizados mediante una medida estadística de complejidad propuesta por R. López-Ruiz, H.L. Mancini y X. Calbet. El modelo desordenado 1D se fundamenta en el conocido modelo de Kronig-Penney mediante una cadena de potenciales delta con variaciones aleatorias en sus distancias. Dado que el cálculo de la complejidad necesita de la densidad de probabilidad electrónica se utiliza el método de la matriz de transferencia para obtener los estados electrónicos. La comparación del coeficiente de transmisión y la razón de participación inversa con la complejidad indica tendencias definidas conforme se incrementa el nivel del desorden. Más aún, los efectos del desorden, longitud de cadena finita y efecto de borde se discuten para los estados electrónicos del centro y el borde de la banda. La anulación de la corriente de probabilidad y la pérdida de fase del estado electrónico del centro de la banda, como consecuencia del desorden, producen la saturación del coeficiente de transmisión, la razón de participación inversa y la complejidad. Los resultados y análisis conducen a considerar la complejidad como un indicador importante de las propiedades de transporte electrónico.

Abstract

The influence of structural disorder on electron transport properties in a one-dimensional (1D) disordered model of solid is analyzed by means of a statistical measure of complexity proposed by R. López-Ruiz, H.L. Mancini and X. Calbet. The 1D disordered model is based upon the so called Kronig-Penney model as a chain of delta potentials with random distances in between. Since the calculation of complexity requires to know the electron probability density, the transfer matrix method is used to obtain electron states. The comparison of transmission coefficient and inverse participation ratio with complexity show clear trends as disorder level increases. Furthermore, the effects of disorder, finite chain length and band edge are discussed for band center and band top electron states. The cancellation of probability current and the loss of electron phase for the band center state produce the saturation of transmission coefficient, inverse participation ratio and complexity as a consequence of disorder. The results and their analysis lead to consider complexity as a relevant indicator for electron transport properties.

Capítulo 1

Introducción

Uno de los temas que ha venido desarrollándose desde mediados del siglo XX, de forma independiente en las diferentes áreas del conocimiento, es el de la *complejidad* [1]-[6]. La transdisciplinariedad de este término ha generado que incluso al día de hoy no se tenga unanimidad sobre el concepto de *complejidad*. En el caso de las disciplinas científicas, esta situación ha motivado diferentes propuestas tanto desde el punto de vista conceptual como operacional [7]. Algunas de ellas basadas en cantidades propias de la *teoría de la información* [8] como la entropía de Shannon [9] o la entropía de Fisher [10].

Una de dichas propuestas, basada en parte en la entropía de Shannon, es la medida estadística de complejidad propuesta por R. López-Ruiz, H.L. Mancini y X. Calbet [11]. Dicha medida de complejidad se fundamenta en la noción intuitiva que los sistemas idealizados, como un sistema completamente ordenado (*e.g.* cristal) o uno completamente desordenado (*e.g.* gas ideal), no tienen complejidad alguna. Los sistemas con complejidad se ubicarían entre estos dos extremos. La caracterización de los sistemas a través de dicha complejidad cubre un amplio espectro como por ejemplo: distribuciones de probabilidad [12], economía [13], series de tiempo [14], sistemas atómicos [15]-[17], moléculas [18],[19], gases fuera del equilibrio [20], estrellas [21], entre otros. Justamente son estas correspondencias las que han motivado el presente trabajo, donde se plantea el estudio de la relación entre la complejidad (C) y las propiedades de transporte electrónico en un modelo de sólido unidimensional (1D) con desorden estructural. La importancia del estudio de sistemas 1D estriba en la posibilidad de extender, con el cuidado respectivo, ciertas conclusiones a sistemas más reales como los sistemas tridimensionales. Asimismo, la investigación en sistemas con desorden [22], [23], aunque de larga data, constituye un campo de estudio muy actual y con temáticas que aún resultan polémicas. Una de las más representativas es la referida a la ausencia de transporte electrónico en sistemas con desorden [24]-[26]. P.W. Anderson realizó uno de los primeros estudios en dicha área encontrando mediante una aproxi-

mación *tight binding* que en todo sistema 1D el desorden, por mas pequeño que sea, inhibe el transporte electrónico debido al fenómeno de localización electrónica [27].

Con la finalidad de contribuir en la investigación de sistemas con desorden, en el presente trabajo se aborda el estudio de la influencia del desorden estructural sobre las propiedades de transporte electrónico en un modelo de sólido 1D. Para ello, se utilizará cantidades típicas como el coeficiente de transmisión (T) y la razón de participación inversa (IPR), y se evaluará la información que pueda brindar la medida estadística de complejidad (C) propuesta por López-Ruiz *et al.* sobre el transporte electrónico, buscando establecer correspondencias entre dichas cantidades.

Para tal fin, el trabajo está organizado de la siguiente manera: El capítulo 2 inicia con una breve descripción en torno al concepto de *complejidad* comentando algunas de sus posibles medidas para luego centrarse en la medida estadística de complejidad que se va a utilizar, exponiendo también algunas características de la extensión de la formulación discreta a la continua. En el capítulo 3 se realiza el cálculo de C correspondiente a los estados electrónicos en el modelo de Kronig-Penney periódico [28], usando para ello el teorema de Bloch. Asimismo, se compara estos resultados con los que provee el método de la matriz de transferencia. Con la finalidad de disponer de información sobre las propiedades de transporte electrónico se procede a calcular la conductancia en la formulación de Landauer-Buttiker [29], [30]. En el capítulo 4 se aborda el estudio de las propiedades de transporte electrónico en el modelo de Kronig-Penney con inclusión de desorden estructural para lo cual se introducen cambios pertinentes en la matriz de transferencia. Los resultados obtenidos estimulan el estudio realizado en el capítulo 5 donde se evalúan los efectos del desorden sobre la transmisión electrónica y complejidad para los estados electrónicos del centro y del borde de la tercera banda. El análisis de la corriente de probabilidad electrónica permite considerar a la medida estadística de complejidad como un buen indicador del transporte electrónico. En el capítulo 6 se plantean las conclusiones respectivas y se proponen las perspectivas de trabajos futuros.

1.1. Objetivo general

Estudiar y caracterizar las propiedades de transporte electrónico en el modelo de Kronig-Penney con desorden estructural mediante el coeficiente de transmisión, la razón de participación inversa y una medida estadística de complejidad.

1.2. Objetivos específicos

- Aplicar el método de la matriz de transferencia para la obtención de las funciones de onda electrónica en un modelo de sólido unidimensional.
- Evaluar los efectos del desorden estructural en el modelo a través del coeficiente de transmisión electrónica, la razón de participación inversa y la complejidad.
- Establecer relaciones entre T , IPR y C conforme se varía el nivel de desorden en el modelo.

Capítulo 2

Conceptos básicos

En este capítulo se realiza una recopilación de la información más relevante en torno al tema de *complejidad* de manera que se tenga un panorama de su estado actual. Además, se comentarán algunas propuestas desarrolladas para la medida de complejidad poniendo énfasis en la medida estadística de complejidad (C) propuesta por R. López-Ruiz, H.L. Mancini y X. Calbet [11], la cual se utilizará en el presente trabajo.

2.1. Complejidad o ciencia de los sistemas complejos

Una de las instituciones pioneras y líderes en el estudio de la denominada *complejidad* es el *Santa Fe Institute* (New México, EEUU). Cuenta la historia que como parte de su Escuela de Verano en Sistemas Complejos del 2004, y para celebrar el 20 aniversario de su fundación, se convocó a un panel con algunos de sus expertos más eminentes (científicos muy conocidos en las áreas de física, ciencias de la computación, biología, economía entre otras). La primera pregunta fué: *¿Cómo se define la complejidad?*. Luego de una primera sonrisa, cada panelista procedió a dar una definición que resultaba distinta de las otras. A pesar de que ya ha pasado más de una década desde aquel día y aunque en diferentes áreas del conocimiento se tiene una idea particular de lo que es *complejidad*, aún no existe consenso en cuanto a su definición. Estando así las cosas, una primera definición de lo que es complejidad la podemos obtener del diccionario. El diccionario de la *Real Academia Española* indica que la palabra *complejidad* se refiere a la *cualidad de complejo*; precisa también que el término *complejo* significa *que se compone de elementos diversos* y que es *enmarañado, de difícil comprensión*. Una primera evaluación de lo señalado nos lleva a reconocer que todo sistema (físico, biológico, económico, etc.) al estar formado por elementos que interaccionan tienen *complejidad* en alguna medida. Por otro lado, atendiendo a la característica de *complejidad* como cualidad, resulta evidente que se encarga del estudio de los denominados *sistemas complejos*.

2.1.1. Complejidad: un poco de historia

A mediados del siglo pasado, *W. Weaver* [31] (uno de los padres de la teoría de la información) realiza un balance de los problemas que hasta ese entonces se han podido abordar con la física y los que han quedado fuera de su alcance (propios de la medicina y la biología) estableciendo la siguiente clasificación: problemas de simplicidad, problemas de complejidad organizada y problemas de complejidad desorganizada. Señala que los *problemas de simplicidad* son aquellos resueltos hasta antes de 1900 y que consideraban unas pocas variables - máximo cuatro variables - (*e.g.* dinámica de una bola de billar); los *problemas de complejidad desorganizada* son aquellos que consideran una cantidad enorme de variables aleatorias y que pueden caracterizarse por valores promedios obtenibles a partir de la teoría de la probabilidad y la mecánica estadística (*e.g.* dinámica de átomos, de estrellas, pronóstico de la frecuencia de llamadas, de muertes, leyes de la termodinámica, leyes de herencia genética); y los *problemas de complejidad organizada* son aquellos que (aún cuando pudieran no tener una cantidad intermedia de variables) involucran una cantidad considerable de factores que están *inter-relacionados* en un todo orgánico, es decir constituyen entidades organizadas (no es errático) que hace inviable estudiarlos estadísticamente (*e.g.* ¿por qué una sustancia es dañina y otra, con la misma proporción de moléculas, es inofensiva?, ¿de qué depende el precio del trigo?, ¿cómo se puede estabilizar la moneda?, ¿cómo se puede explicar el patrón de conducta de un grupo de personas como un sindicato o una minoría racial?). Weaver indica que este último tipo de problemas aparecen en una amplia gama de áreas (biología, medicina, psicología, economía, ciencias políticas, entre otras) y que la ciencia, apoyándose en las capacidades de las computadoras y los equipos mixtos ¹, deberá aprender a tratar en los próximos 50 años.

Una década después, *H.A. Simon* publica un ensayo [32] donde indica que un *sistema complejo* es aquel que está formado por una gran cantidad de partes que interactúan de una manera no-simple. En tales sistemas, el todo es más que la suma de sus partes, no en el sentido metafísico sino pragmático; dadas las propiedades de sus partes y las leyes de sus interacciones no resulta trivial inferir las propiedades del todo. La idea central que propone es que la *complejidad* frecuentemente toma la forma de *jerarquía* ² y que los sistemas jerárquicos tienen algunas propiedades comunes que son independientes de sus contenidos específicos. Las jerarquías las

¹Grupos de trabajo multidisciplinarios surgidos en la 2da. guerra mundial, enfocados en un problema común y formados por especialistas de diferentes campos del conocimiento: matemáticas, física, ingeniería, bioquímica, psicología, fisiología, ciencias sociales, etc.

²Por sistema jerárquico o jerarquía se refiere a un sistema que está compuesto de subsistemas interrelacionados y estos, a su vez, estructurados en jerarquía hasta alcanzar el nivel más bajo de subsistemas elementales (*e.g.* átomo, célula, estrella, aminoácido, familia).

podemos encontrar en sistemas sociales (*e.g.* empresas comerciales, gobiernos, universidades, tribus), sistemas biológicos (*e.g.* órganos, tejidos, células, núcleos), sistemas físicos (*e.g.* galaxias, sistemas planetarios, moléculas), sistemas simbólicos (*e.g.* capítulos, secciones, párrafos), etc. Simon señala que para el entendimiento de los sistemas complejos disponemos principalmente de dos tipos de descripción: la descripción del estado y la descripción del proceso; recalca que la *jerarquía* es uno de los esquemas estructurales centrales que usa la *arquitectura de la complejidad*.

Posteriormente, a inicios de los 70's, *P.W. Anderson* [33], aunque acepta el *reduccionismo*³ señala que la habilidad de reducir todo a simples leyes fundamentales no implica la capacidad de reconstruir todo el universo a partir de ellas. Indica que el comportamiento de grandes y complicados agregados de partículas, no se pueden comprender a partir de una simple extrapolación de las propiedades de unas pocas partículas fundamentales. Reconoce que a cada nivel de complejidad aparecen propiedades completamente nuevas y la comprensión de dichos comportamientos requiere de investigación que considera de naturaleza fundamental.

Alrededor de 1990, *C.H. Bennett* [34] indica que los procesos irreversibles en la naturaleza (*e.g.* evolución solar, biológica, cultural) tienen tendencia a la *auto-organización* (por medio de la generación espontánea de complejidad) y que disponer de una *definición* de complejidad permitiría abordar problemas asociados a física estadística y teoría de la computación. Las posibles definiciones de complejidad deberían capturar nociones intuitivas y además ser lo suficientemente objetivas y matemáticas (*i.e.* operacionales), que permitan demostrar teoremas. A continuación se enlista y comenta algunos candidatos para la *medida* de la complejidad en física como: potenciales termodinámicos, universalidad computacional, complejidad computacional espacio/tiempo, información algorítmica, información mutua de largo alcance, profundidad lógica, profundidad termodinámica, entre otros.

2.1.2. La complejidad y su medida

De la sección anterior queda patente el reconocimiento que en la naturaleza se presentan fenómenos que son difíciles de analizar recurriendo a las teorías formales conocidas. Estos fenómenos, identificados inicialmente como problemas de complejidad organizada, vienen a corresponder en la actualidad a los denominados *sistemas complejos*.

³El reduccionismo es el enfoque filosófico según el cual la reducción es *necesaria y suficiente* para resolver diversos problemas del conocimiento.

Según se vió en las secciones anteriores, los *sistemas complejos* se caracterizarían por tener una gran cantidad de componentes interrelacionados de manera no-simple, estar formados por sub-sistemas que constituyen jerarquías, describibles por su estado o proceso, no analizables a partir de un enfoque reduccionista y/o que presentan tendencia a la auto-organización. Es evidente que bajo este panorama encontrar una definición que englobe estas características es una tarea difícil. A pesar de esto y aunque parezca contradictorio, en la actualidad se dispone de un cúmulo de posibles definiciones y sus correspondientes medidas. S. Lloyd publicó una lista de al menos 40 posibles medidas de complejidad (veáse la Ref. [7] para mayores detalles), señalando además que éstas toman en cuenta alguno(s) de los siguientes aspectos de un sistema complejo: la dificultad de su descripción, la dificultad de su creación y su grado de organización. Es interesante notar que los dos primeros enfoques mencionados nos recuerdan a lo que H.A. Simon denominó descripción del estado y descripción del proceso [32].

Con la finalidad de tener una idea de lo señalado, a continuación se comentará brevemente algunas de las posibles medidas de complejidad.

■ Complejidad por tamaño

Si preguntamos: ¿qué tiene mayor complejidad, el ser humano o una ameba? es muy probable que la respuesta inmediata y obvia sea: ¡el ser humano! Esta respuesta intuitiva se ve confirmada y formalizada si tomamos en cuenta que a nivel genómico, el *tamaño* del ADN del ser humano ($\sim 3\ 000$ Mb) es mayor que el de la ameba (~ 600 Mb); es más, podríamos decir que el ser humano es cinco veces más complejo que la ameba. Sin embargo, tal criterio de complejidad (tamaño del ADN) no resulta adecuado si tomamos en cuenta que existen especies de plantas, como el pino taeda, que tienen un ADN de mayor tamaño ($\sim 22\ 000$ Mb) y que solemos considerar de menor complejidad.

■ Complejidad por entropía

Otra posibilidad para la medida de la complejidad de un sistema podría ser por su *contenido de información*. De la teoría de la información se sabe que tal cantidad existe y es la denominada *entropía de Shannon* [9]. Consideremos un dispositivo (sistema) que puede generar un mensaje (secuencia) utilizando solo dos símbolos (A o B). La entropía de Shannon asigna cero a un mensaje ordenado (*e.g.* secuencia AAAA) y valor máximo al mensaje desordenado (*e.g.* secuencia ABBA). Se deduce entonces que en este caso la complejidad máxima se le asigna al mensaje desordenado. En este caso la mayor complejidad corresponde a un mayor desorden.

■ Complejidad por contenido de información algorítmica

Otra alternativa para la medida de complejidad, desarrollada por A. Kolmogorov y en forma independiente por G. Chaitin y R. Solomonoff, es el *contenido de información algorítmica* (también llamada complejidad algorítmica o complejidad de Kolmogorov) [8]. Se define como el tamaño del programa más corto que generaría una descripción completa del sistema. Consideremos que el dispositivo anterior genera dos mensajes: mensaje 1: AAAAAAAAAAAAAAAAAA y mensaje 2: ABBAABAAAABABBB. Para generar el mensaje 1 el programa sería *Escribe 'A' 15 veces*, y para el mensaje 2 *Escribe 'ABBAABAAAABABBB'*. Evidentemente el programa más corto corresponde al del mensaje 1, y por lo tanto es el que tiene menor contenido de información algorítmica. Tomando en cuenta que el mensaje 2 se ha generado de manera aleatoria y que en dicho caso el contenido de información algorítmica es mayor, deducimos que en este caso la mayor complejidad se corresponde con la secuencia de mayor desorden.

■ Complejidad por profundidad lógica

En la década de los 80's, C.H. Bennett propuso la noción de *profundidad lógica* [35] que toma en cuenta la dificultad en la construcción (reproducción) de un objeto (sistema). Bennett compara la *construcción de un objeto* con el cómputo de una cadena de ceros y unos que lo codifican. Por ejemplo, asignando a los nucleótidos los siguientes códigos binarios: A=00, C=01, G=10, y T=11, es posible convertir una secuencia de nucleótidos en una cadena de ceros y unos. La profundidad lógica se relaciona con el número de pasos que requeriría realizar una máquina de Turing⁴ para generar la secuencia deseada. Sin embargo, puesto que diferentes máquinas de Turing pueden invertir distintos intervalos de tiempo, la profundidad lógica viene dado por el tiempo de ejecución requerido por una máquina de Turing universal para reproducir la secuencia deseada. Esta cantidad no es una medida de aleatoriedad y es nula para secuencias tanto completamente ordenadas como aleatorias.

■ Complejidad por profundidad termodinámica

A finales de los 80's, S. Lloyd y H. Pagels propusieron una medida de la complejidad al que denominaron *profundidad termodinámica* [36], que se basa en la idea que los sistemas complejos son aquellos cuya generación presenta más dificultad. Esta medida es una propiedad de la evolución del estado y no del estado en sí, y se anula para estados completamente ordenados como desordenados. Por ejemplo, para determinar la profundidad termodinámica del genoma humano podemos empezar con el genoma del primer

⁴Una máquina de Turing es un dispositivo hipotético que manipula símbolos sobre una tira de cinta de acuerdo a una tabla de reglas y que es capaz de simular la lógica de cualquier algoritmo de un computador.

ser vivo que ha existido y enlistar todos los eventos genéticos (mutaciones, recombinaciones, etc.) que han conllevado al ser humano moderno. Presumiblemente, puesto que el ser humano evolucionó miles de millones de años después que las amebas, su profundidad termodinámica es mayor y por consiguiente su complejidad.

Es importante notar que las medidas de complejidad por *entropía* y por *contenido de información algorítmica* asocian valor nulo con sistemas completamente ordenados y valor máximo con sistemas aleatorios; por ello son considerados más como medidas de aleatoriedad. Por otro lado, las medidas de complejidad por *profundidad lógica* y por *profundidad termodinámica* consignan valor nulo tanto a sistemas completamente ordenados como desordenados. Justamente la intuición nos indica que los sistemas complejos son los que subyacen entre esos dos extremos. Tal como se muestra en la figura 2.1, estamos interesados en sistemas que no son completamente ordenados ni desordenados, sino que están caracterizados por estructuras o jerarquías. Una de las medidas de complejidad que ha considerado tal correspondencia es la que se discutirá en la siguiente sección.

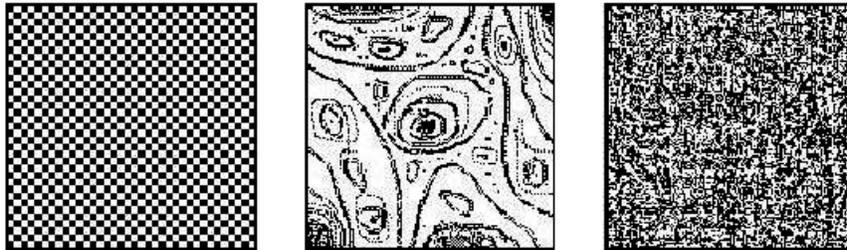


Figura 2.1: Patrones de referencia de sistemas no complejos (extremos) y complejo (centro). Figura tomada de la Ref. [37].

2.2. Una medida estadística de la complejidad

La *Complejidad*, C , es una medida estadística de la complejidad propuesta por López-Ruiz *et al.* [11] que se basa en la idea intuitiva que un sistema completamente ordenado (*e.g.* sólido cristalino) y uno completamente desordenado (*e.g.* gas ideal) no presentan complejidad alguna. El componente esencial para el cálculo de la complejidad C es la distribución de probabilidades asociada a los posibles estados del sistema que se va a estudiar y dado que esta distribución puede ser *discreta* o *continua* se pasará a discutir sus formulaciones respectivas.

2.2.1. Definición de complejidad para un sistema discreto

Con la finalidad de plantear la expresión matemática de la complejidad, C , se considera un sistema físico que tiene un conjunto de N estados accesibles $\{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ con su correspondiente distribución de probabilidades $\{p_1, p_2, \dots, p_N\}$ tal que $\sum_{i=1}^N p_i = 1$.

Un primer factor característico es la cantidad de *información*, H , requerida para la descripción del sistema físico. Mientras que el sólido cristalino requiere mínima información (básicamente la asociada a su celda primitiva), el gas ideal requiere información máxima (e.g. la que corresponde a las posiciones y velocidades instantáneas de cada una de sus moléculas). Justamente C. Shannon [9] definió una cantidad que da cuenta de la información almacenada en un sistema y que viene dada por:

$$H = -K \sum_{i=1}^N p_i \log p_i \quad (2.1)$$

donde K es una constante positiva. Algunas de las propiedades de H son: (i) positividad: $H \geq 0$ para cualquier conjunto arbitrario $\{p_i\}$; (ii) concavidad: H es concavo para cualquier conjunto arbitrario $\{p_i\}$ y alcanza su valor extremo para la distribución equiprobable ($p_i = 1/N \forall i$); (iii) aditividad: $H(A \cup B) = H(A) + H(B)$, donde A y B son sistemas independientes; y (iv) continuidad: H es continuo en cada uno de sus argumentos. Es más, la única función sobre el conjunto $\{p_i\}$ que satisface estas propiedades es la indicada en la ecuación (2.1).

Otro parámetro distintivo es el grado (o nivel) de orden de sus elementos constituyentes asociados a una jerarquía dada. Mientras que el orden en el gas ideal (sistema aleatorio) es mínimo (nulo), el del sólido cristalino (sistema periódico) es máximo. Esta noción de orden es el que permite definir una cantidad denominada *desequilibrio* (D) que establece una especie de *distancia* respecto de un sistema que tiene asociada una distribución equiprobable (sistema aleatorio) y que viene dado por:

$$D = \sum_{i=1}^N \left(p_i - \frac{1}{N} \right)^2 \quad (2.2)$$

No es difícil evaluar que para un sólido cristalino, caracterizado por un estado preferencial x_c (tal que $p_c \sim 1$ y $p_i \sim 0$ para todo estado $x_i \neq x_c$), se tiene que $H_c \sim 0$ y $D_c \sim 1$ (para $N \rightarrow \infty$). De forma similar, para el gas ideal que tiene todos sus estados igualmente probables $p_i = 1/N$, resulta $H_g = K \log N$ y $D_g = 0$. Esto demuestra que si bien H o D por sí solas no cumplen con la idea intuitiva de complejidad, su producto sí lo hace. El comportamiento esperado de tal

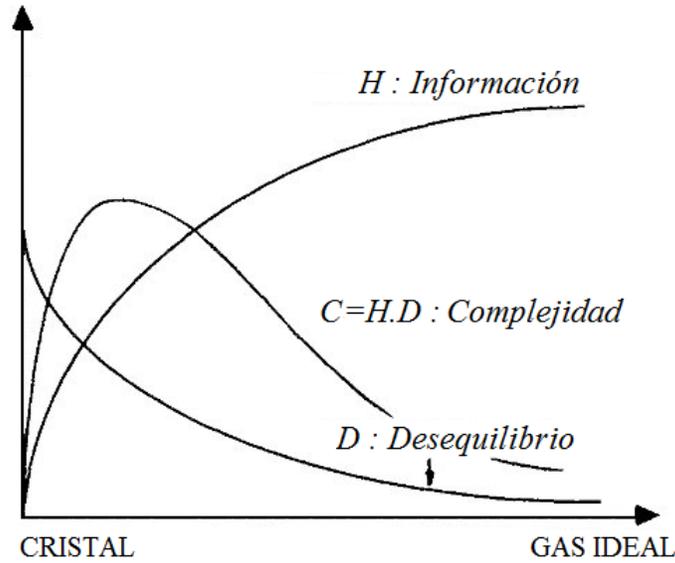


Figura 2.2: Comportamiento esperado para la información (H), el desequilibrio (D) y la medida estadística de complejidad (C). Figura adaptada de la Ref. [11].

producto lo podemos observar en la figura 2.2 en el intervalo de un sistema completamente ordenado (sólido cristalino) hasta uno completamente desordenado (gas ideal) de modo que $C \geq 0$.

El análisis precedente sobre el comportamiento previsto de H y D permite definir la complejidad C para un sistema caracterizado por una distribución discreta de estados como $C \equiv H \cdot D$, o de forma equivalente:

$$C = \left(-K \sum_{i=1}^N p_i \log p_i \right) \left(\sum_{i=1}^N \left(p_i - \frac{1}{N} \right)^2 \right) \quad (2.3)$$

Ejemplo: Sistema con 2 estados

Aunque el estudio de sistemas con $N = 2$ estados es aparentemente sencillo, encierra gran relevancia, tanto desde el punto de vista conceptual (permite afianzar ciertas nociones de las cantidades que vamos a utilizar), como desde el práctico (permite realizar el cálculo de la complejidad en un caso relativamente sencillo). Recordemos que en la naturaleza encontramos sistemas basados en solo dos estados, como es el caso de la información clásica (donde el *bit* puede adoptar solo dos valores, cero o uno), o el modelo Ising (que considera *spin up* o *down*), entre otros.

Sea un sistema con $N = 2$ estados y con probabilidades $p_1 = p$ y $p_2 = 1 - p$. En general tenemos que: $0 < H < K \ln N$ y $0 < D < 1 - 1/N$. Tomando en cuenta los valores máximos de H y D obtenemos los valores correspondientes normalizados como: $h = H/K \ln N$ y $d = D/(1 - 1/N)$ del cual obtenemos $c = h \cdot d$ como la complejidad normalizada.

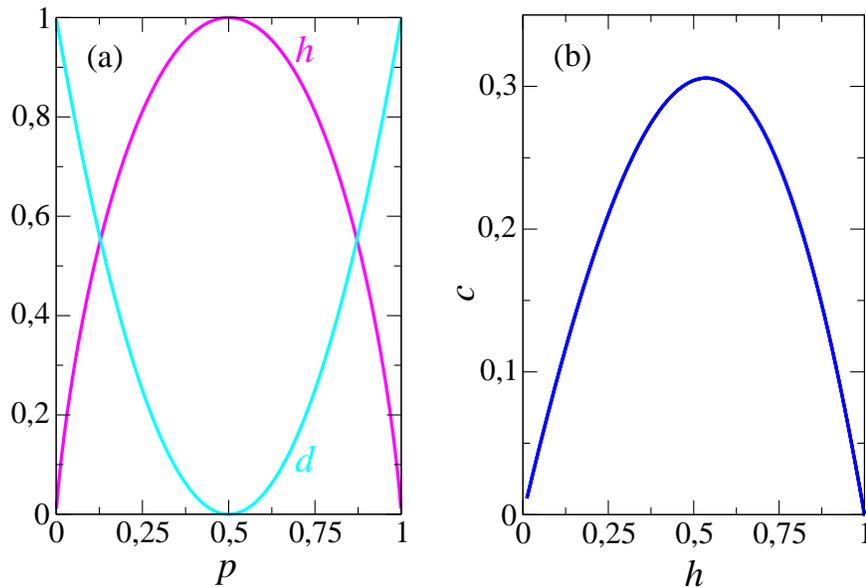


Figura 2.3: (a) Entropía de Shannon normalizada (línea color magenta) y disequilibrio normalizado (línea color cian) en función de la probabilidad de uno de los posibles estados para un sistema de 2 estados. (b) Complejidad normalizada como función de la entropía normalizada.

Tal como se observa en la figura 2.3 -(a) h y d presentan un comportamiento inverso; es decir, el aumento de una de ellas se corresponde con la reducción de la otra tal como prevee la definición inicial. Por otro lado, en la figura 2.3 -(b) se puede comprobar el comportamiento intuitivo

esperado de la complejidad, asignando valor cero tanto a un sistema ordenado (con un estado preferencial, *i.e.* $p_1 = 1$ y $p_2 = 0$) como a un sistema aleatorio (con $p_1 = p_2 = 0,5$) de modo que los sistemas complejos se ubicarían entre estos dos extremos. Es importante resaltar el hecho que el valor máximo de la complejidad no corresponde al valor $h = 0,5$.

Resulta interesante realizar el estudio de sistemas con $N > 2$ estados con la finalidad de monitorear los cambios en la complejidad conforme se aumenta el número de estados N del sistema. Como se puede observar en la figura 2.4, para el caso de $N = 3$ estados, la correspondencia entre c y h ya no es unívoca. Esto se debe a que existen distintos conjuntos de probabilidades $\{p_i\}$ que poseen igual entropía pero distinto desequilibrio, y por consiguiente distinto c . Se puede observar que para una entropía dada, se tiene un valor máximo y mínimo de la complejidad. Al respecto, X. Calbet *et al.* [20] han realizado un estudio sobre la maximización y minimización de la complejidad para un valor dado de H , encontrando que la maximización de C corresponde a una maximización del desequilibrio, es decir $C_{max}(H) = D_{max}(H) \cdot H$. En dicho trabajo obtienen que C_{max} se consigue cuando la probabilidad de un estado p_{max} varía de $1/N \rightarrow 1$ dejando al resto de $N - 1$ estados con igual probabilidad de valor $(1 - p_{max})/(N - 1)$ que varían de $0 \rightarrow 1/N$. De manera similar, plantean que $C_{min}(H) = D_{min}(H) \cdot H$ se obtiene cuando n estados tienen probabilidad cero, un estado tiene probabilidad p_{min} que varía entre $0 \rightarrow 1/(N - n)$ y el resto de $N - n - 1$ estados tienen igual probabilidad de valor $(1 - p_{min})/(N - n - 1)$ que varía entre $1/(N - n) \rightarrow 1/(N - n - 1)$ (con $n = 0, 1, \dots, N - 2$).

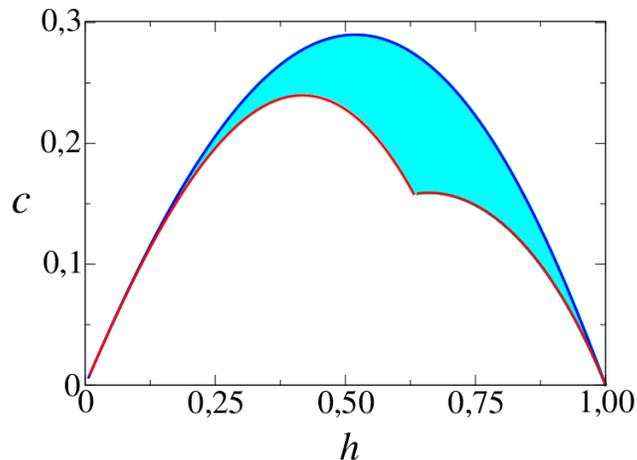


Figura 2.4: Complejidad normalizada c en función de la entropía normalizada h para un sistema discreto con $N = 3$ estados. Se muestra también la complejidad máxima c_{max} (línea color azul) y la complejidad mínima c_{min} (línea color rojo).

2.2.2. Definición de complejidad para un sistema continuo

La extensión de la medida estadística C al caso de un sistema con distribución continua de probabilidades requiere ciertas consideraciones tal como fueron planteadas por R. Catalán *et al.* [38].

■ Reformulación de H

La formulación de H para una distribución continua $p(x)$, con dominio en $[-L, +L]$ y tal que $\int_{-L}^{+L} p(x)dx = 1$, puede realizarse dividiendo el intervalo $[-L, +L]$ en sub-intervalos de igual longitud $\Delta x = x_i - x_{i-1}$, $i = 1, \dots, n$, con $x_0 = -L$ y $x_n = +L$; y considerando la siguiente aproximación $\{p_i\} = \{p(\bar{x}_i) \Delta x\}$ con \bar{x}_i un punto interior del segmento $[x_{i-1}, x_i]$. Esto genera:

$$H^* = H(p_i) = -K \sum_{i=1}^n p(\bar{x}_i) \log p(\bar{x}_i) \Delta x - K \sum_{i=1}^n p(\bar{x}_i) \log(\Delta x) \Delta x \quad (2.4)$$

La segunda sumatoria en la ecuación (2.4) crece con $\log n$ conforme n tiende a infinito. Por ello, R. Catalán *et al.* consideran razonable tomar en cuenta únicamente la primera sumatoria para la extensión de H al caso continuo, de modo que en el límite $n \rightarrow \infty$, se obtiene:

$$H(p(x)) = \lim_{n \rightarrow \infty} [-K \sum_{i=1}^n p(\bar{x}_i) \log p(\bar{x}_i) \Delta x] = -K \int_{-L}^{+L} p(x) \log p(x) dx \quad (2.5)$$

■ Reformulación de D

Para el caso continuo, la extensión natural de la distribución equiprobable, con dominio en el intervalo $[-L, +L]$, es la distribución rectangular $p(x) = 1/(2L)$. El desequilibrio podría reformularse como:

$$D^* = \int_{-L}^{+L} (p(x) - \frac{1}{2L})^2 dx = \int_{-L}^{+L} p^2(x) dx - \frac{1}{2L} \quad (2.6)$$

R. Catalan *et al.* redefinen D , omitiendo el termino constante de D^* , quedando el desequilibrio como:

$$D(p(x)) = \int_{-L}^{+L} p^2(x) dx \quad (2.7)$$

Es importante tomar en cuenta que la extensión al caso continuo, tanto de la entropía de Shannon (ecuación 2.5) como del desequilibrio (ecuación 2.7), requiere el paso de un conjunto discreto de estados (p_i) a una función definida sobre un continuo de estados ($\rho(x)$), de modo que la complejidad C puede redefinirse como:

$$C = \left(-K \int_{-L}^{+L} \rho(x) \log \rho(x) dx \right) \left(\int_{-L}^{+L} \rho^2(x) dx \right) \quad (2.8)$$

Asimismo se debe tomar en cuenta que el cálculo de la complejidad mediante la ecuación (2.8) requiere que tanto la variable x como L se encuentren normalizadas respecto a un valor de escala de manera que sean adimensionales.

A continuación se estudiará mediante un ejemplo las características de C definido en la ecuación (2.8) y se evaluará su comportamiento en los casos límite de los sistemas completamente ordenado y desordenado.

Ejemplo: Función de distribución normal

La función de distribución normal es una distribución que juega un papel importante en la teoría de la probabilidad, estadística, teoría de errores, teoría de la conducción del calor, teoría del riesgo de finanzas y seguros, y en muchas otras ramas de la matemática, física y ciencias sociales. La función de distribución normal, definida en el dominio $< -\infty, +\infty >$ viene dada por $\rho(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$ con $\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x) dx = 1$. La evaluación del comportamiento de la distribución normal en función de su desviación σ (véase la figura 2.5-(a)) nos permite asociar al sistema completamente ordenado con $\sigma \rightarrow 0$ y al sistema completamente desordenado con $\sigma \rightarrow +\infty$. Esto se debe a que en el primer caso la distribución tiende a un estado preferencial y en el segundo la aproximación es hacia un conjunto de estados equiprobables. Esta asociación hace posible la evaluación de la entropía, el desequilibrio y de la complejidad conforme a un parámetro característico de la distribución que viene dado por σ . Justamente, el cálculo explícito de C , a partir de la definición de la distribución normal y aplicando la ecuación (2.8) permite obtener la siguiente relación:

$$C = \frac{K}{2\sigma\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{2} + \log(\sigma\sqrt{2\pi}) \right) \quad (2.9)$$

Como se puede observar en la figura 2.5-(b), se comprueba que en esta reformulación H y D mantienen un comportamiento aproximadamente inverso, con $D \geq 0$; sin embargo, se observa que H adquiere valores negativos. Esto, además de ser contradictorio con la formulación original de Shannon (que considera que $H \geq 0$), produce valores negativos de C , lo cual desvirtúa la

noción intuitiva original de la propuesta que siempre $C \geq 0$. Por otro lado, se hace evidente que para un sistema completamente ordenado $C \rightarrow -\infty$ y para uno completamente desordenado $C \rightarrow 0$.

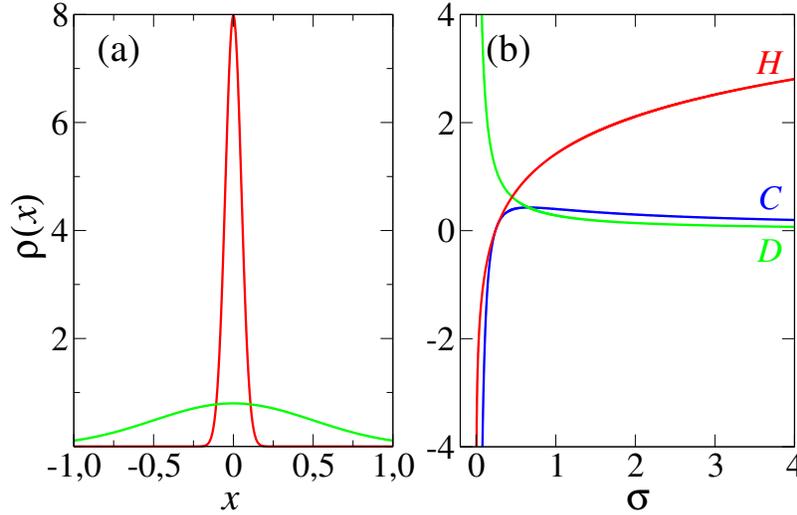


Figura 2.5: (a) Caracterización de la tendencia de la distribución normal para $\sigma = 0,05$ (curva en rojo), $\sigma = 0,5$ (curva en verde). (b) Comportamiento de H, D, C en función de σ .

Del ejemplo anterior se evidencian ciertas inconsistencias respecto a la reformulación de la medida estadística de complejidad para sistemas con distribución continua. Tal como fue indicado por Anteonodo *et al.* [39] y mostrado en el ejemplo, esta reformulación (ecuación (2.8)) admite valores negativos de C (esto se debe a que $H \leq 0$ aún cuando $D \geq 0$). Con la finalidad de recuperar la positividad de C , R. Catalán *et al.* [38] proponen considerar la forma exponencial de la entropía de Shannon en lugar de simplemente H , *i.e.* $C = e^H D$, de modo que:

$$C = e^{-\int_{-L}^{+L} \rho(x) \log \rho(x) dx} \int_{-L}^{+L} \rho^2(x) dx \quad (2.10)$$

Esta definición de la medida estadística de complejidad para sistemas con distribución continua además de restaurar la positividad de C , posee propiedades como la de ser invariante bajo transformaciones de traslación, re-escalamiento y replicación. Adicionalmente encuentran que $C_{min} = 1$ (para un sistema equiprobable) y C_{max} no tiene un valor definido y puede ser infinitamente grande.

2.3. Resumen del capítulo

- La formulación original de R. López-Ruiz *et al.* de la medida de complejidad $C = H \cdot D$ para un sistema discreto de estados reproduce lo esperado ($C = 0$) tanto para un sistema completamente ordenado como para uno desordenado.
- Para sistemas discretos con número de estados $N > 2$ la correspondencia entre la entropía de Shannon y la complejidad C no es unívoca pues diferentes distribuciones de probabilidad tienen el mismo valor de H .
- El parámetro estadístico de complejidad aplicado a sistemas con distribución continua de estados requiere una interpretación cuidadosa de los resultados, pues los sistemas completamente ordenados (periódicos) y desordenados (aleatorios) no se corresponden con el valor $C = 0$ de la definición original.
- La reformulación de la medida de complejidad para sistemas con distribución continua de estados, como $C = e^H D$, recupera la positividad de C y redefine los valores límite correspondiente a los sistemas completamente desordenado ($C_{min} = 1$) y ordenado (C_{max} puede ser infinitamente grande).

Capítulo 3

Complejidad en el modelo de Kronig-Penney periódico

Una de las características más resaltantes de los sólidos cristalinos viene a ser la disposición periódica de sus elementos constituyentes (base) ¹. Esto hace posible que al investigar las propiedades electrónicas en cristales, y utilizando la aproximación del electrón independiente, se considere al potencial de interacción electrón-cristal como un potencial de tipo periódico. Justamente es esta característica de periodicidad la que incorpora el *modelo de Kronig-Penney periódico* (MKPP) [28]. El MKPP es un modelo unidimensional (1D) que ha sido empleado exitosamente en diferentes investigaciones, como por ejemplo en el estudio de la estructura de bandas electrónicas en sólidos ordenados, en el fenómeno de localización en sólidos desordenados [40] y líquidos [41], superconductividad en superredes [42], tunelamiento quark en modelos nucleares [43], entre otros.

Justamente la distribución de energía del electrón en zonas permitidas (bandas) y prohibidas (gaps) constituye un ingrediente esencial para distinguir a los materiales como metálicos, semiconductores o aislantes.

Dado que el MKPP es representativo para sólidos periódicos resulta adecuado para el estudio del transporte electrónico en materiales cristalinos y superredes ². Eventualmente también se pueden estudiar materiales amorfos incorporando adecuadamente el desorden respectivo.

El estudio del transporte electrónico en un medio periódico es generalmente más sencillo y directo que en un medio no periódico (aperiódico o aleatorio). Esto se debe justamente a las simplificaciones asociadas a su periodicidad que hace posible reducir el estudio del transporte

¹Se denomina base al átomo o grupo de átomos que asociados a una red dan origen al sólido cristalino.

²Las superredes son materiales artificiales obtenidos mediante crecimiento sobre sustratos de una cantidad determinada de capas de dos o más cristales químicamente similares, en un secuencia periódica apropiada.

electrónico en todo el material como a aquel que se produce solamente en la celda unitaria tomando adicionalmente las consideraciones de frontera adecuadas (*e.g.* condiciones periódicas).

3.1. Cálculo de la complejidad mediante la función de Bloch

El MKPP original considera una sucesión de barreras o pozos de potencial de anchos finitos que se alternan *at infinitum* [28]. Un caso especial se consigue al sustituir las barreras de potencial por potenciales tipo delta (esto se logra haciendo que el ancho de la barrera tienda a cero y la altura a infinito de manera que su producto se mantenga constante) como el que está representado en la figura 3.1. En dicho caso el potencial de interacción electrón-cristal puede ser expresado de la siguiente manera:

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{m} \Omega \sum_{j=-\infty}^{+\infty} \delta(x + ja) \quad (3.1)$$

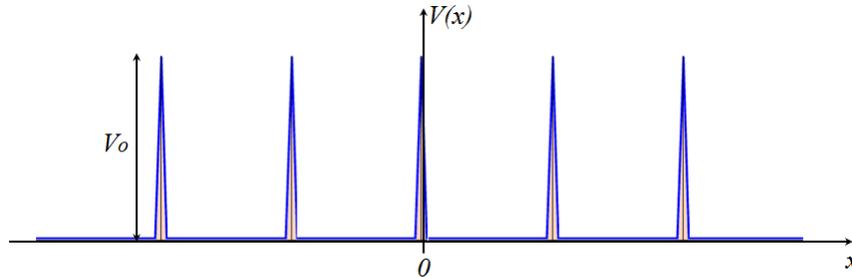


Figura 3.1: Representación del potencial de interacción electrón-cristal periódico del modelo de Kronig-Penney a través de una cadena de potenciales tipo delta. Los potenciales equidistantes están separados una distancia a . Para los cálculos se considerará $a = 1,0 \text{ \AA}$.

Como se ha visto en el capítulo anterior, el cálculo de la complejidad se fundamenta en el conocimiento de la distribución espacial de los estados del sistema en estudio. En el presente caso, esta información viene dada en la función de densidad de probabilidad $\rho(x) = |\psi(x)|^2$. Esto implica que para obtener C primero se debe conseguir la función de onda electrónica $\psi(x)$, para lo cual se requiere resolver la ecuación de Schrödinger para el electrón con el potencial de interacción expresado en la relación (3.1) y aplicar las condiciones de frontera pertinentes.

Tomando en consideración que se tiene potencial nulo entre dos cualesquiera potenciales tipo delta contiguos, es posible expresar la función de onda electrónica como una combinación

de ondas planas. Por ejemplo, en el intervalo $0 < x < a$, la función de onda electrónica se puede expresar como:

$$\psi(x) = A_1 e^{+ikx} + B_1 e^{-ikx} \quad (3.2)$$

o equivalentemente:

$$\psi(x) = A \operatorname{sen}(kx) + B \cos(kx) \quad (3.3)$$

Es importante señalar que debido a que todas las celdas son físicamente equivalentes, es suficiente obtener la función de onda electrónica en una celda (e.g. en la celda $0 < x < a$), por lo que la densidad de probabilidad requerida para obtener C se puede obtener como:

$$\rho(x) = |A|^2 \operatorname{sen}^2 kx + (A^*B + B^*A) \operatorname{sen} kx \cos kx + |B|^2 \cos^2 kx \quad (3.4)$$

Puesto que el potencial de interacción es periódico, el *teorema de Bloch* establece que la eigenfunción del electrón tiene la forma de una onda plana modulada por una función periódica $u(x)$ cuyo período corresponde al de la red cristalina, es decir $\psi(x) = e^{iqx} u_q(x)$ con $u_q(x) = u_q(x + a)$ (a parámetro de red) o de forma equivalente: $\psi(x + a) = e^{iqa} \psi(x)$. Esto permite expresar la eigenfunción electrónica en $a < x < 2a$ como:

$$\psi(x) = e^{iqa} [A \operatorname{sen} k(x - a) + B \cos k(x - a)] \quad (3.5)$$

con A y B cantidades en general complejas y $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$. Puesto que en nuestro caso el potencial no es acotado, las condiciones de frontera en $x = a$ requieren tanto la continuidad de $\psi(x)$ como la discontinuidad de $d\psi(x)/dx$. Tales condiciones se expresan como:

$$\psi(a + \epsilon) = \psi(a - \epsilon) \quad (3.6)$$

$$\frac{d\psi(a + \epsilon)}{dx} - \frac{d\psi(a - \epsilon)}{dx} = 2\Omega\psi(a) \quad (3.7)$$

con $\epsilon \rightarrow 0$. Reemplazando las las relaciones (3.3) y (3.5) en las ecuaciones anteriores se obtiene un sistema de ecuaciones que en forma matricial se puede expresar como:

$$\begin{pmatrix} \operatorname{sen}(ka) & \cos(ka) - e^{+iqa} \\ ke^{iqa} - k \cos(ka) - 2\Omega \operatorname{sen}(ka) & k \operatorname{sen}(ka) - 2\Omega \cos(ka) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

Sabemos que la condición para obtener soluciones no-triviales (es decir con $A, B \neq 0$) requiere que el determinante sea nulo, de lo cual se deduce que:

$$\cos(qa) = \cos(ka) + \frac{\Omega a}{ka} \operatorname{sen}(ka) \quad (3.9)$$

La estructura de bandas electrónica del cristal unidimensional esta contenida en esta ecuación. Los posibles valores adoptados por q determinan las diferentes zonas de Brillouin (ZB) que pueden expresarse como: $(m - 1)\pi \leq |qa| \leq m\pi$ (donde para $m = 1$ se tiene la 1era. ZB , $m = 2$ la 2da. ZB , etc). Esta relación impone una restricción importante sobre los valores de k (y por consiguiente sobre los valores de E), pues solamente aquellos que al ser evaluados en la parte derecha de la ecuación (3.9) y reproduzcan valores entre -1 y 1 , serán válidos. Justamente los valores de $k \in \mathbb{R}$ determinan la región de energías permitidas y los $k \in \mathbb{I}$ determinan las regiones de energías prohibidas (gaps).

Considerando la ecuación (3.9) y como era de esperar, se comprueba que para $\Omega a \rightarrow 0$ todas las energías son permitidas (*i.e.* $k = q$) y se tiene un espectro de energías continuo que corresponde al caso del electrón libre. Asimismo, para $\Omega a \rightarrow \infty$ resulta que solo ciertas energías son permitidas, aquellas con $k = n\pi/a$ y que determinan un espectro discreto de energías que corresponde al caso del electrón en un pozo de potencial infinito.

Para el caso intermedio (*i.e.* $0 < \Omega a < \infty$) la ecuación (3.9) tiene que evaluarse para el valor específico de Ωa . Por ejemplo, el cálculo de las bandas de energías permitidas y prohibidas para $ka > 0$ y con $\Omega a = 4,0$ (también utilizado en la Ref. [44]), tomando en cuenta la condición establecida en la ecuación (3.9), permite obtener las siguientes primeras bandas de energía:

$$\begin{aligned} 2,16 &\leq ka \leq \pi && (1er. \text{ banda}) \\ 4,58 &\leq ka \leq 2\pi && (2da. \text{ banda}) \\ 7,29 &\leq ka \leq 3\pi && (3er. \text{ banda}) \\ 10,18 &\leq ka \leq 4\pi && (4ta. \text{ banda}) \end{aligned} \quad (3.10)$$

En la figura 3.2 se puede observar el correspondiente espectro de energías donde se evidencia claramente que no todo valor de energía está permitido. Asimismo, se observa la disposición simétrica de los valores permitidos de ka respecto al origen de coordenadas.

Retomando la ecuación (3.8) se observa que para un k dado es posible expresar un coeficiente en función del otro, como por ejemplo:

$$B = A \frac{\operatorname{sen} ka}{e^{iqa} - \cos ka} \quad (3.11)$$

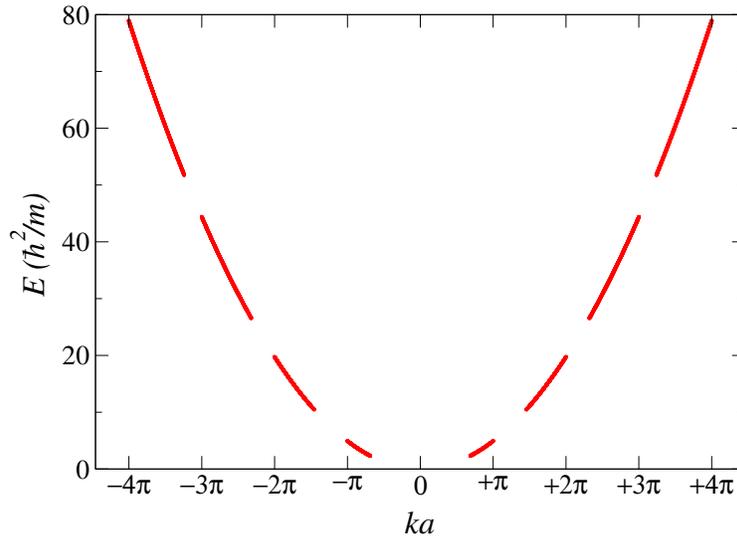


Figura 3.2: Distribución de las energías permitidas y prohibidas (E) en función del número de onda adimensional (ka) para $\Omega = 4,0 \text{ \AA}^{-1}$ y $a = 1,0 \text{ \AA}$.

Esto permite expresar la densidad de probabilidad (ecuación (3.4)) únicamente en función del coeficiente A . Para determinar completamente la eigenfunción correspondiente (excepto por un factor de fase) procederemos a su normalización en el intervalo $0 < x < a$, obteniéndose lo siguiente:

$$\frac{1}{a|A|^2} = \frac{(ka + \text{sen } ka \cos ka) \text{sen}^2 ka}{2ka(1 - 2 \cos qa \cos ka + \cos^2 ka)} + \frac{2(\cos qa - \cos ka)(1 - \cos 2ka) \text{sen } ka}{4ka(1 - 2 \cos qa \cos ka + \cos^2 ka)} + \frac{ka - \text{sen } ka \cos ka}{2ka} \quad (3.12)$$

Puesto que ya se tiene la función de densidad de probabilidad electrónica $\rho(x)$ y tomando en cuenta que su estado corresponde a una variable continua, se puede realizar el cálculo de la entropía de Shannon (H), el desequilibrio (D) y la medida estadística de complejidad (C), para lo cual se tomará en cuenta las reformulaciones presentadas en la sección 2.2.2.

En la figura 3.3 se muestran los resultados obtenidos para H , D y C correspondientes al MKPP tomando en cuenta el teorema de Bloch y la normalización en la celda $0 < x < a$. Tanto H como D y C conservan la estructura de bandas electrónicas característica de los sólidos periódicos y que típicamente se puede observar en el espectro de energía (véase figura 3.2). Aunque los valores de dichas cantidades para el inicio y borde muestran diferencias notorias en las primeras bandas, tal diferencia desaparece para las bandas superiores (aproximadamente a partir de la quinta banda).

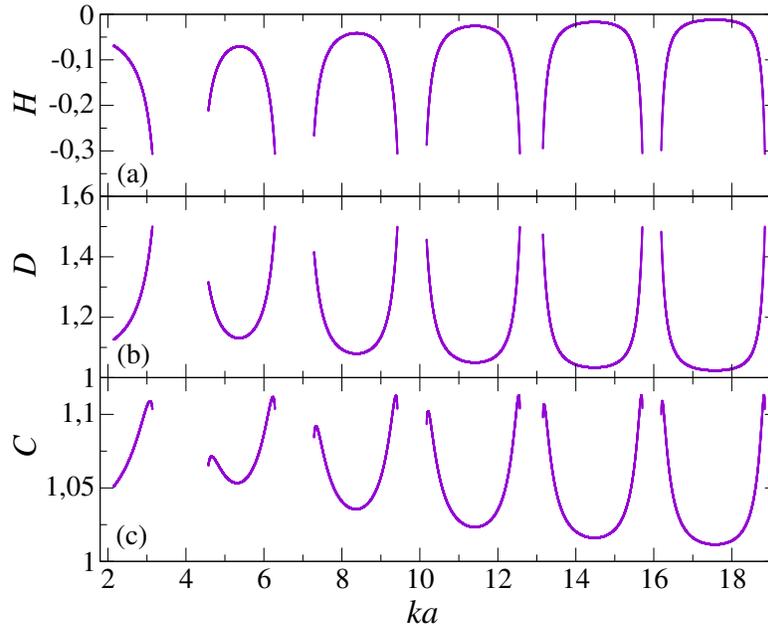


Figura 3.3: (a) Entropía de Shannon, (b) disequilibrio y (c) complejidad, en función del número de onda adimensional. El cálculo de las eigenfunciones se realizó mediante el teorema de Bloch considerando $\Omega = 4,0 \text{ \AA}^{-1}$ y $a = 1,0 \text{ \AA}$.

También se observa en 3.3-(c) que, en cada banda, los estados electrónicos del centro están caracterizados por tener complejidad mínima. Al respecto Sañudo *et al.* [45] plantea que puesto que la alta conductividad se presenta en materiales cristalinos con su banda semillena, en dichos materiales los estados electrónicos más energéticos estarían caracterizados por presentar complejidad mínima. Este sería el caso que se presenta en materiales reales como los metales alcalinos (Li, Na, K, Rb, Cs) que tienen su banda de conducción semillena [46].

Lo realizado hasta el momento corresponde al cálculo de la medida estadística de complejidad C para el caso del electrón cuya interacción con el conjunto de átomos del sólido cristalino es de tipo periódico. Este tipo de potenciales se fundamenta en la periodicidad intrínseca de los materiales cristalinos. Sin embargo, en la naturaleza no solo se presentan materiales cristalinos sino también materiales amorfos y cuasicristales. Dado que en estos últimos se tiene una estructura aperiódica, la solución mediante funciones tipo Bloch ya no es viable. Surge entonces la necesidad de encontrar procedimientos alternativos, analíticos o numéricos, que permitan determinar los estados electrónicos para potenciales no periódicos y que en el límite periódico reproduzcan los resultados conocidos. Justamente a continuación veremos que tal metodología existe y además de ser sencilla de implementar computacionalmente resulta extensible a estructuras desordenadas.

3.2. Método de la matriz de transferencia

Como se vió en la sección anterior, el cálculo de la complejidad requiere determinar la función electrónica y ello fue posible mediante la aplicación del teorema de Bloch. Sin embargo este tipo de soluciones son propias de potenciales periódicos que pierden validez en el caso de estructuras con desorden que es lo que se propone abordar en el presente trabajo. Esto conlleva al desarrollo de procedimientos alternativos que aprovechan la capacidad de cálculo computacional del cual se dispone. Uno de estos procedimientos de amplio uso en el estudio de la propagación de partículas cuánticas es el método de la matriz de transferencia (MMT) [47]-[50]).

El MMT es una metodología de amplio uso en el estudio de la propagación unidimensional en materiales fotónicos y semiconductores. El método se fundamenta en la existencia de una matriz que permite la transferencia de la función de onda de una posición a otra.

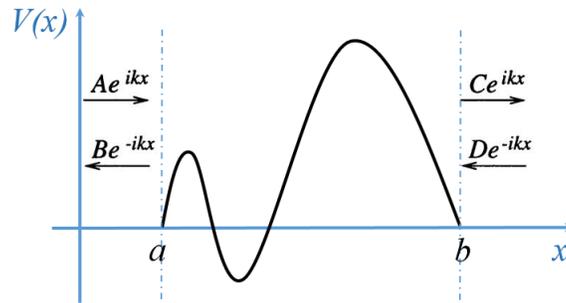


Figura 3.4: Potencial acotado definido en el intervalo $a < x < b$ que representa la interacción de una partícula cuántica con un sistema finito.

Consideremos la propagación de una partícula no-relativista que viaja a lo largo del eje x y cuya interacción con un material viene caracterizado por un potencial localizado, real³ y acotado en cierta región del espacio (veáse figura 3.4).

El planteamiento físico-matemático más general de este caso requiere iniciar con la ecuación fundamental de la mecánica cuántica, es decir la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (ESDT):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x, t) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) \quad (3.13)$$

La teoría establece que siempre que el potencial sea real e independiente del tiempo, es posible expresar la función de onda como el producto de un factor espacial y otro temporal, *i.e.*

³El caso de potenciales complejos implicaría la posibilidad de creación o aniquilación (absorción) de partículas.

$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$ donde $\psi(x)$ es la eigenfunción que se obtiene al resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (ESIT)⁴ :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x) \quad (3.14)$$

Las solución de la ESIT en cada región del potencial considerado se puede expresar en función de ondas planas asociadas a la regiones externas y una función general correspondiente a la región interna, es decir como:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{+ikx} + Be^{-ikx} & x < a \\ \alpha f(x) + \beta g(x) & a < x < b \\ Ce^{+ikx} + De^{-ikx} & b < x \end{cases} \quad (3.15)$$

Puesto que el potencial es acotado (finito) debemos considerar la condición de continuidad de la eigenfunción y de su primera derivada en los puntos frontera del intervalo $a < x < b$. Al aplicar estas condiciones en el punto $x = a$ se obtiene un par de ecuaciones que relacionan A y B con α y β . Asimismo, al evaluar dichas condiciones en el punto $x = b$ se producen otro par de ecuaciones que relacionan α y β con C y D . Tomando en cuenta las cuatro relaciones anteriores y utilizando notación matricial se encuentra que existe una matriz M (relación (3.16)), denominada *matriz de transferencia* que relaciona las amplitudes de las ondas planas asociadas a las regiones externas al potencial.

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

con las siguientes propiedades:

$$\det(\mathbf{M}) = 1 \quad (3.17)$$

$$M_{11} = M_{22}^* \quad y \quad M_{12} = M_{21}^* \quad (3.18)$$

La propiedad expresada en la ecuación (3.17) se fundamenta en la invarianza temporal de la ESDT y la indicada en la ecuación (3.18) proviene de la conservación de la corriente de probabilidad (para mayores detalles mire apéndice A).

⁴Matemáticamente esta ecuación corresponde a un problema del valor propio.

Con la finalidad de verificar estas propiedades y de aplicar la metodología de la matriz de transferencia se procederá a resolver el caso de la propagación del electrón en un potencial de interacción representado como una cadena de finita de potenciales tipo delta.

3.3. Cálculo de la complejidad mediante el método de la matriz de transferencia

Sea un electrón que incide en un material estructuralmente ordenado y cuya interacción se puede representar por un potencial periódico 1D ubicado a lo largo del eje x . Consideremos además que dicha interacción viene dada específicamente por el siguiente potencial:

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{m} \Omega \sum_{j=1}^n \delta(x - ja) \tag{3.19}$$

Es importante destacar que a diferencia del caso periódico en donde el teorema de Bloch permitía estudiar el potencial *ad infinitum*, para el enfoque del MMT estudiaremos solo una región finita ($0 < x < na$) correspondiente a n celdas, cada celda formada por un potencial delta y un potencial nulo (veáse figura 3.5). Se espera que para $n \rightarrow \infty$ se reproduzcan los resultados obtenidos en la sección 3.1.

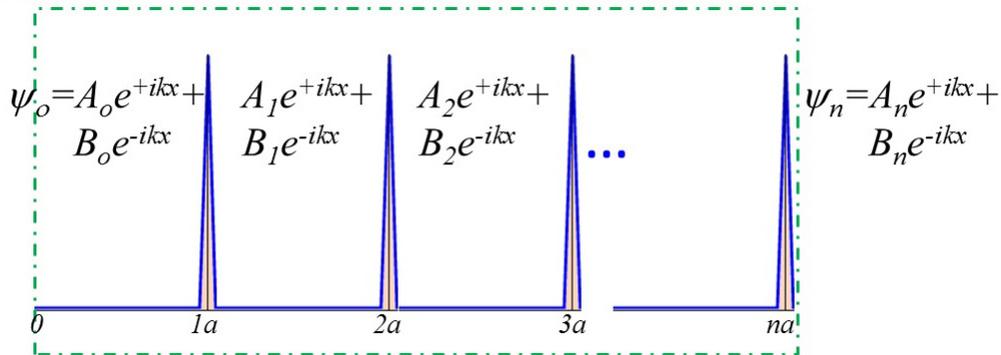


Figura 3.5: Representación del potencial de interacción y de las eigenfunciones correspondientes al intervalo de interes de longitud $L = na$.

Como se ha visto en la sección anterior, el MMT establece una correspondencia entre las amplitudes (A_n, B_n) y (A_o, B_o) a través de una matriz de transferencia que en este caso viene a ser una matriz de transferencia global (\mathbf{P}) , pues corresponde a una *super-celda* conformada por n celdas, de manera que $\mathbf{P} = \mathbf{M}_n \dots \mathbf{M}_2 \cdot \mathbf{M}_1$, es decir:

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \mathbf{P} \begin{pmatrix} A_o \\ B_o \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

Sin embargo, debido a que las n celdas son idénticas $\mathbf{P} = \mathbf{M}^n$ donde $\mathbf{M} = \mathbf{M}_a \cdot \mathbf{M}_\delta$ [50] con \mathbf{M}_a la matriz de transferencia correspondiente al potencial nulo y \mathbf{M}_δ asociada al potencial delta, tal que:

$$\mathbf{M}_a = \begin{pmatrix} e^{+ika} & 0 \\ 0 & e^{-ika} \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

$$\mathbf{M}_\delta = \begin{pmatrix} (1 - i\omega) & -i\omega \\ +i\omega & (1 + i\omega) \end{pmatrix} \quad (3.22)$$

donde se ha considerado $\omega = \Omega/k$ (mire apéndice B para mayores detalles).

Tomando en cuenta las matrices de las ecuaciones (3.21) y (3.22) (e incluso su producto \mathbf{M}_j) se puede comprobar con facilidad las propiedades dadas en las ecuaciones (3.17) y (3.18). Es interesante notar que realizar el cálculo de \mathbf{P} resulta una tarea sencilla computacionalmente pues implica realizar el producto de matrices para un a , k y Ω dados. Para los cálculos se tomará en cuenta lo siguiente: $a = 1,0 \text{ \AA}$ (longitud de referencia) y $\Omega = 4,0 \text{ \AA}^{-1}$ tal que $\Omega a = 4,0$ (adimensional).

Debido a la característica periódica del potencial, se puede plantear a continuación, la condición de frontera de Born-von Karman que establece que la eigenfunción electrónica $\psi_n(x)$ al cabo de n celdas vuelve a ser la eigenfunción inicial $\psi_o(x)$ [50], lo cual conlleva a lo siguiente:

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_o \\ B_o \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} A_o \\ B_o \end{pmatrix} = \mathbf{P} \begin{pmatrix} A_o \\ B_o \end{pmatrix} \quad (3.23)$$

Esta última relación genera como resultado que $\mathbf{P}=\mathbf{1}$, lo cual se cumple solo si los valores propios de \mathbf{M} tienen la forma $\lambda_{+,-} = \exp(\pm 2\pi im/n)$ (donde $m = 0, 1, \dots, n-1$) y puesto que la *traza*(\mathbf{M}) debe ser igual a la traza de la forma diagonalizada de \mathbf{M} , se tiene que $|\text{traza}(\mathbf{M})/2| \leq 1$, que establece una condición para las energías permitidas.

Sin embargo, la solución mas general de la ecuación (3.20) se obtiene al plantear el problema de valor propio, de manera que:

$$\lambda \begin{pmatrix} A_o \\ B_o \end{pmatrix} = \mathbf{P} \begin{pmatrix} A_o \\ B_o \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

Cabe mencionar que cuando $\lambda = 1$ se tiene el caso especial expresado en la ecuación (3.23). Por lo tanto la ecuación (3.24) es el planteamiento mas general.

La solución de la ecuación (3.24) nos conduce a dos relaciones importantes:

(1) La primera se obtiene de la condición de no trivialidad de soluciones (*i.e.* $A_o, B_o \neq 0$), por lo que se considera que $\det(\mathbf{P} - \lambda\mathbf{I}) = 0$, de donde se obtiene:

$$\lambda = s \pm \sqrt{s^2 - 1} \quad (3.25)$$

con $s \equiv \frac{1}{2}(P_{11} + P_{22})$ y se ha aplicado $\det(\mathbf{P}) = 1$. Tomando en cuenta la conservación de la corriente de probabilidad encontramos otra restricción para λ :

$$\begin{aligned} |A_n|^2 - |B_n|^2 &= |A_o|^2 - |B_o|^2 \\ \rightarrow |\lambda|^2(|A_o|^2 - |B_o|^2) &= |A_o|^2 - |B_o|^2 \end{aligned} \quad (3.26)$$

Esto implica que $|\lambda|^2 = 1$ cuyas soluciones son: $\lambda_+ = e^{i\theta}$ y $\lambda_- = e^{-i\theta}$, por lo cual se deduce que λ debe tener la forma de un número complejo. Tomando en cuenta ello en la ecuación (3.25) concluimos que:

$$s^2 \leq 1 \quad (3.27)$$

Esta relación es muy importante pues restringe los valores admisibles de s . Recordando que s es función de los elementos de la matriz de transferencia global \mathbf{P} y estos a su vez dependen del valor de k , la ecuación (3.27) impone una restricción sobre los valores permitidos de k . Es decir, viene a ser el equivalente de la relación de dispersión electrónica obtenida en la ecuación (3.9) y que da cuenta de la estructura de bandas electrónica.

(2) Por otro lado, la comparación de las ecuaciones (3.20) y (3.24) permite expresar un coeficiente en función del otro ⁵:

$$B_n = A_n \frac{\lambda_+ - P_{11}}{P_{12}} \rightarrow B_n = uA_n \quad (3.28)$$

Tomando en cuenta que $\psi_n(x) = A_n e^{+ikx} + B_n e^{-ikx}$, obtenemos:

$$\rho_n(x) = |A_n|^2 [1 + u e^{-i2kx} + u^* e^{+i2kx} + |u|^2] \quad (3.29)$$

Lo que queda por realizar es la normalización de la eigenfunción electrónica. Sin embargo esto no es una cuestión trivial pues nos encontramos con el *problema* de la normalización de

⁵La comparación indicada permite obtener un par de relaciones que al ser equivalentes hace posible la utilización de cualquier de ellas.

una onda plana la cual sabemos representa al electrón extendido en todo el espacio ($-\infty < x < +\infty$). Este problema se puede resolver recordando que el intervalo de normalización es arbitrario [51] y podemos elegir por conveniencia realizar la normalización en el intervalo $0 < x < na$. Considerando entonces que $\int_0^{na} \rho_n(x) dx = 1$ obtenemos una relación en función de parámetros que permiten determinar la amplitud A_n . Explícitamente esta relación es expresable como:

$$\frac{1}{|A_n|^2} = na(1 + |u|^2) + \frac{i(u - u^*)}{2k}(\cos 2kna - 1) + \frac{(u + u^*)}{2k} \sin 2kna \quad (3.30)$$

Habiendo determinado completamente la eigenfunción electrónica (salvo un factor de fase) tenemos lo necesario para calcular H , D y C .

Normalización en $\langle 0, a \rangle$

Tomando en cuenta la misma región de normalización utilizada en el cálculo de la complejidad basado en el teorema de Bloch (intervalo $0 < x < a$) se han obtenido los comportamientos de H , D y C mostrados en la figura 3.6. Como se puede verificar, mediante la comparación con la figura 3.3 y con lo obtenido en la Ref. [45], los resultados del cálculo utilizando la metodología de la matriz de transferencia proveen resultados óptimos que se traducen en resultados similares a los de la metodología basada en eigenfunciones tipo Bloch.

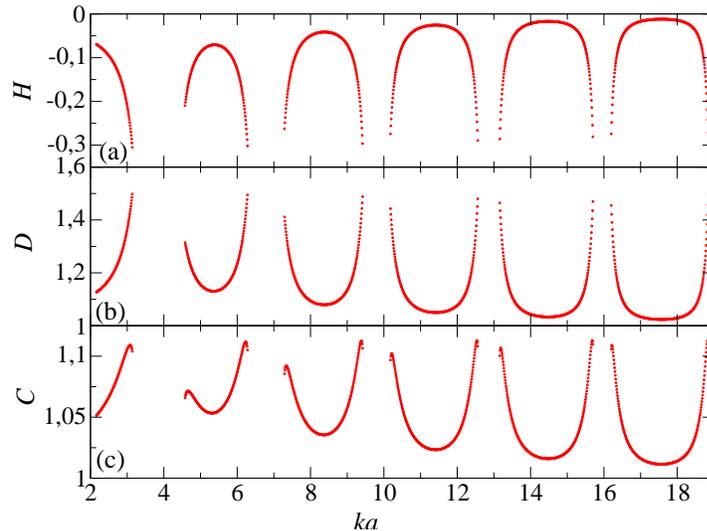


Figura 3.6: (a) Entropía de Shannon, (b) disequilibrio y (c) complejidad, en función del número de onda adimensional. El cálculo de las eigenfunciones se realizó utilizando el método de la matriz de transferencia para $\Omega = 4,0 \text{ \AA}^{-1}$, $a = 1,0 \text{ \AA}$ y normalizando en el intervalo $\langle 0, a \rangle$.

Normalización en $\langle 0, 100a \rangle$

Una inquietud inmediata es la evaluación de los efectos sobre los resultados que se generan en caso de la ampliación del intervalo de normalización con miras al estudio del sistema con desorden, pues tal región debe ser representativa del desorden en la cadena finita de potenciales. Realizando la ampliación del intervalo de normalización al intervalo $\langle 0 < x < 100a \rangle$ se ha obtenido los resultados mostrados en la figura 3.7.

Se observa que este cambio genera curvas de H , D y C simétricas en torno al centro de cada banda permitida, de modo que tanto el inicio como final de la banda alcanzan los mismos valores para cada cantidad calculada. La ampliación del intervalo de normalización reproduce en gran medida el comportamiento obtenido mediante las funciones tipo Bloch del MKPP. Para el caso específico del modelo de sólido cristalino considerado, se podría indicar que un sólido con una banda casi vacía (muy pocos estados electrónicos disponibles ocupados) o casi llena (la mayoría de sus estados electrónicos disponibles ocupados), está caracterizado por tener a sus electrones más energéticos con una alta complejidad.

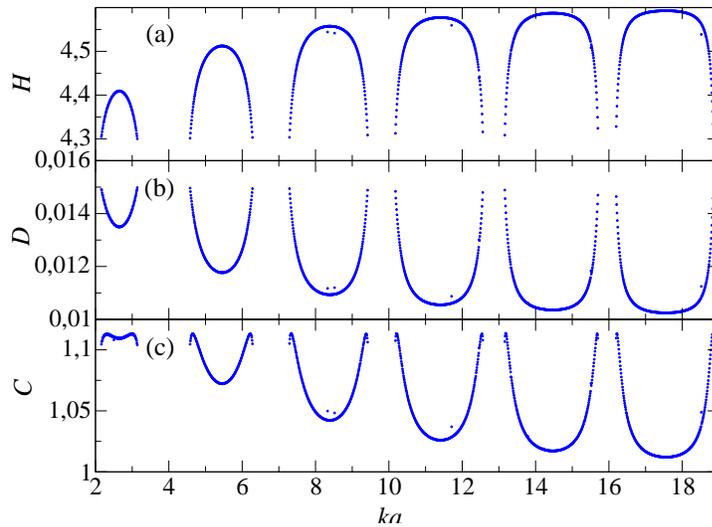


Figura 3.7: (a) Entropía de Shannon, (b) Desequilibrio y (c) Complejidad, en función del número de onda adimensional. El cálculo de las eigenfunciones se realizó utilizando el método de la matriz de transferencia para $\Omega = 4,0 \text{ \AA}^{-1}$, $a = 1,0 \text{ \AA}$ y normalizando en el intervalo $\langle 0, 100a \rangle$.

3.4. Conductancia mediante el método de la matriz de transferencia

Otra propiedad importante que resulta viable de estudiar mediante el MMT es el de la conductancia (G) en el MKPP. Esto lo podemos realizar considerando el formalismo de Landauer-Büttiker [52], [53] que establece que:

$$G = G_o T \quad (3.31)$$

con $G_o = 2e^2/h$ el quantum de conductancia y T representa el coeficiente de transmisión electrónica (e es el valor de la carga del electrón y el factor 2 indica la degeneración del spin).

Con la finalidad de estudiar la transmisión electrónica en el MKPP consideramos la región finita $0 < x < na$ y tomamos $B_n = 0$ (es decir, al final de la cadena no hay posibilidad de flujo reflejado), con lo cual planteamos lo siguiente:

$$\begin{pmatrix} A_n \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} \\ P_{21} & P_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_o \\ B_o \end{pmatrix} \quad (3.32)$$

Recordando que el coeficiente de transmisión se define como el la razón del flujo transmitido ($v_n |A_n|^2$) al flujo incidente ($v_o |A_o|^2$) y considerando las propiedades asociadas a \mathbf{P} , específicamente de unimodularidad (ecuación (3.17)) y de complejos conjugados de sus elementos (ecuación (3.18)) se puede deducir que $T = 1/|P_{22}|^2$ con lo cual, la conductancia se puede calcular como:

$$G = G_o \frac{1}{|P_{22}|^2} \quad (3.33)$$

El gráfico correspondiente de la conductancia para las seis primeras bandas electrónicas es mostrado en la figura 3.8. Aunque en la figura 3.8-(a) pareciera que se tiene conducción máxima para todo valor permitido en cada banda, una evaluación minuciosa (veáse figura 3.8-(b)) evidencia que tal situación solo ocurre para ciertos valores permitidos que corresponden a los estados con resonancia. Es más, la conductancia muestra un comportamiento oscilante alcanzando valores máximos conforme varía el valor de ka (y correspondientemente la energía) encontrándose además que en promedio la conducción es mayor para los estados electrónicos asociados a la región central de la banda que los correspondientes a los extremos de la misma.

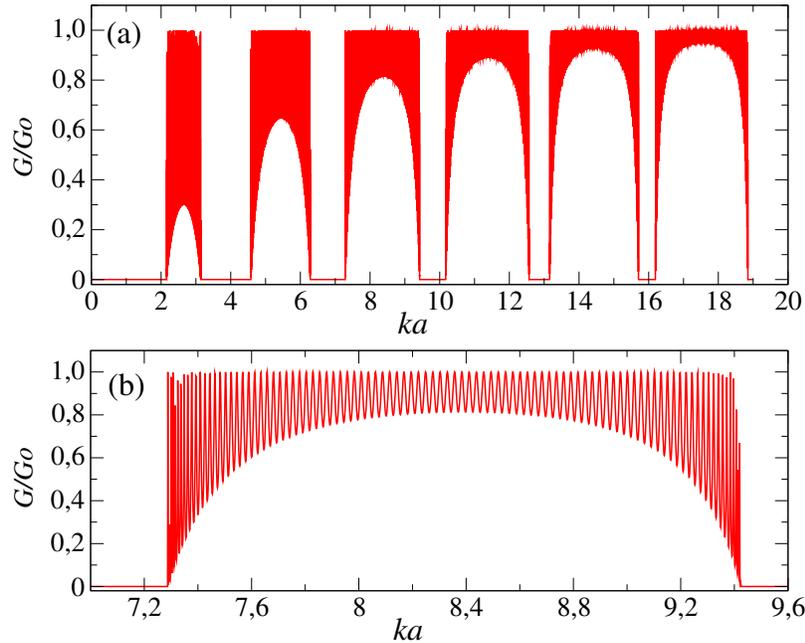


Figura 3.8: Conductancia normalizada en función del número de onda adimensional: (a) primeras seis bandas, (b) ampliación de la tercera banda. Cálculo realizado considerando $\Omega = 4,0 \text{ \AA}^{-1}$, $a = 1,0 \text{ \AA}$ y $n = 100$.

3.5. Conclusiones del capítulo

De lo analizado en las secciones anteriores se puede establecer lo siguiente:

- Tanto el cálculo de complejidad utilizando la metodología de las eigenfunciones tipo Bloch como el MMT, correspondiente al intervalo de normalización $0 < x < a$, proveen resultados similares. Esto se puede verificar mediante una comparación directa de los espectros de complejidad mostrados en las figuras 3.3 y 3.6.
- La extensión del intervalo de normalización a $0 < x < 100a$ utilizando la MMT muestra una variación notoria en relación a la complejidad de los estados electrónicos en los bordes de las bandas obtenidas mediante las eigenfunciones tipo Bloch.
- Cabe destacar que, así como el espectro de conducción (figura 3.8) pone de manifiesto la estructura de bandas electrónica, el espectro de complejidad (figura 3.7) conserva dicha característica del transporte electrónico en sistemas cristalinos. Es decir, el espectro de complejidad constituye una representación complementaria de las bandas electrónicas.

- La comparación de los espectros de complejidad (figura 3.7) y de la conducción (figura 3.8) permite establecer que los estados electrónicos correspondientes a los extremos de una banda y que muestran una baja conducción tienen una complejidad máxima. Por el contrario los estados electrónicos asociados a la región central y de alta conducción tienen complejidad mínima. Esto caracterizaría a los electrones de las regiones centrales con complejidad mínima y a los de los bordes con complejidad máxima dentro del modelo de Kronig-Penney.

Capítulo 4

Complejidad en el modelo de Kronig-Penney con desorden estructural

El estudio realizado de la complejidad en el MKPP, aunque básico como estudio inicial, resulta importante tomando en cuenta que el avance actual de la tecnología permite la fabricación de estructuras periódicas, como es el caso de las superredes semiconductoras (SL) [54]-[56]. Sin embargo, como en todo proceso de manufactura, el sistema no está libre de imperfecciones que van a dar origen a defectos en su estructura como en su composición.

En esta parte del trabajo se abordará los efectos que, sobre las propiedades de transporte electrónico y su complejidad, produce la incorporación de desorden en nuestro sistema inicialmente periódico, es decir se realizará el estudio del modelo de Kronig-Penney con desorden (MKPD).

4.1. Tipos de desorden

En general, se distinguen los siguientes tipos de desorden:

- Un sistema tiene *desorden estructural* (o posicional) cuando carece de orden de largo alcance (aunque puede tener orden de corto alcance). En dicho caso la disposición de sus constituyentes no está asociado a alguna red de Bravais que sí es típico de los sistemas cristalinos. Como ejemplo de tales sistemas tenemos al vidrio (SiO_2).
- Un sistema presenta *desorden químico* (composicional o sustitucional) si la distribución de los tipos de elementos constituyentes es aleatoria, a pesar de tener asociada una red de Bravais (y por consiguiente simetría traslacional). Un ejemplo específico lo constituye el cuarzo (SiO_2).

4.2. Complejidad en el modelo con inclusión de desorden

Con la finalidad de incorporar desorden de tipo estructural en el MKPP procederemos de la misma manera al indicado en la Ref. [50], la cual se explica a continuación. Se reubican los potenciales delta de manera que ya no se distribuyan de forma regular en las posiciones $x_j = j.a$, sino fuera de ellas. Esto se logrará ubicando a los potenciales conforme a la siguiente relación $x_j = j.a + a\epsilon$ (veáse figura 4.1) con $-W/4 < \epsilon < W/4$ donde ϵ es un número aleatorio que varía en el rango indicado y W es un parámetro adimensional que nos sirve para monitorear el *nivel de desorden*. Cuando $W = 0$ no hay desorden y es de esperar que los resultados se correspondan con los ya obtenidos en el MKPP del capítulo anterior. Con $W = 1$ tendremos el máximo desorden considerado en el presente estudio y los potenciales delta pueden ubicarse como máximo a un cuarto de distancia de la posición asociada al caso periódico. Es importante notar que las relaciones planteadas evitan solapamientos de potenciales y como máximo dos potenciales deltas contiguos solo pueden acercarse hasta una distancia de $a/2$.

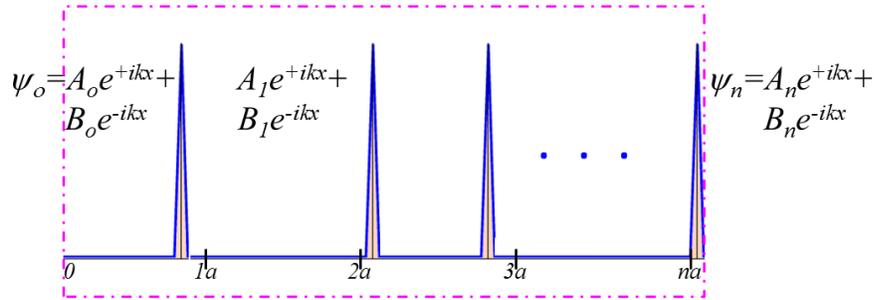


Figura 4.1: Representación de la super-celda en el modelo de Kronig-Penney con desorden estructural.

Aunque los potenciales han sido reubicados, la fenomenología de la propagación de la onda electrónica a través del sistema (ahora desordenado) es la misma, pues los mecanismos de reflexión y transmisión también estarán presentes. Es factible entonces considerar que al sistema llega una onda plana con amplitudes A_o, B_o que va sufrir multiples procesos de dispersión y luego de n potenciales va a resultar una onda con amplitudes A_n, B_n de forma que estas van a estar relacionadas por una nueva matriz de transferencia global \mathbf{P}' tal que:

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \mathbf{P}' \begin{pmatrix} A_o \\ B_o \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

con $\mathbf{P}' = \mathbf{M}'_n \dots \mathbf{M}'_2 \mathbf{M}'_1$. Es importante notar que las matrices \mathbf{M}'_j asociada a la celda j -ésima van a seguir correspondiendo al producto de una matriz representativa del potencial nulo y al de

un potencial delta, es decir $M'_j = M_\delta M'_a$. Considerando el caso particular de un potencial nulo de longitud $a + a.\epsilon$ es inmediato verificar que la matriz correspondiente a M'_a es de la siguiente forma:

$$M'_a = \begin{pmatrix} e^{+ik(a+a.\epsilon)} & 0 \\ 0 & e^{-ik(a+a.\epsilon)} \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

Esta matriz representativa del nuevo potencial nulo se puede expresar a su vez por el siguiente producto:

$$M'_a = \begin{pmatrix} e^{+ika} & 0 \\ 0 & e^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{+ika.\epsilon} & 0 \\ 0 & e^{-ika.\epsilon} \end{pmatrix} \rightarrow M'_a = M_a.M_\epsilon \quad (4.3)$$

De lo anterior se deduce que la matriz correspondiente a la celda j -ésima vendrá dada por: $M'_j = M_\delta M_a M_\epsilon$, lo cual resulta conveniente pues el cálculo se basa nuevamente en el producto de matrices; es más, al procedimiento realizado en el sistema periódico adicionamos una matriz que contempla la reubicación del potencial delta y da cuenta del desorden estructural introducido en el MKPP. Con la finalidad de que el cálculo de la complejidad estadística y conducción electrónica sean representativos del desorden estructural incorporado en el MKPP, es necesario tomar varias *muestras* del sistema desordenado. Esto se logra realizando diferentes ensayos y obteniendo valores promedios sobre la población de muestras.

Como se discutió en la sección 3.3 correspondiente al MKPP, la solución más general de la ecuación (4.1) se obtiene al plantear el problema del valor propio, es decir:

$$\lambda \begin{pmatrix} A_o \\ B_o \end{pmatrix} = \mathbf{P}' \begin{pmatrix} A_o \\ B_o \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

Recordando que el $\det(\mathbf{P}')$ se puede obtener como el producto de los determinantes de las $3n$ matrices, se puede comprobar que $\det(\mathbf{P}') = 1$. Tomando en cuenta la unimodularidad de \mathbf{P}' y la condición de no trivialidad de soluciones se tiene que:

$$\lambda = s \pm \sqrt{s^2 - 1} \quad (4.5)$$

con $s \equiv \frac{1}{2}(P'_{11} + P'_{22})$. Considerando además la conservación de la corriente de probabilidad, se consigue una condición sobre las energías permitidas:

$$s^2 \leq 1 \quad (4.6)$$

Por otro lado, de las ecuaciones (4.1) y (4.4) se puede establecer la siguiente relación entre coeficientes:

$$B_n = A_n \frac{\lambda_+ - P'_{11}}{P'_{12}} \rightarrow B_n = u' A_n \quad (4.7)$$

Considerando la normalización de la eigenfunción electrónica en el intervalo $0 < x < na$ se deduce que:

$$\frac{1}{|A_n|^2} = na(1 + |u|^2) + \frac{i(u - u^*)}{2k}(\cos 2kna - 1) + \frac{(u + u^*)}{2k} \sin 2kna \quad (4.8)$$

Habiendo determinado la función de onda electrónica correspondiente al MKPD podemos obtener la densidad de probabilidad y por consiguiente calcular H , D y C .

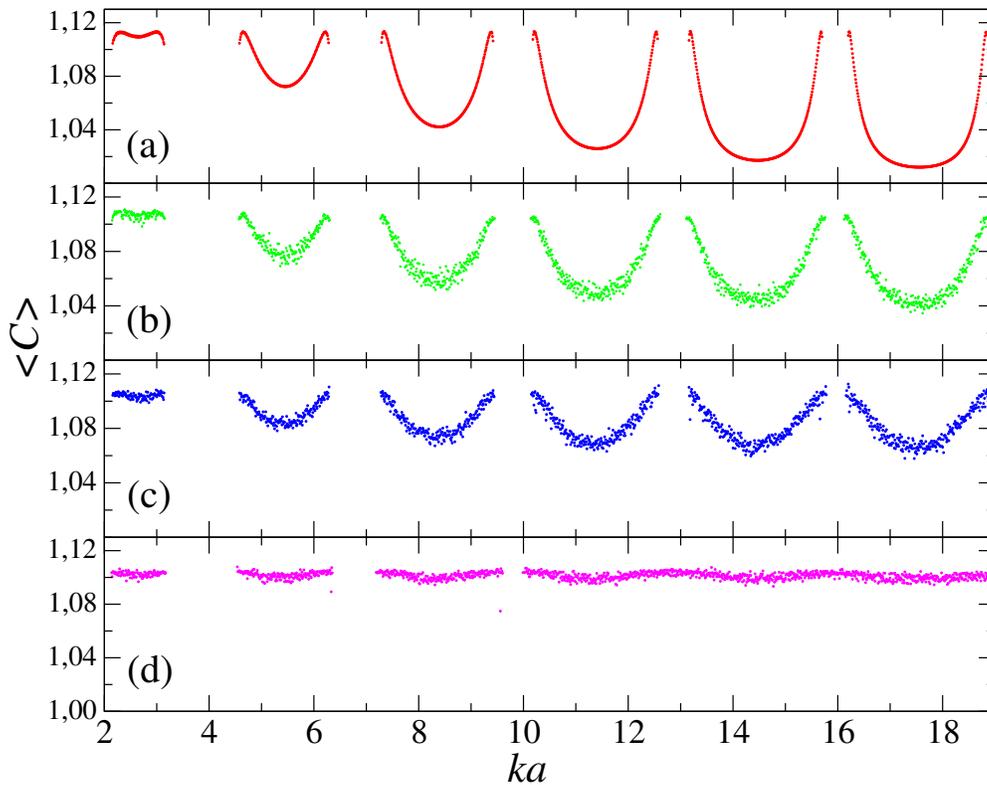


Figura 4.2: Complejidad en función del número de onda adimensional para diferentes niveles de desorden: (a) $W = 0,0005$, (b) $W = 0,05$, (c) $W = 0,10$, (d) $W = 0,30$. El promedio se ha realizado con 100 configuraciones diferentes y considerando: $\Omega = 4,0 \text{ \AA}^{-1}$, $a = 1,0 \text{ \AA}$ y $n = 100$.

Como se puede observar en la figura 4.2-(a), cuando el nivel de desorden es prácticamente

nulo ($W \sim 0$), el comportamiento de C se corresponde bastante bien a lo obtenido para el caso del MKPP (véase figura 3.7). Esto indica que el procedimiento extendido del caso desordenado incorpora de manera adecuada el caso especial ya estudiado del caso periódico.

También se observa que a medida que el nivel de desorden aumenta (casos (b), (c) y (d)) el espectro de complejidad electrónica se torna más difuso y el mínimo de complejidad característico de cada banda del caso periódico desaparece; es decir, la complejidad de los estados electrónicos en cada banda tienden a igualarse. Por otro lado, el incremento del nivel de desorden genera la aparición de estados adicionales en las bandas de mayor energía, indicando que se tiene mayor cantidad de estados disponibles, resultado ya reportados por Gómez *et al.* en la Ref. [57].

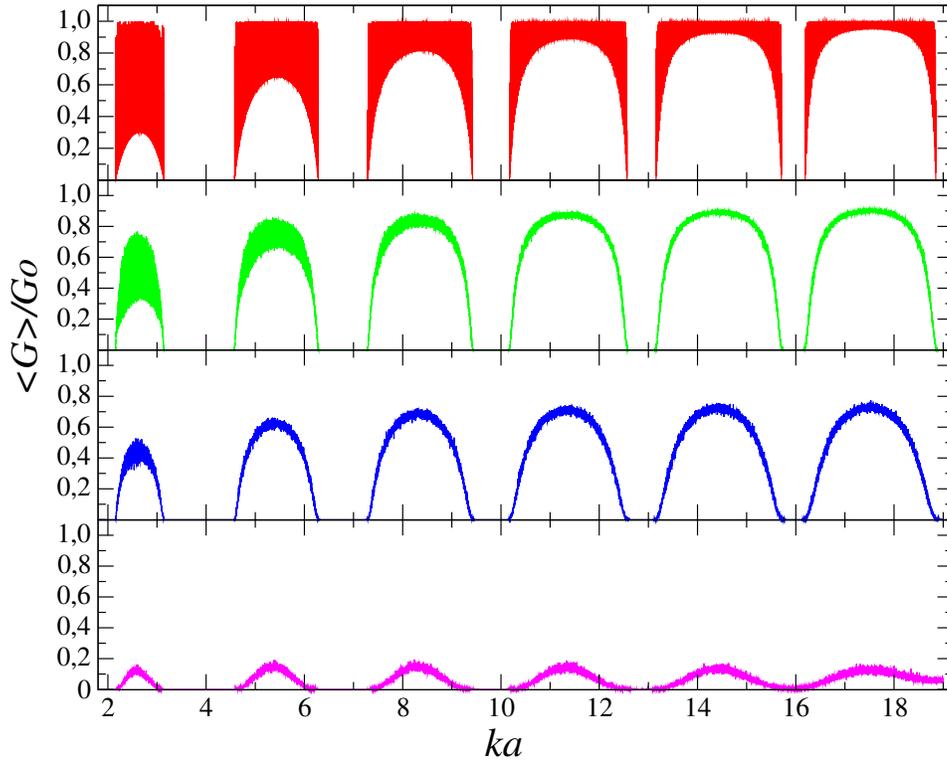


Figura 4.3: Conductancia relativa en función del número de onda adimensional para diferentes niveles de desorden: $W = 0,0005$ (rojo), $W = 0,05$ (verde), $W = 0,10$ (azul), $W = 0,30$ (cian). El promedio se ha realizado con 100 configuraciones diferentes y considerando: $\Omega = 4,0 \text{ \AA}^{-1}$, $a = 1,0 \text{ \AA}$ y $n = 100$.

El estudio del espectro de conducción en función del número de onda adimensional que se muestra en la figura 4.3 permite establecer una correspondencia entre la conducción y la

complejidad C . Claramente se observa que los mínimos de conducción corresponden a los bordes de las bandas; a su vez se observa que en los bordes se presenta complejidad máxima. Esta correspondencia no se ve alterada conforme el nivel de desorden aumenta, al menos para los niveles de desorden estudiados. Sin embargo, sí tiene impacto sobre los estados electrónicos del centro de cada banda pues a medida que el desorden aumenta la conducción disminuye y el mínimo de complejidad desaparece.

La influencia del desorden tanto sobre la complejidad como sobre la conductancia puede evaluarse más detalladamente realizando el estudio en solo una banda de energía, como por ejemplo la banda-4. Tal como se observa en la figura 4.4 la tendencia previamente identificada se mantiene, es decir la complejidad de los estados electrónicos del centro de las bandas aumenta y la conductancia se reduce a medida que se incrementa el desorden.

Aunque de la gráfica de conducción (figura 4.4-(a)) pareciera que la banda de energía se reduce conforme se incrementa el desorden, el espectro de complejidad (figura 4.4-(b)) muestra con mayor claridad que ocurre todo lo contrario; es decir, la banda crece debido a la aparición de nuevos estados electrónicos en los bordes de las bandas.

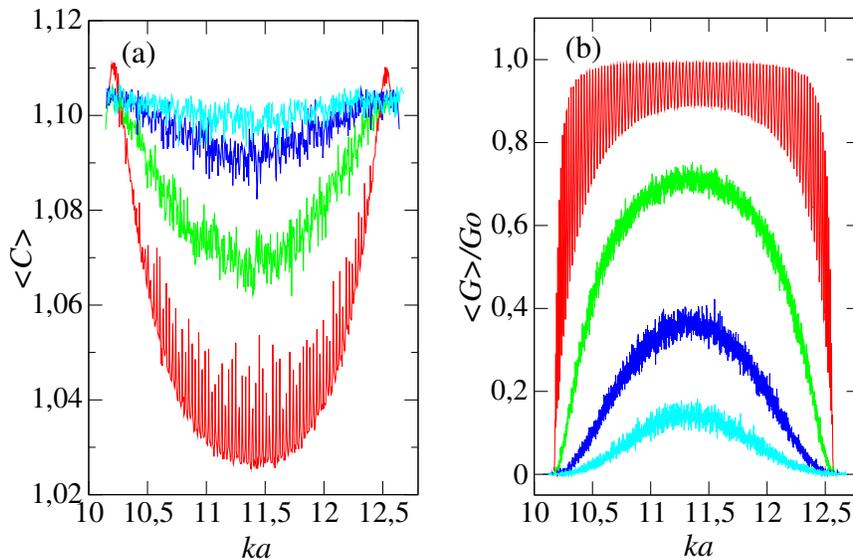


Figura 4.4: (a) Complejidad y (b) Conductancia normalizada en función del número de onda adimensional correspondiente a la banda 4 con: $W = 0,01$ (rojo), $W = 0,10$ (verde), $W = 0,20$ (azul), $W = 0,30$ (cian). El promedio se ha realizado con 100 configuraciones diferentes y considerando: $\Omega = 4,0 \text{ \AA}^{-1}$, $a = 1,0 \text{ \AA}$ y $n = 100$.

4.3. Conclusiones del capítulo

Del presente estudio se desprende lo siguiente:

- La incorporación de desorden estructural produce un incremento de la complejidad de la mayoría de estados electrónicos; es decir, los niveles de complejidad de los estados electrónicos tienden a igualarse.
- El transporte electrónico disminuye a medida que se incrementa el desorden. Esto se observa claramente al evaluar la conductancia como función del nivel del desorden.

Capítulo 5

Influencia del desorden sobre la complejidad de los estados electrónicos

Como se ha podido verificar en el capítulo anterior, la inclusión de desorden estructural produce un aumento en la complejidad de los estados electrónicos así como una reducción de la conductancia, además de propiciar la aparición de estados electrónicos en los bordes de las bandas. Estos comportamientos motivan la profundización en la relación entre la complejidad y la conductancia o, equivalentemente, con la resistencia en sistemas afectados con el tipo de desorden indicado. El estudio de la influencia del desorden sobre la resistencia en sistemas unidimensionales no es nuevo; sin embargo, en el presente estudio se indagará su posible relación con la medida estadística de complejidad propuesta por López-Ruiz *et al.*

A continuación, el estudio se centrará en los estados electrónicos del centro ($ka = 8,36$) y del borde ($ka = 9,42$) de la banda 3, como representativo de los efectos sobre cualquier otra banda. Los resultados mostrados en el presente capítulo se han realizado considerando los parámetros $\Omega = 4,00 \text{ \AA}^{-1}$ y $a = 1,00 \text{ \AA}$, con 100 configuraciones diferentes de $\{\epsilon\}$ para el cálculo de los valores promedio.

5.1. Efectos sobre la transmisión electrónica

Motivado por evidencia experimental en estudios con *dirty wires* a bajas temperaturas, R. Landauer propuso una relación entre el coeficiente de transmisión (T) y la resistencia eléctrica (R)¹ [52]:

$$R = T^{-1} - 1 \quad (5.1)$$

¹En esta formulación la resistencia viene a ser una cantidad adimensional.

El interés en las propiedades a cero grados Kelvin de estos sistemas radicaba en la hipótesis de que su resistencia debería incrementarse con el aumento de su longitud, de acuerdo a la siguiente relación:

$$R = e^{\alpha L} - 1 \quad (5.2)$$

con α denominada la *inversa de la longitud de localización*. Es importante indicar que debido a la representación que se ha asociado al electrón (por medio de ondas planas), tal denominación no es adecuada. En su lugar se considera $\alpha = 1/\xi$, con ξ como *longitud crítica*. Justamente esta longitud crítica permitirá distinguir el regimen de transporte electrónico de acuerdo a lo siguiente:

$$\begin{aligned} L \ll \xi & \quad \text{balístico} \\ L \gg \xi & \quad \text{no-balístico} \end{aligned} \quad (5.3)$$

Tomando en cuenta el planteamiento de R. Landauer, expresadas en las ecuaciones (5.1) y (5.2), es de esperar una relación del tipo:

$$\alpha \cdot L = -\ln(T) \quad (5.4)$$

Justamente, R. Ouasti *et al.* consideraron este tipo de relación para realizar estudios sobre propiedades de localización en cadenas unidimensionales con desorden de tipo químico [58]. En el presente estudio se utilizará la ecuación (5.4) (obtenida de las ecuaciones (5.1) y (5.2)) para profundizar en los efectos, tanto de la longitud finita como del desorden, sobre las propiedades de transporte electrónico que son caracterizadas a través del coeficiente de transmisión.

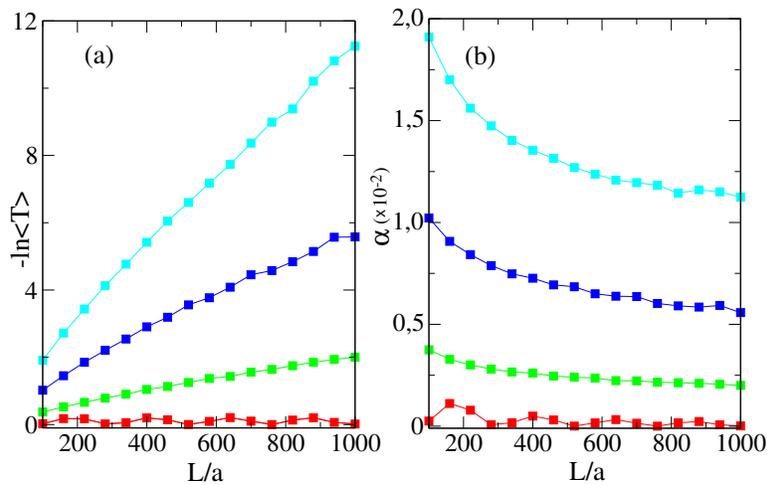


Figura 5.1: $-\ln\langle T \rangle$ y α vs L/a correspondiente al estado electrónico del centro de la banda-3 para diferentes niveles de desorden: $W = 0,00$ (rojo), $W = 0,10$ (verde), $W = 0,20$ (azul), $W = 0,30$ (cian).

Como se observa en la figura 5.1-(a), correspondiente al estado electrónico del centro de la banda-3, tanto el incremento de la longitud del sistema como del nivel de desorden producen la reducción del coeficiente de transmisión lo cual indica la disminución en las propiedades de transporte electrónico. Este comportamiento se podría verificar experimentalmente a través de medidas de la conductancia que, como se ha visto en una sección precedente (sección 3.4), es directamente proporcional al coeficiente de transmisión ². Asimismo, se verifica una relación aproximada de tipo lineal de $-\ln\langle T \rangle$ con L , la cual permite asociar a cada nivel de desorden una longitud crítica que discrimina el tipo de régimen de transporte electrónico, tal como se planteó mediante las relaciones (5.3). Por ejemplo, para el caso ordenado (periódico) $\xi \rightarrow \infty$ lo que indica que sin importar la longitud de la cadena el régimen de transporte es balístico.

Un estudio más en detalle de la constancia de $\alpha = 1/\xi$, *i.e.* de la longitud característica para un nivel de desorden dado, puede realizarse a partir de la figura 5.1-(b). Aquí se puede observar el comportamiento asintótico de $1/\xi$ y el orden de variación ($\approx 10^{-2}$) conforme se alcanza la longitud crítica. Más aún, se verifica que a mayor desorden y longitud, se produce una menor longitud crítica. Considerando justamente una dependencia del tipo $\alpha = \alpha(L)$ y que la pendiente c en la figura 5.1-(a) es aproximadamente constante, se puede plantear el siguiente modelo:

$$\frac{d(-\ln\langle T \rangle)}{dL} = c \quad (5.5)$$

con

$$\frac{d(-\ln\langle T \rangle)}{dL} = \alpha + \frac{d\alpha}{dL}L \quad (5.6)$$

Resolviendo las ecuaciones (5.5) y (5.6), con L_0 y α_0 valores iniciales para un nivel de desorden dado, se obtiene la siguiente expresión para la dependencia con la longitud de la cadena:

$$\alpha = c - \frac{(c - \alpha_0)}{L}L_0 \quad (5.7)$$

La ecuación (5.7) permite verificar que conforme la longitud de la cadena aumenta y para un nivel de desorden dado, la dependencia de α con la misma se hace despreciable, corroborando la tendencia de $\alpha = 1/\xi$ hacia un valor constante y por consiguiente hacia una longitud crítica definida.

²Esta proporcionalidad se hace evidente al considerar la formulación de la conductancia según Landauer-Büttiker.

La dependencia del coeficiente de transmisión con la longitud de la cadena para el estado electrónico del borde de la banda-3, mostrado en la figura 5.2-(a), también indica una reducción de las propiedades de transporte electrónico. Sin embargo, la relación de $-\ln\langle T \rangle$ con L para un nivel de desorden dado ya no corresponde a una de tipo lineal y el ritmo de reducción del coeficiente de transmisión con la longitud es mayor que el que se observó para el estado electrónico del centro de la banda. Adicionalmente, la dependencia de $\alpha = 1/\xi$ con L mostrada en la figura 5.2-(b), restringe la posibilidad de asociar una longitud crítica definida para un nivel de desorden dado. Todas estas características mencionadas conllevan a considerar que las propiedades de transporte electrónico correspondientes al estado del borde de la banda se ven afectados no solamente por el nivel de desorden y la longitud, sino también la influencia de la posición del estado en relación a la banda, y que se denomina *efecto del borde de la banda*.

Dado que el ritmo de reducción de las propiedades de transporte electrónico del estado del borde de la banda es mayor que para el estado electrónico del centro (veáse los ordenes de cambio de $-\ln\langle T \rangle$ en las figuras 5.1-(a) y 5.2-(a)), se puede afirmar que el efecto combinado de la longitud finita de la cadena y del desorden, resulta despreciable frente al efecto del borde de la banda.

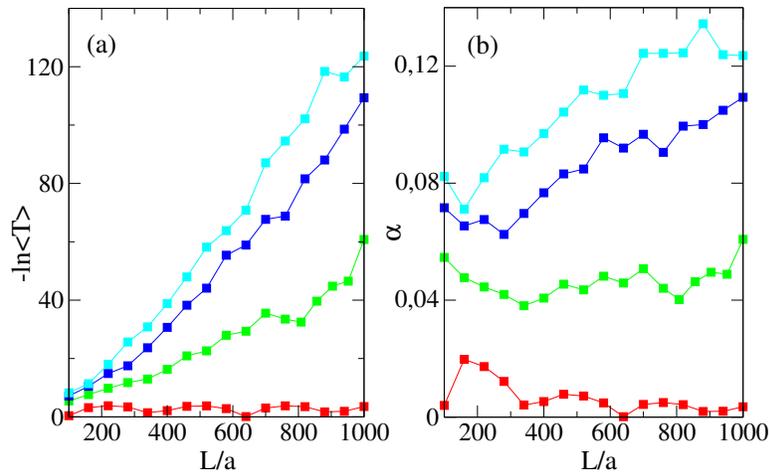


Figura 5.2: $-\ln\langle T \rangle$ y α vs L/a correspondiente al estado electrónico del borde de la banda 3 y para diferentes niveles de desorden: $W = 0,00$ (rojo), $W = 0,10$ (verde), $W = 0,20$ (azul), $W = 0,30$ (cian).

Como ya se ha comentado, las propiedades de transporte electrónico se ven afectadas por la longitud de la cadena, el nivel de desorden y el efecto del borde de la banda, siendo este último el de mayor influencia.

El estudio de la dependencia de $-\ln\langle T \rangle$ con el nivel de desorden para diferentes longitudes de la cadena, como el mostrado en la figura 5.3-(a), permite profundizar en el grado de influencia de los dos primeros factores sobre la reducción del coeficiente de transmisión para el estado electrónico del centro de la banda 3. Tal como se había visto en un análisis anterior, se verifica que la reducción en el coeficiente de transmisión electrónica, y por consiguiente en las propiedades de transporte, es mayor conforme la longitud del sistema aumenta para un nivel de desorden dado. Más aún, la comparación de las figuras 5.1-(a) y 5.3-(a) permite establecer que el efecto del nivel de desorden sobre la transmisión electrónica es mayor que el de la longitud de la cadena. Por otro lado, se observa también que para el sistema periódico e independientemente de la longitud de la cadena, al estado electrónico del centro de la banda le corresponde $T \sim 1$. Esto implica que dicho estado electrónico tiene una gran probabilidad de atravesar completamente la cadena de potenciales y, por consiguiente, dicho estado contribuye a las propiedades de transporte electrónico.

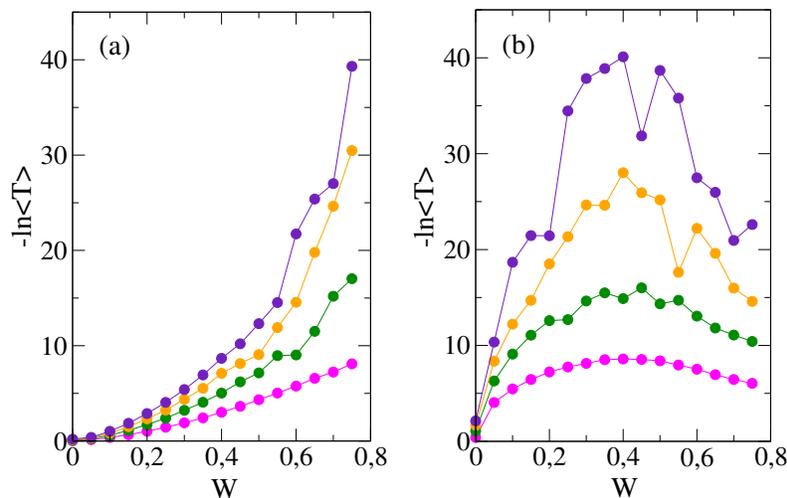


Figura 5.3: $-\ln\langle T \rangle$ vs W para los estados electrónicos de la banda 3: (a) centro y (b) borde. Las longitudes de la cadena corresponden a: $L/a = 100$ (magenta), $L/a = 200$ (verde), $L/a = 300$ (anaranjado), $L/a = 400$ (violeta).

El análisis correspondiente del estado electrónico del borde de la banda, mostrado en la figura 5.3-(b), indica un comportamiento global distinto a lo discutido previamente. Aunque todavía se observa, al menos para bajos niveles de desorden ($W < 0,40$), el efecto combinado de longitud finita y de desorden que se manifiesta en la reducción del coeficiente de transmisión, tal reducción va decayendo paulatinamente hasta que se alcanza un nivel de desorden umbral ($W \approx 0,40$). Para niveles de desorden mayores se observa que tanto el efecto de longitud finita como de desorden se han reducido apreciablemente. Otra característica importante de señalar, y que ha sido

reportado en la literatura, es que la incorporación del desorden conlleva a la aparición de estados electrónicos en las bandas inicialmente prohibidas, por lo que la noción de estado electrónico del *borde de la banda* va perdiendo significado. En nuestro caso, esto implicaría que a partir de un nivel de desorden $W \approx 0,4$ nuestro estado electrónico deja de ser el correspondiente al del borde de la banda.

5.2. Efectos sobre la complejidad de los estados electrónicos

La caracterización de los estados electrónicos mediante la medida estadística de complejidad requiere conocer la entropía y el desequilibrio. Este último constituye a su vez una cantidad importante en el fenómeno de localización electrónica por lo cual pasaremos a evaluar la influencia del desorden tanto en el desequilibrio como en la complejidad de los estados electrónicos.

5.2.1. Caracterización mediante el desequilibrio

En la sección precedente se determinó que el desorden, además de la longitud finita y el efecto del borde de la banda, reducen las propiedades de transporte electrónico. La eventual inhibición del transporte electrónico también puede explicarse mediante el fenómeno de localización electrónica, en cuyo caso el efecto del desorden conlleva a la localización espacial de la función de onda electrónica en una región limitada del espacio que ocupa el sistema, afectando las propiedades de transporte tal como fue planteado por P.W. Anderson a partir de una aproximación tipo *tight-binding*. Con dicho trabajo se inició una línea de investigación que se ha aplicado al estudio de una diversidad de sistemas de interés como sistemas amorfos, nanopartículas [59], etc.

Una de las cantidades utilizadas para caracterizar el fenómeno de localización electrónica es la razón de participación inversa (IPR) pues brinda información sobre la distribución espacial de la función de onda electrónica en el sistema en estudio (*e.g.* cadena de potenciales), de tal manera que valores pequeños ($IPR \rightarrow 0$) están asociados a estados electrónicos extendidos y valores grandes a estados localizados.

Aunque esta distinción entre estados extendidos y localizados no es aplicable al presente estudio, pues la representación que utilizamos del electrón es por medio de ondas planas (*i.e.* nuestros estados electrónicos son extendidos), resulta interesante ahondar en la información que esta cantidad nos puede proveer, sobretodo si se toma en consideración que la expresión del IPR coincide con la del *desequilibrio* (D), de manera que se cumple:

$$D = IPR = \int_{\Lambda} \rho(x)^2 dx \quad (5.8)$$

con Λ el volumen del sistema, que en nuestro caso está determinado por la longitud de la cadena ($L = Na \rightarrow \Lambda$). La evaluación de la ecuación (5.8) para el caso equiprobable, así como el comportamiento de la densidad de probabilidad electrónica para el centro y borde de la banda 3, nos permite plantear la siguiente relación: $D_{borde} > D_{centro} > D_{equi} = 1/Na$. Para un longitud de cadena dada, esto implicaría la posibilidad de asignar una *longitud efectiva* (l) para los estados electrónicos del centro y borde de la banda, tal que: $l_{equip} = Na > l_{centro} > l_{borde}$, por lo cual es posible plantear una expresión para D como función explícita de $L = Na$ de la siguiente forma:

$$D = \frac{1}{\gamma Na} \quad (5.9)$$

con $\gamma = 1$ para un estado caracterizado por una densidad equiprobable. Cabe mencionar que el estado electrónico correspondiente sería el de un electrón libre.

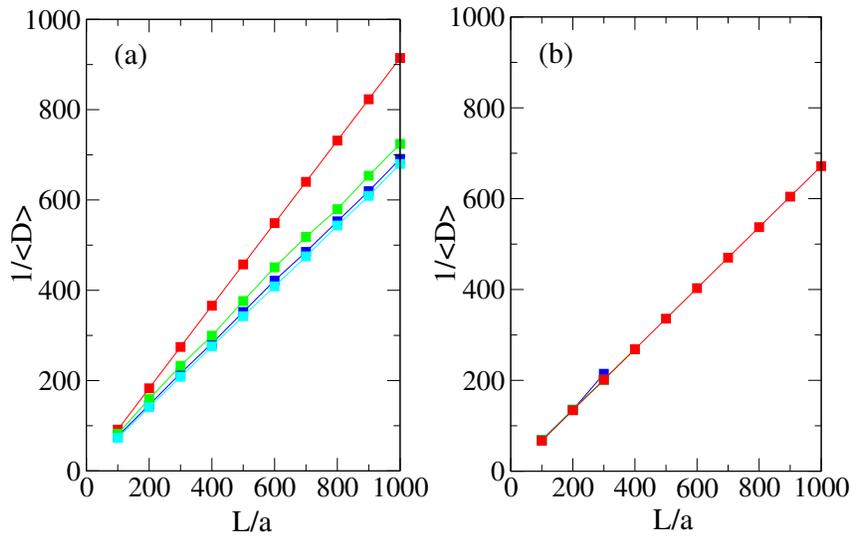


Figura 5.4: $1/\langle D \rangle$ en función de L/a para los estados electrónicos del: (a) centro y (b) borde, de la banda 3. Los niveles de desorden corresponden a: $W = 0,00$ (rojo), $W = 0,10$ (verde), $W = 0,20$ (azul), $W = 0,30$ (cian) para el: (a) centro, y (b) borde de la banda 3.

De la figura 5.4-(a) correspondiente al estado electrónico del centro de la banda 3, se observa que el coeficiente γ es independiente de la longitud para un nivel de desorden dado. También se puede verificar que para el caso periódico ($W = 0,0$) $\gamma \approx 0,81$, un valor cercano a 1. Este resultado se justifica al considerar las ligeras oscilaciones de su densidad electrónica alrededor

de la densidad equiprobable ($\rho(x) = 0,01$). El aumento inicial de desorden en el sistema produce una disminución del valor de γ que eventualmente alcanza un valor mínimo de $\gamma \approx 0,61$ para un nivel de desorden de $W = 0,30$.

El análisis del estado electrónico del borde de la banda, mostrado en la figura 5.4-(b), evidencia que no importando el nivel de desorden, e incluso para el caso periódico, se tiene $\gamma \approx 0,60$, que se corresponde bastante bien con el valor alcanzado para el estado electrónico del centro de la banda para niveles de desorden altos. Esta correspondencia confirma lo encontrado en la sección anterior donde se concluyó que el efecto de borde de banda es mucho mayor que el del desorden y de la longitud finita de la cadena.

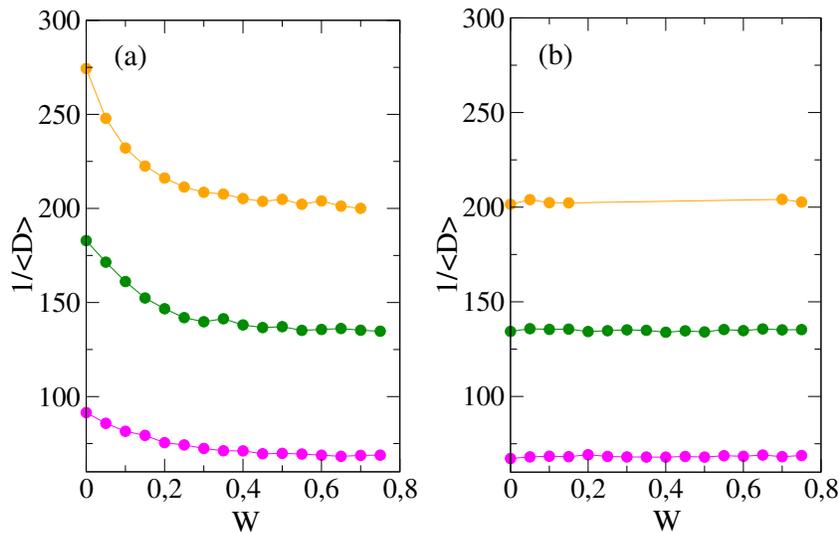


Figura 5.5: $1/\langle D \rangle$ en función del desorden para los estados electrónicos del: (a) centro y (b) borde de la banda 3. Las longitudes de cadena corresponden a: $L/a = 100$ (magenta), $L/a = 200$ (verde), $L/a = 300$ (anaranjado) para estados electrónicos del: (a) centro y (b) borde, de la banda 3.

Se puede realizar un análisis complementario al estudiar la dependencia de $1/D$ con el nivel del desorden para diferentes longitudes. Para el estado electrónico del centro de la banda se puede observar en la figura 5.5-(a) que independientemente de la longitud de la cadena, el aumento del nivel de desorden conlleva a un valor asintótico de $1/D$ característico para cada longitud. Este valor asintótico es mayor conforme se aumenta la longitud de la cadena.

En la figura 5.5-(b) se observa que el efecto de borde de banda produce que para cada longitud, la cantidad $1/D$ alcance su valor asintótico desde niveles de desorden muy pequeños.

Tomando en cuenta el efecto del borde de la banda mencionado, se puede reevaluar el comportamiento obtenido para el estado electrónico del centro de la banda y afirmar que, la incorporación del desorden y a partir de cierto valor ($W \sim 0,30$ para $L/a = 100$), el estado electrónico del centro de la banda se comporta como si correspondiera al estado del borde de la banda.

A modo de conclusión se puede ver que la reducción de las propiedades electrónicas observadas en el coeficiente de transmisión para una longitud finita, a consecuencia del aumento del desorden, se manifiestan en un aumento en el valor del desequilibrio (veáse la figura 5.6) que se puede asociar con la reducción en la longitud efectiva del correspondiente estado electrónico del centro de la banda hasta que se alcanza un valor característico comparable al del correspondiente estado del borde que se observa incluso para el caso ordenado ($W = 0,0$).

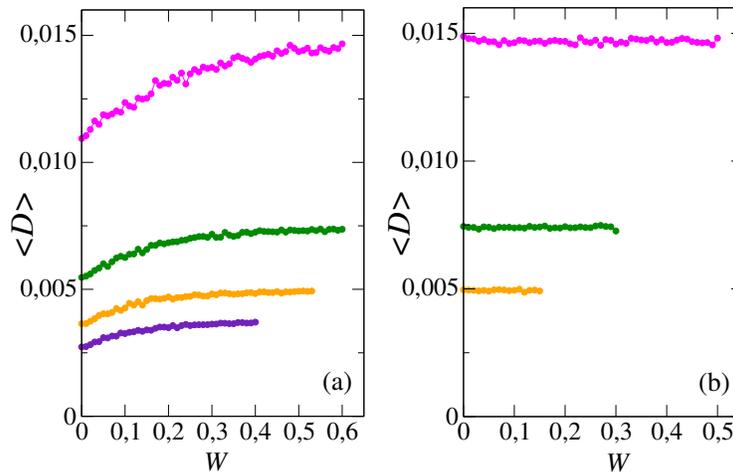


Figura 5.6: $\langle D \rangle$ en función del desorden para los estados electrónicos del: (a) centro y (b) borde, de la banda 3. Las longitudes de cadena corresponden a: $L/a = 100$ (magenta), $L/a = 200$ (verde), $L/a = 300$ (anaranjado), $L/a = 400$ (violeta).

5.2.2. Caracterización mediante la complejidad

Ahora se evaluará el comportamiento de la complejidad correspondiente a los estados electrónicos del centro y borde de la banda 3 en función de la longitud de la cadena, y para distintos niveles de desorden. Para el estado electrónico del centro de la banda se puede observar, en la figura 5.7-(a), que para niveles de desorden bajos ($W < 0,30$) tanto la longitud de la cadena como el desorden tienen influencia sobre la complejidad del estado electrónico. Más aún, para un nivel de desorden dado, la complejidad tiende asintóticamente con la longitud de la cadena hacia un

valor constante máximo $C \approx 1,106$. Sin embargo, tal dependencia con la longitud se torna despreciable para niveles de desorden superiores ($W > 0,30$), pues como se observa, incluso para longitudes de cadena corta se alcanza el valor de la complejidad máxima.

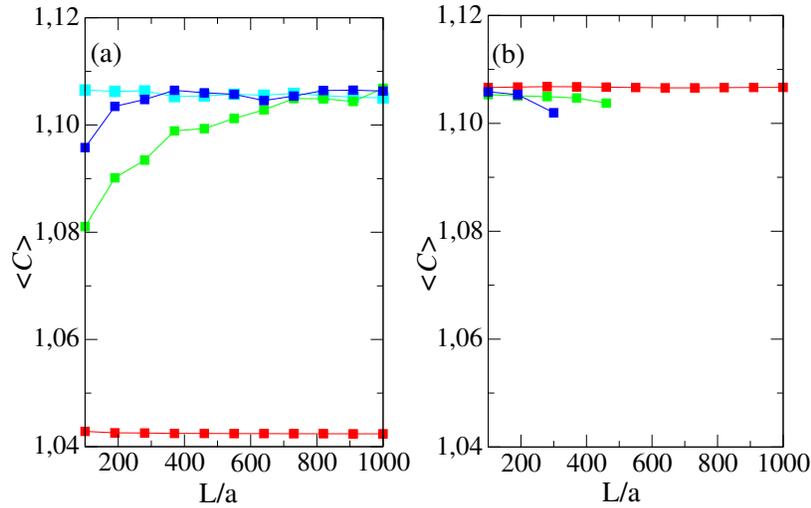


Figura 5.7: $\langle C \rangle$ en función de L/a para el: (a) centro y (b) borde, de la banda 3. Los niveles de desorden corresponden a: $W = 0,00$ (rojo), $W = 0,10$ (verde), $W = 0,20$ (azul), $W = 0,30$ (cian).

El comportamiento de la complejidad para el estado electrónico del borde de la banda para cadenas desordenadas, mostrado en la figura 5.7-(b), indica que incluso para longitudes de cadena cortas ($L/a < 300$) se alcanza un valor constante para la complejidad del sistema. Tomando en cuenta además que dicho valor coincide con el valor máximo de la complejidad alcanzada para el estado electrónico del centro de la banda ($C \approx 1,106$), se puede plantear que este comportamiento es consecuencia del efecto del borde de la banda. Esto implicaría que el efecto del borde de la banda es equivalente al de los niveles superiores de desorden del caso correspondiente al centro de la banda.

Resulta interesante evaluar la complejidad de la cadena ordenada (véase figura 5.7-(a) y -(b)), donde tanto para el estado electrónico del centro como del borde de la banda se observan valores prácticamente constantes pero diferentes, sin mayor efecto de la longitud de la cadena. Por un lado, la constancia encontrada en la complejidad viene a ser consecuencia de la periodicidad de la cadena; y por otro y de mayor relevancia, tal discriminación entre el estado electrónico del centro y del borde de la banda no la muestra un indicador típico del transporte electrónico como el coeficiente de transmisión.

El estudio de la complejidad en función del desorden para los estados electrónicos del centro y borde de la banda, y para diferentes longitudes, nos brinda información complementaria.

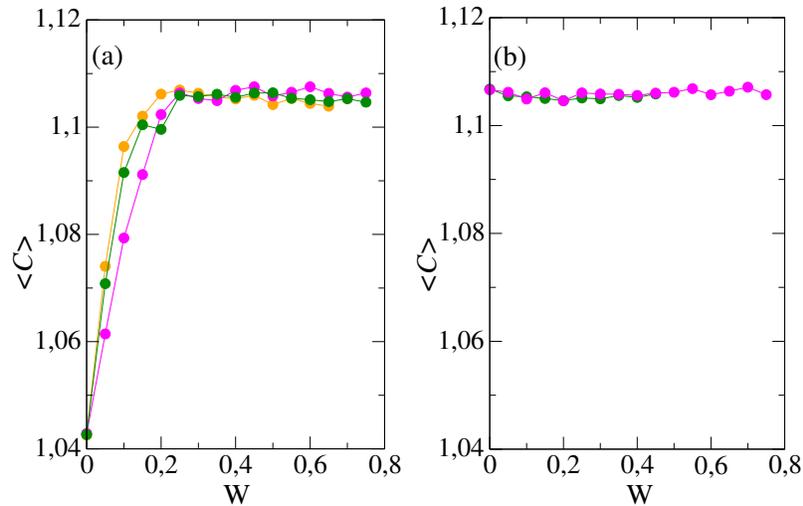


Figura 5.8: $\langle C \rangle$ vs W para el: (a) centro y (b) borde, de la banda 3. Las longitudes de cadena corresponden a: $L/a = 100$ (magenta), $L/a = 200$ (verde), $L/a = 300$ (anaranjado).

En la figura 5.8-(a) se observa que la complejidad, para el estado electrónico del centro de la banda y para diferentes longitudes de cadena, tienden asintóticamente al valor esperado $C \approx 1,106$ conforme se incrementa el nivel de desorden. Ya a partir de $W \approx 0,30$ se ha alcanzado la complejidad máxima y no se observa mayor influencia de la longitud de la cadena. Esto implica que para niveles de desorden $W > 0,30$, el efecto de la longitud de la cadena prácticamente es despreciable en comparación con el del desorden.

El caso correspondiente al estado electrónico del borde de la banda, mostrado en la figura 5.8-(b), no muestra influencia alguna de la longitud de la cadena. Se observa también que la complejidad del estado del borde de la banda permanece aproximadamente constante para todos los niveles de desorden estudiados. Como ya se había encontrado previamente (véase la figura 5.7-(b)), aquí también se observa que el efecto del borde de la banda es equivalente al de los niveles de desorden superiores para el caso del centro de la banda.

5.3. Análisis de la corriente de probabilidad

Como se ha encontrado en la sección 5.1 tanto la longitud de la cadena como el desorden afectan la probabilidad de transmisión electrónica del estado del centro de la banda.³ Específicamente se determinó que el incremento del nivel del desorden, para una longitud finita de la cadena, reduce la probabilidad de transmisión electrónica. Esta reducción debe mostrarse también en una cantidad característica de la propagación electrónica como la corriente de probabilidad electrónica ($J(x)$). Aún más, la fenomenología asociada a la representación electrónica por medio de ondas planas, nos permite estudiar el efecto de la reducción en la probabilidad de transmisión electrónica a través de la corriente de probabilidad ($J(x)$).

La corriente de probabilidad es una cantidad que viene dada en función del flujo de probabilidad transmitido y el flujo de probabilidad reflejado, y se considera constante e igual en cada celda ($x_i < x < x_{i+1}$, $\forall i \in N$) de la cadena de longitud $L = Na$. Para fines prácticos se define la corriente de probabilidad normalizada ($j(x)$) correspondiente a la primera celda como:

$$j_0(x) = \frac{J(x)}{\hbar k/m} = |A_0|^2 - |B_0|^2 = j_0^t - j_0^r \quad (5.10)$$

Considerando además la relación entre las amplitudes de la onda incidente (A_0) y reflejada (B_0), obtenida en el capítulo 3 con el método de la matriz de transferencia como $B_0 = uA_0$, es posible plantear para la primera celda ($x_0 < x < x_1$) que:

$$j_0(x) = |A_0|^2 \{1 - |u|^2\} \quad (5.11)$$

La ecuación (5.11) nos indica que la corriente de probabilidad normalizada viene determinada completamente por la distribución de valores de $|u|$. Esto permite plantear una clasificación de los resultados en alguno de los siguientes casos:

$$\begin{aligned} |u| < 1 &\rightarrow |A_0|^2 > |B_0|^2 \rightarrow j_0^t > j_0^r \\ |u| = 1 &\rightarrow |A_0|^2 = |B_0|^2 \rightarrow j_0^t = j_0^r \\ |u| > 1 &\rightarrow |A_0|^2 < |B_0|^2 \rightarrow j_0^t < j_0^r \end{aligned} \quad (5.12)$$

Con la finalidad de estudiar los efectos del desorden mediante la corriente de probabilidad normalizada se pasará a evaluar la distribución de valores de $|u|$ para una longitud finita de la cadena ($L = 300a$) y distintos niveles de desorden.

³Con la finalidad de evitar efectos del borde de la banda, el análisis de la presente sección se centrará en el estado electrónico del centro de la banda.

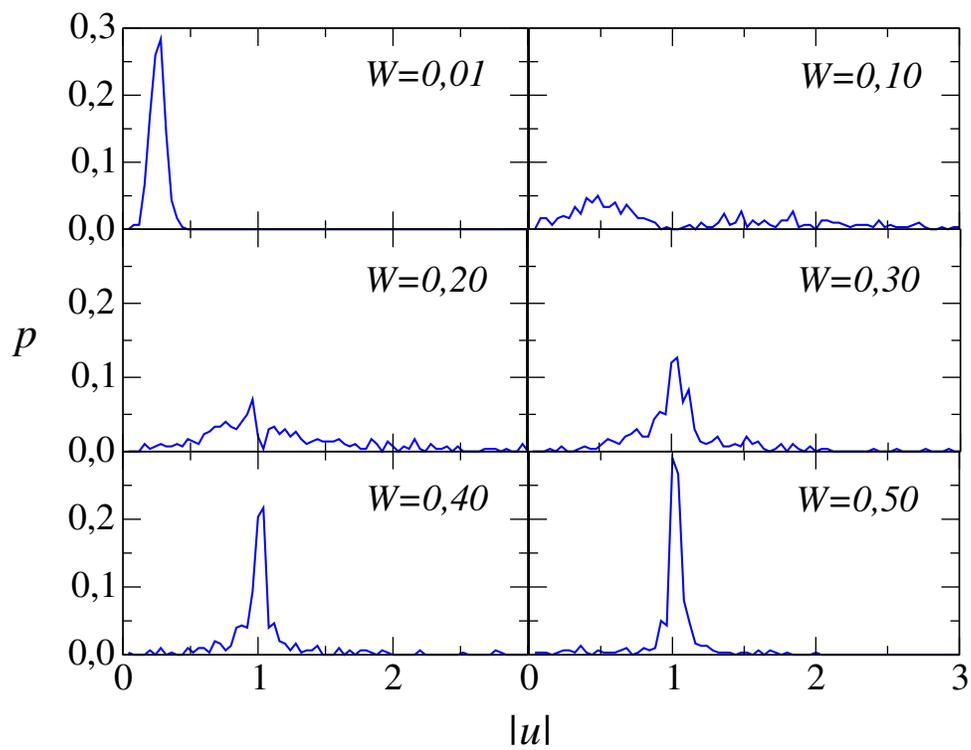


Figura 5.9: Distribución de probabilidad p asociada a $|u|$ conforme se varía el nivel de desorden para una longitud de cadena $L/a = 300$. Aunque existen valores para $3 < |u| < 4$ la escala se reduce a la mostrada para una mejor visualización.

En la figura 5.9 se muestra la distribución de valores de $|u|$ conforme se aumenta el desorden. Para el caso casi-periódico ($W \approx 0,01$) se observa la probabilidad preferente alrededor $|u| \approx 0,25 < 1$ lo cual implicaría mayor corriente de probabilidad transmitida. Este resultado es compatible con lo encontrado en el caso periódico donde la probabilidad de transmisión electrónica resultó $T \approx 1$.⁴

El aumento progresivo del nivel de desorden para $0,10 < W < 0,30$ conlleva a una redistribución de la probabilidad en el intervalo $0 < |u| < 4,0$ con la desaparición del valor preferente de $|u|$ inicialmente encontrado. La distribución de probabilidad de $|u|$ para los niveles de desorden mencionados indica una reducción importante de la corriente de probabilidad transmitida. Esto comportamiento es compatible con lo encontrado mediante la probabilidad de transmisión electrónica donde se observó el mismo resultado.

Para niveles de desorden con $W \geq 0,30$ se obtiene un aumento significativo de la probabilidad en torno al valor $|u| = 1$ (comparable al caso $W \approx 0,01$) lo cual indicaría una reducción apreciable de la corriente de probabilidad normalizada, *i.e.* $j \approx 0$ debido a que $j_0^t \approx j_0^r$ (véase la ecuación 5.12). Esta reducción en la corriente de probabilidad es compatible con lo obtenido para la probabilidad de transmisión. Más aún, identifica un valor de nivel de desorden umbral ($W \approx 0,30$) a partir del cual la corriente de probabilidad no va variar apreciablemente y que además coincide con el nivel de desorden para el cual la razón de participación inversa (equivalentemente desequilibrio) y la complejidad alcanzan su correspondiente valor asintótico.

El estudio de la distribución de valores de las partes real (u_r) e imaginaria (u_i) de la relación de amplitudes en función del nivel de desorden, mostrada en la figura 5.10, permite encontrar adicionalmente que la relación de fases entre la onda electrónica transmitida y reflejada, para el estado del centro de la banda, se ha tornado aleatoria; *i.e.* se ha perdido la coherencia de fase a consecuencia del desorden en la cadena. De manera complementaria a lo encontrado en la distribución de probabilidad de valores de $|u|$, se observa también que para $W \geq 0,30$ la distribución de valores de las partes real e imaginaria de u se ubican preferentemente en el círculo asociado a $|u| = 1$.

⁴El caso periódico $W = 0,0$ (no mostrado) indica una probabilidad $p = 1$ asociado a $|u| = 0,25$.

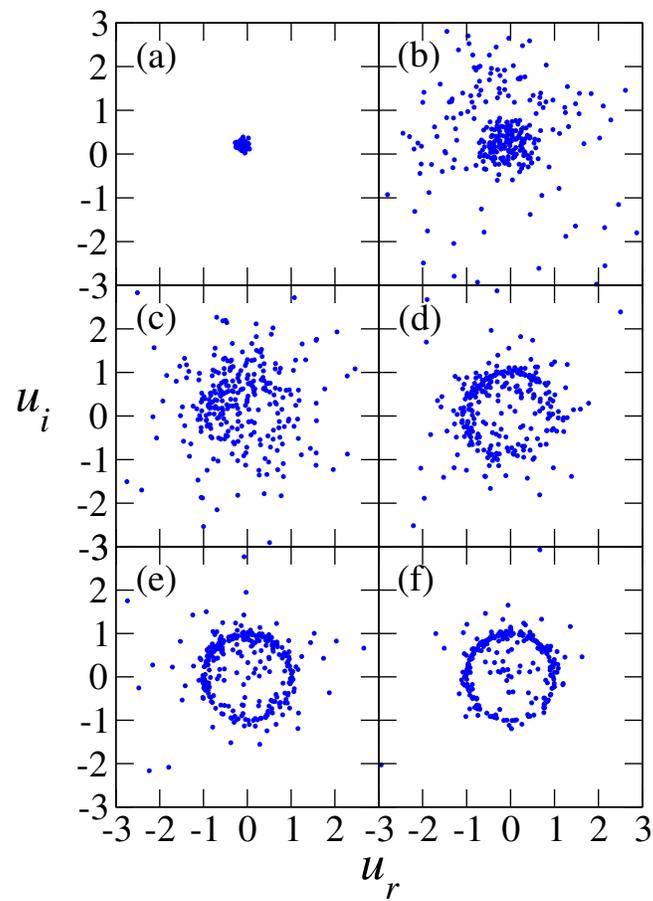


Figura 5.10: Diagramas de dispersión de las partes real e imaginaria de u para una cadena de longitud $L/a = 300$ y diferentes niveles de desorden: (a) $W = 0,012$, (b) $W = 0,10$, (c) $W = 0,20$, (d) $W = 0,30$, (e) $W = 0,40$, (f) $W = 0,50$. La escala se reduce a la mostrada para una mejor visualización.

Capítulo 6

Conclusiones y perspectivas

6.1. Conclusiones

Del estudio realizado para evaluar la influencia del desorden estructural sobre las propiedades de transporte electrónico se desprenden algunas conclusiones importantes, las cuales se discutirán a continuación.

La inclusión de desorden estructural en el modelo de Kronig-Penney conlleva a una reducción del coeficiente de transmisión electrónica, así como al incremento, tanto de la razón de participación inversa como de la complejidad, hacia un valor asintótico de saturación característico, asociado al estado electrónico del centro de la banda. Estos comportamientos en las cantidades estudiadas son consecuencia de la cancelación de la corriente de probabilidad y de la pérdida de fase del estado electrónico correspondiente conforme se incrementa el nivel de desorden en el modelo (cadena de potenciales).

Las tendencias mostradas por el coeficiente de transmisión, la razón de participación inversa y la complejidad, a medida que se incrementa el nivel de desorden, caracterizan adecuadamente la reducción de las propiedades de transporte electrónico a consecuencia del desorden incluido en el sistema en estudio. Más aún, tanto la razón de participación inversa como la complejidad del estado electrónico del centro de la banda alcanzan sus correspondientes valores de saturación a partir de un nivel de desorden umbral, que en el primer caso depende de la longitud de la cadena. Dada la no dependencia de la complejidad de saturación con la longitud de la cadena se propone a la complejidad como un buen indicador de las propiedades de transporte electrónico.

El inverso de la razón de participación inversa (*i.e* desequilibrio) en función de la longitud de la cadena permite caracterizar los efectos sobre el transporte electrónico para un nivel de desorden dado, por medio de una longitud efectiva caracterizada por un coeficiente γ que se relaciona con la fracción de la cadena que define una longitud efectiva para el electrón. El valor $\gamma \approx 2/3$ es alcanzado por el estado electrónico del centro de la banda a partir de $W \approx 0,30$ tornándose independiente de la longitud de la cadena.

6.2. Perspectivas

A partir del estudio realizado y la experiencia obtenida se proponen como posibles temas de extensión del presente estudio los siguientes puntos:

- Como ya se indicó, estudios de influencia de desorden en estructuras unidimensionales son de relevancia actual debido a que la manufactura de los mismos no está libre de la incorporación de defectos. En ese sentido y complementario al estudio desarrollado se propone evaluar los efectos del desorden químico a partir de la metodología planteada buscando evaluar la influencia de este tipo de desorden sobre las propiedades de transporte electrónico. Un caso importante y representativo de lo indicado viene a ser el ADN donde la disposición regular de los cuatro tipos de nucleótidos permite su representación como una cadena de potenciales equidistantes pero con distintas intensidades de potencial.
- La representación de la onda electrónica por medio de un paquete de onda utilizando metodologías alternativas como la aproximación tight-binding permitiría complementar los estudios en sistemas con desorden tanto estructural como químico y de estructuras geométricas más complejas (*3D*).

Apéndice A

Propiedades de la matriz de transferencia

Veremos a continuación que una propiedad matemática (asociada a la forma de la ecuación de onda) y una propiedad física (asociada a la conservación de la corriente de probabilidad) establecen condiciones restrictivas y convenientes sobre la matriz \mathbf{M} .

A.1. Invarianza por reversibilidad temporal

Partimos de la Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo tomando en cuenta el caso general donde la función de onda depende tanto de la posición como del tiempo, es decir:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x, t) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) \quad (\text{A.1})$$

Considerando que el potencial $V(x, t)$ está definido en el intervalo $a < x < b$ y es constante (e.g. nulo) fuera del mismo, es posible expresar la eigenfunción como:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{+ikx} + Be^{-ikx} & x < a \\ \alpha f(x) + \beta g(x) & a < x < b \\ Ce^{+ikx} + De^{-ikx} & b < x \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

El método de la matriz de transferencia toma en cuenta que existe una matriz \mathbf{M} que relaciona las amplitudes de las ondas planas de las regiones adyacentes al potencial, que expresado en forma matricial viene dado por:

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \quad (\text{A.3})$$

Si tomamos el complejo conjugado de la ecuación A.1 y consideramos el cambio $t \rightarrow -t$, obtenemos lo siguiente:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi^*(x, -t) + V(x, -t) \Psi^*(x, -t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(x, -t) \quad (\text{A.4})$$

Puesto que la forma de la ecuación obtenida (ecuación A.4 es invariante respecto a la expresión original (ecuación A.1), concluimos que si $\Psi(x, t)$ es solución, entonces $\Psi^*(x, -t)$ es también solución. En este último caso tendremos:

$$\psi^*(x) = \begin{cases} A^* e^{-ikx} + B^* e^{+ikx} & x < a \\ \alpha^* f(x)^* + \beta^* g(x)^* & a < x < b \\ C^* e^{-ikx} + D^* e^{+ikx} & b < x \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

Nótese que la dirección inicial de propagación de las ondas planas se han invertido (e.g. $A \rightarrow B^*$). Tomando en cuenta la nueva forma de la solución (relación A.5 y la matriz \mathbf{M} podemos establecer la siguiente relación:

$$\begin{pmatrix} D^* \\ C^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B^* \\ A^* \end{pmatrix} \quad (\text{A.6})$$

Comparando las ecuaciones (A.3) y (A.6) deducimos la primera restricción para los elementos de \mathbf{M} :

$$M_{11} = M_{22}^* \quad , \quad M_{21} = M_{12}^* \quad (\text{A.7})$$

A.2. Conservación de la corriente de probabilidad

En sistemas 1D la *corriente de probabilidad* $J(x, t)$ [49] viene dado por:

$$J(x, t) = \frac{\hbar}{2im} \left[\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right] \quad (\text{A.8})$$

de manera que la *densidad de probabilidad* (P_{ab}) cumple que:

$$\frac{dP_{ab}}{dt} = J(a, t) - J(b, t) \quad (\text{A.9})$$

Tomando en cuenta que trataremos únicamente con potenciales reales y dependientes únicamente de la posición, observamos que P_{ab} es independiente del tiempo. Por lo tanto se cumple la conservación de $J(x, t)$, con lo cual tendremos que $J_{x < a} = J_{x > b}$, es decir:

$$|A|^2 - |B|^2 = |C|^2 - |D|^2 \quad (\text{A.10})$$

Utilizando la ecuación anterior, junto con las relaciones (A.7) y (A.10), se demuestra que:

$$\det(\mathbf{M}) = 1 \tag{A.11}$$

Apéndice B

Matrices de transferencia del potencial delta y nulo

Como se ha planteado previamente, las amplitudes de las ondas planas en las regiones adyacentes a un potencial se pueden relacionar por medio de una matriz cuyos elementos dependen del tipo de potencial. A continuación se esboza el procedimiento para obtener la matriz de transferencia del potencial delta y nulo.

B.1. Matriz de transferencia para el potencial delta

Sea el potencial delta dado por $V(x) = (\hbar^2/m) \Omega \delta(x - a)$. Sabemos que las soluciones en las regiones adyacentes se pueden expresar como:

$$\begin{aligned}\psi_I(x) &= Ae^{+ikx} + Be^{-ikx} & x < a \\ \psi_{II}(x) &= Ce^{+ikx} + De^{-ikx} & a < x\end{aligned}\tag{B.1}$$

En este caso la eigenfunción y su primera derivada deben cumplir las siguientes condiciones:

$$\begin{aligned}\psi_I|_{x=a} &= \psi_{II}|_{x=a} \\ \frac{d\psi_{II}}{dx}|_{x=a} - \frac{d\psi_I}{dx}|_{x=a} &= 2\Omega\psi_I|_{x=a}\end{aligned}\tag{B.2}$$

Tomando en cuenta B.1 en B.2 y haciendo $\omega = \Omega/k$ obtenemos:

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - i\omega & -i\omega \\ i\omega & 1 + i\omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}\tag{B.3}$$

B.2. Matriz de transferencia para el potencial nulo

En este caso consideramos el potencial $V(x) = 0$ en el intervalo $0 < x < a$. Sabemos que en este caso la onda plana asociada se puede expresar como:

$$\psi(x) = Ae^{+ikx} + Be^{-ikx} \quad (\text{B.4})$$

La evaluación de la eigenfunción en $x = a$ se puede expresar como:

$$\begin{pmatrix} Ae^{+ika} \\ Be^{-ika} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{+ika} & 0 \\ 0 & e^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \quad (\text{B.5})$$

Bibliografía

- [1] Feldman, D.P., y Crutchfield, J.P. (1998). Measures of Statistical Complexity: Why? *Physics Letters A*, 238, 244-252.
- [2] Mitchell, M. (2009). *Complexity: A guided tour*. New York, EUA: Oxford University Press.
- [3] Parrott, L. (2010). Measuring ecological complexity. *Ecological Indicators*, 10(6), 1069-1076.
- [4] Newman, M.E.J. (2011). Resource Letter CS-1: Complex Systems. *American Journal of Physics*, 79, 800-810.
- [5] Ladyman, J., Lambert, J., y Wiesner, K. (2013). What is a complex system? *European Journal for Philosophy of Science*, 3(1), 33-67.
- [6] Whitesides, G.M., y Ismagilov, R.F. (1999). Complexity in Chemistry. *Science*, 284(5411), 89-92.
- [7] Lloyd, S. (2001). Measures of complexity: a nonexhaustive list. *IEEE Control Systems Magazine*, 21(4), 7-8.
- [8] Cover, T.M., y Thomas, J.A. (1991). *Elements of Information Theory*. New Jersey, EUA: John Wiley & Sons.
- [9] Shannon, C.E. (1948). A mathematical theory of communication. *Bell System Technical Journal*, 27(3), 379-423.
- [10] Sen, K.D., Panos, C.P., Chatzisavvas, K.Ch., y Moustakidis, Ch.C. (2007). Net Fisher information measure versus ionization potential and dipole polarizability in atoms. *Physics Letters A*, 364(3), 286-290.
- [11] López-Ruiz, R., Mancini, H.L., y Calbet, X. (1995). A statistical measure of complexity. *Physics Letters A*, 209, 321-326.

- [12] López-Ruiz, R., y Sañudo, J. (2012). Shape of traveling densities with extremum statistical complexity. *International Journal of Applied Mathematics and Statistics*, 26(2), 81-91.
- [13] Mortoza, L.P.D., y Piqueira, J.R.C. (2017). Measuring complexity in Brazilian economic crises. *PLoS ONE*, 12(3): e0173280. doi: 10.1371/journal.pone.0173280.
- [14] Piqueira, J.R.C, y Vannucchi, S.H. (2019). LMC and SDL complexity measures: A tool to explore time series. *Complexity*, 2019, 2095063, 1-8.
- [15] Panos, C.P., Chatzisavvas, K.Ch., Moustakidis, Ch.C., y Kyrkou, E.G. (2007). Comparison of SDL and LMC measures of complexity: Atoms as a testbed. *Physics Letters A*, 363(1), 78-83.
- [16] Sañudo, J., y López-Ruiz, R. (2008). Complexity in atoms: An approach with a new analytical density. *International Review of Physics*, 2, 223-230.
- [17] Sañudo, J., and López-Ruiz, R. (2008). Statistical complexity and Fisher-Shannon information in the H-atom. *Physics Letters A*, 372, 5283-5286.
- [18] Esquivel, R.O., Angulo, J.C., Antolín, J., Dehesa, J.S., López-Rosa, S., y Flores-Gallegos, N. (2010). Analysis of complexity measures and information planes of selected molecules in position and momentum spaces. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 12, 7108-7116. doi: 10.1039/b927055h.
- [19] Dehesa, J.S., López-Rosa, S., Sánchez-Moreno, P., y Yáñez, R.J. (2012). Complexity of multidimensional hydrogenic systems. *International Journal of Applied Mathematics and Statistics*, 26(2), 150-162.
- [20] Calbet, X., y López-Ruiz, R. (2001). Tendency towards maximum complexity in a non-equilibrium isolated system. *Physical Review E*, 63, 066116, 1-9.
- [21] de Avellar, M.G.B., and Horvath, J.E. (2012). Entropy, complexity and disequilibrium in compact stars. *Physics Letters A*, 376, 1085-1089.
- [22] Ziman, J.M. (1979). *Models of Disorder*. London, UK: Cambridge University Press.
- [23] Thouless, D.J. (1974). Electrons in Disordered Systems and the Theory of Localization. *Physics Reports*, 13(3), 93-142.
- [24] Sánchez, A., Maciá, E., y Domínguez-Adame, F. (1994). Suppression of localization in Kronig-Penney models with correlated disorder. *Physical Review B*, 49(1), 147-157.

- [25] Sánchez, A., y Domínguez-Adame, F. (1994). Enhanced suppression of localization in a continuous random-dimer model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 27, 3725-3730.
- [26] Sánchez, A., Domínguez-Adame, F., Berman, G., y Izrailev, F. (1995). Explanation of delocalization in the continuous random-dimer model. *Physical Review B*, 51(10), 6769-6772.
- [27] Anderson, P.W. (1958). Absence of Diffusion in Certain Random Lattices. *Physical Review*, 109(5), 1492-1505.
- [28] Kronig, R. de L., y Penney, W.G. (1931). Quantum Mechanics of Electrons in Crystal Lattices. *Proceedings of the Royal Society A*, 130, 499-513. doi: 10.1098/rspa.1931.0019
- [29] Economou, E.N, y Soukoulis, C.M. (1981). Static conductance and Scaling Theory of localization in one dimension. *Physical Review Letters*, 46(9), 618-621.
- [30] Fisher, D.S, y Lee, P.A. (1981). Relation between conductivity and transmission matrix. *Physical Review B*, 23(12), 6851-6854.
- [31] Weaver, W. (1948). Science and complexity. *American Scientist*, 36(4), 536-544.
- [32] Simon, H.A. (1962). The architecture of complexity. *Proceedings of the American Philosophical Society*, 106(6), 467-482.
- [33] Anderson, P.W. (1972). More Is Different. *Science*, 177(4047), 393-396. doi: 10.1126/science.177.4047.393
- [34] Bennett, C.H. (1990). How to Define Complexity in Physics, and Why. En: Zurek, W.H. (ed.), *Complexity, Entropy, and the Physics of Information* (pp. 137-148). California: Addison-Wesley.
- [35] Bennett, C.H. (1988). Logical Depth and Physical Complexity. En: Herken, R. (ed.), *The Universal Turing Machine: A Half-Century Survey* (pp. 227-257). New York: Oxford University Press.
- [36] Lloyd, S., y Pagels, H. (1988). Complexity as thermodynamic depth. *Annals of Physics*, 188(1), 186-213.
- [37] Grassberger, P. (1986). Toward a quantitative theory of self-generated complexity. *International Journal of Theoretical Physics*, 25(9), 907-938.

- [38] Catalán, R.C., Garay, J., y López-Ruiz, R. (2002). Features of the extension of a statistical measure of complexity to continuous systems. *Physical Review E*, 66, 011102, 1-6.
- [39] Anteneodo, C., y Plastino, A.R. (1996). Some features of the López-Ruiz-Mancini-Calbet (LMC) statistical measure of complexity. *Physics Letters A*, 223(5), 348-354.
- [40] Soukoulis, C.M., y Economou, E.N. (1999). Electronic localization in disordered systems. *Waves Random Media*, 9, 255-269.
- [41] Chih-Yuan, L., y Foo, E. (1978). The electronic density of states of a liquid-like random Kronig-Penny model-In the Coherent potential approximation. *Chinese Journal of Physics*, 16(1), 30-35.
- [42] Tanaka, Y., y Tsukada, M. (1989). Superconductivity of the Kronig-Penney model. *Physical Review B*, 40(7), 4482-4493.
- [43] Clerk, G.J., y McKellar, B.H.J. (1990). Quark tunneling in a one-dimensional nuclear model. *Physical Review C*, 41(3), 1198-1212.
- [44] Flugge, S. (1994). *Practical Quantum Mechanics*. Berlin, Alemania: Springer.
- [45] Sañudo, J., y López-Ruiz, R. (2012). Calculation of statistical entropic measures in a model of solids. *Physics Letters A*, 376(34), 2288-2291.
- [46] Ashcroft, N.W, and Mermin, N.D. (1976). *Solid State Physics*. New York, EUA: Saunders College Publishing.
- [47] Yu, K.W. (1990). Quantum transmission in periodic potentials: A transfer matrix approach. *Computer in Physics*, 4(2), 176-178.
- [48] Méndez, B., Domínguez, F., y Maciá, E. (1993). A transfer matrix method for the determination of one-dimensional band structures. *Journal of Physics A Mathematical and General*, 26(1), 171-177.
- [49] Merzbacher, E. (1998). *Quantum Mechanics*. New York, EUA: John Wiley & Sons.
- [50] Miranda, A., and Landauro, C. (2008). Método de la matriz de transferencia aplicado al estudio de las propiedades eléctricas del modelo de Kronig-Penney con desorden estructural. *Revista de Investigación de Física*, 11(1), 49-55.
- [51] de la Peña, L. (1991). *Introducción a la Mecánica Cuántica*. México D.F., México: Fondo de Cultura Económica.

- [52] Landauer, R. (1970). Electrical Resistance of Disordered One-Dimensional Lattices. *Philosophical Magazine*, 21(172), 863-867.
- [53] Datta, S. (1995). *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge, UK: Cambridge University Press.
- [54] Esaki, L., and Tsu, R. (1970). Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors. *IBM Journal of Research and Development*, 14(1), 61-65.
- [55] Mazurczyk, R. (1999). Semiconductor superlattices. *Chaos, Solitons & Fractal*, 10(12), 1971-1982.
- [56] Castro-Palacio, J.C., Villatoro, F.R., Mendoza-Yero, O., Velásquez-Abad, L., y Monsoriu, J.A. (2012). Self-similar behavior in semiconductor superlattices. *Fractals*, 20(1), 89-95.
- [57] Gómez, I., Domínguez-Adame, F., Diez, E., y Orellana, P. (2002). Transport in random quantum dot superlattices. *Journal of Applied Physics*, 92(8), 4486-4489.
- [58] Ouasti, R., Zekri, N., Brezini, A., y Depollier, C. (1995). Localization properties of one-dimensional random electrified chains. *Journal of Physics Condensed Matter*, 7(4), 811-820.
- [59] Medrano, L.R., y Landauro, C.V. (2013). Influence of chemical disorder on the electronic level spacing distribution of the Ag_{5083} nanoparticle: A tight-binding study. *Physica B*, 412, 122-125.