



**Universidad Nacional Mayor de San Marcos**

**Universidad del Perú. Decana de América**

Facultad de Ciencias Físicas

Escuela Académico Profesional de Física

**Estudio del efecto del desorden químico  
sobre la complejidad electrónica  
en el modelo de Kronig-Penney**

**TESIS**

Para optar el Título Profesional de Licenciado en Física

**AUTOR**

Alejandro Ariel HEREDIA GUEVARA

**ASESOR**

Dr. Carlos Vladimir LANDAURO SÁENZ

Lima, Perú

2021



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. (2021). Estudio del efecto del desorden químico sobre la complejidad electrónica en el modelo de Kronig-Penney. [Tesis de pregrado, de segunda especialidad, de maestría, de doctorado, Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Facultad de Ciencias Físicas, Escuela Profesional de Física]. Repositorio institucional Cybertesis UNMSM.

---

## Metadatos complementarios

Datos de autor	
Nombres y apellidos	<a href="#">Alejandro Ariel Heredia Guevara</a>
Tipo de documento de identidad	DNI
Número de documento de identidad	40540158
URL de ORCID	<a href="https://orcid.org/0000-0002-1032-205X">https://orcid.org/0000-0002-1032-205X</a>
Datos de asesor	
Nombres y apellidos	<a href="#">Carlos Vladimir Landauro Sáenz</a>
Tipo de documento de identidad	DNI
Número de documento de identidad	09613168
URL de ORCID	<a href="https://orcid.org/0000-0002-1361-7355">https://orcid.org/0000-0002-1361-7355</a>
Datos del jurado	
Presidente del jurado	
Nombres y apellidos	<a href="#">Jaime Francisco Vento Flores</a>
Tipo de documento	DNI
Número de documento de identidad	06225087
Miembro del jurado 1	
Nombres y apellidos	<a href="#">Sthy Warren Flores Daorta</a>
Tipo de documento	DNI
Número de documento de identidad	10532794
Miembro del jurado 2	
Nombres y apellidos	<a href="#">Robert Marino Espinoza Bernardo</a>
Tipo de documento	DNI
Número de documento de identidad	41704209
Datos de investigación	
Línea de investigación	<a href="#">A.2.1.4. Ciencia de Materiales Avanzados y de Estructuras Artificiales</a>

Grupo de investigación	Grupo de Investigación de Sistemas Complejos Funcionalizados (GISICOF)
Agencia de financiamiento	Sin financiamiento
Ubicación geográfica de la investigación	Edificio: Pabellón de Ciencias Físicas, Ciudad Universitaria, UNMSM País: Perú Departamento: Lima Provincia: Lima Distrito: Cercado de Lima Calle: Germán Amézaga 375 Latitud: -11.85 Longitud: -76.45
Año o rango de años en que se realizó la investigación	Marzo 2020 - Abril 2021
URL de disciplinas OCDE	Física de la materia condensada <a href="https://purl.org/pe-repo/ocde/ford#1.03.02">https://purl.org/pe-repo/ocde/ford#1.03.02</a>



**Universidad Nacional Mayor de San Marcos**  
Universidad del Perú. Decana de América

**FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS**

**ESCUELA PROFESIONAL DE FÍSICA**

**ACTA DE SUSTENTACIÓN DE TESIS PARA OPTAR EL TÍTULO PROFESIONAL DE LICENCIADO EN FÍSICA**

Siendo las 17:00 horas del martes 29 de junio del 2021, en la Sala de Sesión Virtual de la Facultad de Ciencias Físicas, bajo la Presidencia del Dr. Jaime Francisco Vento Flores, el Dr. Sthly Warren Flores Daorta (Miembro), el Dr. Carlos Vladimir Landauro Sáenz (Asesor), y el Mg. Robert Marino Espinoza Bernardo (Suplente), se dio inicio a la Sesión Pública de Sustentación de Tesis para optar el Título Profesional de Licenciado en Física, del Bachiller:

**Alejandro Ariel Heredia Guevara**

El Presidente del Jurado en primer lugar dio lectura al documento formal que designa al Jurado y aprueba el acto de sustentación de la Tesis, así como el Resumen del Expediente e invitó al citado Bachiller a realizar la presentación y exposición de su Tesis:

**“Estudio del efecto del desorden químico sobre la complejidad electrónica en el modelo de Kronig-Penney”**

Concluida la exposición del candidato y luego de las preguntas de rigor por parte del Jurado, el Presidente del Jurado con el apoyo de la Unidad de Informática, invitó al Bachiller y al público a abandonar momentáneamente la Sala de Sesión Virtual, para dar paso a la deliberación y calificación por parte del Jurado.

Al término de la deliberación del Jurado el Dr. Jaime Francisco Vento Flores invitó al candidato y al público en general a pasar a la Sala de Sesión Virtual, para dar lectura al Acta de Calificación, en cuyo contenido se ha registrado la nota obtenida por el bachiller, la misma que ha sido de:

<b>19</b>	<b>Diecinueve</b>	<b>Aprobado con máximos honores</b>
.....	.....	.....
(NÚMERO)	(LETRAS)	(MENCIÓN)

Habiendo concluido la Sustentación de la Tesis, el Presidente del Jurado, remitirá el Acta al Vicedecano Académico de la Facultad de Ciencias Físicas, quien la suscribirá dando fe de la realización del acto virtual de manera remota.

El Acta de Calificación será remitida al Director de la Escuela Profesional de Física quien a su vez solicitará la aprobación del Consejo de Facultad para el otorgamiento del Título Profesional de Licenciado en Física al Bachiller Alejandro Ariel Heredia Guevara.



**Universidad Nacional Mayor de San Marcos**  
Universidad del Perú. Decana de América

**FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS**  
**ESCUELA PROFESIONAL DE FÍSICA**

Siendo las 18:30 horas, se dio por concluido el acto académico, expidiéndose tres (03) Actas originales de la Sustentación de la Tesis.

Ciudad Universitaria, martes 29 de junio de 2021.

**Dr. Jaime Francisco Vento Flores**  
PRESIDENTE

**Dr. Sthy Warren Flores Daorta**  
MIEMBRO

**Dr. Carlos Vladimír Landauro Sáenz**  
ASESOR

**Mg. Robert Marino Espinoza Bernardo**  
SUPLENTE



**UNMSM**

Firmado digitalmente por ROJAS  
ACUÑA Joel FAU 20148092282 soft  
Motivo: Soy el autor del documento  
Fecha: 02.07.2021 10:19:01 -05:00

**Dr. Joel Rojas Acuña**  
VICEDECANO ACADÉMICO - FCF

**Datos de la plataforma virtual institucional del acto de sustentación:**

**Enlace:**

Unirse a la reunión Zoom

<https://zoom.us/j/92715608189?pwd=N0dCN0pZNXMxbFYrbzNCRG5uZ0hFUT09>

ID de reunión: 927 1560 8189

Código de acceso: 170412

Grabación archivada en:

Asesor de Tesis: Dr. Carlos Vladimir Landauro Sáenz

Presidente del Jurado: Dr. Jaime Francisco Vento Flores

Miembro del Jurado: Dr. Sthy Warren Flores Daorta

Miembro Suplente del Jurado: Mg. Robert Marino Espinoza Bernardo



*... nuestro conocimiento no es más que una isla en  
el inmenso océano de nuestra ignorancia.  
Y, cada vez que conseguimos ampliar la superficie de la isla,  
se extiende también esa orilla en la que nos enfrentamos  
a lo desconocido, porque cada conclusión espectacular  
viene acompañada de preguntas que no paran  
de crecer en número y en complejidad.*

**Stefan Klein**



# Índice general

<b>Abstract</b>	<b>IX</b>
<b>Resumen</b>	<b>X</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Objetivo general . . . . .	3
1.2. Objetivos específicos . . . . .	3
<b>2. Conceptos básicos</b>	<b>5</b>
2.1. Sistema cristalino y tipos de desorden . . . . .	5
2.2. Flujo electrónico . . . . .	9
2.3. Medida estadística de complejidad . . . . .	10
2.3.1. Distribución discreta de estados . . . . .	11
2.3.2. Distribución continua de estados . . . . .	13
<b>3. Modelo y método</b>	<b>17</b>
3.1. Modelo de sólido 1D con desorden químico . . . . .	17
3.2. Método de la matriz de transferencia . . . . .	19
3.3. Normalización y cálculo de la densidad de probabilidad y flujo electrónico . . . . .	20
<b>4. Resultados y discusión</b>	<b>25</b>
4.1. Influencia del desorden sobre los estados electrónicos . . . . .	25
4.2. Análisis de los efectos del desorden químico sobre el transporte electrónico . . . . .	27
<b>5. Conclusiones y perspectivas</b>	<b>33</b>
<b>A. Conservación de la corriente de probabilidad</b>	<b>35</b>
<b>B. Propiedades de la matriz de transferencia</b>	<b>37</b>

<b>C. Matriz de transferencia local del modelo de sólido 1D con desorden químico</b>	<b>39</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>41</b>
<b>Agradecimientos</b>	<b>45</b>

# Índice de figuras

2.1. Representación esquemática bidimensional del sistema: (a) cristalino, (b) con desorden estructural, y (c) con desorden químico. . . . .	6
2.2. Representación del: (a) perfil de concentración del dopante, (b) sistema de difusión a partir de una fuente líquida (figura adaptada de la Ref. [26]). . . . .	7
2.3. Representación del: (a) perfil de concentración del dopante, (b) sistema de implantación iónica (figura adaptada de la Ref. [26]). . . . .	8
2.4. Comportamiento esperado de la medida de la información, $H$ , el desequilibrio, $D$ , y la medida estadística de complejidad, $C$ , propuesta por López-Ruiz <i>et al.</i> (figura adaptada de la Ref. [10]). . . . .	10
2.5. Medida estadística de complejidad, $C = HD$ , entropía de Shannon, $H$ , y desequilibrio, $D$ , en función del número atómico, $Z$ , de los elementos químicos naturales de la tabla periódica. Las líneas punteadas corresponden a los gases nobles. . . . .	13
2.6. Medida estadística de complejidad, $C = e^H D$ , entropía de Shannon, $H$ , y desequilibrio, $D$ , en función del número de onda adimensional, $ka$ , correspondiente a las seis primeras bandas del modelo de Kronig-Penney para una cadena de longitud $L/a = 400$ con $\Omega = 4,0 \text{ \AA}^{-1}$ y $a = 1,0 \text{ \AA}$ . . . . .	16
3.1. Representación de: (a) modelo de Kronig-Penney, y (b) modelo de sólido 1D con desorden químico. . . . .	18
3.2. Representación del potencial de interacción electrón-sistema dispersor definido en el intervalo $a < x < b$ y del electrón como una combinación de ondas planas. . . . .	19
3.3. Representación del potencial de interacción entre el electrón y sólido 1D con desorden químico. . . . .	21
3.4. Representación de la estructura de bandas electrónica para el MKP (cadena de potenciales delta) con $\Omega_j = 4,0 \text{ \AA}^{-1}$ y $a = 1,0 \text{ \AA}$ . . . . .	23

- 4.1. Representación de la estructura de bandas electrónica considerando los valores permitidos del número de onda adimensional,  $ka$  para diferente número de potenciales en la cadena,  $N$ , para los siguientes niveles de desorden: (a)  $W=0$ , (b)  $W=0,30$ , (c)  $W=0,60$  y (d)  $W=0,90$ . Se ha considerado  $a = 1,0 \text{ \AA}$  y  $\Omega = 4,0 \text{ \AA}^{-1}$ . 26
- 4.2. (a) Entropía de Shannon,  $H$ , y (b) desequilibrio,  $D$ , en función del nivel de desorden químico en el modelo,  $W$ , para cadenas de diferente longitud ( $L/a = N$ ). . 27
- 4.3. Diagramas de dispersión de los valores de la parte imaginaria,  $u_i$ , y parte real,  $u_r$ , para una cadena de longitud correspondiente a  $L/a = 400$  y diferentes niveles de desorden: (a)  $W=0,01$ , (b)  $W=0,20$ , (c)  $W=0,40$ , (d)  $W=0,60$ , (e)  $W=0,80$ , (f)  $W=0,90$ . . . . . 29
- 4.4. Probabilidad,  $p(|u|)$ , en función del módulo del cociente de amplitudes,  $|u|$ , para una cadena de potenciales correspondiente a  $L/a = 400$  y para diferentes niveles de desorden: (a)  $W=0,01$ , (b)  $W=0,20$ , (c)  $W=0,40$ , (d)  $W=0,60$ , (e)  $W=0,80$ , (f)  $W=0,90$ . . . . . 30
- 4.5. (a) Complejidad,  $C$ , y (b) flujo electrónico normalizado,  $J$ , en función del nivel de desorden,  $W$ , para cadenas de diferente longitud ( $L/a = N$ ). . . . . 31

# Abstract

In the present work the chemical disorder effects on electron transport properties in a crystal model of solid are evaluated. The Kronig-Penney model as a delta potentials chain representation is considered in order to include the chemical-type disorder. The chemical disorder in the model is produced as a random variation of the successive delta potential intensities which act as dispersion centers for the electron represented by a combination of plane waves. The disorder effects on electron transport properties in the model are evaluated by means of electron flux and the statistical measure of complexity proposed by López-Ruiz, Mancini y Calbet. The results indicate that chemical disorder produces the diminishing of the quantity of allowed states and the growth of band gaps. As a reference, the evaluation of disorder effects on a representative electronic state such as the center of third-band is realized. The results show a correspondence between the electron transport inhibition and the maximization of the complexity measure. This correlation allows to consider the complexity measure as a good indicator of electron transport properties.





# Resumen

En el presente trabajo se evalúa la influencia del desorden químico sobre las propiedades de transporte electrónico en un modelo de sólido cristalino. Con la finalidad de incorporar el desorden de tipo químico se considera el modelo de Kronig-Penney en su representación mediante una cadena de potenciales de tipo delta. El desorden químico en el modelo se genera mediante la variación aleatoria de las intensidades de los potenciales sucesivos que actúan como centros de dispersión del electrón, el cual es representado mediante una combinación de ondas planas. La evaluación de los efectos del desorden sobre las propiedades de transporte electrónico se realiza mediante el flujo electrónico y la medida estadística de complejidad propuesta por López-Ruiz, Mancini y Calbet. Los resultados indican que el desorden químico conlleva a la reducción de las bandas de estados permitidos y al crecimiento de los gaps de energía. A modo de referencia, se evalúan los efectos del desorden sobre un estado electrónico representativo de un sistema metálico, específicamente el correspondiente al centro de la tercera banda. Los resultados muestran una correspondencia entre la inhibición del transporte electrónico y la maximización de la medida de complejidad. Esta correlación permite considerar a la medida de complejidad como un buen indicador de las propiedades de transporte electrónico.



# Capítulo 1

## Introducción

*Lo último que uno sabe cuando escribe un libro, es qué poner primero.*

**Blaise Pascal**

Desde su formulación, a mediados del siglo pasado, la *teoría de la información* [1],[2], [3] ha incursionado en distintas áreas del conocimiento (física, biología, economía, entre otras), fuera de su ámbito original referido al estudio de los aspectos técnicos de la comunicación. El estudio de sistemas físicos <sup>1</sup> (e.g., átomo, molécula, sólido) no ha sido ajeno a tal proceso [4],[5] y la aplicación de las herramientas (conceptos y formulaciones) propias de dicha teoría han brindado el soporte para el desarrollo a su vez de otros conceptos como por ejemplo el de *complejidad*. Aunque aún no se tiene un consenso sobre su definición, sí se dispone de un conjunto amplio de características asociadas al sistema físico (objeto de estudio) que hacen referencia a: comportamientos difíciles de explicar a partir de sus componentes, cantidad de recursos para su formación, variedad en su estructura, entre otros, y que depende también del enfoque de la correspondiente disciplina. Esto justamente ha motivado el desarrollo de cantidades orientadas a resaltar tales características y que han sido denominadas *medidas de complejidad*. Algunas de dichas medidas provienen del ámbito de las ciencias de la computación, como por ejemplo la *complejidad algorítmica* [6] <sup>2</sup>, la *complejidad de Lempel-Ziv* [7], por indicar algunas; y otras se han originado en el área de la física, como por ejemplo la *profundidad termodinámica* [8] <sup>3</sup>, la *medida efectiva de complejidad* [9], entre otras.

---

<sup>1</sup>Se denomina *sistema físico* al conjunto de elementos que al interactuar entre sí dan lugar a un objeto de interés caracterizado mediante sus propiedades físicas.

<sup>2</sup>La complejidad algorítmica está definida como el tamaño del programa más corto que generaría una descripción completa del sistema.

<sup>3</sup>Esta medida se basa en la idea que los sistemas con complejidad son aquellos que resultan más difíciles de generar.

Una de tales formulaciones, basada en un enfoque intuitivo, con relativa facilidad de implementación computacional y que ha brindado información relevante sobre propiedades conformacionales de sistemas de muchos cuerpos, es la medida estadística de complejidad ( $C$ ) propuesta por R. López-Ruiz, H.L. Mancini y X. Calbet [10]. Al igual que M. Gell-Mann [11], López-Ruiz *et al.* consideran que los sistemas con complejidad deben estar en la región intermedia entre los sistemas completamente ordenados y desordenados. Tomando como extremos de referencia a los sistemas idealizados del cristal (sistema completamente ordenado) y el gas ideal (sistema completamente desordenado) postulan que los sistemas con complejidad deben encontrarse entre estos sistemas extremos de complejidad cero. Su formulación intuitiva, basada en un enfoque probabilístico, ha permitido que  $C$  sea aplicado al estudio de diversos sistemas y situaciones, como por ejemplo, para caracterizar regímenes de transición en sistemas dinámicos caóticos [12],[13], evolución dinámica de un modelo de gas ideal [14], propiedades conformacionales de sistemas de muchos cuerpos como núcleos [15], átomos [16], [17], cluster metálicos [18], estructura de bandas en sistemas cristalinos [19], entre otros.

Siguiendo el enfoque de utilizar la medida estadística de complejidad para caracterizar las propiedades de los sistemas físicos y establecer correspondencias con otras cantidades físicas relevantes, en el presente trabajo se realiza el cálculo de  $C$  para el estudio de las propiedades de transporte electrónico en el modelo de Kronig-Penney [20] con desorden químico. El modelo de Kronig-Penney aunque simple en su planteamiento es representativo en el estudio de las propiedades de sistemas más reales. Por ejemplo, dicho modelo permite entender la distribución de las energías permitidas en las denominadas *bandas*, que constituye un ingrediente fundamental en la clasificación de los materiales como conductores, aislantes o semiconductores [21]. También ha sido utilizado en el estudio del transporte electrónico en sistemas cuasiperiódicos [22], con desorden correlacionado [23], con desorden estructural [24], entre otros.

Aunque en la evolución del estudio de los materiales sólidos se ha priorizado el estudio de los materiales cristalinos (sin desorden), el estudio de sistemas con algún tipo de desorden [25] ha adquirido relevancia debido a la gran variedad de formas en que se presenta (*e.g.* vidrios metálicos, de espín, calcogenoides, plásticos, semiconductores amorfos) y a sus potenciales aplicaciones (*e.g.* silicio amorfo en celdas solares). Resulta de interés entonces profundizar en el estudio y caracterización de las propiedades mecánicas, eléctricas y magnéticas de los materiales con desorden. Es por ello que en el presente trabajo se plantea el estudio de la influencia del desorden de tipo químico sobre las propiedades de transporte electrónico en un sistema unidimensional.

Para conseguir lo mencionado, el trabajo esta organizado de la siguiente manera: en el capítulo 2 se presenta una recopilación sucinta sobre los conceptos básicos de la tesis para luego presentar el modelo de sólido con desorden químico y la metodología para el cálculo de la función de onda electrónica en el capítulo 3. En el capítulo 4 se evalúan los efectos del desorden sobre los estados electrónicos y se caracteriza las propiedades de transporte electrónico mediante el cálculo del flujo electrónico y la medida estadística de complejidad. Finalmente, en el capítulo 5 se plantean las conclusiones y perspectivas del trabajo.

## **1.1. Objetivo general**

Evaluar los efectos del desorden químico en el modelo de Kronig-Penney mediante el flujo electrónico y la medida estadística de complejidad propuesta por López-Ruiz, Mancini y Calbet.

## **1.2. Objetivos específicos**

- Plantear un modelo de sólido con desorden químico a partir del modelo de Kronig-Penney.
- Aplicar el método de la matriz de transferencia para el cálculo de la función de onda electrónica y de su correspondiente función de densidad de probabilidad.
- Caracterizar los efectos del desorden químico en el sistema mediante su influencia en el flujo electrónico y la medida estadística de complejidad.



# Capítulo 2

## Conceptos básicos

*En la vida, rara vez se construye algo  
con piedras que no provengan de otra parte.*

**R.D. Precht**

En el presente capítulo se realiza una recopilación concisa de los conceptos primarios asociados al trabajo desarrollado. Tomando como punto de partida la noción de sistema cristalino se va a proceder a plantear algunos tipos de desorden, los cuales afectan en alguna medida las propiedades de transporte electrónico. Con la finalidad de caracterizar estos efectos se van a plantear las formulaciones del flujo electrónico y de la medida estadística de complejidad.

### 2.1. Sistema cristalino y tipos de desorden

Los primeros estudios realizados para develar el interior de los sólidos datan de los experimentos realizados en 1912 por Friedrich, Knipping y Laue mediante difracción de rayos X [27] y que conllevaron a la noción de *cristal* o *sistema cristalino*<sup>1</sup>. Convencionalmente, se denomina sistema cristalino a aquel que está definido mediante una *red* subyacente (estructura geométrica infinita correspondiente a alguna de las redes de Bravais) y una *base* (especie química constituida por un átomo o conjunto de átomos) asociada a cada punto de la red<sup>2</sup>. Estos dos componentes van a generar que los sistemas cristalinos tengan simetría de traslación (y por consiguiente, orden de largo alcance) y de rotación, haciendo posible definir una estructura elemental representativa del sistema cristalino denominada *celda unitaria*. Como ejemplo de sistema cristalino, se puede mencionar al cuarzo ( $SiO_2$ ).

---

<sup>1</sup>Aunque, a partir de 1991 la Unión Cristalográfica Internacional reconoce a los cuasicristales como cristales aperiódicos, tales sistemas no serán tomados en cuenta en las consideraciones del presente trabajo.

<sup>2</sup>El sistema cristalino está definido intrínsecamente a  $T = 0 K$  (se ignora el movimiento de punto cero).

Justamente, las desviaciones del prototipo ideal de sistema cristalino, a consecuencia de los defectos (intersticios, dislocaciones), vacancias y/o impurezas en el sólido, van a dar origen a una variedad de tipos de desorden [25], algunos de los cuales serán comentados a continuación.

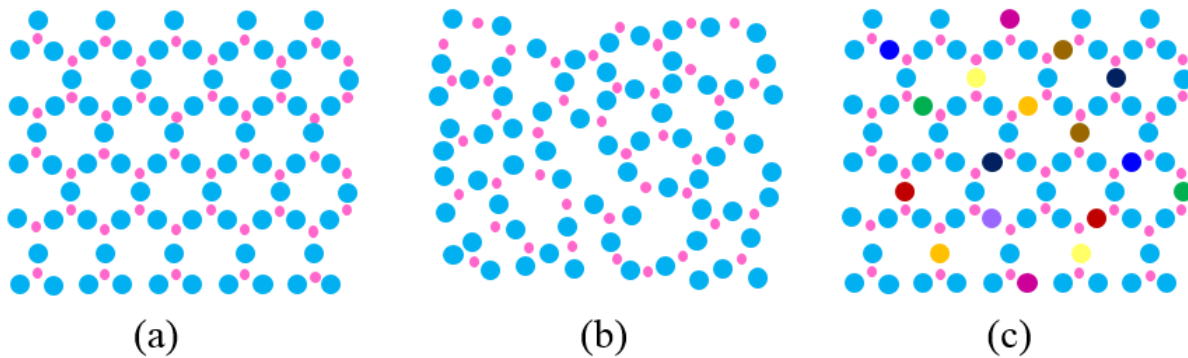


Figura 2.1: Representación esquemática bidimensional del sistema: (a) cristalino, (b) con desorden estructural, y (c) con desorden químico.

Tomando como referencia al sistema cristalino bidimensional mostrado en la figura 2.1-(a), se pueden distinguir los siguientes tipos de desorden:

- **Desorden estructural:** también denominado desorden topológico, geométrico o posicional, es aquel en el que las posiciones de la especie química no tienen asociada ninguna red subyacente, como se muestra en la figura 2.1-(b). Aunque en este caso no se tiene orden de largo alcance, sí se puede presentar ordenamiento local (o de corto alcance), como por ejemplo en el vidrio ( $SiO_2$ ).
- **Desorden químico:** también conocido como desorden sustitucional o composicional, se debe a la aleatoriedad en el tipo de especie química asociada a los puntos de la red subyacente, tal como se puede ver en la figura 2.1-(c). El desorden químico se puede presentar naturalmente como impurezas o se puede producir mediante el proceso de *dopaje*. Este tipo de desorden se puede encontrar en aleaciones (*e.g.* AuCu), mezclas, composites, materiales porosos.

Otros tipos de desorden que se pueden considerar son: el *desorden magnético* (o de spin), en el que la orientación de los momentos magnéticos de las especies químicas es aleatoria, aún cuando se disponen en una red subyacente; y el *desorden vibracional* que toma en cuenta las posiciones instantáneas de vibración que tienen las especies químicas y cuyas posiciones de equilibrio corresponden a una red subyacente.



Como ya se mencionó, el desorden químico en los materiales se puede conseguir a partir de la incorporación de cantidades controladas de impurezas. A este proceso se le conoce como *dopaje* y es aplicado usualmente con la finalidad de modificar las propiedades eléctricas de los materiales como en el caso de los semiconductores. A continuación, y en base a la referencia [26], se comentará sobre las dos técnicas principales de dopaje como son la *difusión* y la *implantación iónica*.

### Difusión

En esta técnica, utilizada con mayor frecuencia hasta finales de 1960 y que requiere de altas temperaturas, los átomos de la sustancia dopante se colocan sobre o cerca de la superficie del wafer (sustrato) por deposición a partir de su fase gaseosa. La concentración del dopante disminuye monotonamente a partir de la superficie (ver figura 2.2-(a)), y su perfil depende de la temperatura y el tiempo de difusión. Por ejemplo, la difusión se utiliza en la manufactura de junturas profundas como las requeridas en los semiconductores complementarios de óxido metálico (CMOS) empleados en la fabricación de circuitos integrados.

La difusión de impurezas se consigue al colocar wafers de material semiconductor en una atmósfera controlada dentro de un tubo de cuarzo a través del cual circula una mezcla gaseosa que contiene a la sustancia dopante, y en el interior de un horno a alta temperatura. Por ejemplo, mediante esta técnica se puede introducir impurezas tipo-*p* (e.g. B) o tipo-*n* (e.g. As, P) en sustratos de Si. Estos dopantes pueden introducirse a partir de fuentes sólidas (e.g. BN para boro,  $As_2O_3$  para arsénico, y  $P_2O_5$  para fósforo), líquidas ( $BBr_3$ ,  $AsCl_3$ , y  $POCl_3$ ), y gaseosas ( $B_2H_6$ ,  $AsH_3$ , y  $PH_3$ ). Sin embargo, las fuentes líquidas son las más comunes. En la figura 2.2-(b) se puede observar un esquema del horno y del flujo de gas a partir de una fuente líquida.

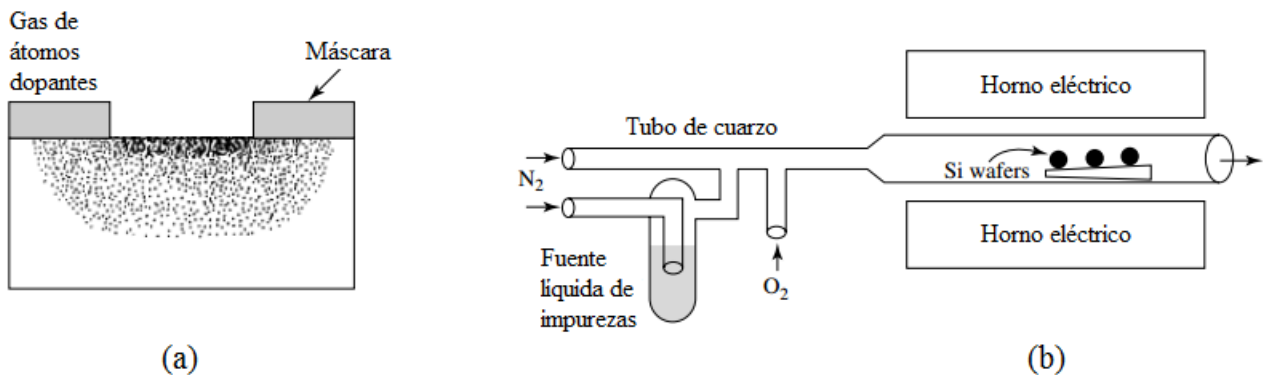


Figura 2.2: Representación del: (a) perfil de concentración del dopante, (b) sistema de difusión a partir de una fuente líquida (figura adaptada de la Ref. [26]).

## Implantación iónica

Desde la década de 1970, el dopaje se ha realizado principalmente por implantación iónica. En esta técnica los átomos dopantes son implantados en el semiconductor usando un haz de iones. La concentración del dopante presenta un pico en la distribución en el interior del semiconductor (ver figura 2.3-(a)), y su perfil es determinado por la masa y energía de los iones implantados.

En la figura 2.3-(b) se muestra un esquema del dispositivo de implantación iónica. La fuente de iones consiste de un filamento que se calienta hasta producir, a partir de un gas (*e.g.*  $\text{BF}_3$  o  $\text{AsH}_3$ ), los iones que van a ser implantados (*e.g.*  $\text{B}^+$  o  $\text{As}^+$ ). Mediante la aplicación de un voltaje de extracción ( $\sim 40$  kV) se produce el desplazamiento de los iones hacia el analizador de masa. El campo magnético aplicado en el analizador de masa permite filtrar solo a aquellos iones que tengan la relación masa-carga adecuada. Los iones seleccionados son entonces energizados en el tubo de aceleración donde alcanzan la energía de implantación requerida. Las aperturas aseguran la colimación del haz de iones. La presión en el dispositivo de implantación se mantiene lo menor posible ( $\sim 10^{-4}$  Pa) para minimizar la posibilidad de dispersión con las moléculas del gas. El haz de iones se direcciona mediante las placas de deflexión hacia la superficie del wafer logrando finalmente la implantación en el sustrato semiconductor.

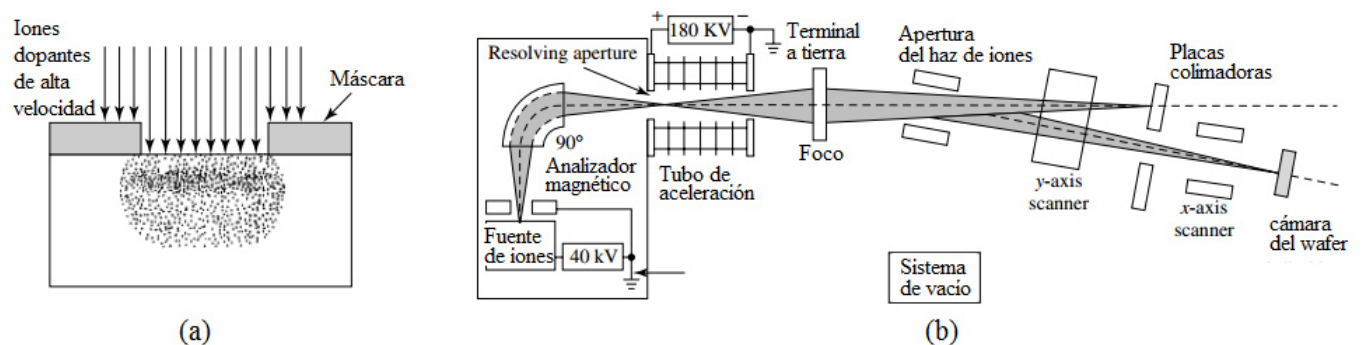


Figura 2.3: Representación del: (a) perfil de concentración del dopante, (b) sistema de implantación iónica (figura adaptada de la Ref. [26]).

## 2.2. Flujo electrónico

La ecuación fundamental de la mecánica cuántica no relativista que gobierna el comportamiento de los sistemas cuánticos es la *ecuación de Schrödinger*. Para el caso de una partícula de masa  $m$  que se propaga a lo largo del eje  $x$  sometida a un potencial de interacción  $V(x, t) \in \mathbb{R}$ , la *ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo* se expresa como:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x, t) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) \quad (2.1)$$

donde  $\Psi(x, t)$  es la *función de onda* asociada a la partícula, también llamada *amplitud de probabilidad* debido a la interpretación probabilística propuesta por M. Born. En caso el potencial de interacción sea dependiente solo de la posición (*i.e.*,  $V(x, t) = V(x)$ ) y asumiendo que siempre es posible expresar la función de onda como producto de dos funciones ( $\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t)$ ), se obtienen como soluciones de la ecuación (2.1) las denominadas funciones de onda de *estado estacionario* de la forma  $\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-i\omega t}$ , tal que la parte espacial  $\psi(x)$  se obtiene al resolver la *ecuación de Schrödinger independiente del tiempo*<sup>3</sup>:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x) \quad (2.2)$$

Como se observa, la ecuación (2.2) constituye un problema de valor propio, cuya solución analítica solo es posible en algunas situaciones, como por ejemplo, el caso del pozo de potencial, oscilador armónico, entre otros [28], [29]. Por otro lado, en el formalismo de la mecánica cuántica se define una cantidad característica denominada *corriente de probabilidad*,  $j(x)$ , que se expresa por:

$$j(x) \equiv \frac{\hbar}{2mi} \left[ \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right] \quad (2.3)$$

Justamente,  $j(x)$  se torna relevante en situaciones como el que se aborda en el presente trabajo, donde se verifica la *conservación de la corriente de probabilidad*, *i.e.* dadas las posiciones  $x_a, x_b \in \mathbb{R}$  se cumple que:  $j(x_b) = j(x_a)$  (ver Apéndice A para una deducción detallada). Para fines del presente trabajo se evalúa brevemente las implicancias de representar al electrón mediante una onda plana. Sea  $\Psi(x, t) = Ae^{+i(kx - \omega t)}$  la función de onda que representa al electrón propagándose en dirección  $+x$ . Al evaluar dicha función de onda electrónica en la ecuación (2.3) resulta:  $j(x) = \frac{\hbar k}{m} |A|^2 = v\Psi^*\Psi = v\rho$ . Si se considera además el producto de esta última expresión con la carga eléctrica elemental (*i.e.*,  $qj(x) = v\rho q$ ), la conservación de  $j(x)$  se puede reinterpretar como la *conservación del flujo electrónico*.

<sup>3</sup>A partir de ahora se hará referencia a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo simplemente como *ecuación de Schrödinger*.

### 2.3. Medida estadística de complejidad

La medida estadística de complejidad propuesta por R. López-Ruiz, H. Mancini y X. Calbet ( $C$ ) [10] parte de la idea intuitiva que los sistemas idealizados, como el *crystal* (sistema completamente ordenado) y el *gas ideal* (sistema completamente desordenado), son sistemas sin complejidad alguna (*i.e.*  $C = 0$ ), por consiguiente los sistemas con algún nivel de complejidad deben encontrarse en la región entre estos sistemas extremo idealizados [11].

Con la finalidad de caracterizar estos sistemas, López-Ruiz *et al.* consideran dos cantidades: la *entropía Shannon* ( $H$ ) [30], que consituye una medida de la cantidad de información contenida en el sistema, y el *desequilibrio* ( $D$ ), definida como una métrica <sup>4</sup> en el espacio de probabilidades respecto a la distribución equiprobable [31]. Aunque ninguna de estas cantidades por sí sola muestra el comportamiento esperado de la complejidad en los casos extremo (pues al ir del cristal al gas ideal la cantidad de información requerida para describir al sistema correspondiente aumenta mientras que su respectivo desequilibrio disminuye), López-Ruiz *et al.* observan que el producto de dichas cantidades, *i.e.*  $C = HD$ , sí reproduce el comportamiento esperado en una medida de complejidad, asignando complejidad mínima a los sistemas extremo y destacando un sistema con una complejidad máxima en la región intermedia, tal como sugiere la evaluación del comportamiento esperado de  $C$  mostrado en la figura 2.4.

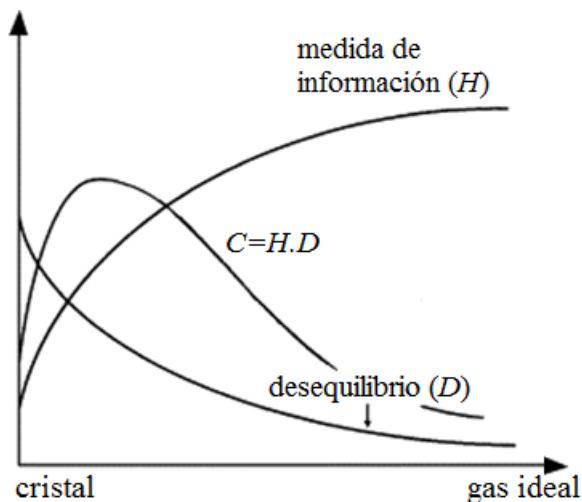


Figura 2.4: Comportamiento esperado de la medida de la información,  $H$ , el desequilibrio,  $D$ , y la medida estadística de complejidad,  $C$ , propuesta por López-Ruiz *et al.* (figura adaptada de la Ref. [10]).

<sup>4</sup>Una *métrica* es una función que define una distancia entre cada par de elementos de un conjunto.

La cantidad característica y fundamental en la formulación de la medida de complejidad es la *función de distribución de estados*, que para una distribución discreta de estados está dada por la función de probabilidad  $p(x_j)$  y para una distribución continua de estados, por la función de densidad de probabilidad  $\rho(x)$ . El estado podría corresponder por ejemplo, al spin de un átomo (sistema discreto) o a la posición de un electrón (sistema continuo). A continuación se plantea la formulación de la medida estadística de complejidad  $C$  para ambos casos.

### 2.3.1. Distribución discreta de estados

Para un sistema caracterizado mediante una distribución discreta con  $N$  estados accesibles  $\{x_1, x_2, \dots, x_N\}$  y con su correspondiente distribución de probabilidades  $\{p_1, p_2, \dots, p_N\}$ , tal que  $\sum_{j=1}^N p_j = 1$ , la medida estadística de complejidad [10],  $C$ , se define por:

$$C = HD \quad (2.4)$$

donde la entropía de Shannon,  $H$ <sup>5</sup>, y el desequilibrio,  $D$ , se expresan como:

$$H = -K \sum_{j=1}^N p_j \ln p_j \quad D = \sum_{j=1}^N \left( p_j - \frac{1}{N} \right)^2 \quad (2.5)$$

La entropía de Shannon es una cantidad que cumple las siguientes propiedades: (i) positividad, *i.e.*  $H \geq 0$  para cualquier conjunto arbitrario  $\{p_j\}$ ; (ii) concavidad, alcanzando su valor extremo para la distribución equiprobable; (iii) aditividad, *i.e.*  $H(A \cup B) = H(A) + H(B)$ , con  $A$  y  $B$  sistemas independientes. La evaluación de la entropía de Shannon para el caso de una distribución equiprobable, con  $p_j = 1/N \forall j \in \mathbb{N}$ , resulta en  $H = K \ln N$ , que coincide con la formulación de la entropía termodinámica para un sistema aislado si se considera  $K$  igual a la constante de Boltzmann (*i.e.*,  $K = k_B$ ). El desequilibrio,  $D$ , constituye una especie de distancia en el espacio de probabilidades respecto a la distribución equiprobable, estableciendo así una jerarquía probabilística cuyo máximo corresponde al sistema completamente ordenado. Justamente para el caso de un sistema completamente desordenado, con todos sus estados igualmente probables, resulta  $D_{min} = 0$ .

La evaluación de estas cantidades para los sistemas extremo (cristal y gas ideal) permite profundizar en las características de la medida estadística de complejidad  $C$ . En el caso del cristal, que corresponde al sistema completamente ordenado, se tiene un estado preferencial ( $x_c$ ), tal que  $p_c = 1$  y  $p_j = 0 \forall x_j \neq x_c$ , de manera que  $H_{cristal} = 0$  con  $D_{cristal} > 0$  máximo y finito ( $D_{cristal} \rightarrow 1$  para  $N \rightarrow \infty$ ), resultando  $C_{cristal} = 0$ . Asimismo, el gas ideal, que corresponde al

<sup>5</sup>La definición original de la entropía de Shannon es  $H_{Shannon} = -K \sum_{j=1}^N p_j \log_2 p_j$ . Sin embargo, para el presente trabajo se determina  $H = (\ln 2) H_{Shannon}$  y se considera  $\ln 2 = 1$ .

sistema completamente desordenado, se caracteriza por sus estados equiprobables, *i.e.*  $p_j = 1/N$   $\forall x_j$  y por consiguiente la entropía de Shannon alcanza su valor máximo  $H = K \ln N$  y  $D = 0$ , resultando  $C_{gas} = 0$ . El análisis precedente permite comprobar la formulación propuesta por López-Ruiz *et. al* que asigna complejidad nula a los sistemas extremo del cristal y gas ideal. Asimismo, cabe destacar que la definición operacional, expresada en la ecuación (2.4), garantiza la positividad de  $C$ , *i.e.*  $C > 0$ .

Esta formulación de  $C$  ha sido aplicada con éxito en: la caracterización de regímenes caóticos en sistemas dinámicos (*e.g.* mapa logístico, mapa de Lorenz) [10], [12], el estudio de la dinámica de un modelo de gas ideal fuera del equilibrio [14], y la caracterización de atributos estadísticos en secuencias de ADN [32]. Se muestra a continuación la aplicación de la medida estadística de complejidad en la caracterización de los elementos de la tabla periódica.

### Complejidad en los elementos de la tabla periódica

Como se ha indicado previamente, la medida estadística de complejidad aplicado a sistemas de muchos cuerpos ha mostrado correspondencias con la distribución de sus elementos constituyentes brindando información sobre sus propiedades conformacionales. Este es el caso de los átomos de los elementos químicos de la tabla periódica donde la distribución de probabilidad correspondiente se puede obtener a partir de la fracción de población electrónica (también utilizado en [33]) asociado a cada estado, el cual está representado como  $(nl)^w$ , con  $n$  el número cuántico principal,  $l$ , el número cuántico orbital, y  $w$  el número de electrones. En la figura 2.5 se observa que la mayoría de los gases nobles ( $Z=2,10,18,36,54,86$ ) tienen una complejidad mínima local (excepto en los casos  $Z=10,18$ ) y dado que son sistemas con su última capa completa, se puede afirmar que la medida de complejidad caracteriza la estructura en capas de los átomos de los elementos químicos. Por otro lado, el crecimiento casi continuo de la entropía se justifica por el progresivo aumento en la cantidad de estados de los elementos a medida que se incrementa  $Z$ . Este comportamiento contrasta con el comportamiento irregular del desequilibrio debido tanto a la población electrónica como a la cantidad de estados que para algunos elementos es común.

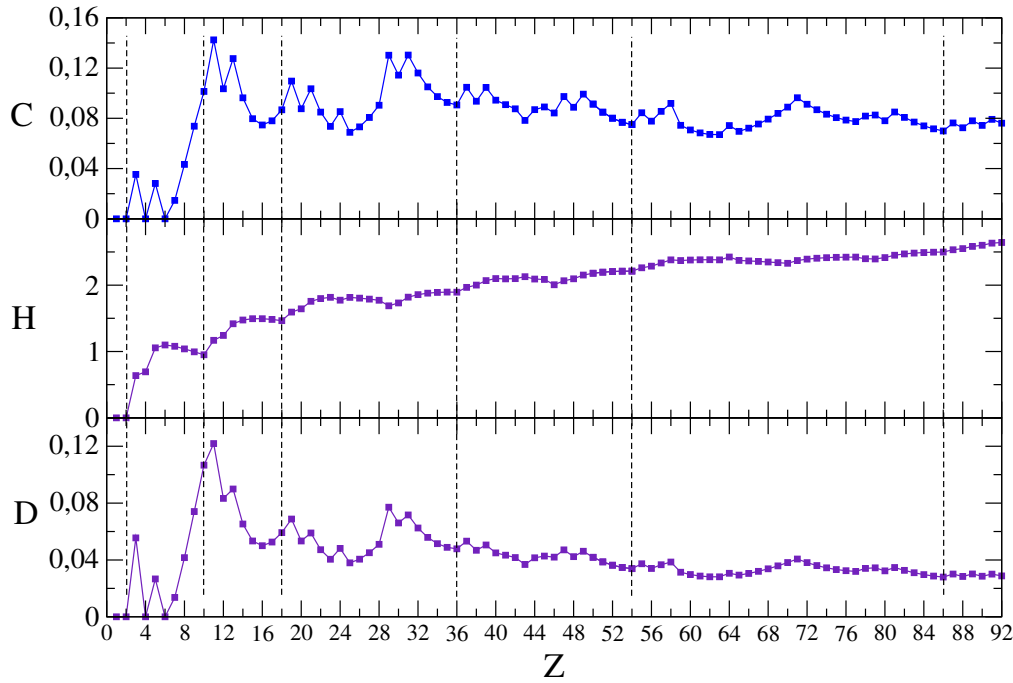


Figura 2.5: Medida estadística de complejidad,  $C = HD$ , entropía de Shannon,  $H$ , y disequilibrio,  $D$ , en función del número atómico,  $Z$ , de los elementos químicos naturales de la tabla periódica. Las líneas punteadas corresponden a los gases nobles.

### 2.3.2. Distribución continua de estados

La extensión de la formulación de  $C$  del caso discreto (ecuación (2.4)) al caso de un sistema con una distribución continua de estados caracterizado por una densidad de probabilidad  $\rho(x)$  definida en el soporte  $\Lambda$ <sup>6</sup> y tal que  $\int_{\Lambda} \rho(x) dx = 1$ , considera  $H = -K \int_{\Lambda} \rho(x) \ln \rho(x) dx$  y  $D = \int_{\Lambda} \rho^2(x) dx$ , de manera que la medida de complejidad vendría dada por el producto respectivo, *i.e.*  $C = HD$ . Aunque esta extensión se ha aplicado en la caracterización del régimen de emisión estimulada en un modelo de láser [13], se han encontrado ciertas inconsistencias, como por ejemplo la falta de positividad de  $C$  [12]. Esto derivó en la reformulación de  $C$  por parte de R. Catalán *et al.* [34], tomando en cuenta el producto de la exponencial simple de  $H$  y  $D$ , es decir:

$$C = e^H D \quad (2.6)$$

La reformulación de  $C$  mostrada en la ecuación (2.6), y que es la que se utiliza en el presente

<sup>6</sup>Se denomina *soporte* al intervalo de valores donde la densidad de probabilidad no es nula.

trabajo, recupera la positividad de  $C$  además de presentar propiedades interesantes, como por ejemplo la de ser invariante bajo transformaciones de traslación y cambios de escala así como la invariancia bajo replicaciones. Esta última propiedad es considerada un requisito indispensable de toda medida de complejidad según Lloyd & Pagels [8]. Asimismo, se determina que el mínimo de complejidad corresponde a  $C_{min} = 1$  y está asociado a una distribución de estados equiprobable (uniforme o rectangular); sin embargo,  $C$  no tiene máximo específico y puede alcanzar un valor muy grande. A manera de ejemplo, se expone a continuación la aplicación de la medida estadística de complejidad  $C$  en la caracterización de los estados electrónicos en el modelo de Kronig-Penney.

### Complejidad en el modelo de Kronig-Penney

Como se ha visto en el caso de una distribución discreta, el ingrediente esencial para el cálculo de la medida de complejidad es la función que caracteriza la distribución de los estados del sistema, que para el caso continuo viene especificado en la función de densidad de probabilidad  $\rho(x)$ . Un sistema donde dicha función se puede determinar de forma exacta y con relativa facilidad, es en el caso del modelo de Kronig-Penney. Dicho modelo, paradigmático de la física del estado sólido, consiste en una sucesión infinita de barreras de potencial de ancho y alturas finitas, que en el caso límite (ancho de barrera infinitesimal y altura infinita) se puede representar por una cadena de potenciales delta, tal que el potencial de interacción se puede expresar como  $V(x) = (\hbar^2/m)\Omega \sum_{j=1}^n \delta(x - ja)$ . Dado que en la región entre potenciales el electrón es libre, la función de onda se puede representar como una combinación de ondas planas de la forma:  $\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$ , por ejemplo en la región  $0 < x < a$ . Si se toma en cuenta que el potencial es periódico, la aplicación del teorema de Bloch que establece  $\psi(x + a) = e^{iQa}\psi(x)$ , permite expresar la función de onda en la región  $a < x < 2a$  como:  $\psi(x) = e^{iQa}[A \sin k(x - a) + B \cos k(x - a)]$ , con  $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ . La aplicación de las condiciones de frontera pertinentes en  $x = a$  (que en este caso corresponden a la discontinuidad de  $\frac{d}{dx}\psi(x)$  y continuidad de  $\psi(x)$ ) conducen a la siguiente relación:

$$\begin{pmatrix} \sin ka & \cos ka - e^{iQa} \\ (ke^{iQa} - k \cos ka - 2\Omega \sin ka) & (k \sin ka - 2\Omega \cos ka) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

Si además se considera la condición de no trivialidad de soluciones (*i.e.* el determinante de la matriz que acompaña al vector de coeficientes igual a cero) se puede obtener la siguiente relación:

$$\cos Qa = \cos ka + \frac{\Omega}{k} \sin ka \quad (2.8)$$



Evidentemente, sólo los estados electrónicos cuyos valores de  $k$  cumplan la ecuación (2.8) constituyen estados electrónicos permitidos. Considerando además que a cada valor de  $k$  le corresponde un valor de  $E$ , la ecuación (2.8) establece las regiones de energías permitidas (*bandas*) y regiones de energías prohibidas (*gaps*).

Por otro lado, a partir de la ecuación (2.8) se obtiene la siguiente expresión:  $B = A \frac{\text{sen } ka}{e^{iQa} - \cos ka}$ , que establece una relación entre los coeficientes  $A$  y  $B$ . Si además se considera la condición de normalización, se puede determinar completamente la función de onda (salvo un factor de fase) y por consiguiente la función de densidad de probabilidad electrónica requerido para el cálculo de la medida de complejidad. Justamente, Sañudo *et al.* [19] realizaron el procedimiento descrito procediendo a la normalización de la función de onda en el intervalo  $0 < x < a$ . Sin embargo, tal como se planteó en [41], la normalización de la función de onda correspondiente a la longitud de onda más larga requiere considerar al menos el intervalo  $0 < x < 3a$ . En el presente caso, la normalización se realizó considerando la longitud completa de la cadena de potenciales.

El comportamiento de la entropía y del desequilibrio para el modelo de Kronig-Penney muestran las tendencias consideradas en la formulación inicial de la medida de la complejidad, donde se espera un comportamiento inverso entre ellos. En este caso mientras la entropía crece (disminuye), el desequilibrio decrece (aumenta), como se muestra en la figura 2.6. Por otro lado, la medida de complejidad caracteriza los estados electrónicos de los bordes de la banda con complejidad máxima y los estados del centro correspondientes con complejidad mínima. Más aún, la tendencia del mínimo de complejidad para bandas de ordenes mayores, corresponde adecuadamente al valor mínimo de complejidad planteado en [34].

Es importante comentar que en [19] se ha propuesto que, dado que los metales monovalentes, como son por ejemplo los metales alcalinos (Li, Na, K, Rb, Cs) y metales nobles (Cu, Ag, Au), son materiales con su última banda *semillena* y que además presentan una alta conductividad, tales sistemas se podrían caracterizar también por tener sus estados electrónicos más energéticos con complejidad mínima.

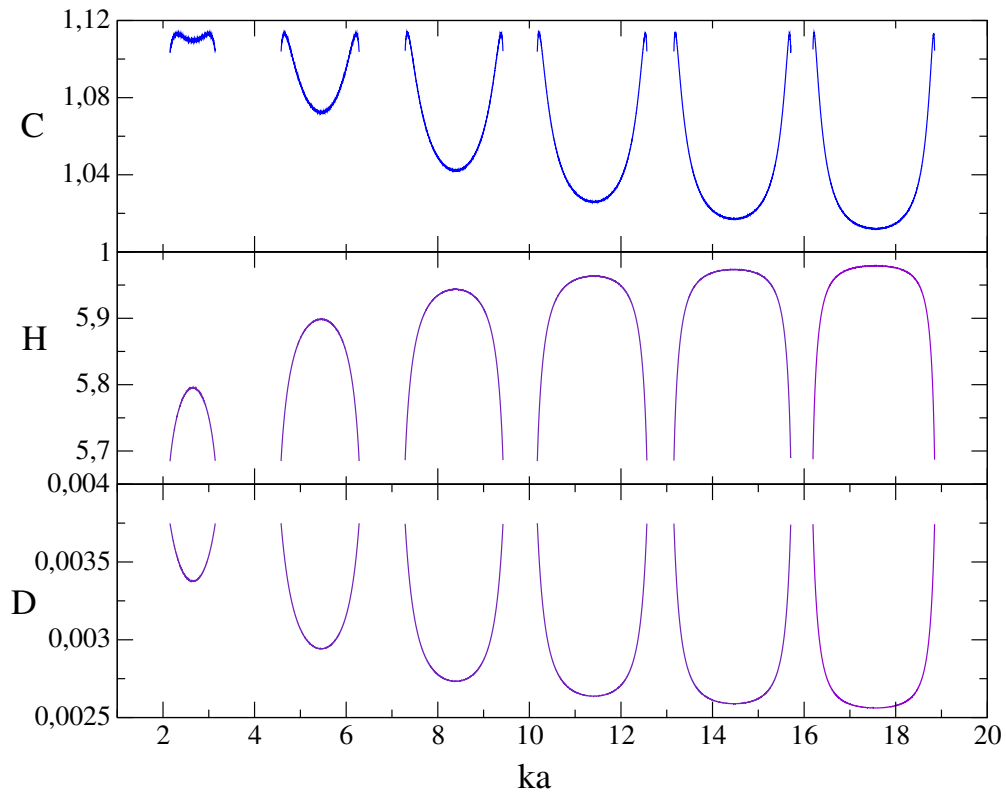


Figura 2.6: Medida estadística de complejidad,  $C = e^H D$ , entropía de Shanon,  $H$ , y desequilibrio,  $D$ , en función del número de onda adimensional,  $ka$ , correspondiente a las seis primeras bandas del modelo de Kronig-Penney para una cadena de longitud  $L/a = 400$  con  $\Omega = 4,0 \text{ \AA}^{-1}$  y  $a = 1,0 \text{ \AA}$ .

# Capítulo 3

## Modelo y método

No importa si el gato es negro o blanco  
con tal que pueda cazar ratones.

**Deng Xiaoping**

En el presente capítulo se introduce el modelo de sólido unidimensional (1D) con desorden químico y la metodología de la matriz de transferencia que se utiliza para obtener la función de onda electrónica y por consiguiente la densidad de probabilidad, que constituyen los ingredientes esenciales para obtener el flujo electrónico y la medida estadística de complejidad.

### 3.1. Modelo de sólido 1D con desorden químico

Como se discutió en el capítulo 2, un sólido con desorden químico se obtiene al variar las especies químicas asociadas a los puntos de la red subyacente. Justamente, la propuesta de modelo de sólido 1D con desorden químico del presente trabajo, parte de un modelo de sólido cristalino denominado *modelo de Kronig-Penney* (MKP) [20], al cual se le incorpora modificaciones convenientes asociadas a la variabilidad de las especies químicas en los puntos de la red. El MKP es un modelo paradigmático de la materia condensada y aunque simple permite reproducir características relevantes de sistemas reales, como por ejemplo la distribución de las energías permitidas en las denominadas *bandas de energía*, que constituye un ingrediente esencial para identificar a un material como metal, semiconductor o aislante [21]. Además, el MKP ha sido utilizado con éxito en el estudio de sistemas cuasiperiódicos [22], con desorden correlacionado [23], con desorden estructural [24], líquidos [35],[36], entre otros.

Si bien el MKP original considera una sucesión *at infinitum* de barreras de potencial de ancho y alto definidas separadas por una distancia constante, para fines del presente trabajo se utiliza la representación mediante una sucesión finita de potenciales tipo delta, tal como se puede ver en la figura 3.1-(a). El modelo de sólido con desorden químico se obtiene al incorporar la variación en las intensidades de los potenciales de interacción asociados a los puntos de la red subyacente, tal como está representado en la figura 3.1-(b). P.W. Anderson abordó en [37] el estudio de los efectos del desorden químico, utilizando para ello la aproximación *tight-binding* e incorporando el desorden mencionado mediante la variación en las energías de sitio.

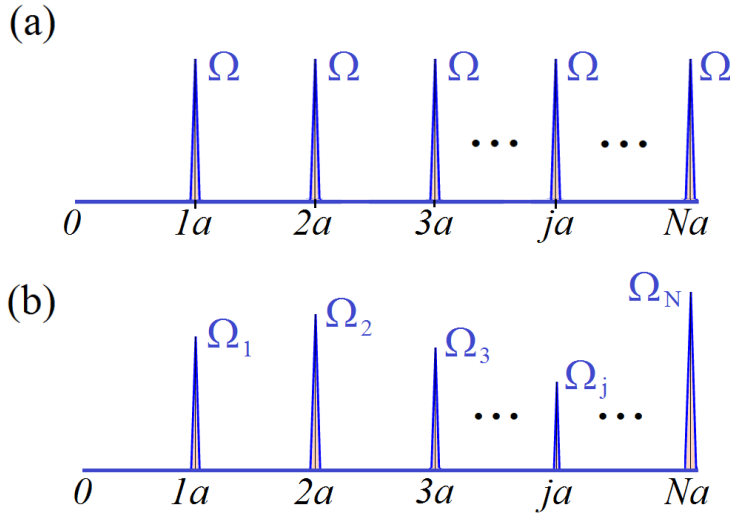


Figura 3.1: Representación de: (a) modelo de Kronig-Penney, y (b) modelo de sólido 1D con desorden químico.

Tomando en cuenta lo indicado, en el presente trabajo se representa la energía potencial de interacción de la onda electrónica con el sistema dispersor (conjunto de iones y electrones) <sup>1</sup>, mediante el siguiente potencial:

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{m} \sum_{j=1}^n \Omega_j \delta(x - x_j) \quad (3.1)$$

con  $\hbar^2\Omega_j/m$  correspondiente al área de  $V(x)$  en torno del sitio  $x_j$  en unidades de energía-longitud, y con  $\Omega_j$  en unidades de inversa de la longitud. Se observa que el MKP (sin desorden) se obtiene al considerar  $\Omega_j = \Omega$  ( $\forall j \in \mathbb{N}$ ), con  $a, \Omega \in \mathbb{R}^+$ .

<sup>1</sup>Esta representación toma en cuenta una aproximación de tipo *campo medio*.

La inclusión de desorden químico en el MKP se consigue al mantener los potenciales en sus posiciones equidistantes ( $x_j = ja$ ) y permitiendo que las intensidades de los potenciales varíen de forma aleatoria, de manera que  $\Omega_j = \Omega + \epsilon_c \Omega$ , con  $\epsilon_c$  un número aleatorio entre  $[-W, +W]$ . Cuando el nivel de desorden corresponde a  $W = 1$ , la intensidad de los potenciales varía tal que  $0 < \Omega_j < 2\Omega$ .

## 3.2. Método de la matriz de transferencia

Una metodología de amplio uso en el estudio de la propagación 1D de electrones, ondas electromagnéticas y sonido en medios estratificados es el método de la matriz de transferencia (MMT) [28], [38],[39]. El MMT además de ser intuitivo constituye una herramienta cuya implementación computacional facilita el cálculo de cantidades asociadas al transporte como es el caso del coeficiente de transmisión y reflexión, permitiendo así el estudio de las propiedades de transporte tanto en sistemas cristalinos como desordenados.

La matriz de transferencia permite estudiar las propiedades de la muestra a través de experimentos de dispersión. Experimentalmente se prepara una onda plana con un vector de onda definido  $k$  y se mide la transmisión de la onda a través del potencial. Tanto el coeficiente de transmisión como el de reflexión y los elementos de la matriz de transferencia son funciones de  $k$ . Así se puede estudiar las propiedades del sistema a partir de la dispersión de la onda plana.

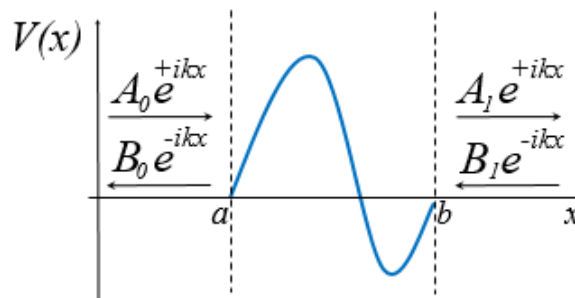


Figura 3.2: Representación del potencial de interacción electrón-sistema dispersor definido en el intervalo  $a < x < b$  y del electrón como un combinación de ondas planas.

Con la finalidad de presentar el planteamiento general del MMT considere el potencial de interacción electrón-sistema dispersor,  $V(x)$ , acotado y definido en el intervalo  $a < x < b$ , tal como se muestra en la figura 3.2. Sea además el electrón en las regiones adyacentes representado mediante una combinación de ondas planas expresadas como:

$$\begin{aligned}\psi_0(x) &= A_0 e^{+ikx} + B_0 e^{-ikx} & x < a \\ \psi_1(x) &= A_1 e^{+ikx} + B_1 e^{-ikx} & b < x\end{aligned}$$

con las amplitudes  $A_0, A_1$  asociadas a la onda electrónica con dirección de propagación  $+x$ , y las amplitudes  $B_0, B_1$  correspondientes a la propagación en dirección  $-x$ . El MMT se basa en la existencia de una matriz  $M$  de orden  $2 \times 2$ , denominada *matriz de transferencia*, que relaciona las amplitudes de las ondas planas en las regiones adyacentes a la región donde se encuentra definido el potencial, y que se obtiene a partir de la aplicación de las condiciones de frontera pertinentes, tal que:

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

La matriz de transferencia  $M$  tiene propiedades matemáticas interesantes: sus elementos diagonales son complejos conjugados entre sí (*i.e.*  $M_{11} = M_{22}^*$  y  $M_{12} = M_{21}^*$ ), como consecuencia de la *invarianza por reversibilidad temporal* de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo; y su determinante es la unidad (*i.e.*  $|M| = 1$ ), como producto de la *conservación de la corriente de probabilidad* (ver Apéndice B para mayor detalle).

En resumen, la estructura de  $M$  depende del potencial específico que se analice y se obtiene mediante la aplicación de las condiciones de frontera adecuadas y sus elementos cumplen las propiedades indicadas anteriormente. La extensión del MMT a una *sucesión de potenciales* (cadena) es directa y da origen a una *matriz de transferencia global* que viene a ser el producto de las matrices de transferencia asociadas a cada potencial dispersor, como se verá a continuación.

### 3.3. Normalización y cálculo de la densidad de probabilidad y flujo electrónico

Habiendo planteado en las secciones anteriores tanto el modelo de sólido 1D con desorden químico como la metodología de la matriz de transferencia, en esta sección se abordará el cálculo de la función de onda electrónica y de la función de densidad de probabilidad requeridas para obtener la corriente de probabilidad y la medida estadística de complejidad, respectivamente. Se plantea a continuación el análisis que conduce a la matriz de transferencia local (en el intervalo  $(j-1)a < x < ja$ ) y la extensión respectiva para la matriz de transferencia global ( $0 < x < Na$ ).

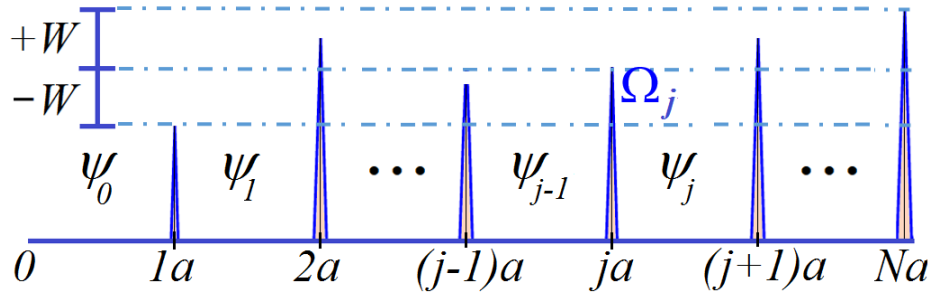


Figura 3.3: Representación del potencial de interacción entre el electrón y sólido 1D con desorden químico.

Sea el potencial de interacción, entre el electrón y el sólido 1D con desorden químico, representado por una cadena de potenciales de largo  $L = Na$ , como el mostrado en la figura 3.3. Dado que la región entre potenciales corresponde a un potencial nulo se puede representar al electrón como una combinación de ondas planas, tal que:

$$\begin{aligned}\psi_j(x) &= \tilde{A}_j e^{+ikx} + \tilde{B}_j e^{-ikx} \\ \psi_{j-1}(x) &= \tilde{A}_{j-1} e^{+ikx} + \tilde{B}_{j-1} e^{-ikx}\end{aligned}\quad (3.3)$$

Aplicando las condiciones de contorno pertinentes en la posición  $x = ja$  y considerando que  $A_j = \tilde{A}_j e^{+ikx_j}$ ,  $B_j = \tilde{B}_j e^{-ikx_j}$  y  $x_j - x_{j-1} = a$  (ver Apéndice C para mayores detalles), se puede demostrar que:

$$\begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} = M_j \begin{pmatrix} A_{j-1} \\ B_{j-1} \end{pmatrix}\quad (3.4)$$

con  $M_j$  la matriz de transferencia local dada por:

$$M_j = \begin{pmatrix} (1 - i\frac{\Omega_j}{k})e^{+ika} & -i\frac{\Omega_j}{k}e^{-ika} \\ +i\frac{\Omega_j}{k}e^{+ika} & (1 + i\frac{\Omega_j}{k})e^{-ika} \end{pmatrix}\quad (3.5)$$

De esta última relación, se puede comprobar que se cumplen las siguientes propiedades:  $M_{11} = M_{22}^*$ ,  $M_{12} = M_{21}^*$  y  $|M| = 1$ . Asimismo, de la ecuación (3.4) se deduce que para la cadena completa se cumple que:

$$\begin{pmatrix} A_N \\ B_N \end{pmatrix} = \tilde{M} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}\quad (3.6)$$

con  $\tilde{M} = M_N M_{N-1} \dots M_2 M_1$  la *matriz de transferencia global* que considera las múltiples dispersiones que experimenta la onda electrónica a lo largo de la cadena. Con la finalidad de re-

solver la ecuación (3.6) y obtener todas las posibles soluciones, se procede a plantear el problema del valor propio:

$$\begin{pmatrix} \tilde{M}_{11} & \tilde{M}_{12} \\ \tilde{M}_{12} & \tilde{M}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

con  $\lambda \in \mathbb{C}$ <sup>2</sup>. La no trivialidad de soluciones (*i.e.*  $A_0, B_0 \neq 0$ ) conlleva al planteamiento  $\det(\tilde{M} - I\lambda) = 0$ , que resulta:

$$\lambda = s \pm \sqrt{s^2 - 1} \quad (3.8)$$

donde se ha definido  $s \equiv \frac{1}{2}(\tilde{M}_{11} + \tilde{M}_{22})$  y se ha considerado la propiedad  $\det(\tilde{M}) = 1$ . Considerando además que  $A_N = \lambda A_0$ ,  $B_N = \lambda B_0$  (que se obtiene al comparar la ecuación (3.6) con (3.7)), la conservación de la corriente de probabilidad (*i.e.*  $j_N = j_0$ ) se puede expresar como:

$$|\lambda|^2(|A_0|^2 - |B_0|^2) = (|A_0|^2 - |B_0|^2) \quad \rightarrow \quad \lambda_{\pm} = e^{\pm i\theta} \quad (3.9)$$

Comparando las ecuaciones (3.8) y (3.9) se obtiene:

$$s^2 \leq 1 \quad (3.10)$$

Dado que la matriz de transferencia global ( $\tilde{M}$ ) se obtiene como el producto de las matrices asociadas a los potenciales delta sucesivos y que cada una de dichas matrices ( $M_j$ ) es función de  $k$  (veáse la relación (3.5)), se deduce que la ecuación (3.10) conlleva a la estructura electrónica de las *bandas* y *gaps* de energía, pues dicha ecuación restringe los posibles valores que puede tener la energía del electrón, tal como puede verse para el caso del modelo de Kronig-Penney en la figura 3.4. Tal relación (ecuación (3.10)) constituye el equivalente de  $|\sin(ka) + \frac{\Omega}{a} \cos(ka)| \leq 1$ , que se obtiene al evaluar analíticamente el modelo de Kronig-Penney mediante el teorema de Bloch.

Por otro lado, se puede expresar  $B_0$  en función de  $A_0$  mediante la relación (3.7), con lo cual se obtiene un par de relaciones equivalentes. Una de ellas, y que es la que se utiliza en el trabajo, se puede expresar como:

$$B_0 = \frac{\lambda - \tilde{M}_{11}}{\tilde{M}_{12}} A_0 \equiv u A_0 \quad (3.11)$$

---

<sup>2</sup>El caso en que  $\lambda = 1$  corresponde al planteamiento de condiciones de frontera de Born-von Karman.



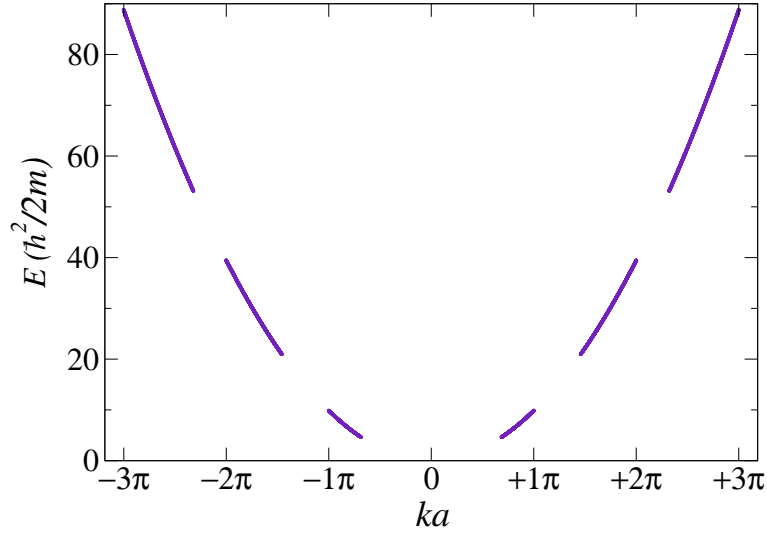


Figura 3.4: Representación de la estructura de bandas electrónicas para el MKP (cadena de potenciales delta) con  $\Omega_j = 4,0 \text{ \AA}^{-1}$  y  $a = 1,0 \text{ \AA}$ .

Tomando en cuenta la relación (3.11), donde  $u$  establece una relación entre las amplitudes de las ondas reflejada e incidente (*i.e.*  $u = B_0/A_0$ ), y considerando el *flujo electrónico normalizado* como  $J(x) = \frac{j(x)}{\hbar k/m}$ , se deduce que:

$$J(x) = |A_0|^2 [1 - |u|^2] \quad (3.12)$$

Finalmente, al considerar la condición de normalización de la densidad de probabilidad a lo largo de la cadena (*i.e.* en  $0 < x < L = Na$ ), se puede determinar (salvo un factor de fase) la función de onda electrónica,  $\psi(x)$ , y por consiguiente la función de densidad de probabilidad,  $\rho(x) = |\psi(x)|^2$ . Esto conduce a las siguientes expresiones:

$$\rho(x) = |A_0|^2 \{1 + |u|^2 + 2u_r \cos(2kx) + 2u_i \sin(2kx)\} \quad (3.13)$$

con:

$$|A_0|^2 = \frac{1}{Na \left[ 1 + |u|^2 + 2u_r \frac{\sin(2kNa)}{2kNa} + 2u_i \frac{1 - \cos(2kNa)}{2kNa} \right]} \quad (3.14)$$

donde  $u_r$  y  $u_i$  representan la parte real e imaginaria de  $u$  (cociente de las amplitudes reflejada e incidente,  $u = B_0/A_0$ ), y que como se verá más adelante constituye una cantidad relevante para el presente trabajo.

Si se toma en cuenta que en el presente estudio se consideran cadenas de longitud larga ( $L/a > 200$ ) y que las funciones trigonométricas consideradas están acotadas en  $[-1, 1]$ , se puede realizar la siguiente aproximación a segundo orden en  $1/(Na)$ :

$$|A_0|^2 = \frac{1}{Na[1 + |u|^2]} \quad (3.15)$$

Más aún, considerando esta aproximación junto con la ecuación (3.12), se obtiene una expresión para el flujo electrónico normalizado en función del cuadrado del módulo de  $u$  y de la longitud de la cadena:

$$J(x) = \frac{1}{Na} \frac{1 - |u|^2}{1 + |u|^2} \quad (3.16)$$

De las ecuaciones (3.13) - (3.16), se observa que tanto la función de densidad de probabilidad,  $\rho(x)$  (requerido para el cálculo de la medida de complejidad), como el flujo electrónico,  $J(x)$ , dependen del cociente de las amplitudes de la onda reflejada e incidente,  $u$ , definida en la ecuación (3.11). Esta es una cantidad importante para definir el transporte electrónico, como se verá en el siguiente capítulo.

# Capítulo 4

## Resultados y discusión

*Lo importante en la ciencia no es tanto obtener nuevos datos,  
sino descubrir nuevas formas de pensar sobre ellos.*

**W.L. Bragg**

### 4.1. Influencia del desorden sobre los estados electrónicos

Como se ha comentado en el capítulo precedente y se ha podido visualizar en la figura 3.4, la ecuación (3.10) permite evaluar la interacción del electrón (a modo de sonda) con el resto del sólido y reproducir la distribución de energías permitidas en las denominadas bandas, utilizando para el presente caso el potencial de interacción del tipo Kronig-Penney. Una forma alternativa de representación de la estructura de bandas, y que permite además considerar la evaluación del efecto de la longitud de la cadena de potenciales, se puede obtener al graficar los valores del número de onda adimensional ( $ka$ ) que cumplen con la condición  $|s|^2 \leq 1$  (*i.e.* estados permitidos) para diferentes longitudes de la cadena o equivalentemente diferente cantidad de potenciales.

Para el caso del modelo de Kronig-Penney sin desorden (caso periódico con  $W = 0$ ), se puede ver en la figura 4.1-(a) que el intervalo de valores permitidos de la energía es constante e independiente de la longitud de la cadena. Sin embargo, al incluir el desorden químico en la cadena, se observa que tanto la longitud de la cadena como el desorden afectan a los intervalos de energía permitidos, tal como se puede ver en las figuras 4.1 (b)-(d) para diferentes niveles de desorden. Se puede observar que para una longitud de cadena dada, el desorden químico en la cadena conlleva a una reducción de las bandas de energía (o equivalentemente, el crecimiento de los gaps). Este resultado es diferente al reportado para el efecto del desorden estructural donde

la inclusión de este tipo de desorden en el sistema conlleva a la aparición de estados permitidos adicionales en la regiones de los gaps [40],[41].

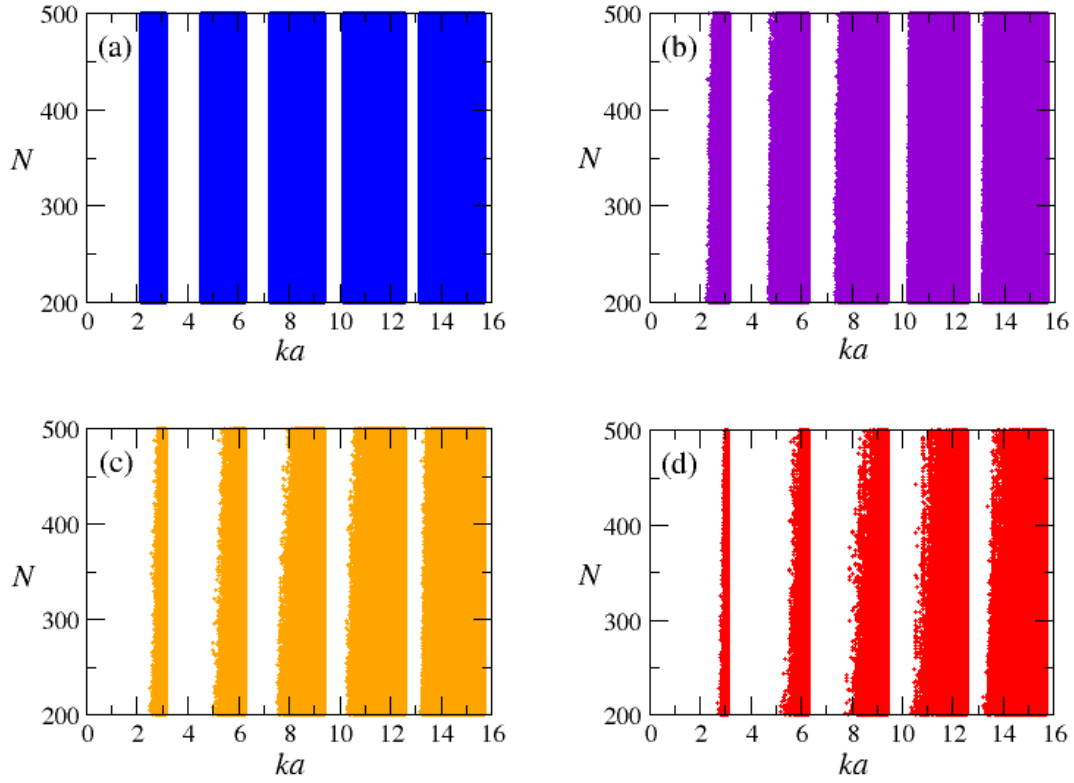


Figura 4.1: Representación de la estructura de bandas electrónica considerando los valores permitidos del número de onda adimensional,  $ka$  para diferente número de potenciales en la cadena,  $N$ , para los siguientes niveles de desorden: (a)  $W=0$ , (b)  $W=0,30$ , (c)  $W=0,60$  y (d)  $W=0,90$ . Se ha considerado  $a = 1,0 \text{ \AA}$  y  $\Omega = 4,0 \text{ \AA}^{-1}$ .

## 4.2. Análisis de los efectos del desorden químico sobre el transporte electrónico

Debido al objetivo específico del trabajo, se procederá a evaluar principalmente los efectos del desorden químico sobre algunos valores de longitud particulares ( $L/a = 200, 300, 400, 500$ ) y con la finalidad de evitar los efectos del borde de banda, el estudio se realiza sobre un estado electrónico representativo del centro de una banda permitida del modelo de Kronig-Penney. Específicamente, se evalúa el estado electrónico correspondiente a  $ka = 8,36$  (centro de la banda 3) y para que los resultados sean representativos del nivel de desorden evaluado, y no de una configuración particular, se han considerado valores promedio en base a 400 configuraciones válidas, *i.e* aquellas que cumplen con la condición expresada en la ecuación (3.10).

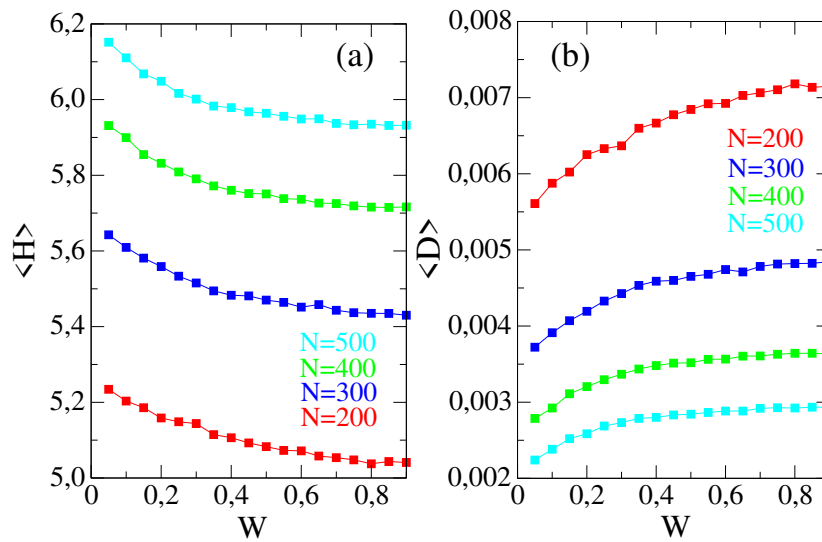


Figura 4.2: (a) Entropía de Shannon,  $H$ , y (b) disequilibrio,  $D$ , en función del nivel de desorden químico en el modelo,  $W$ , para cadenas de diferente longitud ( $L/a = N$ ).

Como puede verse en la figura 4.2-(a) para diferentes longitudes de la cadena, el desorden químico produce la reducción de la entropía de Shannon del estado electrónico correspondiente. La tendencia de tipo asintótica, que se observa más nitidamente para la cadena de mayor longitud, es hacia un valor mínimo de saturación que depende de la longitud de la cadena. Dado que en general es de esperar que la inclusión de desorden en un sistema conlleve a un incremento en la entropía del mismo, llama la atención el comportamiento producido por la inclusión del desorden químico en el modelo de Kronig-Penney. Al respecto, resulta importante tomar en cuenta que el

sistema estudiado está constituido por dos subsistemas, uno correspondiente a los electrones y el otro conformado por los potenciales desordenados (el desorden de tipo químico se traduce en la variabilidad de sus correspondientes intensidades). En el presente estudio lo que se evalúa son los efectos sobre los electrones, por lo que la reducción observada en la entropía se puede interpretar como un ordenamiento de alguna característica asociada a los electrones. Tal ordenamiento no es evidente al considerar la densidad de probabilidad electrónica puesto que la representación del electrón como una combinación de ondas planas conlleva a que se disponga extendida a lo largo de la longitud de la cadena. El origen del ordenamiento encontrado será discutido en detalle más adelante al evaluar la relación entre las amplitudes de la onda incidente y la reflejada.

Por otro lado, como se puede observar en la figura 4.2-(b), el efecto del desorden en el desequilibrio es opuesto y complementario al caso anterior, pues si bien la inclusión de desorden en el modelo conlleva al aumento del desequilibrio, tal comportamiento alcanza un valor finito de saturación, el cual depende de la longitud de la cadena. Este comportamiento sugiere que el ordenamiento evidenciado en la entropía de Shannon correspondiente al estado electrónico analizado también sería el responsable de la saturación del desequilibrio.

Aunque la distribución de probabilidad se obtiene como el cuadrado de la función de onda electrónica (ingrediente principal tanto para la entropía de Shannon como para el desequilibrio) y ésta a su vez resulta de la combinación de una onda plana incidente y otra reflejada, se puede observar en las relaciones (3.13) y (3.15) una dependencia explícita de la densidad de probabilidad con el módulo de la relación de amplitudes incidente y reflejada (*i.e.*  $|u|$ ).

Como se observa en la figura 4.3 (a)-(d), el cociente de amplitudes ( $u = B_0/A_0$ ) se caracteriza por su fase aleatoria incluso para niveles de desorden bajos. Por otro lado, resulta interesante evaluar la distribución de las componentes  $u_i$  y  $u_r$  que para un nivel de desorden  $W \approx 0,60$  y desordenes superiores (ver figura 4.3 (d)-(f)), muestran una disposición preferencial en torno a una circunferencia de radio unitario.

Esta distribución preferencial se comprueba al analizar la probabilidad,  $p(|u|)$ , con que se presentan los posibles valores del módulo  $|u|$ , tal como se puede observar en la figura 4.4 (a)-(f). Este análisis del cociente de amplitudes,  $u$ , indica que a pesar del desorden químico en el sistema, que se expresa mediante la variabilidad de las intensidades de los potenciales delta, surge un ordenamiento en la relación de amplitudes, de manera que a medida que se incrementa el nivel de desorden en el sistema, la distribución de valores de  $u$  tiende hacia un estado preferencial caracterizado por  $|u| = 1$ , que implica a su vez la igualdad de los módulos de las amplitudes de

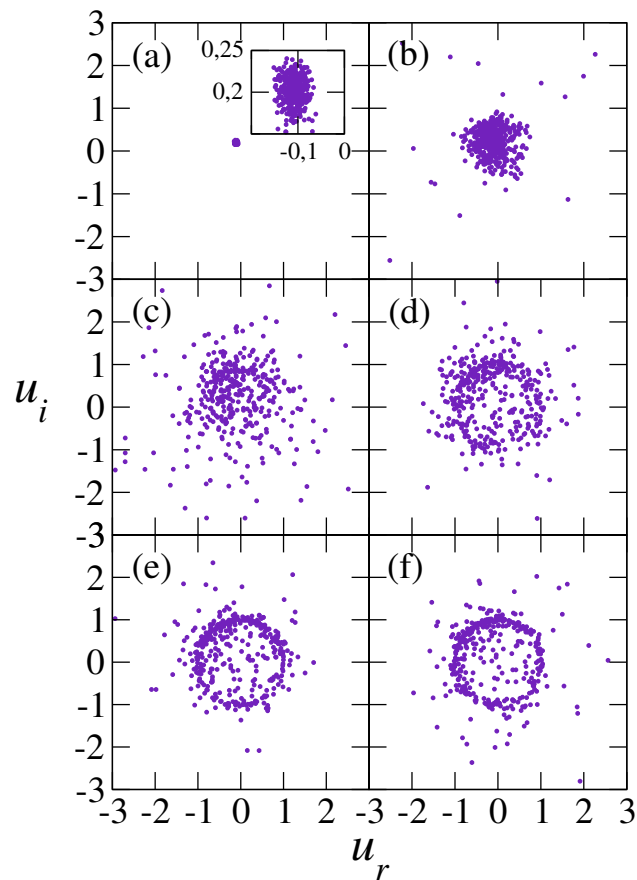


Figura 4.3: Diagramas de dispersión de los valores de la parte imaginaria,  $u_i$ , y parte real,  $u_r$ , para una cadena de longitud correspondiente a  $L/a = 400$  y diferentes niveles de desorden: (a)  $W=0,01$ , (b)  $W=0,20$ , (c)  $W=0,40$ , (d)  $W=0,60$ , (e)  $W=0,80$ , (f)  $W=0,90$ .

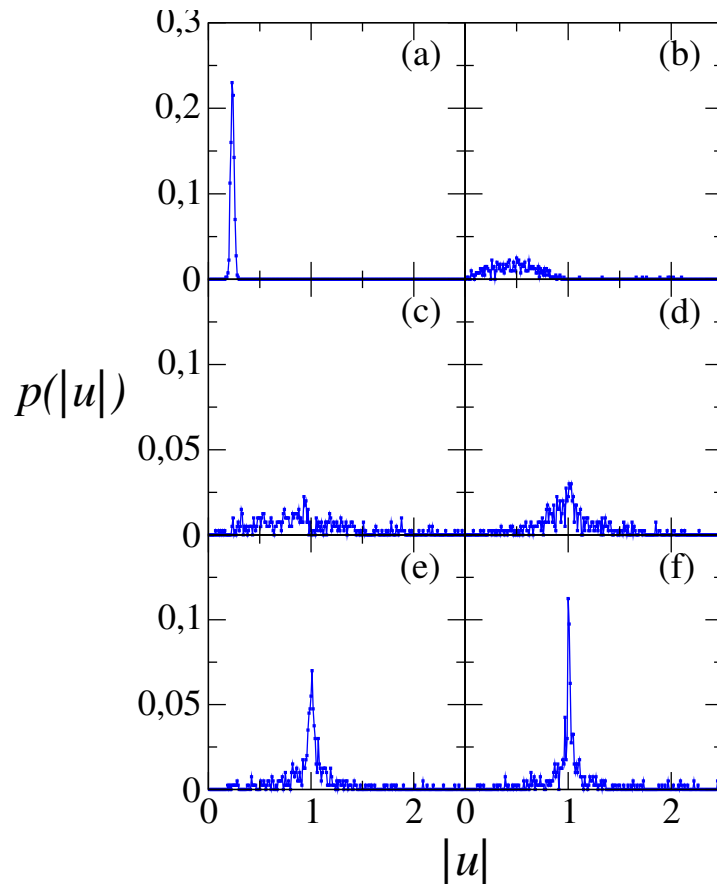


Figura 4.4: Probabilidad,  $p(|u|)$ , en función del módulo del cociente de amplitudes,  $|u|$ , para una cadena de potenciales correspondiente a  $L/a = 400$  y para diferentes niveles de desorden: (a)  $W=0,01$ , (b)  $W=0,20$ , (c)  $W=0,40$ , (d)  $W=0,60$ , (e)  $W=0,80$ , (f)  $W=0,90$ .



las ondas incidente y reflejada. Justamente esta tendencia al ordenamiento en la relación de amplitudes se refleja en la eventual reducción hacia un valor límite tanto de la entropía de Shannon como en el incremento y saturación del desequilibrio que se observaron en la figura 4.2.

La medida estadística de complejidad que se observa en la figura 4.5-(a) muestra el aumento de  $C$ , conforme se incrementa el desorden químico en la cadena, hasta un valor de saturación  $C \approx 1,104$  que resulta aproximadamente independiente de la longitud de la cadena y que se alcanza para  $W \approx 0,60$ . El comportamiento observado en el presente estudio resulta compatible con lo previsto para los límites de los valores de la medida de complejidad que establece un mínimo  $C = 1$  y un máximo que en principio puede ser cualquier valor [34].

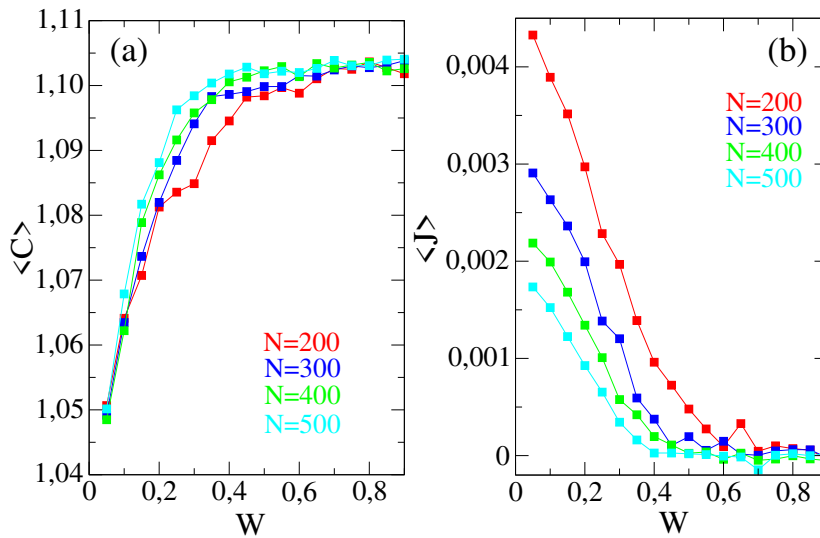


Figura 4.5: (a) Complejidad,  $C$ , y (b) flujo electrónico normalizado,  $J$ , en función del nivel de desorden,  $W$ , para cadenas de diferente longitud ( $L/a = N$ ).

Por otro lado, como se puede observar en la figura 4.5-(b), el flujo electrónico normalizado  $J(x)$  se reduce a medida que se incrementa el desorden químico en el modelo de Kronig-Penney. Tal reducción depende en cierta medida de la longitud de la cadena. Sin embargo, cabe mencionar que a partir de  $W \approx 0,60$  el flujo electrónico es prácticamente despreciable, indicando la inhibición del transporte electrónico en la cadena. Este comportamiento es compatible con el ordenamiento en la relación de amplitudes  $u$  encontrado previamente al justificar la reducción de la entropía del estado electrónico analizado, pues la igualdad de los módulos de las amplitudes de las ondas incidente y reflejada que se evidencia en  $|u| = 1$  conlleva, según la ecuación (3.12),

a la anulación del flujo electrónico. Estudios análogos en sistemas con desorden químico realizados mediante otros métodos corroboran este efecto [37].

Resulta interesante observar que a medida que el desorden en el sistema aumenta, la medida de complejidad alcanza un valor máximo de saturación y el flujo electrónico normalizado se reduce hasta un nivel que resulta despreciable. Para los niveles de desorden estudiados en el modelo, tal comportamiento ocurre a partir de un nivel de desorden  $W \approx 0,60$ . Esto permite considerar a la medida estadística de complejidad,  $C$ , como un indicador relevante en las propiedades de transporte electrónico.

# Capítulo 5

## Conclusiones y perspectivas

*La ciencia nunca resuelve un problema sin crear otros 10 más.*

**G.B.Shaw**

### Conclusiones

En el presente trabajo se realizó un estudio de la influencia del desorden químico sobre la complejidad electrónica en el modelo de Kronig-Penney. Los efectos del desorden químico se evaluaron mediante la entropía de Shannon, el desequilibrio, una medida estadística de complejidad y el flujo electrónico. La función de onda y la densidad de probabilidad electrónica se obtuvieron mediante la metodología de la matriz de transferencia.

La evaluación de los efectos del desorden químico sobre el estado electrónico asociado al centro de la banda 3 indican que, aunque la inclusión de desorden en un sistema corresponde en general a un aumento de la entropía del sistema total, la inclusión de desorden químico en el subsistema de los electrones en el modelo de Kronig-Penney resultó en la disminución de la entropía de Shannon y el aumento del desequilibrio del estado electrónico correspondiente. Ambos comportamientos son consecuencia del ordenamiento en el módulo de la relación de amplitudes de las ondas reflejada e incidente ( $|u|$ ), tal como se evidenció en la tendencia de dicho módulo hacia un valor preferencial ( $|u| = 1$ ).

Por otro lado, la inclusión de desorden químico en el modelo de Kronig-Penney para una longitud de cadena dada, resulta en una maximización de la medida de complejidad hasta un valor de saturación que muestra una clara correspondencia con la minimización del flujo electrónico, lo cual implica la inhibición del transporte electrónico para un desorden umbral  $W \approx 0,60$ ,

indicando así que la medida de complejidad constituye un buen indicador de las propiedades de transporte electrónico.

A diferencia de lo reportado para el caso del desorden estructural [41] donde el desorden incluido en el sistema produce la ampliación de los intervalos de energías permitidos (a consecuencia de la aparición de estados permitidos adicionales en las zonas inicialmente prohibidas), la inclusión de desorden químico conlleva a la reducción de los intervalos de estados inicialmente permitidos del caso periódico (sin desorden,  $W = 0$ ). Tal reducción en el conjunto de estados permitidos es consecuencia de la longitud de la cadena (*i.e.* de la cantidad de potenciales dispersores) y del nivel de desorden. Esto implica que tanto la longitud de la cadena como el nivel de desorden afectan el espectro de energías permitidas generando la reducción de las bandas y por consiguiente el aumento de los gaps.

## Perspectivas

A continuación se comentan algunas de las posibles extensiones del presente estudio que pueden ser considerados en trabajos posteriores.

Debido a las limitaciones técnicas que presenta el proceso de miniaturización (aproximación *top-down*), la nanoelectrónica está considerando el uso de nanoestructuras biológicas como el ADN para ser utilizados en nanocircuitos, donde dicha molécula desempeñaría el papel de alambre conector. Justamente, debido a la alternancia aleatoria de los nucleótidos y a la regularidad en sus espaciamentos, el ADN constituye una estructura natural con desorden químico cuyas propiedades conductoras pueden evaluarse siguiendo la metodología utilizada en el presente trabajo y así profundizar en el estudio de las propiedades de transporte electrónico en tales sistemas.

Otra posible extensión del presente estudio, es realizar la evaluación de los efectos combinados de la inclusión de desorden estructural (que se puede incorporar mediante la variación aleatoria en las distancias entre potenciales) y desorden químico sobre las propiedades del transporte electrónico en el modelo de Kronig-Penney, caracterizando los mismos mediante el coeficiente de transmisión, el flujo electrónico, y la medida estadística de complejidad.

# Apéndice A

## Conservación de la corriente de probabilidad

Debido a la importancia que tiene la corriente de probabilidad en el presente trabajo, pasaremos a detallar las condiciones que hacen posible su conservación. Para ello se parte de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (ESDT) tomando en cuenta el caso donde el potencial depende únicamente de la posición, es decir  $V(x, t) = V(x)$ .

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

Multiplicando la ecuación (A.1) por  $\Psi^*$  e integrando en el intervalo  $(x_a, x_b)$  obtenemos:

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

Tomando el complejo conjugado de la ESDT:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi^*(x, t) + V(x)^* \Psi^*(x, t) \quad (\text{A.3})$$

Multiplicando la ecuación (A.3) por  $\Psi$  e integrando en  $(x_a, x_b)$ :

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

Restando la ecuación (A.4) de (A.2) se obtiene:

$$i\hbar \int_{x_a}^{x_b} \left[ \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right] dx = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{x_a}^{x_b} \left[ \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \right] dx + \int_{x_a}^{x_b} \left[ \Psi^* V \Psi - \Psi V^* \Psi^* \right] dx \quad (\text{A.5})$$

Se puede verificar que se cumplen las siguientes identidades:

$$\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} [\Psi^* \Psi] \quad (\text{A.6})$$

$$\Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} - \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right] = \frac{2m}{\hbar i} \frac{\partial}{\partial x} j(x) \quad (\text{A.7})$$

con la corriente de probabilidad,  $j(x)$ , definida como:

$$j(x) \equiv \frac{\hbar i}{2m} \left[ \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right] \quad (\text{A.8})$$

Reemplazando las identidades en la ecuación (A.5):

$$i\hbar \int_{x_a}^{x_b} \left[ \frac{\partial [\Psi^* \Psi]}{\partial t} \right] dx = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{x_a}^{x_b} \left[ -\frac{2m}{\hbar i} \frac{\partial}{\partial x} j(x) \right] dx + \int_{x_a}^{x_b} \left[ \Psi^* V \Psi - \Psi V^* \Psi^* \right] dx \quad (\text{A.9})$$

Esta expresión es equivalente a:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_a}^{x_b} [\Psi^* \Psi] dx = -[j(x_b) - j(x_a)] + \frac{1}{i\hbar} \int_{x_a}^{x_b} \left[ \Psi^* V \Psi - \Psi V^* \Psi^* \right] dx \quad (\text{A.10})$$

En esta última ecuación, el término de la izquierda nos indica la razón de cambio (respecto al tiempo) de la probabilidad o equivalentemente de la carga en la región  $(x_a, x_b)$ . Este cambio se debe al flujo de partículas que ingresa y sale de la región (primer término de la derecha) y/o de la creación y aniquilación de partículas en dicha región (segundo término de la derecha). Justamente los potenciales de tipo complejo están asociados a la absorción o ganancia de partículas. Puesto que únicamente consideramos potenciales reales tenemos que  $V(x) = V^*(x)$ , lo cual anula el último término de la ecuación (A.10).

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_a}^{x_b} [\Psi^* \Psi] dx = -[j(x_b) - j(x_a)] \quad (\text{A.11})$$

Para el caso en que busquemos soluciones de tipo estacionario se sabe que la densidad de probabilidad es independiente del tiempo y por consiguiente el primer término se hace cero. Finalmente y para las condiciones antes indicadas se obtiene la conservación de la corriente de probabilidad:

$$j(x_a) = j(x_b) \quad (\text{A.12})$$

# Apéndice B

## Propiedades de la matriz de transferencia

Como se indicó en la sección 3.2, los elementos de la matriz de transferencia tienen restricciones como consecuencia de una propiedad matemática y otra física. En este apartado se brindará detalles de tales restricciones.

### Invarianza por reversibilidad temporal

Partimos de la ESDT, que viene expresada como:

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

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:

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

El MMT plantea 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:

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

Si tomamos el complejo conjugado de la ecuación (B.1) y hacemos el cambio  $t \rightarrow -t$ , obtenemos lo siguiente:

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

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

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

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

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

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

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

### Conservación de la corriente de probabilidad

En sistemas 1D la *corriente de probabilidad*  $j(x, t)$  está definida tal que la *densidad de probabilidad*,  $(P_{ab})$ , cumple que:

$$\frac{dP_{ab}}{dt} = j(a, t) - j(b, t) \quad (\text{B.8})$$

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:

$$|A|^2 - |B|^2 = |C|^2 - |D|^2 \quad (\text{B.9})$$

Utilizando la ecuación anterior, junto con las relaciones (B.7) y (B.9), se demuestra que:

$$\det(\mathbf{M}) = 1 \quad (\text{B.10})$$



## Apéndice C

# Matriz de transferencia local del modelo de sólido 1D con desorden químico

El análisis del intervalo  $(j - 1)a < x < ja$  parte de la consideración de las siguientes funciones de onda y sus respectivas derivadas:

$$\psi_j(x) = \tilde{A}_j e^{+ikx} + \tilde{B}_j e^{-ikx} \quad \rightarrow \quad \psi_{j-1}(x) = \tilde{A}_{j-1} e^{+ikx} + \tilde{B}_{j-1} e^{-ikx} \quad (\text{C.1})$$

$$\psi_{j-1}(x) = \tilde{A}_{j-1} e^{+ikx} + \tilde{B}_{j-1} e^{-ikx} \quad \rightarrow \quad \frac{d\psi_{j-1}}{dx} = ik\tilde{A}_{j-1} e^{+ikx} - ik\tilde{B}_{j-1} e^{-ikx} \quad (\text{C.2})$$

Las condiciones de frontera en  $x = ja$  requieren considerar tanto la continuidad de la función de onda como la discontinuidad de su primera deriva, es decir:

$$\begin{aligned} \psi_{j-1}(x) &= \psi_j(x) \\ \frac{d\psi_j}{dx} - \frac{d\psi_{j-1}}{dx} &= 2\Omega_j \psi_j(x) \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

Reemplazando las relaciones (C.1), (C.2) y (C.3), resulta:

$$\begin{aligned} \tilde{A}_{j-1} e^{+ikx_j} + \tilde{B}_{j-1} e^{-ikx_j} &= \tilde{A}_j e^{+ikx_j} + \tilde{B}_j e^{-ikx_j} \\ (ik\tilde{A}_j e^{+ikx_j} - ik\tilde{B}_j e^{-ikx_j}) - (ik\tilde{A}_{j-1} e^{+ikx_j} - ik\tilde{B}_{j-1} e^{-ikx_j}) &= 2\Omega_j (\tilde{A}_j e^{+ikx_j} + \tilde{B}_j e^{-ikx_j}) \end{aligned}$$

La factorización de las amplitudes conduce a:

$$\begin{aligned} \tilde{A}_j e^{+ikx_j} + \tilde{B}_j e^{-ikx_j} &= \tilde{A}_{j-1} e^{+ikx_j} + \tilde{B}_{j-1} e^{-ikx_j} \\ \tilde{A}_j e^{+ikx_j} (ik - 2\Omega_j) + \tilde{B}_j e^{-ikx_j} (-ik - 2\Omega_j) &= ik\tilde{A}_{j-1} e^{+ikx_j} - ik\tilde{B}_{j-1} e^{-ikx_j} \end{aligned}$$

Definiendo:  $A_j = \tilde{A}_j e^{+ikx_j}$ ,  $B_j = \tilde{B}_j e^{-ikx_j}$  y  $\Delta_j = x_j - x_{j-1}$ , se obtiene:

$$\begin{aligned} A_j + B_j &= A_{j-1} e^{+ik\Delta_j} + B_{j-1} e^{-ik\Delta_j} \\ A_j(ik - 2\Omega_j) + B_j(-ik - 2\Omega_j) &= ikA_{j-1} e^{+ik\Delta_j} - ikB_{j-1} e^{-ik\Delta_j} \end{aligned}$$

que se pueden expresar en forma matricial como:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik - 2\Omega_j & -ik - 2\Omega_j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{+ik\Delta_j} & 0 \\ 0 & e^{-ik\Delta_j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{j-1} \\ B_{j-1} \end{pmatrix}$$

Además:

$$\begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik - 2\Omega_j & -ik - 2\Omega_j \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{+ik\Delta_j} & 0 \\ 0 & e^{-ik\Delta_j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{j-1} \\ B_{j-1} \end{pmatrix}$$

es decir:

$$\begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} = \frac{1}{-2ik} \begin{pmatrix} -ik - 2\Omega_j & -1 \\ -ik + 2\Omega_j & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{+ik\Delta_j} & 0 \\ 0 & e^{-ik\Delta_j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{j-1} \\ B_{j-1} \end{pmatrix}$$

entonces:

$$\begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - i\frac{\Omega_j}{k} & -i\frac{\Omega_j}{k} \\ i\frac{\Omega_j}{k} & 1 + i\frac{\Omega_j}{k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{+ik\Delta_j} & 0 \\ 0 & e^{-ik\Delta_j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{j-1} \\ B_{j-1} \end{pmatrix}$$

Tomando en consideración que  $\Delta_j = a$  y realizando el producto de matrices, finalmente se obtiene:

$$\begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (1 - i\frac{\Omega_j}{k})e^{+ika} & -i\frac{\Omega_j}{k}e^{-ika} \\ i\frac{\Omega_j}{k}e^{+ika} & (1 + i\frac{\Omega_j}{k})e^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{j-1} \\ B_{j-1} \end{pmatrix} \quad (\text{C.4})$$

# Bibliografía

- [1] Fisher, R.A. (1925). Theory of statistical estimation. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 22, 700-725.
- [2] Shannon, C.E. and Weaver, W. (1949) *The Mathematical Theory of Communication*, Urbana, EUA: University of Illinois Press.
- [3] Jaynes, E.T. (1957). Information theory and statistical mechanics. *Physical Review*, 106, 620-631.
- [4] Lopez-Rosa, S., Manzano, D., and Dehesa, J.S. (2009). Complexity of d-dimensional hydrogenic systems in position and momentum spaces. *Physica A*, 388, 3273-3281.
- [5] Sen, K.D. (2011). *Statistical Complexity: Applications in Electronic Structure*, London, UK: Springer.
- [6] Cover, T.M. and Thomas, J.A. (1991) *Elements of Information Theory*, New York, EUA: John Wiley & Sons.
- [7] Lempel, A. and Ziv, J. (1976). On the complexity of finite sequences. *IEEE Transactions on Information Theory*, 22, 75-81.
- [8] Lloyd, S. and Pagels, H. (1988). Complexity as thermodynamic depth. *Annals of Physics*, 188, 186-213.
- [9] Grassberger, P. (1986). Toward a quantitative theory of self-generated complexity. *International Journal of Theoretical Physics*, 25, 907-938.
- [10] López-Ruiz, R., Mancini, H.L., and Calbet, X. (1995). A statistical measure of complexity. *Physics Letters A*, 209, 321-326.
- [11] Gell-Mann, M. (1995). What is complexity? *Complexity*, 1, 16-19.

- [12] Anteneodo, C., and Plastino, A.R. (1996). Some features of the López-Ruiz-Mancini-Calbet (LMC) statistical measure of complexity. *Physics Letters A*, 223, 348-354.
- [13] López-Ruiz, R. (2001). Complexity in some physical systems. *International Journal of Bifurcations and Chaos*, 11, 2669-2673.
- [14] Calbet, X., and López-Ruiz, R. (2001). Tendency towards maximum complexity in a nonequilibrium isolated system. *Physical Review E*, 63, 066116, 1-9.
- [15] López-Ruiz, R. and Sañudo, J. (2010). Evidence of magic numbers in nuclei by statistical indicators. *Open Systems & Information Dynamics*, 17, 279-286.
- [16] Sañudo, J. and López-Ruiz, R. (2008). Statistical complexity and Fisher-Shannon information in the H-atom. *Physics Letters A*, 372, 5283-5286.
- [17] Sañudo, J. and López-Ruiz, R. (2009). Alternative evaluation of statistical indicators in atoms: The non-relativistic and relativistic cases. *Physics Letters A*, 373, 2549-2551.
- [18] Sañudo, J. and López-Ruiz, R. (2011). Statistical measures and magic numbers in metal clusters. *Physics Letters A*, 375, 1674-1676.
- [19] Sañudo, J. and López-Ruiz, R. (2012). Calculation of statistical entropic measures in a model of solids. *Physics Letters A*, 376, 2288-2291.
- [20] Kronig, R. de L., and Penney, W.G. (1930). Quantum Mechanics of Electrons in Crystal Lattices. *Proceedings of the Royal Society A*, 130, 499-513.
- [21] Ashcroft, N.W. and Mermin, N.D. (1976). *Solid State Physics*. New York, EUA: Saunders College.
- [22] Hennig, D., Tsironis, G.P., Molina, M.I., and Gabriel, H. (1994). A nonlinear quasiperiodic Kronig-Penney model. *Physics Letters A*, 190, 259-263.
- [23] Sánchez, A., Maciá, E., and Domínguez-Adame, F. (1994). Suppression of localization in Kronig-Penney models with correlated disorder. *Physical Review B*, 49, 147-157.
- [24] Luna-Acosta, G.A., Izrailev, F.M., Makarov, N.M., Kuhl, U., and Stöckmann, H.-J. (2009) On dimensional Kronig-Penney models with positional disorder: Theory versus experiment. *Physical Review B*, 80, 115112, 1-8.

- [25] Elliot, S.R. (1983). *Physics of amorphous materials*. New York, EUA: Longman Inc.
- [26] May, G.S. and Spanos, C.J. (2006). *Fundamentals of Semiconductor Manufacturing and Process Control*, New Jersey, EUA: John Wiley & Sons.
- [27] Eckert, M. (2012) Max von Laue and the discovery of X-ray diffraction in 1912. *Annalen der Physik*, 524(5), A83-A85.
- [28] Merzbacher, E. (1998). *Quantum Mechanics*. New York, EUA: John Wiley & Sons.
- [29] Eisberg, R. & Resnick, R. (1985). *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles*. New York, EUA: John Wiley & Sons.
- [30] Shannon, C.E. (1948). A mathematical theory of communication. *Bell System Technical Journal*, 27 (3), 379-423.
- [31] Martin, M.T, Plastino, A., and Rosso, O.A. (2003) Statistical complexity and disequilibrium. *Physics Letters A*, 311, 126-132.
- [32] ZuGuo, Y., and GuoYi, C. (2000). Rescaled range and transition matrix analysis of DNA sequences. *Communications in Theoretical Physics* 33, 673-678.
- [33] Panos, C.P., Nikolaidis, N.S., Chatzisavvas, K.Ch., and Tsouros, C.C. (2009). A simple method for the evaluation of the information content and complexity in atoms. A proposal for scalability. *Physics Letters A*, 373, 2343-2350.
- [34] Catalán, R.C., Garay, J., and López-Ruiz, R. (2002) Features of the extensión of a statistical measure of complexity to continuous systems. *Physical Review E*, 66, 011102, 1-6.
- [35] Makinson, R., and Roberts, A. (1960) Zone Theory of Liquids. *Australian Journal of Physics*, 13, 437-445.
- [36] Lu, C.Y. (1978) The electronic density of states of a liquid-like random Kronig-Penney model in the Coherent potential approximation. *Chinese Journal of Physics*, 16, 30-35.
- [37] Anderson, P.W. (1958) Absence of Diffusion in Certain Random Lattices. *Physical Review*, 109, 1492-1505.

- [38] Miranda, A. y Landauro, C.V. (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.
- [39] Griffiths, D.J. and Steinke, C.A. (2001). Waves in locally periodic media. *American Journal Physics*, 69, 137-154.
- [40] Gómez, I., Domínguez-Adame, F. and Diez, E. (2002). Transport in random quantum dot superlattices. *Journal of Applied Physics*, 92, 4486-4489.
- [41] Heredia A.A. (2019). *Medida estadística de complejidad LMC en el Modelo de Kronig-Penney con desorden estructural* (Tesis de Maestría). Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Lima, Perú.

# Agradecimientos

En primer lugar quiero agradecer a mi asesor de tesis, el Dr. Carlos V. Landauro Sáenz por la paciencia, apoyo y orientación, tanto en el plano académico como en el profesional, que permitieron culminar el presente trabajo.

Asimismo, la confianza, orientación y guía del Dr. Hans Nowak, han sido fundamentales, tanto para que el trabajo de tesis llegue a buen puerto como para la maduración en las capacidades (que aún siguen en evolución) que toda labor de investigación requiere.

Por otro lado, el apoyo y orientación técnica en diferentes ámbitos por parte de la familia del GIMC (red de Grupos de Investigación en Materia Condensada de la UNMSM) así como las facilidades brindadas en el uso del equipamiento e instalaciones del CITBM (Centro de Investigaciones Tecnológicas, Biomédicas y Medioambientales) han sido esenciales en el desarrollo de la tarea investigativa.

Indudablemente, mi familia constituye un apoyo imprescindible y han brindado, de diversas maneras y en diferentes momentos, el apoyo personal que un trabajo de esta magnitud requiere.

A todos ellos, mi más sincero y profundo agradecimiento.