

Estructura electrónica de aleaciones binarias unidimensionales desordenadas*

E. MARX-PÉREZ

*Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de San Luis Potosí
San Luis Potosí, 78000 SLP, México*

Y

F. AGUILERA-GRANJA

*Instituto de Física Manuel Sandoval Vallarta
Universidad Autónoma de San Luis Potosí
San Luis Potosí, 78000 SLP, México*

Recibido el 17 de septiembre de 1991; aceptado el 27 de abril de 1992

RESUMEN. Estudiamos la estructura electrónica de aleaciones unidimensionales A_xB_{1-x} desordenadas espacialmente. Para el estudio de este tipo de aleaciones aplicamos el método de cúmulos de la red de Bethe conjuntamente con una técnica de simulación. Discutimos algunas ventajas y desventajas del método de cúmulos de la red de Bethe en comparación con otras técnicas reportadas en la literatura.

ABSTRACT. We study the electronic structure of one-dimensional disorder alloys A_xB_{1-x} . For the study of this type of alloys we apply the cluster Bethe lattice method together with a simulation technique. We discuss some of the advantages and disadvantages of the cluster Bethe lattice method in comparison with other techniques reported in the literature.

PACS: 71.10.+x; 71.20.-b

INTRODUCCIÓN

Como consecuencia de la disposición periódica de los átomos en un cristal, se genera un potencial periódico con el que interaccionan las partículas o excitaciones que se mueven en el interior de la red. El movimiento de electrones, fotones, magnones y algunas otras excitaciones se puede describir fácilmente debido a que se cumple en forma rigurosa el teorema de Bloch. En este caso el vector de onda es un buen número cuántico y la estructura microscópica (electrónica, fonónica, etc.) se puede describir mediante relaciones de dispersión.

Desafortunadamente, en el caso de interfaces, vidrios, sistemas amorfos y desordenados, el teorema de Bloch no se cumple, lo cual ocasiona que la descripción del movimiento de partículas y excitaciones sea más compleja que en el caso de los cristales. Debido a la falta de periodicidad, es necesario desarrollar otros métodos que no incluyan al vector de onda en el cálculo de la estructura electrónica (fonónica, etc.) y obtener así información de los

*Dedicado a la memoria del profesor F. Mejía-Lira.

efectos de corto alcance en el material. Afortunadamente, estos métodos alternativos existen y permiten estudiar las propiedades electrónicas y fonónicas sin necesidad de recurrir al vector de onda. Uno de estos métodos en particular es el de las funciones de Green, el cual utilizaremos en este artículo para la descripción de las propiedades electrónicas.

Los efectos del desorden a nivel microscópico pueden originar que los niveles de energía y la función de onda de una partícula sean sustancialmente diferentes de los que tiene en un material ordenado, esto debido a que la simetría de traslación del hamiltoniano del sistema se ve seriamente afectada por el estado de desorden del sistema. El nivel de Fermi también se afecta como consecuencia del desorden y por lo tanto habrá variaciones en las propiedades electrónicas del material. Las propiedades electrónicas de cualquier sistema dependen de la densidad local de estados electrónicos (DLEE) y en general la respuesta a perturbaciones externas (conductividad eléctrica y térmica) depende en gran detalle de la naturaleza de las funciones de onda y de la DLEE.

La física de los sistemas desordenados es un campo que ha sido objeto de amplias y extensas investigaciones. Una revisión del estudio de los sistemas desordenados se puede encontrar en el libro de Ziman [1] y en las referencias allí citadas, y en forma más breve pero no por ello menos importante, en el libro de M. Plischke y B. Bergersen [2].

En cuanto a las propiedades electrónicas de las aleaciones, así como las técnicas utilizadas en su estudio, se pueden consultar los artículos de H. Ehrenreich y L.M. Schwartz [3], el libro de E.N. Economou [4] y en la Ref. [2].

Lo que aquí estudiamos es la DLEE de aleaciones binarias unidimensionales desordenadas espacialmente. Nuestro interés consiste en comparar las distintas aproximaciones que hay en la literatura para cálculos de DLEE con los resultados del método de cúmulos de la red de Bethe (MCRB) [5,6]. El MCRB ha sido ampliamente usado para el cálculo de DLEE de una gran variedad de sistemas, los cuales incluyen materiales cristalinos, amorfos y cuasi-cristales [5-8]. Aunque el MCRB ha sido ampliamente usado, no sabemos de cálculos con este método para el caso de aleaciones desordenadas. Cabe hacer notar que se han hecho algunas comparaciones de cálculos con el MCRB para el caso de cuasi-cristales, con los obtenidos usando otras técnicas [7,8]. Los cuasi-cristales se consideran un estado intermedio entre los sistemas ordenados y desordenados, pero no son estrictamente sistemas desordenados. Claramente uno de los objetivos de este trabajo es el estudio del desorden mismo en aleaciones. La comprensión de las propiedades de sistemas desordenados permitirá eventualmente entender las propiedades de los materiales reales, puesto que éstos siempre presentan desorden a temperatura ambiente.

La forma en que este trabajo está organizado es la siguiente: primero explicamos en qué consiste el MCRB utilizando un hamiltoniano de amarre fuerte, posteriormente desarrollamos un modelo dentro del esquema del MCRB que nos permite estudiar DLEE en el caso de aleaciones desordenadas y, finalmente, discutiremos las ventajas o limitaciones que tiene el MCRB para el estudio de sistemas desordenados con respecto a otros métodos.

2. MÉTODO

Como el método que utilizamos es una combinación del método de la red de Bethe y del cálculo de la estructura electrónica de cúmulos, empezaremos con una breve revisión de las propiedades de la red de Bethe.

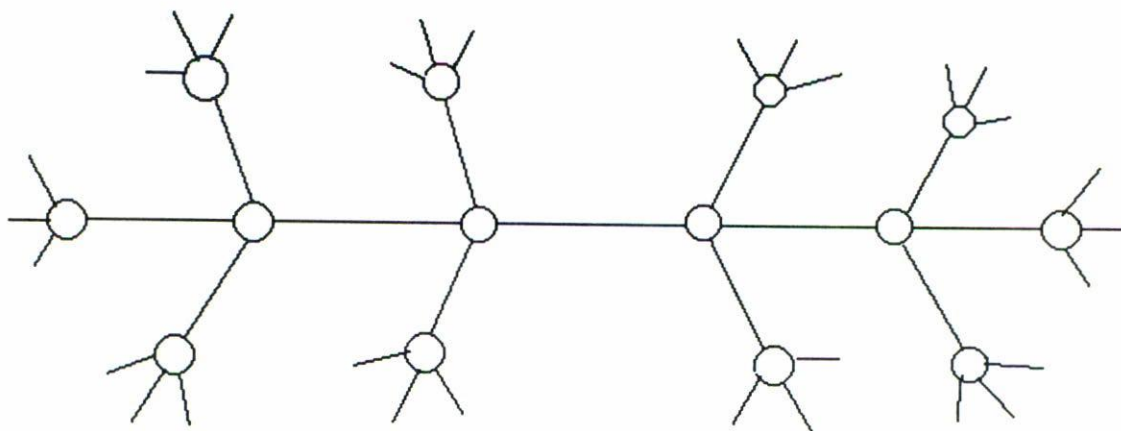


FIGURA 1. Red de Bethe de número de coordinación cuatro ($z = 4$). Las redes de Bethe tienen como característica principal que dos puntos cualesquiera en ellas están conectados por un solo camino.

2.1. Red de Bethe

La red de Bethe es un modelo matemático utilizado para simular el comportamiento de sólidos. Esta red consiste en un sistema infinito de puntos conectados por un número de coordinación z sin trayectorias cerradas. Para ir de un punto a otro dentro de la red existe sólo un camino. La red de Bethe para $z = 4$ se muestra en la Fig. 1. Este modelo tiene la ventaja de que usando un hamiltoniano de enlace fuerte se puede obtener de forma analítica la función de Green (G). La importancia de la función de Green se debe a que está directamente relacionada con la DLEE.

El hamiltoniano de enlace fuerte en la notación de Dirac [10] con interacciones entre primeros vecinos se puede expresar como sigue:

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

donde ϵ_i son los niveles de energía en cada uno de los sitios del cristal y t_{ij} la probabilidad de brinco de un electrón del sitio i al sitio j (*hopping*). La ventaja de usar la notación de Dirac es que el manejo de H se simplifica y el cálculo de la función de Green y de los valores esperados resulta muy sencillo.

Algunas propiedades importantes de la función de Green son las siguientes:

- i) Los polos de la función de Green corresponden a los valores propios de H .
- ii) Los residuos de la función de Green en los polos corresponden a las funciones propias de H .
- iii) Las discontinuidades de la función de Green corresponden a los límites de la DLEE.

iv) La ecuación que nos relaciona la función de Green con el hamiltoniano (ecuación de movimiento) es la ecuación de Dyson:

$$EG = 1 + HG. \quad (2)$$

v) La DLEE en el sitio central del cristal (red de Bethe) está dada por la parte imaginaria de $G_{0,0}$:

$$n_{0,0}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im } G_{0,0}(E). \quad (3)$$

El cálculo de la función de Green se hace mediante la evaluación de los elementos de matriz de la ecuación de Dyson. El cálculo de los elementos de matriz de la función de Green, utilizando el hamiltoniano de la Ec. (1), nos conduce al siguiente conjunto de ecuaciones:

$$(E - \epsilon_A)G_{0,0} = 1 + ztG_{1,0}; \quad (4a)$$

$$(E - \epsilon_A)G_{1,0} = tG_{0,0} + (z - 1)tG_{2,0}; \quad (4b)$$

$$(E - \epsilon_A)G_{n,0} = tG_{n-1,0} + (z - 1)tG_{n+1,0}; \quad (4c)$$

⋮

donde ϵ_A corresponde al nivel atómico del material y t al brinco entre primeros vecinos. El conjunto anterior de ecuaciones puede resolverse definiendo una función de transferencia Γ de la forma siguiente:

$$\Gamma = \frac{G_{n+1,0}}{G_{n,0}}. \quad (5)$$

Utilizando esta definición en la Ec. (4c), se puede obtener una ecuación cuadrática para Γ ,

$$(z - 1)t\Gamma^2 - (E - \epsilon_A)\Gamma + t = 0. \quad (6)$$

Conociendo la Γ podemos escribir $G_{1,0}$ como $\Gamma G_{0,0}$ y de esta forma tendremos $G_{0,0}$. Con todo lo anterior, el cálculo de la DLEE resulta inmediato al usar la Ec.(3). En este caso en particular la DLEE está dada por

$$n(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\frac{1}{(E - \epsilon_A) - zt\Gamma} \right]. \quad (7)$$

La Ec. (7) tiene parte imaginaria sólo en el intervalo de valores de energía $\epsilon_A - 2\sqrt{z-1}t$ y $\epsilon_A + 2\sqrt{z-1}t$. Es interesante resaltar que cuando $z = 2$, el cálculo de la DLEE en la red de Bethe se vuelve exacto y está dado por

$$n(E) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{4t^2 - (E - \epsilon_A)^2}}. \quad (8)$$

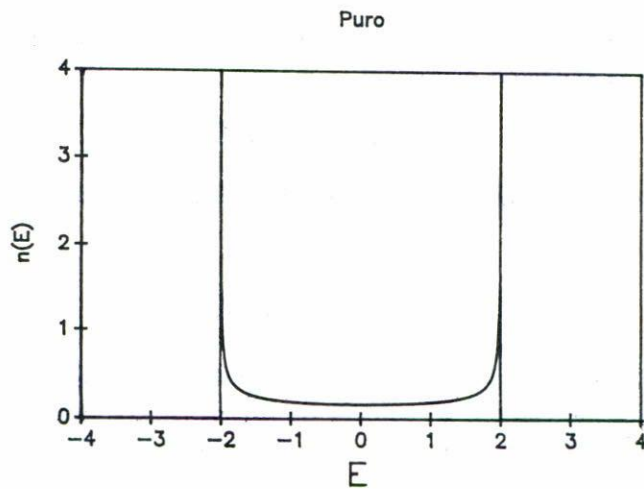


FIGURA 2. DLEE para una cadena de átomos de una sola clase con un solo nivel por sitio ($\epsilon = 0$). Los resultados de la red de Bethe en este caso coinciden con el cálculo exacto.

Sin embargo, para cualquier otro valor de z el método de la red de Bethe es aproximado, puesto que en estos casos hay más de un camino para ir de un sitio a otro dentro del cristal y la aproximación de un cristal por “un racimo de uvas” no es adecuada. En la Fig. 2 se presentan los resultados para la DLEE en una dimensión ($z = 2$). En este caso se hace notar que en los límites de la banda la DLEE diverge.

2.2. Método de cúmulos de la red de Bethe

El MCRB considera una fracción del sistema real que se pretende estudiar (cúmulo); cualquier sitio que se encuentre fuera de este cúmulo, estará descrito por las propiedades de una red de Bethe. Esto se ejemplifica en la Fig. 3 para el caso de una aleación binaria unidimensional. En este caso el cúmulo usado es de 5 puntos y el resto del sólido es remedado por una red de Bethe de $z = 4$. Este método presupone que entre más grande es el tamaño del cúmulo usado, mejores serán los resultados descritos. Decimos presupone, puesto que no hay una prueba rigurosa de la convergencia del MCRB. Los resultados para el caso de una cadena lineal de un elemento puro ($\epsilon_A = 0.0$) se muestran en la Fig. 4 para cúmulos de distintos tamaños. En todos los casos los cúmulos fueron saturados con red de Bethe de número de coordinación $z = 6$, este número se usa para asegurarse de no dejar fuera los estados cercanos a los bordes de la(s) banda(s) [7]. Aunque no hay una prueba rigurosa de la convergencia de la DLEE como función del tamaño del cúmulo, se puede ver en la Fig. 4 que los cálculos son mejores al aumentar el tamaño del cúmulo, pues éstos convergen a los resultados exactos (Fig. 2). En todos estos casos la medición de la DLEE se hace en el punto central y en los sitios 0 y 22 se utilizó una red de Bethe de un elemento puro con nivel de energía en cero y brinco de $t = -1.0$. Por otra parte, el MCRB tiene algunas dificultades debido a la interface falsa entre el cúmulo y la red de Bethe. Afortunadamente, parte de estas dificultades se han superado mediante el uso de algunas reglas empíricas [5,6].

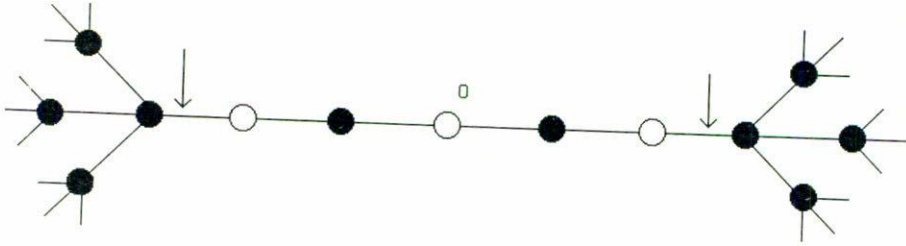


FIGURA 3. Modelo usado en el cálculo de la DLEE de la aleación $A_x B_{1-x}$. En este caso el cúmulo corresponde a una cadena de cinco átomos, los cuales son saturados con red de Bethe de un elemento puro. El ejemplo aquí mostrado corresponde al de una aleación ordenada.

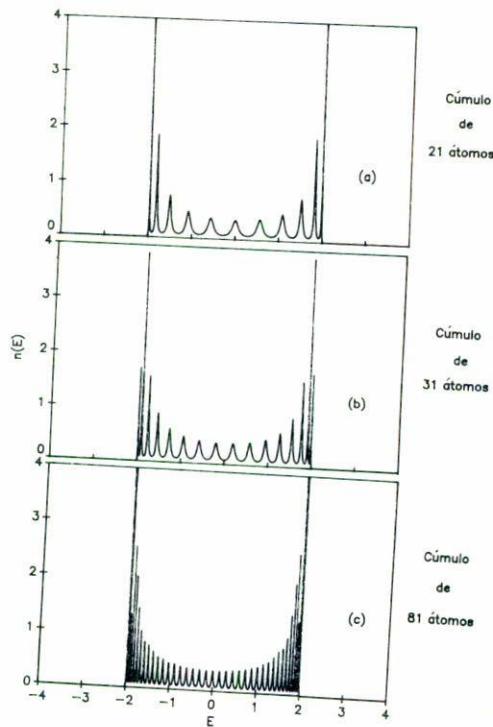


FIGURA 4. DLEE calculada con el MCRB para un sistema de átomos del mismo tipo usando cúmulos de distintos tamaños. La red de Bethe usada para saturar el sistema tiene número de coordinación seis. Estos resultados muestran que cuando el tamaño del cúmulo crece los resultados convergen al valor exacto (Fig. 2). Los resultados presentados corresponden al sitio central del cúmulo.

En el caso de sistemas desordenados para tratar el hamiltoniano se usa una técnica de simulación que utiliza un generador de configuraciones aleatorias, el cual sirve para remedar todos los posibles estados en los que se pudiera encontrar el sistema en cuestión. Las variables ϵ_i y t_{ij} que aparecen en el hamiltoniano de este sistema tienen ahora un carácter aleatorio y su frecuencia dependerá de la concentración de los componentes de la aleación. El carácter estocástico dentro de nuestro sistema estará modelado mediante el uso de un generador de números aleatorios entre 0 y 1. Los niveles de energía en cada

sitio se asignarán como sigue:

$$\epsilon_i = \begin{cases} \epsilon_A & \text{si } \text{Ran} \leq x, \\ \epsilon_B & \text{de otra manera,} \end{cases} \quad (9)$$

donde Ran es un número generado aleatoriamente entre 0 y 1. Todos los sitios del cristal se llenan de acuerdo a lo expresado por (9). Al concluir este proceso, el sistema generado corresponderá a una de las tantas configuraciones que se presentan en la aleación desordenada.

La probabilidad de brinco t_{ij} dependerá únicamente de los átomos primeros vecinos, y puesto que todos los sitios dentro del cristal se encuentran ya asignados en la configuración que se generó, los valores del brinco están dados por

$$t_{ij} = \begin{cases} t_{AA} & \text{si } i = j = A, \\ t_{BB} & \text{si } i = j = B, \\ t_{AB} & \text{de otra manera.} \end{cases} \quad (10)$$

Puesto que se conocen los niveles de energía y los brincos, el hamiltoniano del cristal está determinado y en principio se pueden conocer todas las propiedades del sistema. En el caso de sistemas desordenados, el problema se presenta debido a que el hamiltoniano que describe el sistema varía dependiendo de la configuración en que se encuentre. Lo anterior implica que para el cálculo de cualquier propiedad que nos interese, si queremos que ésta sea representativa del sistema, debe efectuarse sobre un gran número de las posibles configuraciones en las que se encuentre el sistema. Las configuraciones tomadas por el sistema son remedadas mediante el uso de números aleatorios en el proceso de llenado de la red, en lo que nosotros denominamos una simulación. Para el estudio de las propiedades de interés (DLEE), se genera un gran número de simulaciones y se toma un promedio aritmético de todas las DLEE generadas en el sitio central. Este promedio se espera que describa el comportamiento global del sistema.

El tamaño de cúmulo usado en el MCRB obedece a un compromiso entre el tiempo de cómputo y el número de simulaciones a realizarse. Considerando lo anterior, es claro que hay dos posibilidades *i*) cúmulos grandes y pocas simulaciones, *ii*) cúmulos más pequeños y un mayor número de simulaciones. Aquí hemos optado por este último, aunque lo ideal sería cúmulos grandes y un número grande de simulaciones.

3. RESULTADOS

En todos los resultados presentados en este trabajo tomamos los niveles atómicos en $\epsilon_A = 0$ y $\epsilon_B = -1$ y la integral de brinco se tomará siempre como $t = -1$, independiente del tipo de sitios que se conectan.

Los resultados para sistemas desordenados espacialmente, utilizando el MCRB, se presentan en la Fig. 5 para tres concentraciones distintas ($x = 0.5, 0.75$ y 0.95). Estos

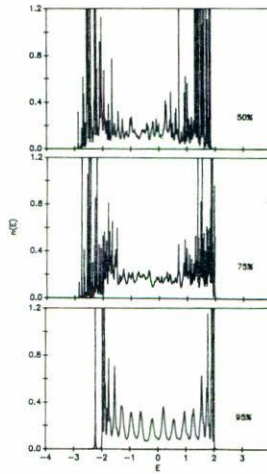


FIGURA 5. DLEE calculada con el MCRB para un sistema desordenado usando un cúmulo de 21 puntos. Las DLEE presentadas en cada uno de los casos corresponden al promedio sobre del sitio central de un gran número de simulaciones. En cada uno de los casos se indica el porcentaje de átomos del tipo A.

resultados para la DLEE corresponden a un promedio aritmético simple, en donde se suman todas las DLEE generadas en el sitio central y se divide entre el número de eventos. En los resultados mostrados en la Fig. 5, el número de eventos es de 35 simulaciones para cada una de ellas. El ancho de las bandas calculadas en la aleación depende ligeramente de la concentración, los valores obtenidos son 4.77, 4.88 y 4.0 para $x = 0.5$, 0.75 y 0.95, respectivamente. Observando la evolución de las DLEE partiendo de la concentración $x = 0.5$, podemos ver que al aumentar la concentración, se empieza a formar una segunda banda en el borde inferior, haciendo que la simetría del centro de la banda que se presenta en caso de $x = 0.5$ se pierda. Para incrementos mayores en la concentración, la DLEE será más parecida a la del elemento puro A y la banda angosta cercana al límite inferior se convierte eventualmente en un estado localizado, pues en este límite el sistema se comporta como si B fuera una impureza. Antes de terminar esta sección, es importante mencionar que el ligero comportamiento asimétrico observado en la DLEE para $x = 0.5$ desaparecerá gradualmente al aumentar el número de simulaciones.

4. DISCUSIÓN Y COMPARACIONES

Existen en la literatura una gran variedad de métodos que permiten estudiar la DLEE de sistemas desordenados, algunos de ellos son los siguientes.

4.1 Aproximación del cristal virtual (ACV)

Esta es la aproximación más sencilla para el estudio de la DLEE de una aleación. Ésta consiste en suponer que la DLEE de la aleación binaria A_xB_{1-x} es equivalente a la de un solo elemento pero con un nivel de energía "efectivo" ($\epsilon_{efe} = x\epsilon_A + (1-x)\epsilon_B$). Cuando se

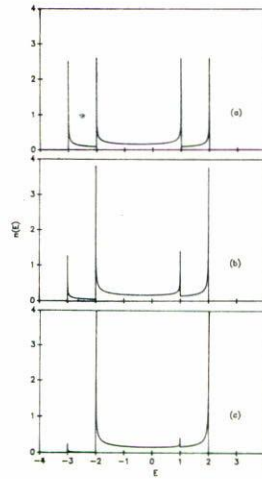


FIGURA 6. DLEE calculada usando el método simple de mezclas (MSM) para una aleación $A_x B_{1-x}$.

escribe el hamiltoniano del sistema y se calcula la función de Green, resulta trivial darse cuenta que ésta presenta una parte imaginaria entre los siguientes límites, $\epsilon_{efe} - 2\sqrt{z-1}t$ y $\epsilon_{efe} + 2\sqrt{z-1}t$, por lo tanto, la DLEE estará sólo definida dentro de esta región. Aunque este método describe una banda de energía cuyos límites dependen de la concentración de las componentes, la forma y el ancho de la banda es siempre la misma para todas las concentraciones y corresponde a la de un elemento puro centrado en ϵ_{efe} , motivo por el cual muchas veces esta aproximación es llamada de banda rígida.

4.2. Método simple de mezclas (MSM)

A diferencia del anterior, son las DLEE de elementos puros centrados en ϵ_A y ϵ_B las que se combinan, utilizando la concentración como función del peso. La DLEE del sistema $A_x B_{1-x}$ en este método es una simple superposición, que está dada por la siguiente forma:

$$n(E) = xn_A(E) + (1 - x)n_B(E), \tag{11}$$

donde $n_A(E)$ y $n_B(E)$ son las DLEE de los elementos puros, respectivamente. Los resultados tienen las siguientes características: i) el ancho de la(s) banda(s) es siempre constante y estará dado por $\epsilon_B + 2\sqrt{z-1}t$ y $\epsilon_A - 2\sqrt{z-1}t$, si $\epsilon_B < \epsilon_A$ o bien, $\epsilon_A + 2\sqrt{z-1}t$ y $\epsilon_B - 2\sqrt{z-1}t$, de otra manera; ii) la forma de las DLEE presenta dependencia en la concentración de las componentes de la aleación; iii) como consecuencia de la superposición del método, se introducirán singularidades dentro de la(s) banda(s) cuando éstas estén presentes en las DLEE de los elementos puros. Los resultados para aleaciones con concentraciones (x) de 0.50, 0.75 y 0.95 se presentan en la Fig. 6 usando este método.

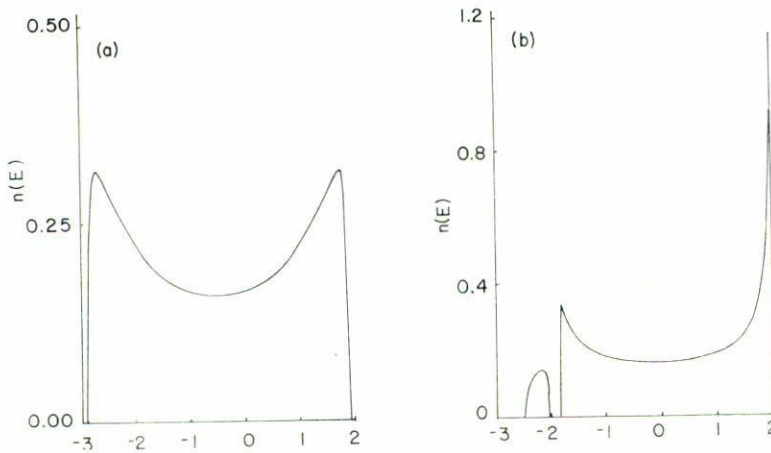


FIGURA 7. DLEE calculada usando la aproximación de potencial coherente (APC) para una aleación $A_x B_{1-x}$. Los resultados en (a) y (b) corresponde a $x = 0.5$ y 0.95 , respectivamente.

4.3 Aproximación del potencial coherente (APC)

La APC es una técnica más sofisticada que las presentadas anteriormente [1,2], la idea esencial es reemplazar a cada átomo del cristal por un átomo "efectivo" de manera tal que la dispersión promedio es cero en cada uno de los sitios del cristal. Para ser un poco más precisos, se considera una sola impureza del tipo B en un sitio i del cristal y en los demás sitios del cristal átomos del tipo A . Usando la condición de no dispersión se obtiene la función de Green G en el sitio I , de la cual se puede obtener la DLEE tomando la parte imaginaria. Resultados para el caso de una aleación binaria desordenada ($A_x B_{1-x}$) usando este método para concentraciones de $x = 0.5$ y 0.95 se presentan en la Fig. 7.

4.4 Método de la matriz de transferencia (MMT)

En el MMT el problema de un electrón se formula en términos de una matriz de transferencia similar a la usada al tratamiento del modelo de Ising en una dimensión [2]. Puesto que el teorema de Bloch no es válido para sistemas desordenados no se puede hacer uso de éste como ayuda para clasificar los valores propios. En este método el problema se reduce a calcular un problema de valores propios en términos de la matriz de transferencia sobre una cadena de longitud N (finita) para las distintas configuraciones generadas aleatoriamente. Con esta técnica, no se evalúa directamente la DLEE sino la densidad integrada de estados o bien el número de modos, esto es el número de estados desde $-\infty$ hasta cierta energía E . Promediando lo anterior para un gran número de configuraciones, se puede obtener una densidad promedio de estados integrada:

$$\mathcal{N}(E) = \int_{-\infty}^E dE' n(E') = S_n(E), \quad (12)$$

donde $S_n(E)$ es el número de modos en la función de onda hasta la energía E . Para calcular la DLEE ($n(E')$) basta sólo diferenciar. Como ésta es una técnica que contabiliza

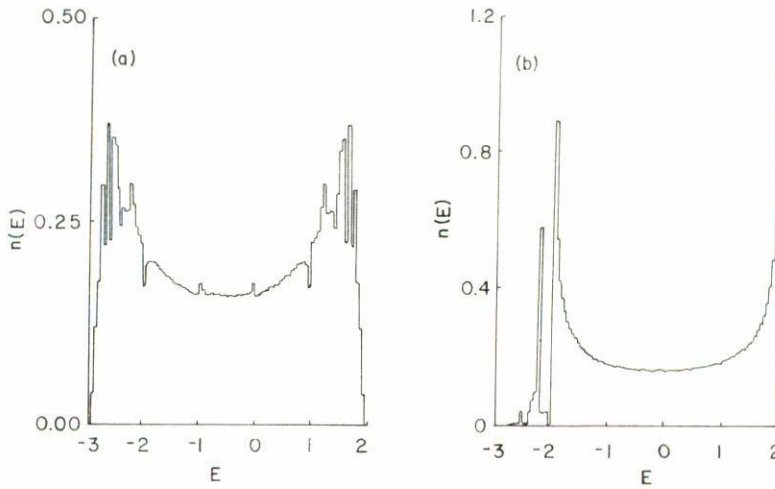


FIGURA 8. DLEE calculada usando el método de la matriz de transferencia (MMT) para una aleación $A_x B_{1-x}$. Los resultados en (a) y (b) corresponde a $x = 0.5$ y 0.95 , respectivamente.

estados discretos, los resultados son histogramas. Resultados para el caso de una cadena de 500 átomos usando esta técnica se muestran en la Fig. 8, para concentraciones de $x = 0.5$ y 0.95 . Los cálculos obtenidos mediante esta técnica son considerados entre los mejores.

Los resultados del MCRB aquí presentados muestran que las DLEE tiene un espectro con una parte “suave” y una parte “ruidosa”. Las oscilaciones suaves son características del MCRB, como se vio en la Fig. 4, mientras que la parte “ruidosa” es consecuencia del desorden en la aleación. En el caso de la aleación con una concentración $x = 0.5$, la parte “suave” se encuentra entre $\epsilon_B = -1.0$ y $\epsilon_A = 0$, fuera de esta región la DLEE es ruidosa. La DLEE es “simétrica” respecto del centro de la banda ($\frac{1}{2}(\epsilon_A + \epsilon_B)$). La estructura ruidosa cerca de los bordes de la banda es debida a la existencia de una estructura de brechas (*gaps*) en el espectro de la DLEE, la cual se observa cuando la energía es barrida muy finamente [1,2]. Otro detalle que resulta interesante, es que cerca de los bordes la DLEE no decae precipitadamente puesto que presenta unas “colas”. Estas colas propias de los sistemas desordenados son las llamadas colas de Lifshitz [1,2]. Para concentraciones más altas ($x = 0.75$) la DLEE se vuelve asimétrica y se empieza a formar una “isla” con estructura muy ruidosa en el borde inferior de la banda. La “isla” que se separa y forma una segunda banda, es en realidad un conjunto de estados y brechas con un espaciamiento muy pequeño.

Cuando la concentración de la componente A se incrementa más ($x = 0.95$), el sistema $A_x B_{1-x}$ se comporta como si B fuera una impureza, como se muestra en la Fig. 5. La DLEE es casi simétrica salvo por el estado localizado en el límite inferior de la banda. En este caso la “isla” en el borde inferior de la banda se vuelve un solo estado localizado. Los estados localizados son semejantes a los niveles atómicos. Matemáticamente los estados localizados corresponden a singularidades de la DLEE fuera de la banda. Haciendo un análisis de un sistema compuesto de átomos del tipo A con una impureza del tipo B en el sitio central se puede obtener información de la posición del estado localizado en este

límite. Tomando por facilidad $\epsilon_A = 0$ se obtiene que la función de Green para este sistema está dada por

$$G_{00}(E) = \begin{cases} \left[\epsilon_B + i\sqrt{4t^2 - E^2} \right]^{-1} & \text{si } E < 2|t| \\ \left[\epsilon_B + \text{sig}(E)\sqrt{E^2 - 4t^2} \right]^{-1} & \text{si } E \geq 2|t| \end{cases} \quad (13)$$

La función anterior presenta singularidades (estados localizados) si $\epsilon_B^2 = E^2 - 4t^2$, pero para que estén fuera de la banda se requiere que $E \geq 2|t|$, lo cual siempre se cumple para cualquier valor $\epsilon_B \neq 0$. Por lo tanto, habrá estados localizados siempre que $\epsilon_B \neq 0$, y la posición está dada por la siguiente ecuación:

$$\mathcal{E} = \text{sig} \epsilon_B \sqrt{4t^2 + \epsilon_B^2}. \quad (14)$$

Cuando se compara la posición del estado localizado obtenido cuando la concentración de A es $x = 0.95$, vemos que la posición de este estado en las Figs. 5 y 7 corresponde a la dada por la Ec. (14).

Los resultados obtenidos con ACV y MSM son los que se pueden considerar como las aproximaciones de orden más bajo. La ACV permite movilidad a la banda, pero la forma de la DLEE es siempre la de un sistema puro. El MSM permite cambios en la forma de la DLEE e inclusive da el aspecto de dos bandas en el límite de bajas concentraciones de uno de los componentes, pero en realidad siempre se trata de una sola banda con límites fijos. Ambas aproximaciones tienen la limitación de que son independientes del estado de orden del sistema.

Finalmente, diremos que las características descritas arriba para la DLEE como función de la concentración son muy semejantes para MCRB, APC y MMT. Los más parecidos entre sí son los resultados MCRB y MMT en lo que a la estructura fina de la DLEE se refiere, puesto que los detalles como las colas de Lifshitz y la estructura fina (gaps) no entran dentro del formalismo del APC [1,2]. Sin embargo, en cuanto a la forma de la DLEE, los resultados del MMT y APC son muy parecidos.

Otro detalle que es importante resaltar es que la comparación realizada aquí es para orbitales esféricamente simétricos. Para otro tipo de orbitales los resultados pueden ser diferentes.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo ha sido apoyado por la Dirección General de Investigación Científica y Superación Académica de la SEP a través del convenio C90-07-0383 A2.

REFERENCIAS

1. J.M. Ziman, *Models of Disorder*, Cambridge University Press (1979).
2. M. Plischke y B. Bergersen, *Equilibrium Statistical Physics*, Prentice Hall, Advanced Reference Series (1989).
3. H. Ehrenreich y L.M. Schwartz, *Solid State Physics* **31** (1976) 149.
4. E.N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics*. Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg New York (1979).
5. J.D. Joannopoulos y F. Yndurain, *Phys. Rev. B* **10** (1974) 5164.
6. J.D. Joannopoulos y M.L. Cohen, *Solid State Physics* **31** (1976) 71.
7. F. Aguilera-Granja, F. Mejía-Lira, J.L. Morán-López y R. Barrera, *Phys. Rev. B* **36** (1987) 7342.
8. J.M. Cabrera-Trujillo, F. Mejía-Lira, J.L. Morán-López y V. Kumar, *Solid State Commun.* **75** (1990) 477.
9. N.W. Ashcroft y N.D. Mermin, *Solid State Physics*, Holt, Rinehart and Winston, New York (1976).
10. P.A.M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, 4th Ed., Oxford University Press (1958).