



UNIVERSIDAD MICHOACANA
DE SAN NICOLÁS DE HIDALGO



Instituto de Física y Matemáticas

Modelos de enlace fuerte con desorden diagonal y no-diagonal

Tesis

que para obtener el título de:

Maestro en Ciencias en el área de Física

Presenta:

Rafael Fraga Ramírez

Director de Tesis:

Dr. Luca Tessieri

Morelia, Michoacán. Marzo 2022

Agradecimientos

Al terminar un proyecto y cerrar una etapa en nuestra vida siempre hay mucho que agradecer, en ocasiones demasiado, hoy es uno de esos días, uno de esos momentos en los que solo resta decir gracias, gracias por el apoyo a lo largo del camino.

- A mi familia, mis padres y hermanos, por darme más de lo que merezco.
- A mis profesores, por todo el conocimiento que me han transmitido, en especial al Dr. Luca Tessieri por asesorarme en este proyecto, por la paciencia y su gran calidad humana.

Índice general

Resumen	1
Abstract	3
Introducción	5
Contenido de la tesis	6
1. Sistemas cristalinos	9
1.1. Red de Bravais	9
1.2. Estructuras cristalinas	11
1.2.1. Celda Primitiva Wigner-Seitz	12
1.2.2. Red recíproca	12
1.3. Teorema de Bloch	13
1.4.1. Modelo de Kronig-Penney	17
2. Sistemas desordenados	21
2.1. Tipos de desorden	21
2.2. Localización de Anderson	22
2.2.1. Bordes de movilidad	22
2.2.2. Definición de la localización	23
2.3. Teoría del único parámetro de escala	24
2.4. Modelos de enlace fuerte	26
2.4.1. Hamiltoniano de enlace fuerte	26
2.5. Modelo de Anderson 1D	27
2.5.1. Partícula libre	27
2.5.2. Mapa hamiltoniano	29
2.5.3. Longitud de localización	30
2.5.4. Transición metal-aislante	31
2.5.5. Modelo de Anderson de talla finita	33
3. Teoría de Matrices Aleatorias	39
3.0.1. Modelos de colectivos	39
3.1. RMT y sistemas desordenados	41
3.2. Caos cuántico	44
3.2.1. Rotador pateado	45

4. Matrices Banda Aleatorias	53
4.0.1. Colectivo de Matrices Banda	53
4.0.2. Propiedades estadísticas de las BRM	54
4.1. BRM en el caos cuántico	57
4.1.1. Osciladores acoplados	57
4.1.2. Descripción del KR usando BRM	59
4.2. Sistemas casi 1D y el formalismo supersimétrico	61
5. Modelos de enlace fuerte con desorden fuera de la diagonal	63
5.1. Definición del modelo	63
5.2. Métodos numéricos	65
5.3. Modelo tridiagonal	65
5.3.1. Modelo tridiagonal con variación del grado de desorden	66
5.3.2. Modelo tridiagonal con correlaciones fuera de la diagonal principal .	68
5.4. Modelo multidiagonal	77
5.4.1. Papel clave del término laplaciano	77
5.5. Modelo multidiagonal con desorden	79
5.5.1. Modelo multidiagonal con correlaciones	82
6. Conclusiones	91
6.1. Trabajo a futuro	92
7. Apéndice A	93
7.0.1. Teoría de Probabilidad	93
Bibliografía	95

Resumen

En el presente trabajo se analizan con métodos numéricos modelos de enlace fuerte unidimensionales desordenados. Físicamente los modelos describen una partícula cuántica (“electrón”) que se mueve en una red unidimensional con energías de sitio aleatorias y amplitudes de salto a los primeros b vecinos también aleatorias. Desde un punto de vista matemático, el problema consiste en determinar las propiedades estadísticas de autovalores y autovectores de matrices banda aleatorias con desorden diagonal y no-diagonal. El objetivo principal es estudiar la localización de los estados electrónicos y determinar cómo cambia su estructura cuando el desorden (diagonal y no-diagonal) presenta correlaciones espaciales. Los resultados numéricos de esta tesis muestran que, para valores moderados del desorden no-diagonal, específicas correlaciones espaciales de las energías de sitio y de las amplitudes de salto producen una transición de localización-deslocalización análoga a la que ocurre en el modelo de Anderson unidimensional con desorden correlacionado. La transición se atenúa hasta perderse por completo cuando se incrementa la intensidad del desorden no-diagonal.

Palabras claves: Localización de Anderson, Matrices banda aleatorias, Desorden correlacionado.

Abstract

In the present work, numerical methods are used to analyze random one-dimensional tight binding models. In physical terms, these models describe a quantum particle (“electron”) which moves along a one-dimensional chain with random site energies and random hoppings to the b nearest neighbor. From a mathematical point of view, the problem consists in determining the statistical properties of the eigenvalues and eigenvectors of band random matrices with diagonal and off-diagonal disorder. The main purpose is to study the localization of the electronic states and to determine how their structure changes when disorder (both diagonal and off-diagonal) presents spatial correlations. The numerical results of this thesis show that, for moderate values of the off-diagonal disorder specific spatial correlations of the site energies and of the hopping amplitudes produce a localization-delocalization transition similar to the one that occurs in the one-dimensional Anderson model with correlated disorder. When the strength of the off-diagonal disorder is increased, the transition fades and eventually vanishes.

Keywords: Anderson localization, Band random matrices, Correlated disorder.

Introducción

En este trabajo se estudian las propiedades estadísticas de los autovalores y las propiedades de localización de los autovectores de matrices banda cuyos elementos son variables aleatorias idénticamente distribuidas independientes o con específicas correlaciones del desorden, las cuales representan modelos de enlace fuerte con interacciones entre b vecinos en una muestra unidimensional de talla finita.

Nuestros modelos surgen como una generalización del modelo de Anderson unidimensional que considera desorden en las energías de sitio e interacciones a primeros vecinos, el cual es representado mediante una matriz banda tridiagonal con elementos aleatorios solamente dentro de la diagonal principal. De manera análoga, nuestros sistemas tendrán una representación como matriz banda aleatoria, pero ahora con desorden tanto dentro como fuera de la diagonal y una anchura de la semibanda de tamaño b .

En diversos estudios se ha demostrado que los autoestados del modelo de Anderson unidimensional son localizados en presencia de desorden en las energías de sitio. Sin embargo, Izrailev y Krokhin mostraron que mediante el uso de correlaciones del desorden es posible modular las propiedades de localización de los autovectores de la muestra, generando ventanas de localización-deslocalización efectivas de los estados del sistema. Lo que nos motiva a creer que el uso de elementos correlacionados en el modelo con desorden fuera de la diagonal principal e interacciones a los primeros b vecinos puede generar la presencia de un comportamiento similar al modelo unidimensional antes mencionado, teniendo como consecuencia que podamos manipular las propiedades de localización de los autovectores de las matrices banda que estamos estudiado.

Debemos destacar que este problema se mantiene abierto y es de interés conocer a fondo su solución dado que puede significar una extensión de los modelos unidimensionales a modelos de dimensionalidad más alta, considerando el vínculo que existe entre las matrices banda aleatorias que representan nuestros modelos de enlace fuerte y los sistemas casi unidimensionales. Además, los posibles alcances del estudio no se limitan a los modelos de enlace fuerte, existe la posibilidad, al estudiar matrices banda aleatorias, de encontrar resultados que permitan desarrollar otros modelos y campos de la física, tales como el rotador pateado en su versión cuántica y el caos cuántico en general.

A través de un estudio numérico hemos confirmado la presencia de localización en los autovectores del modelo de Anderson con energías de sitio independientes y el efecto de transición entre estados localizados y estados extendidos al usar los elementos diagonales con apropiadas correlaciones del desorden. Una vez desarrollado el modelo con desorden

diagonal continuamos con el análisis del desorden fuera de la diagonal sin correlaciones considerando interacciones a b vecinos en la red. Sistemas para los cuales hemos encontrado que la presencia de desorden fuera de la diagonal tiene como consecuencia que las ventanas de localización-deslocalización de los autoestados se vean disminuidas con el crecimiento de las interacciones entre vecinos cercanos de la red, lo que tiene como consecuencia la pérdida de la transición metal-aislante.

También hemos determinado que el agregar correlaciones a lo largo de todas las diagonales de la matriz banda permite preservar las ventanas de localización-deslocalización para valores finitos de la anchura de banda. Sin embargo, si b sigue creciendo, se pierde el efecto de deslocalización debido a las correlaciones del desorden. Se tiene por lo tanto una confirmación parcial de nuestras hipótesis de que por medio de apropiadas correlaciones de los elementos de matriz se pueden preservar las ventanas de transición efectivas entre estados localizados y estados extendidos.

Contenido de la tesis

Para lograr nuestro objetivo de una manera eficaz comenzaremos, en el primer capítulo, mostrando las principales características de un sistema cristalino así como los diferentes conceptos de la física de estado sólido que nos serán de utilidad para definir con precisión tanto los modelos de enlace fuerte como las propiedades estadísticas de los parámetros presentes en él. Entre estos conceptos destaca la definición de una red de Bravais para la correcta descripción de un cristal, la cual nos permite caracterizar este sistema físico y, más adelante, enunciar y demostrar el teorema de Bloch que en esencia describe la forma de los autoestados cuando un electrón está sometido a un potencial periódico, resultado que tiene como consecuencia la presencia de estados extendidos y la aparición de bandas de energía como características de un sistema cristalino [2, 3, 4].

Una vez que hayamos desarrollado los puntos más importantes en el estudio de los cristales, pasaremos en el segundo capítulo a describir los sistemas desordenados. Veremos que la presencia de desorden tiene como consecuencia la aparición del fenómeno de la localización de los autoestados, la cual fue descrita en 1958 por P. W. Anderson [1], quien mostró que al agregar desorden a una muestra los autoestados, en un principio extendidos en la presencia de un material cristalino, se confinaban a una región finita del espacio. Este fenómeno, hoy conocido como localización de Anderson, ha logrado un enorme desarrollo a partir de este trabajo, extendiéndose a diferentes campos de la física y ha sido objeto de numerosos estudios que incluyen análisis teórico, numérico y experimental [7, 10]. Se ha aplicado esta teoría en el estudio de sistemas mesoscópicos [11], la propagación de ondas electromagnéticas y acústicas en medios aleatorios [12, 13], la física de átomos fríos [14] y la localización de fotones [15], entre otros. Llegando hasta estudios más recientes relacionados con el transporte de información en el ADN, donde se ha demostrado que las correlaciones de largo alcance juegan un rol importante en la transmisión electrónica del ADN [17].

Una vez que tengamos establecido la forma de introducir desorden en un sistema cristalino y definido con precisión la manera de identificar la presencia de localización en nuestros sistemas, mostraremos algunos de los resultados más importantes entorno a la teoría de sistemas desordenados; entre los que destaca la teoría del único parámetro de escala a partir de la cual se ha podido establecer que para sistemas en una y dos dimensiones solamente se tiene la presencia de estados localizados independientemente del grado de desorden, y para el caso en tres dimensiones se pasa de un sistema con estados extendidos a un sistema con estados localizados al aumentar el grado de desorden, efecto conocido como *transición metal-aislante*. Luego, hacia la parte final del capítulo, definiremos con precisión, a través de su hamiltoniano, lo que consideramos como un modelo de enlace fuerte y concluiremos este apartado con un estudio numérico del modelo de Anderson, caso particular de modelo de enlace fuerte, utilizando una red de tamaño infinito y una de tamaño finito para diferentes características en los parámetros del modelo. Mostrando a partir del trabajo desarrollado por Izrailev y colaboradores [19] que bajo específicas correlaciones de los elementos que conforman las energías de sitio del modelo de Anderson se puede generar una transición efectiva entre estados localizados y estados extendidos aún en el caso de una dimensión, efectuándose una transición metal-aislante.

Más adelante, en el capítulo 4, realizaremos el estudio de sistemas desordenados desde otra perspectiva; utilizando la teoría de matrices aleatorias, una herramienta importante y de enorme utilidad al tratar diversos problemas físicos, entre los que destaca el estudio del caos cuántico. Estudiaremos los sistemas desordenados a través del producto de matrices aleatorias mediante el método de matrices de transferencia y haremos uso del teorema de Furstenberg que, junto con la conjetura de Borland, permite establecer el crecimiento de los autoestados del modelo de Anderson [22, 27]. Finalmente, terminaremos la descripción de las principales aplicaciones de las matrices aleatorias describiendo el fenómeno del caos cuántico mediante el rotador pateado, un modelo ampliamente estudiado en la literatura y de gran importancia al tratar de establecer una relación entre sistemas desordenados y sistemas cuánticos deterministas. El modelo del rotador pateado es importante por, además de lo ya mencionado, exhibir la presencia de un fenómeno similar a la localización de Anderson conocido como *localización dinámica*, que genera que la difusión de la energía presente en el análogo clásico del rotador pateado desaparezca en su versión cuántica al transcurrir el tiempo [28, 29, 30].

En nuestro penúltimo capítulo nos enfocaremos en describir las principales aplicaciones del colectivo de matrices banda aleatorias, un conjunto particular de matrices aleatorias, mencionaremos sus principales propiedades estadísticas [33, 36] y las diferentes aplicaciones a sistemas físicos que de ellas se tiene; como lo son el estudio del rotador pateado y otros modelos que presentan caos cuántico [30, 37], a través de las cuales podemos mostrar la transición entre sistemas completamente caóticos a integrables con la variación de los parámetros presentes en su estructura. Además de utilizar el colectivo de matrices banda aleatorias para describir sistemas cuánticos que presentan caos, destacaremos su conexión con los sistemas casi unidimensionales en la física de estado sólido y la posibilidad de utilizar las matrices banda aleatorias para extender el estudio de sistemas desordenados unidimensionales a más dimensiones [40].

Por último, en el capítulo central de este trabajo, utilizaremos la gran variedad de herramientas desarrolladas a lo largo de cada sección para estudiar numéricamente modelos de enlace fuerte particulares que consistirán en una cadena de átomos de longitud N , unidimensional, con interacciones entre b vecinos en la red. Para ello haremos uso de la teoría de matrices aleatorias mediante la representación del hamiltoniano de enlace fuerte como matriz tipo banda. A partir de la representación matricial buscaremos determinar la solución del problema de autovalores y establecer las propiedades estadísticas tanto del espectro de energías como de los autoestados del sistema, lo que nos permitirá describir la localización presente en nuestros modelos.

Como ya lo hemos mencionado, buscaremos realizar una extensión del modelo tridiagonal con desorden puramente diagonal al agregar desorden a las subdiagonales e interacción a b vecinos en la red.

Separaremos el estudio en dos secciones, en la primera se desarrollará un modelo con desorden diagonal con correlaciones y desorden no-diagonal sin correlaciones. Mostraremos que, al aumentar el desorden no-diagonal, se pierde la transición de localización-deslocalización asociada a las correlaciones de las energías de sitio.

Una vez que hayamos identificado el efecto de la presencia de desorden sin correlaciones fuera de la diagonal principal, procederemos a usar elementos correlacionados a lo largo de todas las diagonales de la matriz banda con el fin de recuperar las ventanas de localización-deslocalización que presenta el modelo con desorden puramente diagonal y con ello permanezca la transición entre regímenes.

A través de nuestros datos hemos logrado mostrar que, en efecto, la presencia de correlaciones del desorden en las subdiagonales del modelo con interacciones a b vecinos en la red nos permite recuperar la transición entre estados extendidos y estados localizados. Sin embargo, la evidencia numérica nos muestra que la pérdida de la transición metal-aislante no se detiene por completo, solamente se ve disminuida, por lo que podemos concluir que las correlaciones del desorden que hemos utilizado solo nos permiten preservar parcialmente las ventanas de localización-deslocalización.

Capítulo 1

Sistemas cristalinos

Antes de poder abordar el tema central de este trabajo, que se dedica particularmente al análisis de sistemas desordenados, describiremos las principales propiedades de un sólido cristalino con el objetivo de definir, a partir de él, un sistema ordenado y poder identificar la presencia de desorden en un sistema físico.

Definición 1. Sólido Cristalino: Consideramos un sólido cristalino como aquel que está constituido por un conjunto regular de unidades idénticas, periódicamente distribuidas en el espacio[2].

A continuación, desglosaremos los conceptos más importantes en el estudio de las estructuras cristalinas, a partir de los cuales podremos desarrollar las propiedades de simetría que caracterizan a este modelo físico.

1.1. Red de Bravais

Una *red de Bravais* se define como un conjunto periódico de puntos en el espacio, todos ellos conectados por los vectores de traslación:

$$\mathbf{t}_n = n_1\mathbf{t}_1 + n_2\mathbf{t}_2 + n_3\mathbf{t}_3, \quad (1.1.1)$$

donde los vectores $\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \mathbf{t}_3$ son no coplanares y satisfacen la regla de la mano derecha. A estos vectores se les conoce como *vectores primitivos* o *fundamentales* y los números n_1, n_2, n_3 que los acompañan son cualquier número entero.

El paralelepípedo formado por $\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \mathbf{t}_3$ es llamado *celda primitiva* y su volumen está dado por:

$$\Omega = \mathbf{t}_1 \cdot (\mathbf{t}_2 \times \mathbf{t}_3). \quad (1.1.2)$$

La posible elección de los vectores primitivos y de la celda primitiva no es única, solamente el volumen (Ω) contenido dentro de la celda se debe mantener invariante.

Para mostrar este hecho podemos observar la Figura 1.1. Donde tenemos una red de Bravais bidimensional que puede ser generada por los vectores primitivos:

$$\mathbf{t}_1 = (a, 0, 0), \quad \mathbf{t}_2 = (0, b, 0), \quad (1.1.3)$$

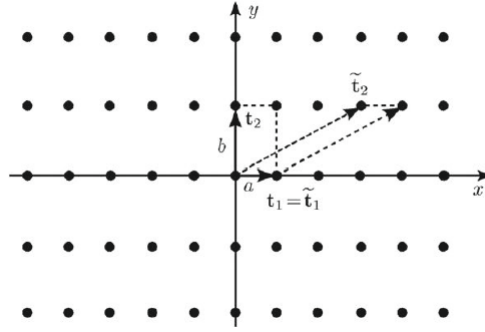


Figura 1.1: Red de Bravais bidimensional generada con dos diferentes celdas primitivas [2].

y a la vez, es descrita de manera equivalente por los vectores fundamentales

$$\tilde{\mathbf{t}}_1 = (a, 0, 0) = \mathbf{t}_1, \quad \tilde{\mathbf{t}}_2 = (na, b, 0) = n\mathbf{t}_1 + \mathbf{t}_2 \quad (1.1.4)$$

con n un entero arbitrario. Con ello vemos que para ambas descripciones cambian tanto los vectores fundamentales como la celda primitiva en la generación de la red, pero el volumen $\Omega = ab$ permanece constante.

Luego, de la definición de red de Bravais, es posible describir el conjunto de puntos que la constituyen usando otro tipo de celda, denominada *celda convencional*, la cual contiene un número entero de celdas primitivas y un cierto número extra de puntos de la red. Un ejemplo de una red de Bravais en dos dimensiones aparece en la Figura 1.2. Donde se compara la generación del conjunto de puntos que constituyen la red, por un lado, con una celda primitiva y por otro con una celda convencional. Para esta red se toma como ejemplo la celda primitiva generada por los vectores:

$$\mathbf{t}_1 = (a, 0, 0), \quad \mathbf{t}_2 = (a/2, b/2, 0), \quad (1.1.5)$$

donde el área del paralelogramo formado por estos vectores tiene un valor de $ab/2$. Ahora, al describir la red con una celda convencional con forma rectangular, doble área y un punto extra en el centro del rectángulo; los vectores primitivos son:

$$\mathbf{t}_1^{(c)} = (a, 0, 0), \quad \mathbf{t}_2^{(c)} = (0, b, 0), \quad (1.1.6)$$

con lo que las celdas convencionales generadas por $\mathbf{t}_1^{(c)}$ y $\mathbf{t}_2^{(c)}$ contienen dos celdas primitivas.

Aunque para describir las propiedades de una red de Bravais que requieren el uso de todas las propiedades de simetría presentes en el cristal se debe emplear la red generada a partir del uso de los vectores y celdas primitivas, las celdas convencionales pueden ser útiles al ofrecer una imagen gráfica distinta para analizar algunos cristales.

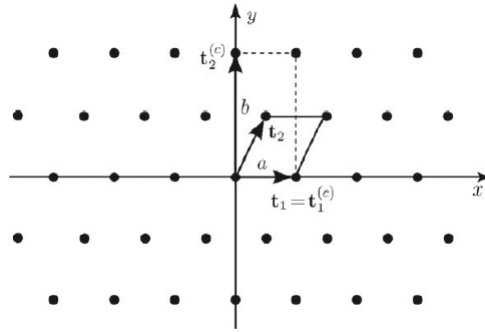


Figura 1.2: Red de Bravais en dos dimensiones descrita empleando una celda primitiva $(\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2)$ y de manera comparativa utilizando una celda convencional $(\mathbf{t}_1^c, \mathbf{t}_2^c)$ [2]

1.2. Estructuras cristalinas

Los vectores primitivos permiten describir el aspecto geométrico de un cristal, pero no son siempre suficientes para especificar la composición del cristal mismo. Además de la estructura de la red se necesita especificar el tipo de átomos o iones que ocupan una celda primitiva, descritos a través de una base de vectores $\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, \dots, \mathbf{d}_n$, los cuales establecen su posición de equilibrio en cada celda del cristal. Es útil distinguir dos tipos de redes:

Red simple: Un cristal con un solo tipo de átomo en la celda primitiva es denominado *cristal simple* o *red simple*. En este caso la base contiene un solo vector, el cual puede tomar el valor de cero con una apropiada selección del origen de coordenadas en el cristal. En una red simple la posición de equilibrio de los átomos \mathbf{R}_n coincide con el vector de traslación \mathbf{t}_n , de manera que tenemos:

$$\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{t}_1 + n_2 \mathbf{t}_2 + n_3 \mathbf{t}_3 \quad (1.2.7)$$

Red compuesta: Un cristal con dos o más tipos de átomos o iones en la unidad de celda primitiva es conocido como *cristal compuesto* o *red compuesta*, por lo que la posición de equilibrio de los átomos está determinada por los puntos:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_n^{(1)} &= \mathbf{d}_1 + n_1 \mathbf{t}_1 + n_2 \mathbf{t}_2 + n_3 \mathbf{t}_3, \\ \mathbf{R}_n^{(2)} &= \mathbf{d}_2 + n_1 \mathbf{t}_1 + n_2 \mathbf{t}_2 + n_3 \mathbf{t}_3, \\ &\vdots \\ \mathbf{R}_n^{(\nu)} &= \mathbf{d}_\nu + n_1 \mathbf{t}_1 + n_2 \mathbf{t}_2 + n_3 \mathbf{t}_3, \end{aligned} \quad (1.2.8)$$

Una red compuesta se puede ver como una red conformada por un cierto número de redes simples subyacentes (*subredes*) iguales al número de vectores que conforman la base del cristal.

1.2.1. Celda Primitiva Wigner-Seitz

Como se dijo anteriormente al describir una red de Bravais, la selección de la celda primitiva para generar el cristal no es única. Sin embargo, existe una importante y muy útil elección de la celda, sugerida por Wigner y Seitz, la cual definimos de la siguiente manera:

Definición 2. Celda Wigner-Seitz: *Una celda de Wigner-Seitz es la región del espacio construida alrededor de un punto de la red; de tal manera que cualquier punto de la celda primitiva está más cerca a este punto que a cualquier otro punto de la red.*

Dado un átomo, la celda de Wigner-Seitz puede delimitarse trazando planos que sean equidistantes entre el átomo inicial y los átomos vecinos y considerando el volumen encerrado más pequeño entre ellos.

En adición a esto, si el cristal está conformado por redes compuestas, definimos la celda de Wigner-Seitz a partir de las redes de Bravais subyacentes, con la propiedad de que la celda construida en la red subyacente satisface la definición descrita anteriormente.

1.2.2. Red recíproca

Además del enfoque directo de la red en el espacio ordinario, al estudiar un cristal podemos considerar, también, la *red recíproca en el espacio dual o recíproco*. El cual definimos a partir de los vectores primitivos $\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \mathbf{t}_3$ en el espacio directo, a través de la siguiente relación:

$$\mathbf{t}_i \cdot \mathbf{g}_j = 2\pi\delta_{ij}, \quad (1.2.9)$$

donde los vectores \mathbf{g}_j son vectores primitivos en el espacio recíproco (y el factor numérico es introducido comúnmente en la literatura para simplificar algunas expresiones derivadas de esta propiedad). Note que la red recíproca está relacionada solamente con las propiedades traslatorias del cristal y no con la base, por lo que cristales con la misma simetría traslatoria, y diferente base, tienen la misma red recíproca asociada.

Ahora bien, podemos resolver (1.2.9) de manera explícita para determinar los vectores en el espacio dual a partir de sus correspondientes vectores en el espacio ordinario. Por ejemplo, \mathbf{g}_1 debe ser ortogonal a \mathbf{t}_1 y \mathbf{t}_2 , lo que implica que es paralelo al producto cruz de ambos vectores, si agregamos la condición $\mathbf{g}_1 \cdot \mathbf{t}_1 = 2\pi$ queda definido unívocamente; de manera similar para los otros dos vectores del espacio dual, con lo que podemos concluir

$$\mathbf{g}_1 = \frac{2\pi}{\Omega} \mathbf{t}_2 \times \mathbf{t}_3, \quad \mathbf{g}_2 = \frac{2\pi}{\Omega} \mathbf{t}_3 \times \mathbf{t}_1, \quad \mathbf{g}_3 = \frac{2\pi}{\Omega} \mathbf{t}_1 \times \mathbf{t}_2, \quad \Omega = \mathbf{t}_1 \cdot (\mathbf{t}_2 \times \mathbf{t}_3). \quad (1.2.10)$$

Es importante destacar que las celdas recíprocas obedecen las mismas propiedades que las celdas primitivas y que las celdas recíprocas de las celdas recíprocas son las celdas primitivas del espacio ordinario.

Definición 3. Zonas de Brillouin: *Las zonas de Brillouin son definidas en el espacio dual, de tal manera que: la primera zona de Brillouin de la red recíproca tiene la*

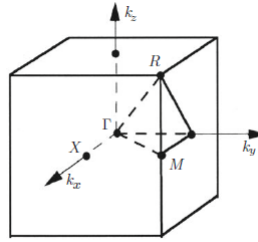


Figura 1.3: Primera zona de Brillouin para una red cúbica simple [2].

misma definición que la descrita para una celda de Wigner-Seitz en el espacio directo, es decir, cumple la propiedad de que cualquier punto de la celda está más cerca de un punto elegido en la red, que de cualquier otro punto en el cristal. Se puede obtener de manera similar a la celda de Wigner-Seitz, bisectando con planos perpendiculares los segmentos que unen los primeros vecinos en la red recíproca, luego los segundos vecinos y así sucesivamente, considerando al final de la bisección el volumen más pequeño encerrado. La segunda Zona de Brillouin corresponde al segundo volumen más pequeño encerrado en la bisección y así sucesivamente, se pueden construir el resto de las zonas de Brillouin asociadas a la red recíproca.

Para ejemplificar la obtención de la zona de Brillouin considere una red cúbica simple con vectores primitivos en el espacio directo:

$$\mathbf{t}_1 = d(1, 0, 0), \quad \mathbf{t}_2 = d(0, 1, 0), \quad \mathbf{t}_3 = d(0, 0, 1), \quad (1.2.11)$$

por lo que los vectores en el espacio recíproco son

$$\mathbf{g}_1 = \frac{2\pi}{d}(1, 0, 0), \quad \mathbf{g}_2 = \frac{2\pi}{d}(0, 1, 0), \quad \mathbf{g}_3 = \frac{2\pi}{d}(0, 0, 1), \quad (1.2.12)$$

de manera que la red recíproca es también un cubo de lado $\frac{2\pi}{d}$.

Para esta red se muestra en Figura 1.3, la primera zona de Brillouin, resaltando además otros puntos de alta simetría; Γ denota el origen de la zona de Brillouin, X el centro, M el centro de uno de los bordes y R uno de los vértices del cubo, respectivamente.

1.3. Teorema de Bloch

A continuación enunciaremos, daremos una demostración, y finalmente, describiremos las principales consecuencias del teorema de Bloch; el cual está relacionado con las soluciones de la ecuación de Schrödinger para el caso de un potencial periódico.

Para empezar, considere un electrón en un potencial que satisface $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{t}_n)$ para todo \mathbf{t}_n en la red de Bravais. Dicho electrón tiene asociada la siguiente ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \phi(\mathbf{r}) = E\phi(\mathbf{r}) \quad (1.3.13)$$

Teorema 1.4. Las autofunciones de (1.3.13) asociadas al potencial $V(\mathbf{r})$ son el producto de una onda plana $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ por una función $\mathbf{u}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ con la periodicidad de la red. Es decir

$$\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\mathbf{u}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{u}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{t}_n) = \mathbf{u}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.4.14)$$

Donde las funciones $\mathbf{u}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ y el vector \mathbf{k} son conocidas como funciones de Bloch y vector de Bloch, respectivamente [4]. Note que (1.4.14) se puede expresar de manera equivalente en la forma

$$\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{t}_n) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{t}_n}\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.4.15)$$

Antes de iniciar con la demostración del teorema anterior debemos destacar un punto muy importante en la conducción de los electrones a través de un cristal. Debido a que, como resultado de la interacción del electrón de conducción con los iones del cristal, este tendrá asociados solo ciertos valores de la energía, estos valores se agrupan en niveles que se distribuyen en las denominadas *bandas de energía permitidas*, separadas por regiones de energía para los cuales no existe un autoestado asociado al electrón, por lo que se les denomina regiones prohibidas o *bandas de energía prohibidas*. De manera que un cristal se comporta como aislante si sus bandas de energía permitidas se encuentran todas llenas o vacías, y por otro lado, se comporta como metal si una o más bandas están parcialmente llenas, y como semimetal o semiconductor para un caso intermedio entre los dos anteriores (véase Figura 1.4).

La estructura de bandas presente en los cristales es a menudo tratada analíticamente a través de una ligera perturbación por medio de un potencial periódico al modelo de la partícula libre. Ahora bien, desde un punto de vista físico, el origen de la estructura de bandas de energía se debe a la denominada *reflexión de Bragg*, por cada reflexión de Bragg de un electrón no existe una solución de la ecuación de Schrödinger correspondiente (véase Figura 1.5). De esta manera, considerando un electrón en un potencial periódico unidimensional de período a y utilizando la condición de Bragg (véase [3] para más detalles al respecto): $(\mathbf{k} + \mathbf{G})^2 = k^2$. Entonces por medio de la difracción de onda del vector \mathbf{k} , en una dimensión, tenemos

$$k = \pm \frac{1}{2}G = \pm n\pi/a \quad (1.4.16)$$

donde $G = 2\pi n/a$ es un vector en la red recíproca y n cualquier entero. De esta manera la primera reflexión de Bragg y por lo tanto la primera banda de energía prohibida ocurrirá en $k = \pm\pi/a$, como vemos en la Figura 1.5. La región comprendida entre $-\pi/a$ y π/a en el espacio \mathbf{k} corresponde a la primera zona de Brillouin de la red y tiene asociada la primera banda de energía permitida. El resto de las bandas de energía prohibidas ocurrirán a los sucesivos valores de n .

Demostración. Para la demostración del teorema 1.4.15 considere el operador de traslación $T_{\mathbf{t}_n}$, tal que al actuar sobre cualquier función $f(\mathbf{r})$ tiene como resultado:

$$T_{\mathbf{t}_n}f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{t}_n) \quad (1.4.17)$$

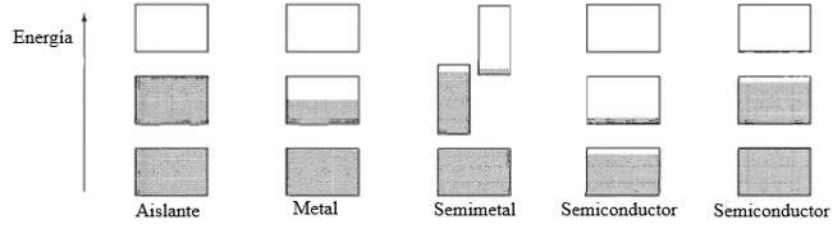
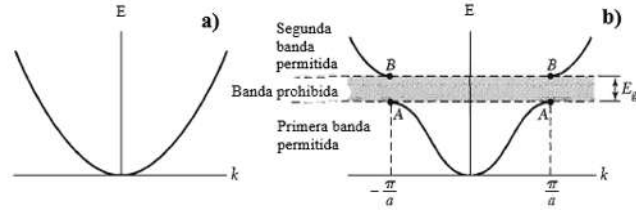


Figura 1.4: Bandas de energía de un cristal [3]


 Figura 1.5: Energía E en función del vector de onda k para (a) una partícula libre, (b) un electrón en un potencial periódico unidimensional con una red de período a [3]

para todo \mathbf{t}_n en la red de Bravais. Además, dado que el hamiltoniano es periódico, tenemos

$$T_{\mathbf{t}_n} H \phi(\mathbf{r}) = H(\mathbf{r} + \mathbf{t}_n) \phi(\mathbf{r} + \mathbf{t}_n) = H(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r} + \mathbf{t}_n) = H T_{\mathbf{t}_n} \phi(\mathbf{r}), \quad (1.4.18)$$

de manera que se satisface

$$T_{\mathbf{t}_n} H = H T_{\mathbf{t}_n}. \quad (1.4.19)$$

Otra propiedad que satisface el operador de traslación es que las traslaciones no dependen del orden en que estas se apliquen, de tal manera que

$$T_{\mathbf{t}_n} T_{\mathbf{t}'_n} \phi(\mathbf{r}) = T_{\mathbf{t}'_n} T_{\mathbf{t}_n} \phi(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r} + \mathbf{t}_n + \mathbf{t}'_n), \quad (1.4.20)$$

por lo que concluimos

$$T_{\mathbf{t}_n} T_{\mathbf{t}'_n} = T_{\mathbf{t}'_n} T_{\mathbf{t}_n} = T_{\mathbf{t}_n + \mathbf{t}'_n}. \quad (1.4.21)$$

Ahora bien, usando (1.4.19) podemos concluir que el operador $T_{\mathbf{t}_n}$ y H forman un conjunto de operadores que conmutan y sabemos, de la mecánica cuántica, que esto tiene como consecuencia que los autoestados de H pueden ser seleccionados de tal manera que son simultáneamente autoestados de $T_{\mathbf{t}_n} \forall \mathbf{t}_n$, es decir:

$$\begin{aligned} H \phi &= \lambda \phi, \\ T_{\mathbf{t}_n} \phi &= c(\mathbf{t}_n) \phi. \end{aligned} \quad (1.4.22)$$

Los autovalores $c(\mathbf{t}_n)$ del operador de traslación satisfacen, por un lado, la propiedad:

$$T_{\mathbf{t}_n} T_{\mathbf{t}'_n} \phi = c(\mathbf{t}_n) T_{\mathbf{t}'_n} \phi = c(\mathbf{t}_n) c(\mathbf{t}'_n) \phi \quad (1.4.23)$$

mientras que, a través de este resultado, al usar (1.4.21), tenemos

$$T_{\mathbf{t}_n} T_{\mathbf{t}'_n} \phi = T_{\mathbf{t}_n + \mathbf{t}'_n} \phi = c(\mathbf{t}_n + \mathbf{t}'_n) \phi \quad (1.4.24)$$

lo que nos dice que los autovalores satisfacen

$$c(\mathbf{t}_n) c(\mathbf{t}'_n) = c(\mathbf{t}_n + \mathbf{t}'_n). \quad (1.4.25)$$

Esto significa que dado \mathbf{t}_i , vector primitivo en la red de Bravais, siempre podemos escribir $c(\mathbf{t}_i)$ en la forma

$$c(\mathbf{t}_i) = e^{2\pi i x_i}, \quad (1.4.26)$$

para una adecuada selección de x_i . De esta expresión podemos concluir que, al aplicar de manera sucesiva (1.4.25) a cualquier vector $\mathbf{t}_n = n_1 \mathbf{t}_1 + n_2 \mathbf{t}_2 + n_3 \mathbf{t}_3$ en la red de Bravais, este tiene asociados los autovalores

$$c(\mathbf{t}_n) = c(\mathbf{t}_1)^{n_1} c(\mathbf{t}_2)^{n_2} c(\mathbf{t}_3)^{n_3}. \quad (1.4.27)$$

Expresión equivalente a

$$c(\mathbf{t}_n) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_n}, \quad (1.4.28)$$

donde $\mathbf{k} = x_1 \mathbf{g}_1 + x_2 \mathbf{g}_2 + x_3 \mathbf{g}_3$ y \mathbf{g}_i son los vectores de la red recíproca, los cuales hemos expresado que satisfacen $\mathbf{t}_i \cdot \mathbf{g}_j = \delta_{ij}$.

Por lo tanto, a través de los resultados anteriores, concluimos

$$T_{\mathbf{t}_n} \phi(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r} + \mathbf{t}_n) = c(\mathbf{t}_n) \phi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_n} \phi(\mathbf{r}) \quad (1.4.29)$$

con lo que mostramos que los autoestados ϕ del hamiltoniano satisfacen la identidad (1.4.15), y con ello hemos demostrado el teorema 1.4. □

Condiciones de Born-von Karman

Para determinar el valor del vector de onda \mathbf{k} podemos imponer las condiciones de frontera de *Born-von Karman* (para más detalles véase [4]), que consideran la periodicidad de la red

$$\phi(\mathbf{r} + N_i \mathbf{t}_i) = \phi(\mathbf{r}), \quad (1.4.30)$$

donde N_i son todos enteros del orden $N^{1/3}$ tales que $N = N_1 N_2 N_3$ es el número total de celdas primitivas en el cristal.

Aplicando el teorema de Bloch a (1.4.30) tenemos

$$\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + N_i \mathbf{t}_i) = e^{iN_i \mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_i} \phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.4.31)$$

lo cual nos dice que

$$e^{iN_i \mathbf{k} \cdot \mathbf{t}_i} = 1, \quad (1.4.32)$$

si $\mathbf{k} = x_1 \mathbf{g}_1 + x_2 \mathbf{g}_2 + x_3 \mathbf{g}_3$, entonces se satisface

$$e^{2\pi i N_i x_i} = 1 \quad (1.4.33)$$

y en consecuencia

$$x_i = \frac{m_i}{N_i}, \quad m_i \in \mathbb{Z}. \quad (1.4.34)$$

Por lo tanto, la forma general de los vectores de Bloch es

$$\mathbf{k} = \sum_{i=1}^3 \frac{m_i}{N_i} \mathbf{t}_i, \quad m_i \in \mathbb{Z}. \quad (1.4.35)$$

Consecuencias del teorema de Bloch

El teorema anterior tiene dos consecuencias muy importantes:

1. *Los estados cristalinos son extendidos.* Esta consecuencia se obtiene al analizar la norma de las funciones de onda, las cuales están sujetas a la condición (1.4.30) que implica que las autofunciones tienen la misma extensión en todos los puntos separados por un vector de la red de Bravais, o en otras palabras, son estados extendidos.

2. *El espectro de energías tiene una estructura de bandas, separadas por zonas de energía prohibidas.* Antes de enunciar el teorema de Bloch mencionamos esta importante característica de los sistemas cristalinos, sin embargo, esta consecuencia no es tan inmediata y nos limitaremos a desarrollar a continuación un ejemplo que nos permite analizar este punto en particular en un modelo simple y bastante estudiado en la literatura.

1.4.1. Modelo de Kronig-Penney

Como ejemplo de la aplicación del teorema de Bloch y para mostrar la estructura de bandas de energía que describimos anteriormente utilizaremos un modelo unidimensional por simplicidad en los cálculos. Este modelo es conocido como *Modelo de Kronig-Penney*, y se basa en una idealización física de un sistema con potenciales rectangulares periódicos que se extienden infinitamente. Es usual y analíticamente más simple, para mostrar la estructura de bandas, considerar los potenciales de manera deltiforme. Por lo que al final de nuestros cálculos, realizaremos esta aproximación y concluiremos con ella nuestros resultados.

Para empezar, consideremos una secuencia de barreras, como se muestra en la Figura 1.6. Con un periodo de la red de valor $a = w + b$.

Considérese la región comprendida entre $-w < x < b$ compuesta por las regiones *I* y *II* que se aprecian en la Figura 1.6, para $-w < x < 0$ y $0 < x < b$, respectivamente. De esta manera, las soluciones de la ecuación (1.3.13) para energías $0 < E < V_0$ tienen la forma:

$$\phi_I(x) = Ae^{iqx} + Be^{-iqx}, \quad -w < x < 0, \quad q(E) = \sqrt{2mE/\hbar^2}, \quad (1.4.36)$$

$$\phi_{II}(x) = Ce^{\beta x} + De^{-\beta x}, \quad 0 < x < b, \quad \beta(E) = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2} \quad (1.4.37)$$

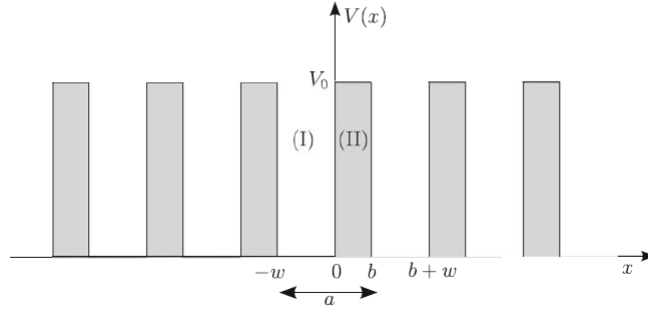


Figura 1.6: Barreras de potencial rectangulares periódicas [2]

Donde los coeficientes A, B, C, D son determinados por las siguientes condiciones de frontera:

Por un lado, la continuidad de la función de onda y su primera derivada nos dicen

$$\phi_I(0) = \phi_{II}(0), \quad \left(\frac{d\phi_I}{dx} \right)_{x=0} = \left(\frac{d\phi_{II}}{dx} \right)_{x=0}, \quad (1.4.38)$$

mientras que el teorema de Bloch implica que

$$\phi_{II}(b) = e^{ika} \phi_I(-w), \quad \left(\frac{d\phi_{II}}{dx} \right)_{x=b} = e^{ika} \left(\frac{d\phi_I}{dx} \right)_{x=-w}. \quad (1.4.39)$$

Por lo que los coeficientes de (1.4.36) y (1.4.37) deben satisfacer el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned} A + B &= C + D, \\ Aiq - Biq &= C\beta - D\beta, \\ Ce^{\beta b} + De^{-\beta b} &= e^{ika}[Ae^{-iqw} + Be^{iqw}], \\ C\beta e^{\beta b} - D\beta e^{-\beta b} &= e^{ika}[Aiqe^{-iqw} - Biqe^{iqw}]. \end{aligned} \quad (1.4.40)$$

Este sistema tiene solución no trivial solo si el determinante de los coeficientes es nulo, es decir,

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ iq & -iq & -\beta & \beta \\ -e^{ika-iqw} & -e^{ika+iqw} & e^{\beta b} & e^{-\beta b} \\ -iqe^{ika-iqw} & iqe^{ika+iqw} & \beta e^{\beta b} & -\beta e^{-\beta b} \end{vmatrix} = 0 \quad (1.4.41)$$

Después del cálculo algebraico del determinante y agrupar términos de manera conveniente podemos concluir que el sistema debe satisfacer la siguiente identidad:

$$\frac{\beta^2 - q^2}{2q\beta} \sinh(\beta b) \sin(qw) + \cosh(\beta b) \cos(qw) = \cos(ka). \quad (1.4.42)$$

Esta expresión nos permite observar la estructura de bandas de energía de la que hablábamos anteriormente y puede ser resuelta mediante métodos numéricos, sin embargo, como decíamos al inicio de la sección para ver esta consecuencia del teorema de Bloch es mucho más conveniente considerar un caso límite en el cual las barreras son una sucesión tipo deltas, es decir, considere $b \rightarrow 0, V_0 \rightarrow \infty$, manteniendo $V_0 b$ constante. Lo cual simplifica (1.4.42) de la siguiente manera:

$$P \frac{\sin(qa)}{qa} + \cos(qa) = \cos(ka), \quad P = \frac{mV_0 b a}{\hbar^2}. \quad (1.4.43)$$

En la Figura 1.7, podemos observar la gráfica generada para el lado izquierdo de (1.4.43), en donde se ha destacado la región -1 a 1 (eje de las ordenadas), zona que delimita los valores para los cuales se satisfacen ambos miembros de la expresión (1.4.43). También, aparecen resaltados en líneas un poco más gruesas los valores de qa (eje de la abscisas) correspondientes a la misma condición de compatibilidad dada por (1.4.43), dando origen a los intervalos de energía permitidos en el modelo. En contraparte, cuando el miembro izquierdo toma valores fuera de estos intervalos los resultados correspondientes no cumplen la condición de compatibilidad entre ambos miembros de la ecuación del modelo y surgen las bandas de energía prohibidas.

Ahora, al imponer las condiciones de frontera periódicas k toma los valores discretos:

$$k = \frac{2\pi}{Na} n, \quad n = -\frac{N}{2}, -\frac{N}{2} + 1, \dots, \frac{N}{2} - 1, \quad (1.4.44)$$

donde N corresponde al número de celdas en la red.

Para la primera zona de Brillouin, apreciamos en la Figura 1.8, los datos generados para $E(k)$, considerando $P = 3\pi/2$ y $a = 1$. En esta imagen es clara la estructura de banda de los valores de la energía, separando bandas de energía permitidas con regiones de energía prohibidas. Con lo que hemos logrado mostrar esta importante consecuencia del teorema de Bloch enunciada en la sección anterior.

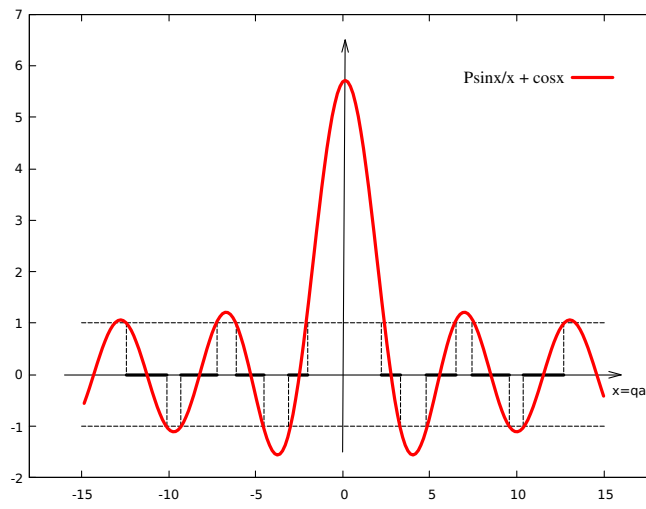


Figura 1.7: Gráfica de la solución de 1.4.43 en función del parámetro qa , para $P = 3\pi/2$. Con los valores de qa resaltados en el eje x para los cuales se satisface la condición de compatibilidad de ambos miembros en (1.4.43)

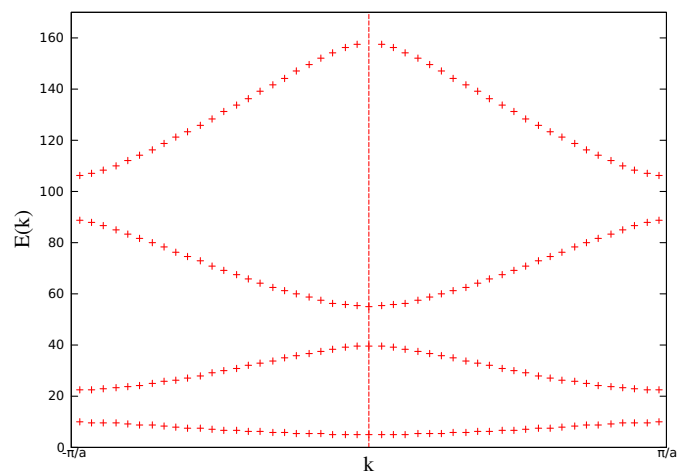


Figura 1.8: Bandas de energía para el modelo de Kroning-Penny

Capítulo 2

Sistemas desordenados

Un sistema cristalino u ordenado es, estrictamente hablando, una idealización física; debido a que, en la naturaleza, por más puro que sea un material este siempre contará con algún tipo o grado de anomalía.

De esta manera, surge la necesidad de clasificar y estudiar sistemas desordenados, lo cual es nuestra tarea por desarrollar en el presente capítulo. A continuación, describiremos los tipos de desorden presentes en un material y detallaremos los aspectos importantes que se han estudiado a lo largo del tiempo en torno a los sistemas desordenados, poniendo particular atención en los modelos unidimensionales, ampliamente estudiados en la literatura y los cuales representan el objeto de estudio de este trabajo. Con esto buscaremos precisar los efectos que genera la presencia de desorden en los autoestados del sistema y finalmente, realizaremos un estudio numérico para ejemplificar las principales características de los modelos con desorden.

2.1. Tipos de desorden

El desorden presente en un sistema cristalino puede mostrarse en diferentes formas y niveles; desde una ruptura ocasional de la estructura de la red de Bravais debida a la presencia de alguna impureza o dislocación, hasta una completa pérdida de las simetrías del sistema como ocurre en un sólido amorfo. De manera que es posible clasificar a los sistemas desordenados en dos grandes grupos, de acuerdo con el tipo de desorden presente:

Desorden estructural: Material en el que los átomos ocupan posiciones aleatorias en la red.

Desorden compositivo: Cristal con una red de Bravais bien definida, que sin embargo carece de orden en su composición, presentando dos o más tipos de átomos distribuidos de manera aleatoria en la red.

Además de clasificar los sistemas desordenados por el tipo de desorden en su estructura, también podemos identificarlos en base al grado de desorden en el material, el cual puede variar de débil a fuerte.

Usualmente clasificaremos el desorden como débil o fuerte con base en las propiedades

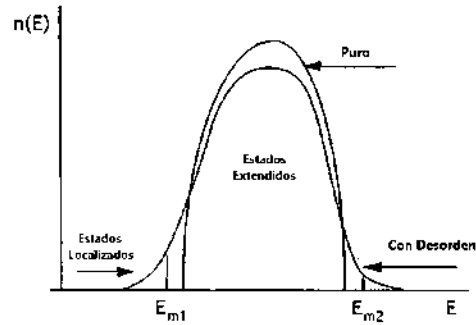


Figura 2.1: Densidad de estados $n(E)$ en función de la energía E . Para el caso de un cristal puro y un sistema cristalino con desorden [11].

estadísticas de los parámetros aleatorios presentes en el modelo, los cuales quedan completamente determinados por su distribución de probabilidad o bien por sus momentos.

2.2. Localización de Anderson

Como lo describimos en el capítulo anterior, los autoestados en un sistema cristalino son ondas de Bloch y como consecuencia son estados extendidos. Sin embargo, esta propiedad de la función de onda se modifica sustancialmente conforme agregamos desorden a la red.

El estudio del efecto de la presencia de desorden en un material recibió un impulso fundamental del trabajo publicado en 1958 por el ganador del premio Nobel P. W. Anderson [1] quien demostró que la libre propagación de los electrones en un sistema desordenado no solamente se reduce al aumentar el desorden en la estructura de la red, sino que se puede llegar a un punto crítico donde los electrones se quedan confinados en una región finita del espacio, dando lugar a lo que hoy conocemos como *localización de Anderson*, en su honor.

También es bien sabido que, al igual que en otros fenómenos físicos, la dimensionalidad del sistema afecta considerablemente las propiedades de la localización. Para un sistema tridimensional el desorden débil tiene un efecto perturbativo de los estados electrónicos generando la localización de una fracción de los autoestados que reduce la conductividad. Cuando se aumenta el desorden, se llega a un punto crítico a partir del cual todos los estados son localizados, en la región correspondiente a desorden fuerte.

Para el caso de una y dos dimensiones la situación es muy diferente debido a que en un material de talla infinita los estados electrónicos son localizados independientemente del grado de desorden.

2.2.1. Bordos de movilidad

Una de las características de los sistemas tridimensionales es que presentan una transición; con un aumento de la fracción de autoestados localizados paralelo al incremento del grado

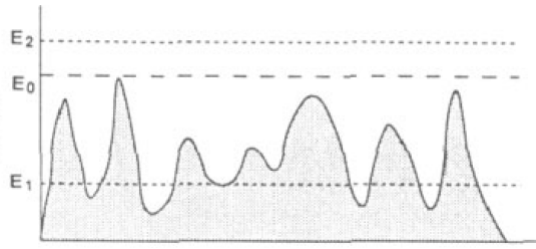


Figura 2.2: Barreras de potencial aleatorias [11].

de desorden. En la Figura 2.1, se aprecian las gráficas cualitativas de la densidad de estados de un material tridimensional. Por un lado, tenemos el caso de un cristal puro cuyos estados son ondas de Bloch y por el otro, el caso donde el cristal presenta algún tipo y grado de desorden en su estructura que da origen a la presencia de estados localizados. En la imagen podemos ver que bajo la presencia de desorden las colas de la curva comienzan a presentar una región de estados localizados, separados de los estados extendidos en el centro de la banda por los valores E_{m1} y E_{m2} , valores conocidos como *bordes de movilidad*. Estos bordes de movilidad se aproximarán conforme el grado de desorden en el sistema aumente, hasta llegar a un punto tal que todos los estados sean localizados. A este cambio en las propiedades del transporte se le conoce como transición *metal-aislante*.

2.2.2. Definición de la localización

Es bien sabido que el análisis de una partícula cuántica confinada en una región del espacio es mucho más sutil que en el caso clásico. En efecto, si la partícula se encuentra atrapada entre barreras de potencial, con energía E_1 menor que la de las barreras (véase Figura 2.2), aún puede escapar del pozo vía tunelamiento y hallarse en un estado extendido; por el contrario, una partícula con energía E_2 mayor que la de las barreras de potencial, que clásicamente presentaría estados extendidos, puede convertirse en una partícula localizada vía interferencia destructiva.

Por lo tanto, para hablar de localización de Anderson necesitamos precisar las características de los autoestados que nos permitirán afirmar si un sistema presenta localización o no.

Comportamiento asintótico de la función de onda

El comportamiento asintótico de la función de onda para un estado localizado es usualmente descrito por el decaimiento exponencial:

$$\phi(r) = f(r)e^{-\lambda r} \quad (2.2.1)$$

donde λ es el *exponente de Liapunov* o *inverso de la longitud de localización* (l_{loc}^{-1}) y $f(r)$ es una función aleatoria.

Probabilidad de transmisión

Además de poder identificar un estado localizado a partir del comportamiento de la función de onda, también es posible analizar si presenta localización con ayuda de la probabilidad de transmisión de un electrón de un sitio r a un sitio r' en la red. Esta probabilidad está asociada al cuadrado de la función de Green, de tal manera que

$$t(r, r'; E) = \langle | \langle r | G(E^+) | r' \rangle |^2 \rangle \quad (2.2.2)$$

donde $t(r, r', E)$ es conocida como *probabilidad de transmisión* [10]. A partir de t podemos definir el exponente de Liapunov de la siguiente manera:

$$\frac{2}{\lambda} = - \lim_{|r-r'| \rightarrow \infty} \frac{\log t(r, r'; E)}{|r - r'|}. \quad (2.2.3)$$

Además de los indicadores de localización de Anderson que describimos anteriormente, existen algunos otros utilizados en la literatura (véase [10] para más detalles).

2.3. Teoría del único parámetro de escala

La teoría del único parámetro de escala (SPS por sus siglas en inglés) postula que todas las propiedades físicas de un sólido desordenado de tamaño finito se pueden describir en términos de la longitud de localización para una muestra infinita $(l_{loc})_{\infty}$ y del tamaño de la muestra L [16].

La idea conceptual de esta teoría surge del trabajo de Thouless y colaboradores, quienes analizaron la conductancia de un sistema de volumen L^d en d dimensiones en función de la longitud L [9]. Años más tarde, con ayuda del trabajo de Wegner [21], en adición de las ideas de Thouless y colaboradores, fue posible formular la teoría del único parámetro de escala de la localización, en la cual la conductancia, $g(L)$, toma el lugar de la variable de escala [20]. Con este resultado la SPS logró dar un paso importante al tratar de entender el fenómeno de la localización considerando el comportamiento de la conductancia como función únicamente del tamaño de la muestra, confirmando así las ideas de Thouless y colaboradores.

Función de escala

Para poder describir la conductancia en función del tamaño de la muestra, $g = g(L)$, de un hipercubo de volumen L^d introducimos la siguiente función, conocida como función de escala [10]:

$$\beta(g) = \frac{d(\ln g)}{d(\ln L)} = \frac{L}{g} \frac{dg}{dL}. \quad (2.3.4)$$

Distinguimos dos zonas para el estudio del fenómeno de la localización:

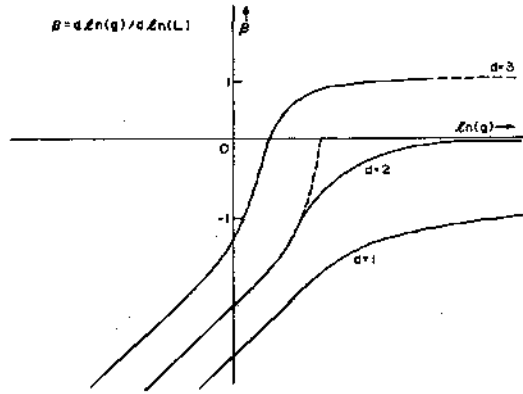


Figura 2.3: Comportamiento de la función de escala utilizando la conductancia y el tamaño de la muestra como parámetros de escala, en relación con la dimensión del sistema [7].

a) Mayor conductancia $g \gg 1$

En este régimen es válida la ley de Ohm, es decir, la conductancia está dada por:

$$g(L) = \sigma L^{d-2}, \quad \sigma - \text{conductividad}, \quad (2.3.5)$$

lo que implica que la forma asintótica para la función de escala es:

$$\beta(g) = d - 2. \quad (2.3.6)$$

b) Menor conductancia $g \ll 1$

Para este caso los estados electrónicos son localizados, y la forma asintótica de la función de onda es de la forma descrita en (2.2.1). En esta región la función de escala tiene el siguiente comportamiento:

$$\beta(g) = \log(g), \quad (2.3.7)$$

independientemente de la dimensionalidad del sistema [7].

Con ayuda de estas formas asintóticas se puede construir una curva para analizar el comportamiento de la función de escala en el límite $T = 0$, para los casos $d = 1, 2$ y 3 como se muestra en la Figura 2.3, bajo la suposición de que $\beta(g)$ es una función continua y monótona, lo cual es bastante plausible dado que representa la conductancia de un sistema finito como función del tamaño de la muestra, sin embargo, existen excepciones donde no se cumple la condición de la monotonía (para más detalles sobre este punto véase [7]).

a) SPS en 1 y 2 dimensiones:

Uno de los puntos más importantes que predice la teoría del único parámetro de escala es que para sistemas unidimensionales y bidimensionales solamente es posible obtener

estados localizados, debido a que β siempre es menor que cero.

b) SPS en 3 dimensiones:

A diferencia de los dos casos anteriores, en tres dimensiones se tiene un comportamiento muy diferente para la conductancia del sistema, siendo posible iniciar desde un valor g_0 suficientemente grande, de tal manera que $\beta(g) > 0$, encontrándonos en el régimen metálico donde es válida la ley de Ohm, y para el cual $g(L)$ aumentará con el tamaño de la muestra. Sin embargo, si iniciamos desde un valor g_0 suficientemente pequeño, entonces $\beta(g) < 0$, donde el comportamiento de la función de escala corresponde a estados localizados y para el cual $g(L)$ decrecerá conforme L crezca. Destacando con ello el valor g_c tal que $\beta(g_c) = 0$ correspondiente al valor de la conductividad para el cual los bordes de movilidad se unen (véase Figura 2.1) y el sistema pasa a tener solo estados localizados; este valor depende, como se mencionó anteriormente, del grado de desorden en el material, si el desorden es débil entonces el sistema se encontrará en la región de estados extendidos, y si el desorden es fuerte en la zona asociada a estados localizados. Siendo g_c el punto crítico que marca la transición *metal-aislante*.

2.4. Modelos de enlace fuerte

Hasta este momento, en el presente capítulo, hemos definido el concepto de localización y desarrollado las consecuencias más importantes derivadas de la existencia de la teoría SPS. Además, comenzamos hablando de la forma de clasificar un sistema desordenado, estudio que extenderemos ahora para un cierto tipo de modelos en particular, los cuales son usados para describir sistemas que presentan desorden compositivo y se caracterizan por considerar los electrones fuertemente atados al núcleo, de ahí su nombre de “enlace fuerte” (TBM por sus siglas en inglés). Estos modelos, además, pueden ser empleados para la descripción de muestras de tamaño finito, algo de especial interés en el presente trabajo, dado que nos permitirá usar análisis numérico como herramienta de estudio.

2.4.1. Hamiltoniano de enlace fuerte

Los modelos de enlace fuerte pueden ser descritos por el siguiente hamiltoniano (TBH por sus siglas en inglés):

$$H = \sum_{n,\alpha} |n, \alpha \rangle \epsilon_{n,\alpha} \langle n, \alpha| + \sum_{n,\alpha,m,\beta} |n, \alpha \rangle V_{n,\alpha,m,\beta} \langle m, \beta| \quad (2.4.8)$$

Donde n es el índice de sitio en la red de Bravais, mientras que α representa un conjunto completo de números cuánticos de los orbitales electrónicos.

De la estructura del TBH se derivan las siguientes propiedades que lo caracterizan[5]:

1. La estructura de la red (dimensión del modelo, condiciones de frontera, etcétera).
2. Los valores de las energías de sitio (elementos diagonales ϵ_n).

3. Las amplitudes de transición (elementos fuera de la diagonal $V_{n,m}$).

En la sección 2.1 mencionábamos que una forma de clasificar los sistemas desordenados era a partir del grado de desorden presente en su estructura, el cual dependía de las propiedades estadísticas de los parámetros del modelo. En el caso de un modelo de enlace fuerte en el que tanto las energías de sitio cuanto las amplitudes de salto a sitios cercanos son variables aleatorias, el grado de desorden estará determinado por las propiedades estadísticas de los elementos ϵ_n y $V_{n,m}$. En la siguiente sección usaremos la condición de desorden débil, que puede ser establecida a través del segundo momento de la distribución, $\langle \epsilon_n^2 \rangle \ll 1$, para desarrollar algunas de las propiedades de localización en un modelo de enlace fuerte específico.

2.5. Modelo de Anderson 1D

Un modelo de enlace fuerte del tipo descrito por (2.4.8) y ampliamente estudiado en la literatura, es el modelo de Anderson unidimensional, el cual considera desorden solamente en las energías de sitio ϵ_n e interacciones a primeros vecinos ($V_{n\pm 1}$), como se muestra en la Figura 2.4, y es representado por el siguiente hamiltoniano:

$$H = \sum_n |n\rangle \epsilon_n \langle n| + \sum_n (|n+1\rangle \langle n| + |n\rangle \langle n+1|), \quad (2.5.9)$$

donde los elementos ϵ_n son variables aleatorias independientes e idénticamente distribuidas (véase Apéndice A), con distribución uniforme

$$\rho(x) = \begin{cases} \rho_0, & x \in (-x_0, x_0) \\ 0, & \text{otro caso,} \end{cases} \quad (2.5.10)$$

y las siguientes propiedades estadísticas

$$\langle \epsilon_n \rangle = 0, \quad \langle \epsilon_n^2 \rangle = \sigma^2. \quad (2.5.11)$$

2.5.1. Partícula libre

Para empezar con el estudio del modelo de Anderson, consideremos primero la versión más sencilla de él, la cual consiste en retirar el desorden de su estructura, es decir, considerar los elementos $\epsilon_n = 0 \forall n$. De esta manera, esperamos que las soluciones del sistema sean estados extendidos.

Ahora, para iniciar con el análisis, es conveniente reescribir (2.5.9) en términos de las funciones de onda, usando la ecuación de Schrödinger, de la siguiente manera:

Partimos de la ecuación de eigenvalores

$$H|\phi\rangle = E|\phi\rangle \implies \langle n|H|\phi\rangle = E \langle n|\phi\rangle \quad (2.5.12)$$

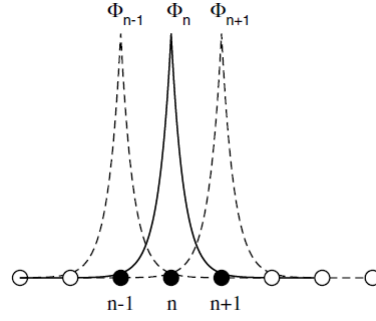


Figura 2.4: Red unidimensional con interacciones a primeros vecinos [6].

y definimos $\langle n|\phi \rangle \equiv \phi_n$ para obtener

$$\phi_{n+1} + \phi_{n-1} + \epsilon_n \phi_n = E\phi_n. \quad (2.5.13)$$

Posteriormente, retiramos el desorden y establecemos condiciones de frontera usando una red periódica:

$$\phi_{n+1} + \phi_{n-1} = E\phi_n, \quad (2.5.14)$$

sujeto a la condición

$$\phi_{n+N} = \phi_n. \quad (2.5.15)$$

Finalmente, a partir de la forma de (2.5.14), proponemos las soluciones

$$\phi_n = Ae^{\alpha n}. \quad (2.5.16)$$

Sustituyendo (2.5.16) tenemos

$$E(\alpha) = e^\alpha + e^{-\alpha} = 2 \cosh(\alpha) \quad (2.5.17)$$

de esta manera, si $\alpha \in \mathbb{R}$, tendríamos típicamente funciones de onda no normalizables, por lo que las descartamos como soluciones físicamente aceptables. Lo que determina $\alpha = i\mu$. Ahora, si imponemos las condiciones de frontera periódicas, entonces μ toma los valores discretos

$$\mu_m = \frac{2\pi m}{N}, \quad m = 0, 1, \dots, N-1. \quad (2.5.18)$$

donde N es el número total de celdas primitivas en el cristal. Sustituyendo este valor para μ_m en (2.5.17) tenemos que la energía del sistema es

$$E(k) = 2 \cos(\mu_m) = 2 \cos\left(\frac{2\pi m}{N}\right). \quad (2.5.19)$$

De esta expresión se observa que el electrón, típicamente, está restringido a la banda de energía

$$-2 < E < 2. \quad (2.5.20)$$

2.5.2. Mapa hamiltoniano

Para describir las propiedades del modelo de Anderson existen diferentes enfoques que podemos seguir. Uno de ellos fue propuesto en [18] y consiste en considerar un oscilador paramétrico sujeto a golpeteos tipo delta de amplitud A_n periódicos, descrito mediante el hamiltoniano:

$$H(p, x, t) = \frac{\mu p}{2} + \frac{\mu x}{2} - \frac{x}{2} \delta_1(t), \quad \delta_1(t) = - \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} A_n \delta(t - n). \quad (2.5.21)$$

El cual tiene asociado el siguiente mapa bidimensional en el espacio fase:

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n \cos \mu - (p_n + A_n x_n) \sin \mu, \\ p_{n+1} &= x_n \sin \mu + (p_n + A_n x_n) \cos \mu. \end{aligned} \quad (2.5.22)$$

A través de este mapa podemos establecer una equivalencia entre el oscilador paramétrico y el modelo de Anderson unidimensional, al considerar un par de relaciones entre los parámetros de uno y otro sistema, de la siguiente manera:

Primero, eliminamos p_{n+1} y p_n de (2.5.22) para obtener, con un cálculo sencillo, la siguiente relación:

$$x_{n+1} + x_{n-1} = (A_n \sin \mu + 2 \cos \mu) x_n \quad (2.5.23)$$

por lo tanto, vemos que, si comparamos esta expresión con (2.5.13), efectivamente, el modelo de Anderson y el mapa hamiltoniano (2.5.22) son equivalentes si se cumplen las condiciones:

$$E = 2 \cos \mu, \quad A_n = - \frac{\epsilon_n}{\sin \mu}, \quad (2.5.24)$$

de esta manera, la única restricción proviene de la identidad del lado derecho, la cual se cumple en el caso de desorden débil, $\langle \epsilon_n^2 \rangle \ll 1$ y por su parte, el parámetro A_n nos permitirá introducir el desorden al modelo, de manera que si las energías de sitio son independientes, también lo serán los elementos A_n .

En este nuevo enfoque, mediante el mapa (2.5.22), los estados localizados del modelo de Anderson corresponderán a trayectorias no acotadas en el espacio fase (p, x) cuando $n \rightarrow \infty$. Mientras que, contrariamente, los estados extendidos son representados por trayectorias acotadas.

Para el estudio de la evolución de (2.5.22) es conveniente introducir las variables de ángulo-acción haciendo el cambio de variable $x_n = r_n \sin \theta_n$ y $p_n = r_n \cos \theta_n$, con lo cual el mapa toma la forma:

$$\begin{aligned} \sin \theta_{n+1} &= D_n^{-1} [\sin(\theta_n - \mu) - A_n \sin \theta_n \sin \mu], \\ \cos \theta_{n+1} &= D_n^{-1} [\cos(\theta_n - \mu) + A_n \sin \theta_n \sin \mu], \end{aligned} \quad (2.5.25)$$

donde

$$D_n = \frac{r_{n+1}}{r_n} = \sqrt{1 + A_n \sin(2\theta_n) + A_n^2 \sin^2 \theta_n}. \quad (2.5.26)$$

Ahora bien, usando (2.5.25) podemos desacoplar la variable angular θ_n :

$$\tan(\theta_{n+1}) = \frac{\sin(\theta_n - \mu) - A_n \sin \theta_n \sin \mu}{\cos(\theta_n - \mu) + A_n \sin \theta_n \sin \mu}, \quad (2.5.27)$$

y obtener de manera explícita, en aproximación a desorden débil,

$$\theta_{n+1} = \theta_n - \mu + A_n \sin^2(\theta_n) + O(A_n^2). \quad (2.5.28)$$

2.5.3. Longitud de localización

Ahora, nuestro principal interés se centra en encontrar la longitud de localización, para ello empleamos la siguiente expresión para el exponente de Liapunov:

$$\lambda = l_{loc}^{-1} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \log \left| \frac{x_{n+1}}{x_n} \right| \quad (2.5.29)$$

Sustituyendo x_n en términos de las variables ángulo-acción

$$l_{loc}^{-1} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \log \left(\frac{r_{n+1}}{r_n} \right) + \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \log \left| \frac{\sin \theta_{n+1}}{\sin \theta_n} \right| \quad (2.5.30)$$

Considerando que el segundo sumando del lado derecho de la identidad anterior tiende a cero, excepto en los bordes y centro de la banda de energía, se estima

$$l_{loc}^{-1} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \log \left(\frac{r_{n+1}}{r_n} \right), \quad (2.5.31)$$

dando como resultado

$$l_{loc}^{-1} = \frac{1}{2} \langle \log D_n^2 \rangle, \quad (2.5.32)$$

donde $\langle \rangle$ representan el promedio sobre el “tiempo” n .

Considerando desorden débil, podemos aproximar el logaritmo de la expresión anterior a segundo orden, con lo cual obtenemos

$$l_{loc}^{-1} = \frac{\langle \epsilon_n^2 \rangle}{8 \sin^2(\mu)} - \frac{\langle \epsilon_n \sin(2\theta_n) \rangle}{2 \sin \mu} \quad (2.5.33)$$

y se reduce el problema del cálculo de la longitud de localización a la determinación del valor del correlador $\langle \epsilon_n \sin(2\theta_n) \rangle$. Para realizar esta tarea consideremos el siguiente correlador

$$Q_k \equiv \langle \epsilon_n e^{2i\theta_{n-k}} \rangle \quad (2.5.34)$$

y las variables aleatorias ϵ_n sujetas a las propiedades (2.5.11) y a la siguiente relación de correlación:

$$\langle \epsilon_n \epsilon_{n-k} \rangle \equiv \sigma^2 \xi(k) \quad (2.5.35)$$

De la expresión (2.5.34) es claro que nuestro interés se centra en calcular el valor de Q_0 , el cual obtenemos de la siguiente ecuación recursiva que cumplen los elementos Q_k (véase detalles del método en [17, 19]):

$$Q_{k-1} = e^{-2i\mu} Q_k - \frac{i}{2 \sin \mu} \xi(k), \quad 1 \leq k < \infty \quad (2.5.36)$$

Multiplicando ambos miembros de (2.5.36) por $e^{-2i\mu(k-1)}$ y sumando sobre todos los valores de k obtenemos

$$Q_0 = -\frac{i}{2 \sin \mu} \sum_{k=1}^{\infty} e^{2i\mu k} \xi(k) \quad (2.5.37)$$

Con ello, usando (2.5.37), la longitud de localización está determinada por

$$l_{loc}^{-1} = \frac{\sigma^2}{8 \sin^2 \mu} + \frac{\sigma^2}{4 \sin \mu} \mathcal{I}(Q_0) + O(\sigma^2), \quad (2.5.38)$$

donde $\mathcal{I}(Q_0)$ representa la parte imaginaria de Q_0 .

Como resultado obtenemos

$$l_{loc}^{-1} = \frac{\sigma^2 W(\mu)}{8 \sin^2 \mu}, \quad (2.5.39)$$

donde

$$W(\mu) = 1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \xi(k) \cos(2\mu k). \quad (2.5.40)$$

Esta expresión para la longitud de localización fue obtenida por primera vez por Izrailev y Krokhin en [19], siendo $W(\mu)$ la denominada *densidad espectral del desorden*, y está relacionada con las propiedades de transición localización-deslocalización efectiva en el modelo. Note que esta expresión falla en el centro de la banda de energía $E = 0$ y en los bordes de la misma $E = \pm 2$, donde el modelo de Anderson presenta peculiares propiedades de localización (véase por ejemplo [17] para más detalles sobre este punto).

2.5.4. Transición metal-aislante

Basados en los resultados obtenidos para la teoría SPS, descrita anteriormente, establecimos que para modelos 1D todos los estados son localizados en una muestra de tamaño infinito sin importar el grado de desorden. Sin embargo, (2.5.40) nos dice que si $W(\mu)$ toma el valor cero para algún intervalo en el espectro de energías, entonces la longitud de localización pasa de ser $O(1/\sigma^2)$ a $O(1/\sigma^4)$, con $\sigma^2 \ll 1$, por lo que se genera una transición efectiva, en aproximación a segundo orden, de localización-deslocalización, aún para un modelo 1D.

Consideremos

$$W(\mu) = \begin{cases} W_0, & \mu \in (-\pi/2, -\mu_1) \cup (\mu_1, \pi/2) \\ 0, & \text{otro caso.} \end{cases} \quad (2.5.41)$$

que implica, por expresión (2.5.39),

$$l_{loc}^{-1} = \begin{cases} \frac{\sigma^2 W(\mu)}{8 \sin^2 \mu}, & E \in (-E_1, E_1) \\ 0, & E \in (-\pi/2, -E_1) \cup (E_1, \pi/2) \end{cases} \quad (2.5.42)$$

Donde E_1 corresponde al borde de movilidad que marca el cambio de régimen, como se describió previamente en la sección 2.2.1, y cuyo valor está determinado a partir de la densidad espectral a través del parámetro μ_1 por la relación: $E_1 = 2 \cos(\mu_1)$.

Por otro lado, invirtiendo la relación (2.5.40), podemos determinar la correlación que deben satisfacer las energías de sitio de nuestro modelo, la cual está dada por la siguiente expresión

$$\chi(k) = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} W(\mu) \cos(2\mu k) d\mu. \quad (2.5.43)$$

Ahora hemos podido establecer con precisión los elementos necesarios que deben satisfacer todos los parámetros del modelo para generar una transición efectiva de localización-deslocalización.

Para terminar, analicemos un ejemplo específico, considere la densidad espectral:

$$W(\mu) = \begin{cases} 5, & \mu \in (-\pi/2, -2\pi/5) \cup (2\pi/5, \pi/2) \\ 0, & \text{otro caso.} \end{cases} \quad (2.5.44)$$

Siendo $E_1 = 2 \cos(2\pi/5) \approx 0.63$, tenemos

$$l_{loc}^{-1} = \begin{cases} \frac{\sigma^2 W(\mu)}{8 \sin^2 \mu}, & E \in (-0.63, 0.63) \\ 0, & E \in (-\pi/2, -0.63) \cup (0.63, \pi/2), \end{cases} \quad (2.5.45)$$

y la siguiente función de correlación de los parámetros ϵ_n , dada por (2.5.43),

$$\chi(k) = \frac{\langle \epsilon_n \epsilon_{n+k} \rangle}{\langle \epsilon_n^2 \rangle} = 5\delta_{0,k} - \frac{\sin(4\pi k/5)}{\pi k/5}. \quad (2.5.46)$$

Note que la función de correlación decae con ley de potencias de la forma $\chi(k) \sim 1/k$, por lo que la transición metal-aislante se debe a una correlación de largo alcance en las energías de sitio del modelo de Anderson.

El algoritmo utilizado en la práctica para generar desorden correlacionado es descrito a continuación:

1. Generamos un conjunto de variables aleatorias independientes idénticamente distribuidas, x_n , que satisfacen las siguientes propiedades estadísticas

$$\langle x_n \rangle = 0, \quad \langle x_n x_{n-k} \rangle = \delta_{k,0} \quad (2.5.47)$$

2. A partir de $W(\mu)$, procedemos a obtener los elementos

$$\beta_k = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \sqrt{\sigma^2 W(\mu)} \cos(2\mu k) d\mu. \quad (2.5.48)$$

3. Con estos coeficientes, a su vez, generamos las energías de sitio correlacionadas:

$$\tilde{x}_n = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \beta_{n-k} x_k. \quad (2.5.49)$$

Por otro lado, para determinar numéricamente la longitud de localización del modelo de Anderson, y comparar con los resultados obtenidos anteriormente, podemos emplear la ecuación (2.5.13), pero no de manera directa debido al crecimiento exponencial de los autoestados, por ello en su lugar iteramos la relación alternativa [22]:

$$\lambda = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_0^n \log |R_n|, \quad (2.5.50)$$

donde:

$$R_{n+1} = E + \epsilon_n + \frac{1}{R_n}. \quad (2.5.51)$$

obtenida de considerar $R_n = \frac{\phi_n}{\phi_{n-1}}$ en (2.5.13), para controlar el crecimiento exponencial. Además, recordemos que los elementos ϵ_n satisfacen (2.5.46), así como (2.5.11).

Finalmente, en la Figura 2.5, se aprecia la densidad espectral (2.5.44) y la correspondiente longitud de localización inversa o exponente de Liapunov generado a partir de la fórmula (2.5.39), comparando con los datos obtenidos por la expresión recursiva (2.5.50). En este gráfico la densidad espectral se caracteriza por tener una región donde su valor es cero, mientras que el resto del espectro se mantiene a un valor constante 2, ambas partes separadas por el parámetro μ_1 , quien también está relacionado con la posición de los bordes de movilidad en la transición localización-deslocalización que se observa en el exponente de Liapunov, sobre el cual encontramos que tanto el valor teórico derivado de la fórmula de “Izrailev y Krokhin” y el valor numérico obtenido a partir de (2.5.50) coinciden en gran medida, siendo distintas en los bordes de la banda de energía y en el centro, zonas donde, como dijimos anteriormente, se presentan anomalías y la fórmula de “Izrailev y Krokhin” falla.

2.5.5. Modelo de Anderson de talla finita

Un aspecto importante a destacar de los estudios realizados anteriormente para describir las propiedades de localización del modelo de Anderson, es que tanto (2.2.1) y (2.2.3) y los resultados obtenidos mediante el enfoque del mapa hamiltoniano, consideran un sistema de talla infinita. Sin embargo, podemos extender nuestro análisis a través de un estudio numérico, siendo necesario primero introducir nuevos indicadores de la localización adecuados para un modelo finito. Dos de ellos, frecuentemente utilizados en la literatura son descritos a continuación.

Longitud de localización entrópica l_k

La longitud de localización entrópica es una de las herramientas que podemos utilizar para el análisis de la localización a partir de los autoestados en modelos de longitud finita

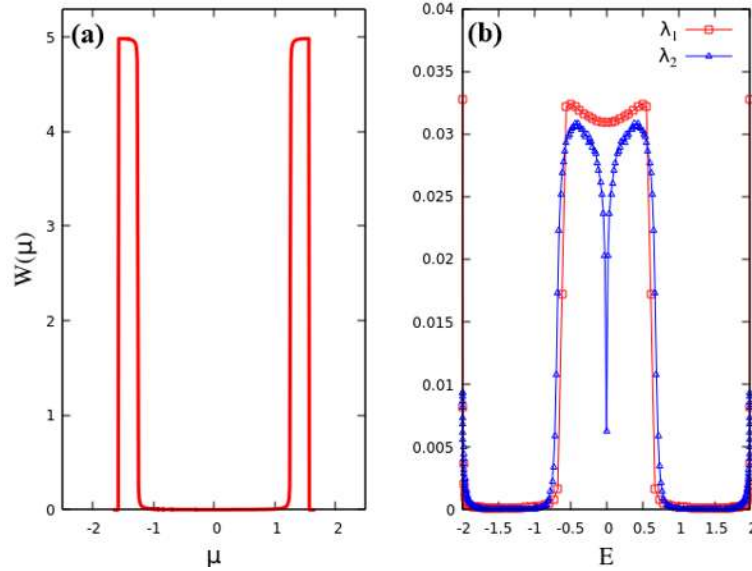


Figura 2.5: (a) Densidad espectral $W(\mu)$ (2.5.44). (b) Exponente de Liapunov utilizando la fórmula de Izrailev-Krokhin (λ_1) y utilizando la fórmula recursiva (2.5.50) (λ_2), ambos casos considerando $\sigma^2 = 0.05$.

y está definida a partir de la siguiente expresión [28]:

$$l_k \equiv \exp(S_k), \quad \text{con} \quad S_k = - \sum_{i=1}^N |\phi_i^{(k)}|^2 \log |\phi_i^{(k)}|^2, \quad (2.5.52)$$

donde N es el tamaño de la red y $\phi_i^{(k)}$ el k -ésimo autoestado del sistema con i -ésima componente.

La razón de participación inversa P_k^{-1}

La razón de participación inversa es una medida de la porción del espacio donde la amplitud de la función de onda es marcadamente distinta de cero, y está definida por [10]:

$$P_k^{-1} \equiv \sum_{i=1}^N |\phi_i^{(k)}|^4. \quad (2.5.53)$$

A pesar de que tanto la longitud de localización entrópica, como la razón de participación inversa nos permiten analizar el grado de localización de un autovector del sistema, ambos parámetros suelen ser distintos salvo en los casos extremos de un estado completamente extendido y un estado completamente localizado. Para analizar este comportamiento supongamos que la función de onda se esparce de manera uniforme sobre a sitios en la red de tamaño N con igual amplitud $|\phi_i^{(k)}|^2 = 1/a$ y desaparece en el resto de la red.

Siendo $N_0 = 1$ para un estado completamente localizado y $N_0 = N$ para un estado extendido, los indicadores de la localización nos dicen que:

$$\begin{aligned} N_0 = 1 &\implies P_k^{-1} = l_k = 1, \\ N_0 = N &\implies P_k^{-1} = l_k = N. \end{aligned} \quad (2.5.54)$$

Más adelante, cuando realicemos el estudio numérico, veremos que estos dos parámetros difieren para los valores de localización intermedios, pese a que, como ya obtuvimos, coinciden en los casos límites.

Autovectores y autovalores del modelo de Anderson

Una vez que hemos establecido las herramientas para describir la localización en el sistema hacemos lo propio con las propiedades del modelo de Anderson de talla finita, sujeto a condiciones de frontera periódicas.

El hamiltoniano (2.5.9), en representación de los sitios y condiciones de frontera periódicas, corresponde al operador matricial

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & 1 \dots & 0 & 1 \\ 1 & \epsilon_2 & 1 \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 \dots & 1 & \epsilon_{n-1} & 1 \\ 1 & 0 \dots & 1 & \epsilon_n \end{pmatrix}. \quad (2.5.55)$$

Si queremos que el sistema presente una transición efectiva de localización-deslocalización los elementos diagonales ϵ_n deben satisfacer las condiciones (2.5.10) y (2.5.11).

Una vez obtenido el desorden con correlaciones procedemos a resolver el problema de eigenvalores, diagonalizando (2.5.55), y finalmente, con el uso de (2.5.52) y (2.5.53) a partir de los autovalores y autovectores de H podemos describir las propiedades de localización del sistema.

En la Figura 2.6, se aprecian los datos generados a través de la densidad espectral $W(\mu)$ dada en (2.5.44). En este grafico aparecen la longitud de localización entrópica y la razón de participación inversa; las cuales, como ya mostramos, pese a ser iguales en los casos extremos de estados completamente extendidos y estados completamente localizados, difieren para los resultados de localización intermedios de manera apreciable. Sin embargo, ambos parámetros reproducen lo que se espera del modelo de Anderson en base a los resultados analíticos para una red infinita, por un lado, para el caso sin correlaciones (imagen (a)) vemos que todos los estados están localizados. Mientras que para el caso con correlaciones de largo alcance (imagen (b)) se aprecia la transición metal-aislante que predice la fórmula de Izrailev y Krokhin y que habíamos logrado obtener anteriormente, con los bordes de movilidad en $\pm E_1 = \pm 2 \cos(\mu_1) \approx \pm 0.63$, los cuales coinciden completamente con los obtenidos para el exponente de Liapunov en la Figura 2.5.

Además, si observamos la Figura 2.8, donde se compara la longitud de localización para

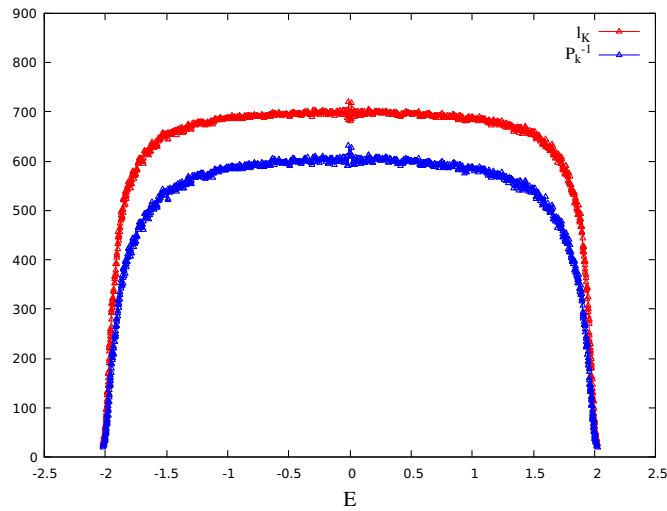


Figura 2.6: Longitud de localización entrópica y razón de participación inversa en función de la energía para el modelo de Anderson sin correlaciones con matrices de tamaño 1000×1000 y $\sigma^2 = 0.05$.

el modelo de talla finita y el modelo de tamaño infinito, vemos que la zona de estados localizados es muy similar para ambos modelos, por su parte la región de estados extendidos es diferente dado que al ser el inverso del exponente de Liapunov los estados extendidos con valor muy cercano a cero presentan una longitud de localización que crece considerablemente, la marcada diferencia en esta región es consecuencia de la talla finita en la cadena de átomos que consideramos para el problema de autovalores.

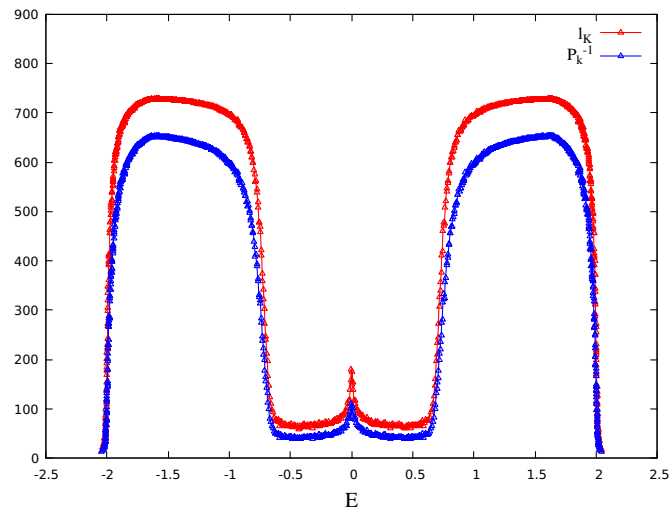


Figura 2.7: Longitud de localización entrópica y razón de participación inversa en función de la energía para el modelo de Anderson con correlaciones de los elementos ϵ_n , los cuales son generados a partir de (2.5.44) y satisfacen (2.5.11) con matrices de tamaño 1000×1000 y $\sigma^2 = 0.05$.

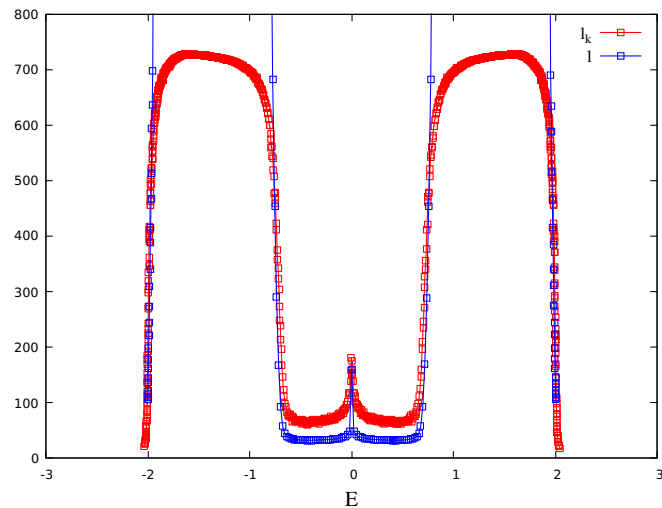


Figura 2.8: Longitud de localización entrópica l_k para una matriz de tamaño 1000×1000 , y longitud de localización l obtenida como el inverso del exponente de Liapunov dado en (2.5.50). Ambos valores considerando $\sigma^2 = 0.05$.

Capítulo 3

Teoría de Matrices Aleatorias

La teoría de matrices aleatorias (RMT por sus siglas en inglés) se usó inicialmente para analizar las propiedades estadísticas generales de un sistema cuántico de muchos cuerpos, donde el hamiltoniano, en principio muy complejo, que se deseaba estudiar era sustituido por un colectivo de Hamiltonianos aleatorios con características específicas de acuerdo al modelo [22]. Teniendo su primera aparición como herramienta para modelar un sistema físico en 1951, cuando Wigner propuso el uso de esta teoría para describir algunas propiedades físicas, tales como el espaciamiento entre niveles, de estados excitados de un núcleo atómico.

Posteriormente, con el desarrollo de este campo se han logrado extender las aplicaciones a una gran variedad de áreas de estudio y modelos físicos específicos entre los que se encuentran el denominado caos cuántico [23] y, de especial interés en el presente trabajo, el estudio de las propiedades de equilibrio y transporte en sistemas desordenados [24]. Es este el motivo para desarrollar en el presente capítulo los puntos más destacados de esta teoría.

3.0.1. Modelos de colectivos

Dentro de la gran variedad de conjuntos Ω de matrices aleatorias que se pueden formar, existen algunos con características particulares que destacan del resto por sus diversas aplicaciones en la física, entre ellos podemos encontrar los siguientes.

Colectivos Gaussianos

Los colectivos gaussianos son conjuntos cuyos elementos tienen la siguiente distribución [26]:

$$\rho(H) = c \exp^{-a \text{Tr} H^2} \quad (3.0.1)$$

con a y c constantes y H perteneciente a uno de los siguientes colectivos:

a) Colectivo Gaussiano Ortogonal

Ω_O es un Colectivo Gaussiano Ortogonal (GOE) si sus elementos son matrices de tamaño $N \times N$, reales, simétricas, e i.i.d. (véase Apéndice A), cuyas entradas son elementos aleatorios, con Ω_O invariante ante transformaciones ortogonales, es decir, si $A \in \Omega_O$, entonces $A' = OAO^T$ también es elemento de Ω_O , donde O es cualquier matriz ortogonal.

b) Colectivo Gaussiano Unitario

Decimos que Ω_U es un Colectivo Gaussiano Unitario (GUE) si sus elementos son matrices de tamaño $N \times N$, hermíticas cuyas entradas son elementos aleatorios con parte real e imaginaria i.i.d. Con Ω_U invariante ante transformaciones unitarias, es decir, de manera análoga al colectivo GOE, si $B \in \Omega_U$, entonces $B' = UBU^T \in \Omega_U$, con U cualquier matriz unitaria.

c) Colectivo Gaussiano simpléctico

Decimos que Ω_S es un Colectivo Gaussiano Simpléctico (GSE) si sus elementos son matrices de tamaño $N \times N$, hermíticas cuaterniónicas. Con Ω_S invariante ante transformaciones simplécticas, es decir, al igual que en los colectivos anteriores, si $C \in \Omega_S$, y efectuamos una transformación simpléctica en C , la nueva matriz C' también pertenecerá al colectivo Ω_S .

Autovalores de los colectivos gaussianos

Como consecuencia de las características de sus elementos y de las propiedades de simetría que satisfacen los colectivos Ω_O , Ω_U y Ω_S , sus autovalores presentan algunas características particulares que han sido ampliamente estudiadas en la literatura desde la década de los cincuenta con el trabajo de Wigner.

Para empezar, se ha demostrado que la distribución de probabilidad de sus autovalores tiene la siguiente estructura [26, 24]

$$P(E_1, \dots, E_N) = \text{const} \left[\prod_{\mu < \nu}^{1 \dots N} |E_\mu^2 - E_\nu^2|^\beta \right] \left[\prod_{\mu}^{1 \dots N} |E|^\alpha \right] \exp \left(-D \sum_{\mu=1}^N E_\mu^2 \right) \quad (3.0.2)$$

donde los autovalores E_i son resultado de la diagonalización de los miembros pertenecientes a los colectivos gaussianos, con $\beta = 1, 2, 4$ para los colectivos GOE, GUE y GSE, respectivamente. Además, el valor de la constante α también varía de acuerdo a cada colectivo (véase [26] para los valores correspondientes).

a) Conjetura de Wigner

Una de las consecuencias de la distribución (3.0.2) se ve reflejada en la distribución del espaciamiento entre niveles $P(s)$, la cual muestra una repulsión de los eigenvalores de la energía entre niveles cercanos.

En 1957, Wigner guiado por el caso $N = 2$ y para el colectivo GOE ($\beta = 1$), propuso

que el espaciamiento de niveles seguía el comportamiento dado por (3.0.3) considerando $\beta = 1$. Más tarde se logró obtener este resultado de manera analítica, y además, mostrar que se cumplía, también, para los colectivos GUE y GSE, $\beta = 2, 4$, respectivamente (véase [24, 25] para más detalles al respecto). Este fenómeno se ha estudiado, además, de manera experimental al analizar la estructura de algunos núcleos atómicos (véase por ejemplo [31] y referencias en él).

La forma de la distribución $p(s)$ pueden ser resumida a través de la denominada *conjetura de Wigner*, expresada mediante la siguiente identidad:

$$p(s) = As^\beta e^{-Bs} \tag{3.0.3}$$

donde A, B son constantes diferentes para cada colectivo (véase [24, 26] para los valores asociados a cada colectivo), y $\beta = 1, 2, 4$, para los colectivos GOE (distribución de *Wigner-Dyson*), GUE y GSE, respectivamente. Note que el valor $\beta = 0$ implica $p(s) = A \exp^{-Bs}$, cuya distribución recibe el nombre de *Distribución de Poisson* (véase Figura 3.1).

b) Ley del semicírculo

Otra de las características importantes, derivada de las simetrías presentes en los colectivos gaussianos y de la distribución (3.0.2), es que el valor esperado de la densidad de estados tiende, cuando $N \rightarrow \infty$, a la denominada ley del semicírculo (véase Figura 3.2), dada por la siguiente expresión,

$$\bar{\rho}(E) = \frac{2}{\pi R^2} \sqrt{R^2 - E^2} \tag{3.0.4}$$

donde $R = \sqrt{N/a}$, y $\bar{\rho}(E)$ representa el valor esperado de la densidad de estados en el sistema y se obtiene a través de la expresión

$$\bar{\rho}(E) = \int dE_2 \dots dE_N P(E, E_2, \dots, E_N). \tag{3.0.5}$$

3.1. RMT y sistemas desordenados

Hemos mencionado que se ha logrado establecer una conexión entre la RMT y los sistemas desordenados, aunque se debe precisar que, en un primer momento, la teoría de las matrices aleatorias y la localización de Anderson se estudiaron de manera paralela, y con el paso del tiempo, con el desarrollo de las mismas, fue posible encontrar la conexión entre ambas teorías.

Teorema de Furstenberg

Antes de iniciar con el desarrollo del modelo de Anderson utilizando RMT enunciaremos una generalización de la ley de los grandes números, la cual nos permitirá crear un

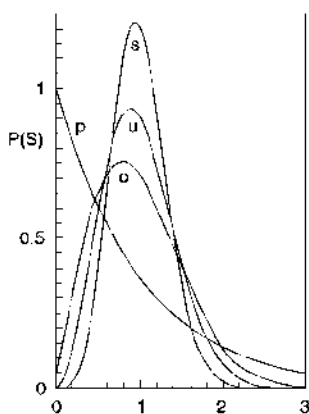


Figura 3.1: Gráficas típicas del espaciamiento entre niveles de los colectivos gaussianos; GOE, GUE, GSE para las curvas o , u , s respectivamente. Además la distribución de Poisson en la curva p [26].

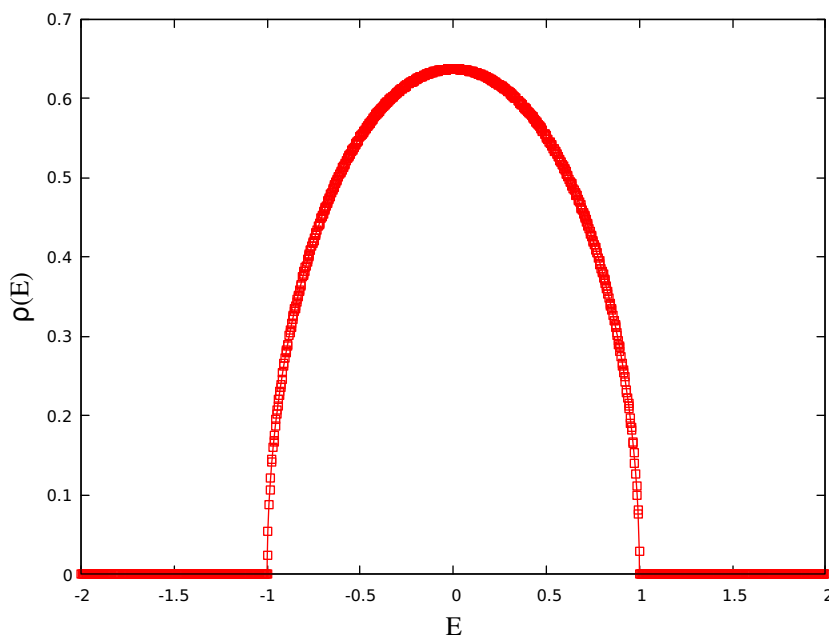


Figura 3.2: Diagrama de la densidad de estados aproximándose a la ley del semicirculo, para una matriz A perteneciente al colectivo GOE, realizando una normalización de los autovalores considerando $R = \sqrt{N/a}$, siendo A una matriz de tamaño 2000×2000 .

punto entre ambas teorías:

Primero, sea \mathbf{P}_N un producto de N matrices aleatorias $\mathbf{X}(i)$ independientes e idénticamente distribuidas

$$\mathbf{P}_N = \prod_{i=1}^N \mathbf{X}(i). \quad (3.1.6)$$

Supongamos que la secuencia $\omega_N = [\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_N]$ es estacionaria (es decir, las densidades de probabilidad de las variables X_i no cambian en el tiempo), ergódica y satisface

$$\overline{\log^+ \|\mathbf{X}\|} < \infty, \quad (3.1.7)$$

donde $\log^+ x = 0$ si $x \leq 1$ y $\log^+ x = \log x$ en otro caso, y el promedio en (3.1.7) es tomado sobre la distribución de probabilidad de \mathbf{X} .

Entonces el límite

$$\lambda_1 = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \|\mathbf{P}_N\| \quad (3.1.8)$$

existe con probabilidad 1. λ_1 es llamado *máximo exponente de Lyapunov característico* y es una cantidad determinista, es decir, no depende de la realización de la secuencia ω_N . Además, agregando algunas consideraciones adicionales a los elementos $\mathbf{X}(i)$ (véase [22] para más detalles) podemos establecer que $\lambda_1 > 0$ con probabilidad uno, resultado muy importante al tratar de establecer el comportamiento exponencialmente localizado del modelo de Anderson a través de la RMT, como veremos a continuación.

Matrices de transferencia

Ahora desarrollemos el modelo de Anderson mediante el uso de las propiedades del producto de matrices aleatorias. Para ello, considere la representación (2.5.13), la cual es equivalente a la siguiente identidad generada usando matrices de transferencia:

$$z(n+1) = \mathbf{A}(n)z(n), \quad (3.1.9)$$

donde

$$z(n) = \begin{pmatrix} \phi_n \\ \phi_{n+1} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}(n) = \begin{pmatrix} E - \epsilon_n & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.1.10)$$

Para una energía E fija y una condición inicial ϕ_0 y ϕ_1 ($\phi_0^2 + \phi_1^2 \neq 0$), la solución de (2.5.13) se puede expresar como

$$z(n) = \mathbf{A}(n-1) \dots \mathbf{A}(0) \mathbf{z}(0) = \mathbf{P}_n \mathbf{z}(0). \quad (3.1.11)$$

Si los ϵ_n son variables aleatorias independientes con la misma distribución de probabilidad, entonces las $\mathbf{A}(n)$ son matrices aleatorias simplécticas idénticamente distribuidas [22], y por lo tanto, podemos aplicar el teorema de Furstenberg, descrito anteriormente, para concluir

$$\lambda_1 = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \|\mathbf{P}_N \mathbf{z}(0)\|. \quad (3.1.12)$$

Con este resultado determinamos que el crecimiento de las soluciones de (3.1.10) es gobernado por λ_1 , sin embargo, para establecer el comportamiento de la función de onda

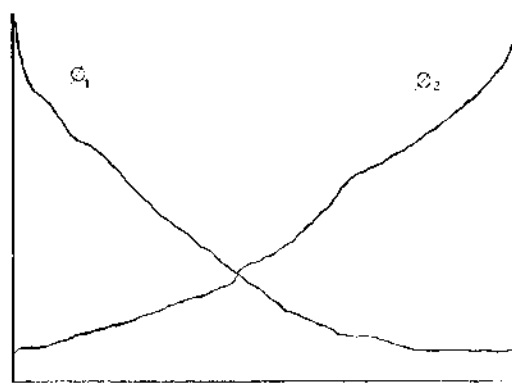


Figura 3.3: Dos soluciones de (3.1.10) para condiciones de frontera de izquierda y de derecha de la muestra [27].

en la ecuación (2.5.13) necesitamos considerar un detalle adicional, como veremos a continuación.

Es importante destacar que este resultado está sujeto a la condición de que los elementos ϵ_n son independientes, por lo que no es posible aplicar el mismo razonamiento al caso correlacionado.

Conjetura de Borland

Identificar el exponente de Liapunov obtenido anteriormente con el inverso de la longitud de localización, como hemos hecho en ejemplos anteriores, no es tan sencillo de realizar, debido a que, en general, si consideramos dos soluciones ϕ_1 y ϕ_2 de la ecuación (2.5.13); una a partir de condiciones de frontera al lado izquierdo de la red y otra a partir del lado derecho, tendremos que no es posible “embonar” ambas soluciones (véase Figura 3.3), salvo para ciertos valores de la energía E .

Por tal motivo, es necesario establecer que estas dos soluciones de diferentes extremos de la muestra “embonarán” solamente para los valores de E correspondientes a los autovalores del hamiltoniano, hecho conocido como la *conjetura de Borland* [27], la cual conecta el exponente de Liapunov característico del producto de matrices aleatorias con la localización de Anderson, debido a que determina el crecimiento exponencial de los autoestados y con ello la localización presente en el sistema. Pudiendo establecer

$$l_{loc}^{-1} = \lambda_1 > 0. \quad (3.1.13)$$

3.2. Caos cuántico

Como establecimos anteriormente, la teoría de matrices aleatorias se ha aplicado al estudio de diferentes problemas de la física, particularmente de la física cuántica. Siendo uno de los más destacados, el denominado caos cuántico, el cual desarrollaremos en la

presente sección.

Para empezar, cuando hablamos de un *sistema caótico cuántico* nos referimos a *aquel cuyo análogo clásico es caótico*.

Ahora bien, para introducir la RMT al estudio de estos sistemas cuánticos debemos establecer una relación con las matrices aleatorias, la cual no es para nada obvia debido a que los sistemas cuánticos bajo estudio son deterministas y por lo tanto no contienen parámetros aleatorios en su estructura. Sin embargo, numerosos estudios numéricos han mostrado que la teoría de matrices aleatorias puede ser utilizada para describir propiedades estadísticas del espectro de energías [28, 29].

Es de mencionarse que el estudio del caos cuántico enfrenta algunas complicaciones, entre las que destacan la determinación de las propiedades específicas para distinguir si un sistema presenta o no caos, dado que, desde un punto de vista clásico, la definición estándar de un sistema caótico contempla la divergencia de las trayectorias inicialmente cercanas en el espacio fase, algo que no es posible realizar en los modelos cuánticos. Por lo que ha sido necesario el desarrollo de otros indicadores de caos, siendo la RMT fundamental en este sentido, proveyendo una herramienta muy útil para estudiar las propiedades estadísticas de dichos modelos.

Uno de los indicadores más usados para distinguir entre sistemas integrables y sistemas caóticos, es el comportamiento de la distribución del espaciamiento entre niveles cercanos. En la Figura 3.1, tomada de [24], podemos apreciar una curva típica de la comparación de datos numéricos obtenidos para la distribución de niveles comparados con los datos generados a partir de la RMT, mostrando una concordancia significativa en la predicción de resultados cuando se usa un colectivo GOE, cuya distribución del espaciamiento entre niveles es asociada en la literatura como característica de sistemas que presentan caos cuántico, y cuya función de distribución específica fue descrita en 3.0.1. Además, en la imagen aparece la distribución de Poisson, asociada al otro extremo, correspondiente a sistemas integrables.

La conexión entre sistemas desordenados y caos cuántico no se limita al hecho de que las matrices aleatorias desempeñan un papel importante en la descripción de ambas clases de sistemas. En efecto, un fenómeno análogo a la localización de Anderson, conocido como *localización dinámica* [24], se produce y ha sido ampliamente estudiado, en el rotador pateado, mismo que juega un papel central en el estudio del caos cuántico. En la siguiente sección describiremos más a detalle ambos puntos de este modelo cuántico.

3.2.1. Rotador pateado

El rotador pateado (KR por sus siglas en inglés) es un modelo clave en la descripción del caos cuántico, la localización en sistemas desordenados y la relación entre ambas teorías y la RMT, a través de las matrices aleatorias con estructura de banda. Además, es uno de los sistemas más estudiados en este sentido, siendo esencial para demostrar como a partir de la variación de algunos de sus parámetros se puede pasar de un sistema

integrable a un sistema caótico, atravesando una región intermedia entre ambas distribuciones de los niveles [28, 29, 30]. También, permite observar el fenómeno de la localización dinámica, un comportamiento inesperado presente en este paradigmático modelo, y del que hablábamos anteriormente.

El rotador pateado es descrito por el siguiente hamiltoniano dependiente del tiempo:

$$H(t) = \frac{p^2}{2I} + \epsilon \frac{I}{T} \cos \theta \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(t - nT), \quad (3.2.14)$$

Para empezar, dada la naturaleza periódica del movimiento del rotador pateado es conveniente utilizar el operador de Floquet [31] para determinar la evolución del sistema, este operador está dado por la expresión

$$F = e^{-i\epsilon(I/T\hbar) \cos \theta} e^{-iT p^2/2I\hbar} \quad (3.2.15)$$

De manera que la función de onda, entre dos patadas sucesivas satisface

$$\psi(t+1) = F\psi(t), \quad (3.2.16)$$

o de manera equivalente, podemos expresar la evolución del rotador mediante el mapa

$$|\psi^+(t+1)\rangle = F|\psi^+(t)\rangle, \quad \text{con } T = 1, t = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2.17)$$

Sin embargo, para describir la evolución de ψ^+ podemos iniciar el estudio del KR entre el instante $t-1$ antes de la rotación libre, donde la función de onda corresponde a ψ^+ y el instante posterior a la rotación libre, pero antes de la patada donde la función de onda es denotada como ψ^-

$$|\psi^-(t)\rangle = e^{-iH_0/\hbar} |\psi^+(t-1)\rangle, \quad H_0 = \frac{p^2}{2I}. \quad (3.2.18)$$

Ahora bien, es conveniente analizar la rotación libre entre las patadas en la base del momento angular p ,

$$p|n\rangle = n\hbar|n\rangle, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3.2.19)$$

Ya que el hamiltoniano H_0 es diagonal en esta representación podemos concluir

$$H_0|n\rangle = \frac{\hbar^2}{2I} n^2 |n\rangle \quad (3.2.20)$$

Desarrollando la función de onda en esta base

$$|\psi^\pm(t)\rangle = \sum_n \psi_n^\pm(t) |n\rangle, \quad (3.2.21)$$

de manera que la rotación libre es descrita por

$$\psi_n^-(t+1) = e^{-i\hbar n^2/(2I)} \psi_n^+(t) \quad (3.2.22)$$

Por su parte, cada patada puede ser representada por medio de la identidad

$$\psi^+(\theta, t) = e^{-i\epsilon \cos \theta / \hbar} \psi^-(\theta, t). \quad (3.2.23)$$

Ahora, combinando ambos resultados, en la base del momento angular tenemos el mapeo

$$\psi_m^+(t+1) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} J_{m-n} e^{-i\hbar n^2 / (2I)} \psi_n^+(t), \quad (3.2.24)$$

donde las funciones J_{m-n} son funciones de Bessel:

$$J_n(\kappa) = \frac{1}{\pi i^n} \int_0^\pi d\theta e^{i\kappa \cos \theta} \cos(n\theta). \quad (3.2.25)$$

De manera que hemos determinado mediante (3.2.24) la evolución de la función de onda en el sistema.

Localización dinámica

Para observar la localización en el rotador pateado cuántico nos centramos en la condición $K = \epsilon\tau \gg 1$, con $\kappa = \epsilon/\hbar$ y $\tau \equiv \hbar T/I$. Para esta condición sobre K es bien sabido que el equivalente clásico de (4.1.13) presenta un movimiento fuertemente caótico. Ahora, de acuerdo con datos numéricos (véase por ejemplo [28, 29]), si además de la condición de caos fuerte, el KR satisface $\kappa \gg 1$, entonces el modelo cuántico imitará el comportamiento de su análogo clásico, presentando propiedades estadísticas similares; como la difusión de la energía en el tiempo y la relajación de la función de distribución en el espacio de momentos. Sin embargo, esto ocurre solo durante cierto periodo de tiempo $t \lesssim t^*$, después del cual los efectos de interferencia cuántica comienzan a ser más y más importantes, teniendo como resultado que para $t \gtrsim t^*$ la difusión clásica sea suprimida y eventualmente se detenga. Demostrando con ello la presencia del fenómeno de *localización dinámica*. El valor de este tiempo característico t^* es estimado en [28] con un valor $t^* \sim \kappa^2$.

En la Figura 3.4, se muestra el comportamiento típico de la difusión de la energía para el rotador pateado. En la línea continua se muestra el valor “teórico”, perteneciente a la difusión clásica y en la línea discontinua el valor obtenido numéricamente para el modelo en su versión cuántica. Como podemos observar las dos curvas son muy similares en un primer intervalo de tiempo, sin embargo, a partir del ya mencionado $t \approx t^*$ la curva correspondiente a los datos numéricos comienza a presentar un comportamiento totalmente diferente, frenando su crecimiento hasta detener la difusión.

Modelo de Anderson y KR

Para establecer la conexión entre el KR y el modelo de Anderson consideramos el problema de autovalores para el operador de Floquet descrito en (3.2.15),

$$F|u^+\rangle = e^{-i\phi}|u^+\rangle \quad (3.2.26)$$

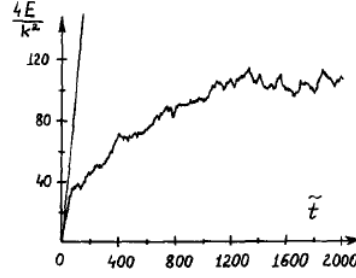


Figura 3.4: Dependencia de la energía normalizada en función del tiempo discreto $\tilde{t} = t/T$, para $\kappa = 20$; $\tau = 0.25$; $K = \kappa\tau = 5$; $\tilde{t}_{max} = 2000$. La línea recta corresponde a la difusión clásica, con $E = \kappa^2\tilde{t}/4$, por su cuenta, la línea discontinua pertenece a los datos del estudio numérico [30].

el cual, en la representación del momento angular implica,

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} J_{m-n} e^{-i\hbar m^2/(2I)} u_n^+ = e^{-i\phi} u_m^+ \quad (3.2.27)$$

Mientras que, por otro lado, de manera similar al mapeo para la función de onda realizado anteriormente, podemos expresar la siguiente identidad para el movimiento del rotador pateado antes y después de la patada,

$$u^-(\theta) = e^{i\kappa \cos \theta} u^+(\theta), \quad (3.2.28)$$

utilizando las dos relaciones anteriores tenemos

$$u^-(\theta) = e^{i(\phi - H_0/\hbar)} u^+(\theta) \implies u_m^- = e^{i(\phi - \hbar m^2/2)} u_m^+ \quad (3.2.29)$$

Por otro lado, utilizando el siguiente operador Hermitiano W [31],

$$e^{-i\kappa \cos \theta} = \frac{1 + iW}{1 - iW}, \quad W = -\tan\left(\frac{\kappa V}{2}\right) \quad (3.2.30)$$

y definiendo el vector

$$|u\rangle = \frac{1}{2}(|u^+\rangle + |u^-\rangle), \quad (3.2.31)$$

junto con (3.2.28), tenemos

$$u(\theta) = \frac{u^+(\theta)}{1 + iW(\theta)} = \frac{u^-(\theta)}{1 - iW(\theta)} \implies \begin{cases} u^+(\theta) = [1 + iW(\theta)]u(\theta), \\ u^-(\theta) = [1 - iW(\theta)]u(\theta). \end{cases} \quad (3.2.32)$$

Finalmente, considerando esta expresión y (3.2.29) encontramos la siguiente ecuación para $u(\theta)$

$$[1 - iW(\theta)]u(\theta) = e^{i(\phi - H_0/\hbar)} [1 + iW(\theta)]u(\theta), \quad (3.2.33)$$

de manera que,

$$[1 - e^{i(\phi - H_0/\hbar)}] u - i(1 + e^{i(\phi - H_0/\hbar)}) W u = 0. \quad (3.2.34)$$

Reescribiendo términos

$$i \left[\frac{1 - e^{i(\phi - H_0/\hbar)}}{1 + e^{i(\phi - H_0/\hbar)}} \right] + W u = 0. \quad (3.2.35)$$

Expresión que en la base del momento angular toma la forma

$$T_m u_m + \sum_{r(\neq 0)} W_r u_{m+r} = E u_m, \quad (3.2.36)$$

donde $E = -W_0$ y

$$T_m = i \frac{1 - e^{i(\phi - \hbar m^2/2)}}{1 + e^{i(\phi - \hbar m^2/2)}} = \tan \left(\frac{\phi - \hbar m^2/2}{2} \right), \quad (3.2.37)$$

$$W_r = - \int_0^{2\pi} d\theta \frac{e^{ir\theta}}{2\pi} \tan \left(\frac{\kappa \cos \theta}{2} \right). \quad (3.2.38)$$

Analizando la estructura de la identidad (3.2.36) vemos que esta es muy similar a la ecuación (2.5.13) que corresponde al modelo de Anderson unidimensional, sin embargo hay dos puntos importantes que debemos destacar en torno a la relación entre ambos modelos; primero, W_r corresponde a las amplitudes de salto, pero en el caso de (3.2.36) tenemos en principio una interacción hasta r vecinos en la red donde $r \rightarrow \infty$, y aun considerando que el estudio de (3.2.38) nos dice que W_r decae exponencialmente cuando el valor de r crece, r es más grande de 1, que corresponde a los saltos entre primeros vecinos del modelo de Anderson, por lo que no podemos establecer una relación directa entre W_r y $V_{n\pm 1}$ en el modelo de Anderson unidimensional. Segundo, los elementos T_m corresponden al potencial en el sitio m de la red, sin embargo, hemos visto que para el modelo de Anderson estos elementos son aleatorios, y de la ecuación (3.2.37) vemos, analizando la fase de la tangente, que estos elementos son pseudoaleatorios debido a la rápida fluctuación de la fase para grandes valores de m , pero no son realmente aleatorios, como lo son los valores ϵ_n en las energías de sitio de 2.5.9 (véase [31] para más detalles).

Ahora bien, aunque la conexión entre ambos modelos no ha sido demostrada por completo a nivel analítico, diversos estudios numéricos han mostrado la equivalencia entre el modelo de Anderson y el rotador pateado.

Espaciamiento entre niveles: transición de estadísticas

Como mencionamos al inicio de la sección, el rotador pateado, además de servir como ejemplo para mostrar la localización dinámica, también sirve para ejemplificar la transición entre un sistema integrable a uno caótico a través de la variación de sus parámetros. Para describir este fenómeno se han desarrollado diversos trabajos a través del estudio de la repulsión entre niveles, utilizando los colectivos gaussianos como modelos teóricos, además de las matrices aleatorias con estructura de banda, para estas últimas en el siguiente capítulo desarrollaremos a detalle su relación con el caos cuántico y el rotador

pateado, siendo también utilizadas en la descripción de niveles intermedios de sistemas caóticos e integrables.

Para empezar, en la sección 3.0.1, establecimos que los colectivos gaussianos presentan una forma particular en la distribución del espaciamiento entre niveles de la energía dada por la ecuación (3.0.3), dando como resultado una repulsión entre niveles cercanos (véase Figura 3.1).

Ahora bien, con ayuda de resultados numéricos, ha sido posible establecer que cuando el KR es fuertemente caótico entonces la distribución del espaciamiento entre niveles $p(s)$ corresponde a la distribución de Wigner-Dyson, mientras que en el otro caso, al tratarse de un sistema completamente integrable se tiene la forma asintótica de la distribución $p(s) \sim e^{-s}$, muy cercana a la distribución de Poisson. Por lo tanto, la estadística intermedia para medir el grado de caos en un sistema cuántico, en particular el rotador pateado, tendrá en su estructura la suma de estos dos tipos de distribución dependiendo de la región a la que pertenezca su movimiento.

Para poder analizar algunos de estos resultados numéricos nos basaremos en el desarrollo realizado en [30], donde se utiliza la representación matricial de (3.2.24) de la siguiente manera

$$\psi_n(t + T) = \sum_m U_{nm}(\kappa, \tau) \psi_m(t), \quad (3.2.39)$$

donde la matriz U_{nm} determina la evolución de cualquier vector N-dimensional del sistema, y de la cual daremos más detalles al considerar la representación del KR como matriz con estructura de banda en el siguiente capítulo, por ahora nos limitaremos a mostrar las propiedades de localización de los autovectores del sistema.

Además de considerar la representación matricial de la evolución del rotador pateado, en [30], Izrailev introduce el siguiente parámetro

$$d = \langle l_k \rangle \quad (3.2.40)$$

donde l_k es la longitud de localización entrópica definida en (2.5.52) y $\langle \cdot \rangle$ representa el promedio sobre todos los autoestados de U_{nm} .

Este parámetro se relaciona con la distribución de los niveles cercanos a partir de $\beta = d/N$, al considerar la combinación de las distribuciones GOE y Poisson, a través de la siguiente identidad:

$$p(s) = As^\beta \exp \left[-\frac{\beta\pi^2}{16} s^2 - \left(C_0 - \frac{\beta}{2} \right) \frac{\pi}{2} s \right] \quad (3.2.41)$$

En el artículo [30] se realiza un estudio numérico minucioso para analizar el comportamiento del KR usando (3.2.41) con β el intervalo $0 \leq \beta \leq 1$.

En la Figura 3.5, observamos tres curvas típicas del espaciamiento entre niveles para el rotador pateado variando el grado de caos en el sistema a partir de κ . De los resultados obtenidos podemos concluir que a medida que el parámetro β se acerca a 1 la gráfica tiende a la distribución GOE, mientras que si $\beta \rightarrow 0$ la distribución $p(s)$ tiende a la distribución

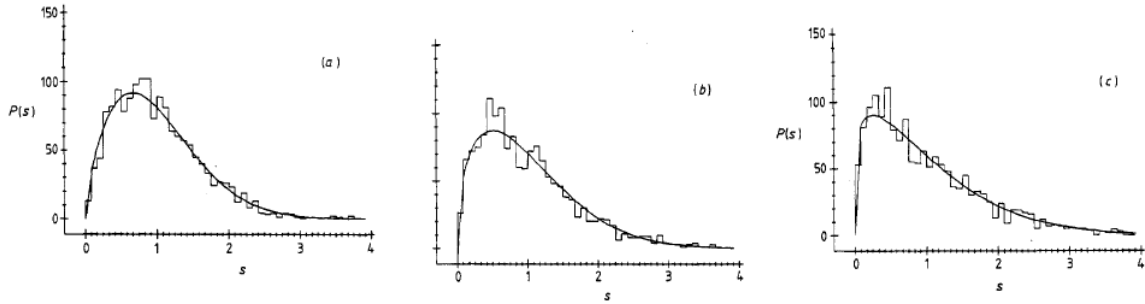


Figura 3.5: Tres ejemplos de la estadística intermedia para $p(s)$ con el parámetro $K = 5$, $N = 398$ y $d = \langle l_k \rangle$. Las curvas suaves corresponden a los datos generados usando (3.2.41), con $\beta = d/N$, mientras que los histogramas pertenecen a los datos generados numéricamente a partir de $U_{nm}(\kappa)$. (a) $\kappa \approx 39.8$, $\beta \approx 0.76$, (b) $\kappa \approx 21.1$, $\beta \approx 0.48$, (c) $\kappa \approx 9.1$, $\beta \approx 0.22$ [30].

de Poisson (véase también Figura 3.1); ambos resultados en correspondencia a los sistemas completamente caóticos y completamente integrables, respectivamente. Además, podemos apreciar que los datos generados usando (3.2.41) y los resultados numéricos generados al diagonalizar U_{nm} coinciden en gran medida para los tres casos.

Capítulo 4

Matrices Banda Aleatorias

En el presente capítulo desarrollaremos las principales características de otro de los colectivos que destacan dentro de la teoría de matrices aleatorias, conocido como Colectivo de Matrices Banda Aleatorias (BRM por sus siglas en inglés). Comenzaremos estableciendo las principales características estadísticas de este particular colectivo, con resultados obtenidos de manera numérica y sustentados analíticamente. Luego describiremos las principales aplicaciones del colectivo de matrices banda aleatorias, para el cual mostraremos, mediante un ejemplo, la conexión con el caos cuántico [37], y a su vez al rotado pateado [28, 30]. Finalmente, desglosaremos los puntos más destacados en el vínculo de las BRM con el estudio de sistemas casi unidimensionales en la física de materia condensada [40].

Comencemos destacando que la conexión de las RBM con los sistemas desordenados surge debido a la localización de sus autovectores, propiedad que contrasta con las características de los colectivos ortogonales (GOE), unitarios(GUE) y simplécticos(GSE), descritos en 3.0.1, y que usualmente se estudian en la RMT.

Esta importante cualidad en la estructura de los autovectores se ve reflejada de igual manera en las propiedades estadísticas de los eigenvalores permitiendo observar una transición del espaciamiento entre niveles de los casos extremos de las distribuciones de Poisson y Wigner-Dyson, dependiendo únicamente, de manera análoga a la teoría SPS (como veremos un poco más adelante), de algunos parámetros de escala [33].

Siendo este comportamiento de los niveles energéticos el que ha permitido utilizar las matrices aleatorias con estructura de banda como una herramienta más para describir las propiedades estadísticas de sistemas Hamiltonianos en los niveles intermedios en la transición del régimen completamente integrable (correspondiente a estadística de Poisson) y completamente caótico (característico de la estadística de Wigner-Dyson) en el estudio del caos cuántico [36].

4.0.1. Colectivo de Matrices Banda

El Colectivo de Matrices Banda Aleatorias, es el conjunto Ω_{RBM} de matrices reales y simétricas de tamaño $N \times N$ cuyos elementos, $A \in \Omega_{RBM}$, satisfacen:

$$A_{i,j} = 0, \quad \text{si } |i - j| \geq b, \quad (4.0.1)$$

donde b es la anchura de la semibanda, $b = 1$ para una matriz tridiagonal, $b = 2$ para una matriz pentadiagonal, etcétera. Nótese que si $b = N - 1$ entonces A pertenece al colectivo GOE. Además, los elementos $A_{i,j}$ son variables aleatorias independientes e idénticamente distribuidas, con media nula. A tiene asociada la densidad de probabilidad dada por [30]:

$$\rho(A) = e^{-a \text{Tr} A^2} = \prod_{i=1}^N e^{-a A_{ii}^2} \prod_{i < j}^N e^{-2a A_{ij}^2}, \quad a > 0. \quad (4.0.2)$$

De esta identidad podemos observar que el colectivo es caracterizado por los parámetros a , N y b , donde el primero de ellos no afecta las propiedades estadísticas del espectro de energías y de los autoestados ya que únicamente cambia la escala de todos los autovalores y autovectores.

4.0.2. Propiedades estadísticas de las BRM

Como primer punto a desarrollar en la teoría de las matrices banda aleatorias tenemos la descripción de algunas de las propiedades estadísticas de sus autovalores y autovectores.

Ley del semicírculo

Una de las características que destacamos para los colectivos gaussianos, es que sus autovalores están distribuidos mediante la denominada ley del semicírculo, siendo relativamente sencillo mostrar este hecho analíticamente debido a las simetrías rotacionales de los colectivos. Sin embargo, para el caso de las BRM esta importante cualidad se ha perdido y no es posible obtener por el mismo camino un resultado análogo, por lo que es bastante complicado tratar el problema a nivel analítico. Diversos autores, por métodos diferentes (véase [34] y referencias ahí), han demostrado que para N grande y b tal que $b/N \rightarrow 0$, las BRM satisfacen la ley del semicírculo para la distribución de sus autovalores, con un radio $R = \sqrt{b/a}$.

Propiedades de localización de las BRM

Ahora describiremos la localización presente en los autoestados del colectivo BRM. Hecho para el cual existen una gran cantidad de estudios numéricos, como el que describiremos a continuación, desarrollado en [33], y también, algunos estudios analíticos (véase por ejemplo [36]), en los cuales se trata de caracterizar la forma de los autovectores con la intención de identificar el surgimiento de estados localizados o estados extendidos en el sistema, además de aportar evidencia tanto numérica como teórica de que las propiedades de localización de los autoestados del colectivo BRM satisfacen una relación similar a la teoría del único parámetro de escala para los sistemas desordenados que estudiamos en capítulos anteriores.

Para empezar, considere A una matriz aleatoria con estructura de banda, perteneciente al colectivo Ω_{BRM} , además, definamos el parámetro $x \equiv b^2/N$. Para este conjunto de

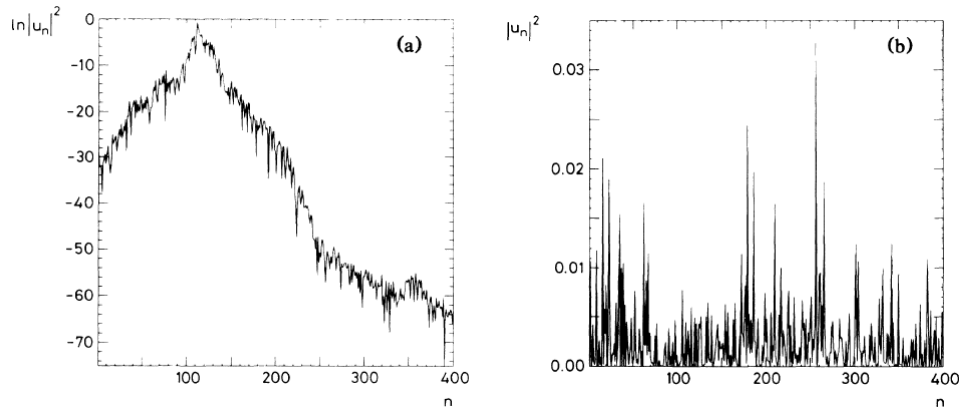


Figura 4.1: (a) Componentes de un autovector normalizado al tamaño de la muestra $N = 400$ en escala logarítmica $|\log(u_n)|$ versus la componente n del vector. (b) Componentes de un autovector $|u_n|^2$ versus la componente n del vector [33].

matrices se presentan, en la Figura 4.1, dos autovectores típicos para dos miembros de este colectivo. En la imagen vemos que su estructura es totalmente diferente, siendo el vector (a) el correspondiente al caso para el cual $x \ll 1$, mostrando un decaimiento exponencial; mientras que las componentes del vector en (b), correspondientes a los valores b y N tales que $x \gg 1$. Este segundo autovector muestra una aparente aleatoriedad en el tamaño de sus componentes (que podría asociarse a caos en el sistema), además, es de destacar que el vector cuenta con casi todas sus entradas distintas de cero, por lo que es posible intuir que el primero corresponde a un estado localizado dado su decaimiento exponencial y el segundo a un estado extendido, pese a la aleatoriedad de sus entradas.

En [35], donde se busca describir la transición entre estados localizados y estados extendidos, podemos encontrar evidencia adicional que sustenta esta idea intuitiva, como lo muestra la Figura 4.2, donde aparecen dos autovectores. Para estos autovectores es muy claro que su comportamiento pertenece a un estado localizado (a) o a un estado extendido (b). Siendo este último muy similar a la imagen (b) presentada en la Figura 4.1.

Por otro lado, como adelantamos al inicio del capítulo, se ha logrado establecer, por medio de estudios numéricos [33] y también mediante resultados teóricos [44], que el colectivo RBM está sujeto a una ley de escalamiento, donde la variable de escala de la localización es

$$x = b^2/N, \quad (4.0.3)$$

relacionada únicamente con la anchura de la semibanda y el tamaño del sistema.

A través del estudio numérico del comportamiento de x para diferentes tamaños de la muestra N es definida de manera empírica en [33], por Izrailev y colaboradores, la función de escala denominada *longitud de localización de escala*, misma que fue corroborada analíticamente en [44] y es descrita por la identidad:

$$\beta(x) = \frac{\gamma x}{1 + \gamma x}, \quad \gamma \approx 1.4 \quad (4.0.4)$$

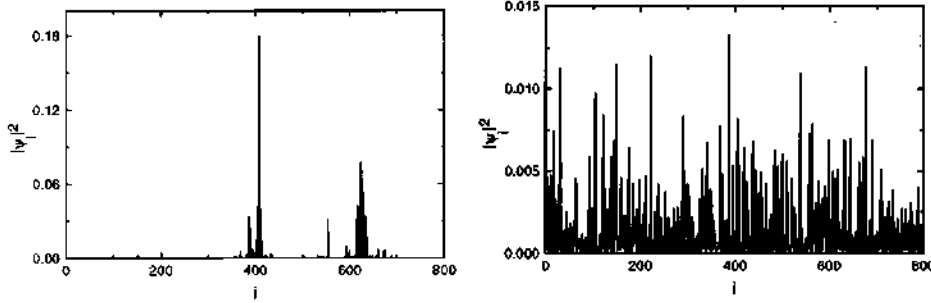


Figura 4.2: Componentes de dos autovectores ψ_i en función de la componente i para $N = 800$ [35].

relacionada a través de x con la anchura de la semibanda y el tamaño de la BRM. Esta ley empírica de escalamiento es comparada con β a través de la longitud de localización de los autoestados del sistema, de manera similar a (2.5.50), mediante el siguiente razonamiento.

Primero definimos la “longitud de localización”

$$l_H = N \exp(H - H_{GOE}) = N l_k \exp(-H_{GOE}) \quad (4.0.5)$$

donde l_k es la longitud de localización entrópica definida en (2.5.50) y

$$H_{GOE} = \Psi\left(\frac{1}{2}N + 1\right) - \Psi\left(\frac{3}{2}\right) \quad (4.0.6)$$

con Ψ la función “digamma”. Luego introducimos el siguiente parámetro:

$$d = N \exp(\langle H \rangle - H_{GOE}) \quad (4.0.7)$$

donde $\langle \cdot \rangle$ representa el promedio sobre todos los autoestados, y finalmente establecemos la relación

$$\beta = d/N \quad (4.0.8)$$

para relacionar “la longitud de localización” definida en (4.0.5) con la longitud de localización de escala.

En la Figura 4.3, se graficaron los datos obtenidos numéricamente para la longitud de localización de escala, β , con ayuda de los autoestados de las BRM a través de (4.0.8); mientras que por otro lado se grafica β de la ley empírica en función de x , datos que corresponde a la curva de ajuste punteada, para la cual se utilizó $\gamma = 1.4$.

Como podemos observar en la Figura 4.3, los datos correspondientes a diferentes matrices banda aleatorias son muy similares al analizar la longitud de localización de sus autoestados en relación a la anchura de la semibanda y al tamaño de la muestra, pudiendo observarse además que la curva punteada correspondiente a la ley empírica (4.0.4) reproduce de muy buena manera los datos obtenidos, confirmando que la longitud de localización de los autovectores de las matrices banda aleatorias satisfacen una propiedad de escalamiento, con $x = b^2/N$ como variable de escala.

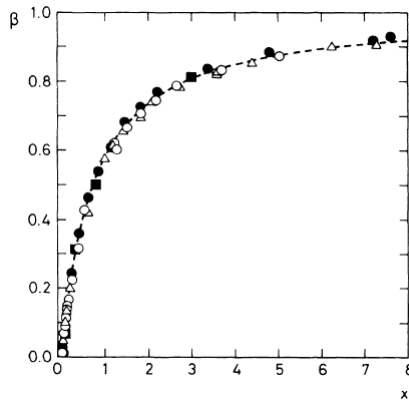


Figura 4.3: Longitud de localización de escala β en función de $x = b^2/N$ para $N = 200$ (\bullet), $N = 400$ (\triangle), $N = 800$ (\blacksquare), $N = 1000$ (\circ) y β dada por (4.0.4) en la línea punteada [33].

4.1. BRM en el caos cuántico

Al desarrollar la teoría de matrices aleatorias como herramienta para estudiar los sistemas cuánticos caóticos y principalmente al momento de trabajar el rotador pateado, hemos mencionado que existe una importante conexión entre los sistemas que presentan caos y la teoría de matrices banda. A continuación, mostraremos con base en unos ejemplos esta relación.

4.1.1. Osciladores acoplados

El modelo de los osciladores acoplados ha sido uno de los sistemas que se han estudiado para mostrar la transición entre un sistema caótico y uno integrable. Para los cuales desde inicios de la década de los setentas, con Percival [38] se determinó que en el límite semiclásico, el espectro de energía de los osciladores presentaba dos regiones, una regular y otra irregular, como reflejo de ambos tipos de movimiento en el sistema. En estudios posteriores [39] realizados numéricamente a través del hamiltoniano:

$$H = H_1 + H_2 + 4kx_1^2x_2^2, \quad H_i = \frac{1}{2}(p_i^2 + x_i^2), \quad i = 1, 2, \quad (4.1.9)$$

representando dos osciladores acoplados con una interacción de cuarto orden, se logró encontrar evidencia de que los niveles de energía, $E_n(k)$, permitían caracterizar el movimiento caótico en el sistema siendo analizados mediante la variación del parámetro k con ayuda de la expresión

$$\Delta_n^2 = [(E_n(k + \Delta k) - E_n(k)) - (E_n(k) - E_n(k - \Delta k))], \quad (4.1.10)$$

conocida por ser una medida de las correlaciones de largo alcance en el espectro de energías.

Años más tarde, Seligman y colaboradores [37], utilizaron un modelo similar, con una estructura más compleja, brindando una importante contribución al estudio de la transición entre estadísticas de los niveles de energía relacionada al grado de caos del sistema. A continuación, desarrollaremos los principales puntos de este trabajo y buscaremos mostrar la conexión de esta teoría con las BRM.

Los autores del estudio [37] consideraron dos partículas que se movían a través de pozos de potencial unidimensionales e interactuaban mediante un potencial local, expresando formalmente este sistema por medio del siguiente hamiltoniano:

$$H = \frac{1}{2} (p_1^2 + p_2^2) + V_1(x_1) + V_2(x_2) + V_{12}(x_1 - x_2) \quad (4.1.11)$$

La dinámica del sistema está determinada por la forma específica de los potenciales V_i , mediante los cuales se busca mostrar la transición entre regímenes. Seligman y sus colaboradores encontraron que la elección

$$V_i(x) = v_i(\alpha_i x^2 + \beta_i x^4 + \gamma_i x^6), \quad (4.1.12)$$

permitía, mediante la variación de los parámetros v_i, α_i, β_i y γ_i , observar la transición entre un sistema determinista y uno caótico, de manera similar al rotador pateado que estudiamos anteriormente.

El estudio está basado en dos indicadores, por un lado utilizando la distribución del espaciamiento entre niveles $p(s)$, y por el otro Δ_n^2 de la expresión (4.1.10), la cual mencionábamos que también permite identificar si un sistema presenta caos.

Por su parte, el estudio del modelo se realiza a través del hamiltoniano (4.1.11), el cual es expandido en la base del oscilador armónico y posteriormente diagonalizado, realizando un truncado en la representación matricial.

Además del estudio hecho a partir del hamiltoniano, Seligman y colaboradores, proponen como modelo para reproducir los resultados obtenidos una matriz cuyas entradas A_{ij} son de la forma descrita para el colectivo GOE multiplicadas por $\exp[-(i-j)^2/\sigma^2]$, lo que convierte a la matriz A en una matriz aleatoria con estructura de banda. Donde σ juega el papel del parámetro b en (4.0.1) y se varía para interpolar entre la distribución de Poisson ($\sigma = 0$) y una GOE ($\sigma \rightarrow \infty$), siendo posible vincular los dos modelos y establecer una relación entre las BRM y la transición de regímenes caóticos a integrables.

En la Figura 4.4, tomada de [37], se muestran los datos generados a partir de (4.1.11) y se aprecia el espaciamiento entre niveles $p(s)$, figura de la derecha, siendo claro el cambio de la estadística de Poisson a la de Wigner-Dyson, en la transición de un sistema integrable a uno caótico, con una zona intermedia entre regímenes, donde el uso de las matrices aleatorias banda reproduce con gran precisión los datos obtenidos. Además, aparece Δ_n^2 dada por (4.1.10), la cual corresponde en gran medida con los datos obtenidos mediante las BRM para la región donde el sistema es caótico.

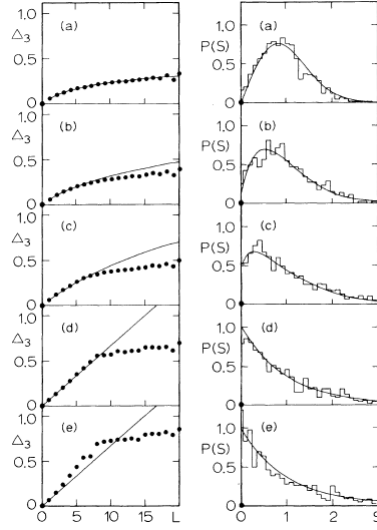


Figura 4.4: A la derecha distribución del espaciamiento entre niveles cercanos $p(s)$ usando (4.1.11) (histogramas), en comparación, la predicción de la distribución usando BRM (curvas continuas). A la izquierda Δ_n^2 en la línea punteada, en comparación, la predicción de la distribución usando BRM (curvas continuas) [37].

4.1.2. Descripción del KR usando BRM

En la sección 3.2.1 determinamos la evolución en el tiempo de la función de onda del KR, expresando la solución en la base del momento angular. Además de simplificar los cálculos analíticos, utilizar esta base nos permite encontrar una conexión entre el rotador pateado y las matrices banda aleatorias.

Consideremos el hamiltoniano del KR mediante la identidad:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2I} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \epsilon \cos \theta \delta_T(t), \quad \delta_T(t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(t - mT). \quad (4.1.13)$$

Entonces, la evolución del sistema en un periodo T entre dos patadas puede describirse con ayuda del siguiente mapeo:

$$\psi(\theta, t + T) = \exp\left(\frac{iT\hbar}{4I} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}\right) \exp\left(-i\frac{\epsilon}{\hbar} \cos \theta\right) \exp\left(\frac{iT\hbar}{4I} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}\right) \psi(\theta, t), \quad (4.1.14)$$

donde ψ representa la función de onda del rotador pateado.

De esta manera, en la base del momento angular, la función de onda satisface

$$\psi_n(t + T) = \sum_m U_{nm}(\kappa, \tau) \psi_m(t), \quad (4.1.15)$$

donde la matriz U_{nm} determina la evolución de cualquier vector N-dimensional del sistema, y tiene la forma simétrica:

$$U_{nm} = G_{nn'} B_{n'm'} G_{m'm} \quad (4.1.16)$$

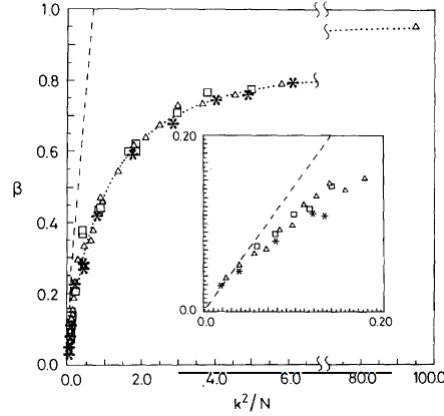


Figura 4.5: Longitud de localización de escala β en función de κ^2/N para $N = 400$ (\square), $N = 600$ (\triangle) y $N = 800$ (*). En el recuadro se magnifica la región correspondiente a $x \ll 1$, donde existe una fuerte localización [30].

donde la matriz diagonal G_{ll} describe a la rotación libre sobre medio periodo $T/2$:

$$G_{ll}(\tau/2) = \exp(i(T/4)l^2\delta_{ll}) \quad (4.1.17)$$

y la matriz $B_{n'm'}$ representa el efecto de la patada:

$$B_{n'm'}(\kappa) = i^{n'-m'} J_{n'-m'}(\kappa), \quad (4.1.18)$$

con $J_\nu(\kappa)$ una función de Bessel.

Dado que las funciones de Bessel, presentes en U_{nm} , decrecen muy rápidamente con el incremento de la diferencia entre el índice y su argumento ($|n - m| > \kappa$), la matriz U_{nm} toma la forma de una matriz banda con elementos de valor despreciable fuera de la banda de tamaño $\approx 2\kappa$ estableciendo una relación directa entre el parámetro κ del KR y la anchura de la semibanda b . Si además los elementos U_{nm} satisfacen la condición de caos fuerte clásico ($K \gg 1$), entonces las entradas de U_{nm} se vuelven pseudoaleatorias, debido a la rápida fluctuación de los factores de fase presentes en $G_{nn'}$. Lo que nos permite concluir que las propiedades de localización del KR, pueden ser descritas a partir del colectivo BRM siempre que el parámetro b no sea muy grande ($b < N/2$).

En la Figura 4.5 se muestra la gráfica de la longitud de localización de escala utilizando κ en lugar de b en la expresión (4.0.4), reescrita de la siguiente manera:

$$\frac{\beta}{1 - \beta} = \frac{b^2}{N} = \frac{\kappa^2}{N} \quad (4.1.19)$$

Como podemos observar, los datos generan curvas con el mismo comportamiento que al usar la semibanda b , como lo muestra la Figura 4.3.

Por otro lado, en la sección 3.2.1 mostramos la Figura 3.5, donde se aprecian tres diferentes

gráficos, que corresponden a la distribución del espaciamiento entre niveles cercanos del KR, en los cuales se ha usado la representación de U_{nm} como matriz con estructura de banda. Cuando hablamos del rotador pateado mencionamos que estos datos numéricos concuerdan de muy buena manera con la expresión (3.2.41), mostrando lo valiosas que pueden ser las matrices banda para describir sistemas cuánticos caóticos.

4.2. Sistemas casi 1D y el formalismo supersimétrico

La conexión entre matrices banda aleatorias y el estudio de sistemas casi unidimensionales no es para nada trivial y ha sido objeto de gran interés en las últimas décadas debido a su importante aplicación en modelos de la física de materia condensada.

En particular, para nuestros propósitos, poder aplicar la BRM a sistemas casi unidimensionales es de destacada importancia en el estudio del modelo de Anderson y la descripción de sistemas desordenados, debido a que, como establecimos con la SPS, las propiedades del transporte dependen fuertemente de la dimensionalidad del sistema que se esté tratando y extender el desarrollo analítico de los modelos de una a más dimensiones ha enfrentado grandes complicaciones, principalmente a nivel teórico. Lo que convierte a las BRM en un objeto interesante que podría ser clave ayudando a acrecentar los resultados obtenidos.

Para empezar, hemos destacado que el estudio de las RMT se ha concentrado principalmente en los colectivos gaussianos; GOE, GUE y GSE, los cuales gracias a sus diferentes propiedades de simetría han permitido la obtención de diferentes resultados analíticos. Por esta misma razón la implementación del formalismo supersimétrico a estos colectivos se ha logrado con éxito y es utilizada para determinar algunas propiedades estadísticas de los colectivos [42]. A pesar de que los elementos del colectivo BRM no satisfacen estas importantes características de simetría ha sido posible extender a esta clase de matrices el uso del formalismo supersimétrico. Se ha logrado así obtener de manera analítica expresiones para la longitud de localización, a través de la razón de participación inversa, y estudiar la transición localización-deslocalización de los autoestados de las BRM [35, 36]. Estos resultados han permitido corroborar que en efecto las matrices banda están sujetas a la ley de escalamiento $x = b^2/N$, tal como lo establecimos a través de resultados numéricos en secciones anteriores.

La implementación del formalismo supersimétrico consiste en mapear las BRM al denominado *modelo σ -no lineal* [43], y a partir de él desarrollar el problema para la obtención de las propiedades de transporte. Es posible, por otra parte, mapear de manera análoga los sistemas casi unidimensionales al *modelo σ -no lineal*, teniendo como resultado la existencia de una equivalencia entre las matrices banda aleatorias y los sistemas casi unidimensionales. Esta conexión es estudiada a nivel analítico en [40] por Fiodorov y Mirlin, quienes lograron con éxito mapear ambos sistemas al *modelo σ -no lineal* y mostrar el vínculo entre ambas teorías.

Resultado de destacada importancia debido a que permite conectar las BRM a sistemas casi unidimensionales, hecho que podría ser la clave para desarrollar la teoría de sistemas

desordenados cuya Hamiltoniana es una matriz con estructura de banda y poder extender los resultados, hasta ahora obtenidos para sistemas desordenados en una dimensión, a sistemas casi unidimensionales.

Para concluir este capítulo, debemos recalcar que, si bien es cierto que las matrices aleatorias con estructura de banda han tenido gran relevancia en las últimas décadas, son aún objetos poco conocidos a nivel analítico. Los estudios que se tienen a nivel teórico de este particular colectivo de matrices aleatorias son limitados, y mucho más nutridos los resultados numéricos que se han desarrollado al respecto.

Capítulo 5

Modelos de enlace fuerte con desorden fuera de la diagonal

En la sección 2.5 estudiamos las principales características del modelo de Anderson unidimensional, un caso particular de modelo de enlace fuerte. Ahora nuestro objetivo consiste en estudiar una generalización de este modelo al agregar desorden fuera de la diagonal principal y un mayor número de subdiagonales de tal manera que los elementos $V_{n,m}$ de (2.5.9) sean variables aleatorias. Este análisis lo realizaremos de manera numérica con ayuda de la representación del modelo como matriz con estructura de banda y utilizando la longitud de localización entrópica (2.5.52) y la razón de participación inversa (2.5.53) como indicadores de la localización-deslocalización del sistema.

Centraremos nuestro estudio en identificar el efecto que tiene en las propiedades de localización la aleatoriedad de los elementos V_{nm} , con un especial interés en el caso con correlaciones de largo alcance tanto en los elementos diagonales como en el resto de las subdiagonales, dado que las correlaciones generan una transición efectiva de estados localizados a estados extendidos en el modelo de Anderson (véase Figura 5.2).

5.1. Definición del modelo

Hemos establecido que el hamiltoniano de los modelos de enlace fuerte está dado por la expresión:

$$H = \sum_n |n\rangle \epsilon_n \langle n| + \sum_{n,m} |n\rangle V_{n,m} \langle m| \quad (5.1.1)$$

donde los ϵ_n corresponden a los elementos dentro de la diagonal principal y los V_{nm} a los elementos fuera de la diagonal en la representación de (5.1.1) como matriz con estructura de banda. Los primeros están relacionados con los potenciales de sitio y los segundos con las amplitudes de salto entre átomos de la red.

Ahora bien, cuando hablábamos de sistemas desordenados mencionamos que la forma de introducir desorden en el modelo era precisamente a través de los elementos ϵ_n y V_{nm} ,

los cuales eran determinados por sus propiedades estadísticas. Entonces, consideremos a los elementos ϵ_n como variables aleatorias idénticamente distribuidas con las propiedades

$$\langle \epsilon_n \rangle = 0, \quad \langle \epsilon_n^2 \rangle = \sigma_\epsilon^2 \quad (5.1.2)$$

y distribución uniforme

$$\rho(x) = \begin{cases} 1/W, & x \in (-W/2, W/2) \\ 0, & \text{otro caso} \end{cases} \quad (5.1.3)$$

donde, $W = \sqrt{12}\sigma_\epsilon$.

Además, estos elementos son independientes en el caso del modelo de Anderson sin correlaciones, y en el resto de las variantes del modelo de enlace fuerte los consideraremos como variables correlacionadas a través del algoritmo descrito en la sección 2.5, con la ayuda de la densidad espectral

$$W(\mu) = \begin{cases} 5, & \mu \in (-\pi/2, -2\pi/5) \cup (2\pi/5, \pi/2) \\ 0, & \text{otro caso.} \end{cases} \quad (5.1.4)$$

Por lo tanto, usando la expresión (2.5.43), tienen asociado el correlador binario

$$\chi(k) = \frac{\langle \epsilon_n \epsilon_{n+k} \rangle}{\langle \epsilon_n^2 \rangle} = 5\delta_{0,k} - \frac{\sin(4\pi k/5)}{\pi k/5}. \quad (5.1.5)$$

Por su parte los elementos V_{nm} son variables aleatorias i.i.d, con distribución uniforme al igual que los elementos diagonales, de tal manera que

$$V_{n,m} = \begin{cases} 1 + h_{n,m}, & m = n \pm 1, \\ h_{n,m} & m \neq n \pm 1. \end{cases} \quad (5.1.6)$$

Donde

$$\langle h_{n,m} \rangle = 0, \quad \langle h_{n,m}^2 \rangle = \sigma_\gamma^2. \quad (5.1.7)$$

Ahora bien, al agregar desorden en los elementos fuera de la diagonal se presentan dos variantes importantes a considerar para estudiar las propiedades del modelo:

a) Efecto del aumento de la intensidad del desorden fuera de la diagonal:

Para analizar las consecuencias de la variación del desorden consideraremos únicamente la matriz tridiagonal con $V_{n,n\pm 1} = 1 + h_{n,n\pm 1}$ para dos casos distintos, por un lado, donde los elementos $h_{n,n\pm 1}$ son variables aleatorias independientes; y por el otro, considerándolos como elementos correlacionados a partir de (5.1.4), donde los $h_{n,n\pm 1}$ satisfacen, en ambos casos, las propiedades (5.1.7). Además, manipularemos el grado de desorden en los elementos fuera de la diagonal a través del segundo momento de la distribución (σ_γ^2).

b) Efecto del aumento de subdiagonales: Buscaremos analizar el efecto de las interacciones a b vecinos en la red, con $b > 1$, manteniendo fijo el grado de desorden en los

elementos de la matriz banda ($\sigma_\gamma^2 = \sigma_\epsilon^2/2$). Donde el parámetro b corresponde de manera directa a la anchura de la semibanda de la BRM. Consideraremos los casos donde los elementos $h_{n,m}$ son i.i.d. y donde $h_{n,m}$ tienen específicas correlaciones del desorden.

5.2. Métodos numéricos

En secciones anteriores hemos desarrollado el modelo de Anderson de talla finita utilizando análisis numérico a través de la razón de participación inversa y la longitud de localización entrópica. Sin embargo, hemos omitido los detalles sobre las herramientas computacionales que se han empleado, por lo que a continuación enunciaremos las principales subrutinas involucradas en el estudio de las propiedades de los autovalores y autovectores de los diferentes modelos de enlace fuerte que analizamos, las cuales son programadas en el lenguaje “Fortran 90” (Para ver detalles sobre las diferentes subrutinas véase [45]).

Para empezar, para la construcción de los elementos de matriz independientes idénticamente distribuidos de la matriz hamiltoniana utilizamos una subrutina denominada *ran2* que nos permite generar una secuencia de números aleatorios con distribución uniforme en el intervalo $(0, 1)$, los cuales manipulamos de tal manera que se convierten en una sucesión de variables aleatorias con media nula y una varianza específica. Una vez que generamos las variables aleatorias procedemos, de ser el caso, a correlacionarlos mediante el algoritmo descrito en 2.5 utilizando la densidad espectral del desorden deseada, en nuestro caso hemos utilizado (5.1.4).

Para determinar autovalores y autovectores de las matrices banda de nuestro interés hemos seguido el procedimiento y usado las subrutinas que se presentan en [45] para matrices reales y simétricas. El método consiste en llevar preliminarmente la matriz de interés a una forma tridiagonal por medio del algoritmo *Householder*, que reduce una matriz simétrica $N \times N$ a una matriz tridiagonal A por medio de $N - 2$ transformaciones ortogonales. Posteriormente se pueden determinar autovalores y autovectores de la matriz tridiagonal A por medio de un algoritmo QL , que descompone la matriz en el producto $A = Q \cdot L$ donde Q es una matriz ortogonal y L es una matriz triangular inferior.

Finalmente, ya con los estados del sistema completamente identificados procedemos a aplicar (2.5.52) y (2.5.53), leyendo entrada por entrada de la matriz que contiene los autoestados para construir las gráficas que hemos presentado hasta ahora y las que se muestran a continuación.

5.3. Modelo tridiagonal

Al hablar del modelo tridiagonal, nos referimos al caso en el cual consideramos la matriz $H \in \Omega_{BRM}$ tal que $b = 1$, que es en esencia el modelo de Anderson unidimensional que se muestra en la matriz H_A de (5.3.9) al que le agregamos desorden en las interacciones

a primeros vecinos, de manera que $V_{n\pm 1} = 1 + h_{n,n\pm 1}$, donde los elementos $h_{n,n\pm 1}$ tienen las propiedades descritas en (5.1.7) y en consecuencia la matriz Hamiltoniana toma la forma de H dada en (5.3.9),

$$H_A = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & 1 \dots & 0 & 0 \\ 1 & \epsilon_2 & 1 \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 \dots & 1 & \epsilon_{N-1} & 1 \\ 0 & 0 \dots & 1 & \epsilon_N \end{pmatrix}, \quad (5.3.8)$$

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & 1 + h_{1,2} \dots & & 0 & 0 \\ 1 + h_{1,2} & \epsilon_2 & 1 + h_{2,3} \dots & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 \dots & 1 + h_{N-2,N-1} & \epsilon_{N-1} & 1 + h_{N-1,N} & \\ 0 & 0 \dots & 1 + h_{N-1,N} & & \epsilon_N \end{pmatrix}. \quad (5.3.9)$$

Primero, para mostrar el cambio en las propiedades de la localización entre el modelo tridiagonal H dado en (5.3.9) que presenta desorden fuera de la diagonal principal, y el ya estudiado modelo de Anderson, resolvemos el problema de autovalores para la matriz H_A dada en (5.3.8), considerando los elementos diagonales correlacionados a partir de la densidad espectral $W(\mu)$ dada en (5.1.4) y las propiedades

$$\langle \epsilon_n \rangle = 0, \quad \langle \epsilon_n^2 \rangle = \sigma_\epsilon^2 = 0.1 \quad (5.3.10)$$

En las Figuras 5.1 y 5.2 se muestran la longitud de localización entrópica y la razón de participación inversa para el modelo de Anderson sin correlaciones en los elementos diagonales y el caso con correlaciones en las energías de sitio, respectivamente.

5.3.1. Modelo tridiagonal con variación del grado de desorden

Como ya lo hemos mencionado, al estudiar el modelo con desorden fuera de la diagonal principal nos hemos planteado analizar el efecto que genera en los autoestados del sistema el considerar varios grados de desorden no-diagonal.

Para analizar el sistema (5.3.9), con este cambio en particular, consideremos dos casos; uno tal que $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$ y en el otro $\sigma_\epsilon^2 = 0.2$, al tiempo que variamos σ_γ^2 de manera que $\sigma_\gamma^2 = \frac{\sigma_\epsilon^2}{4}$, $\frac{\sigma_\epsilon^2}{2}$, $\frac{3\sigma_\epsilon^2}{4}$ y σ_ϵ^2 en cada caso; para el desorden dentro y fuera de la diagonal principal de H , respectivamente. Destacando que los elementos ϵ_n son variables correlacionadas a partir de la densidad espectral (5.1.4).

Con estas características en los elementos de la BRM resolvemos el problema de autovalores y autovectores de H para obtener los datos que se presentan en las Figuras 5.3 y 5.5, para $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$ y las Figuras 5.4 y 5.6, para $\sigma_\epsilon^2 = 0.2$. En las curvas podemos apreciar, tanto para la razón de participación inversa como para la longitud de localización entrópica, que a medida que el desorden en las subdiagonales aumenta también lo

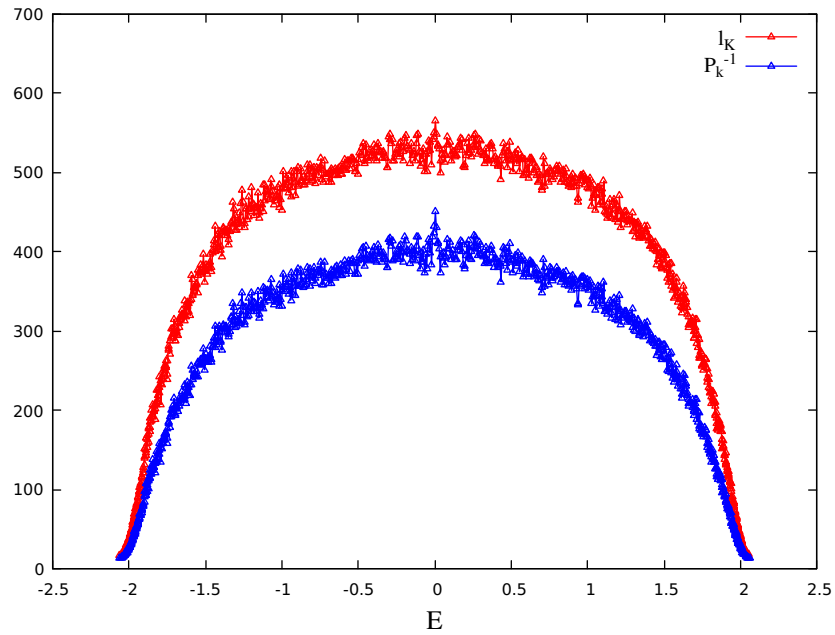


Figura 5.1: Razón de participación inversa y Longitud de localización entrópica para el modelo de Anderson sin correlaciones en los elementos diagonales. Considerando $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$, H_A de tamaño 1000×1000 y 100 realizaciones del desorden.

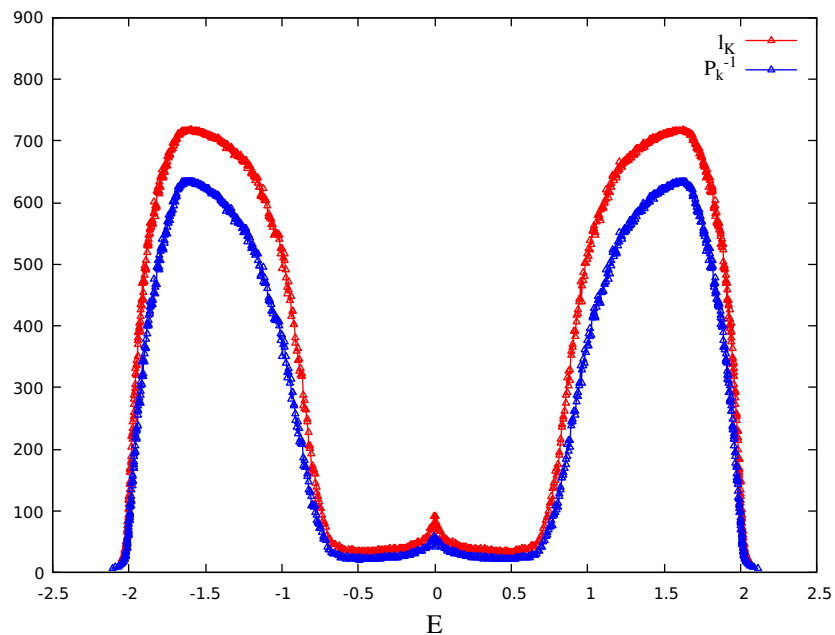


Figura 5.2: Razón de participación inversa y Longitud de localización entrópica para el modelo de Anderson con correlaciones del desorden. Considerando $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$, H_A de tamaño 1000×1000 y 100 realizaciones del desorden.

hace la localización en el sistema y esto tiene como consecuencia que la transición entre estados extendidos en los extremos de la banda de energía y los estados localizados en el centro de la misma se vuelva menos evidente. Por lo que podemos concluir que el aumento de desorden en las subdiagonales del modelo tridiagonal (5.3.9) genera una pérdida de la transición metal-aislante. Sin embargo, también debemos destacar, al comparar las curvas para $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$ y $\sigma_\epsilon^2 = 0.2$ ya sea para la razón de participación inversa o para la longitud de localización entrópica, que el aumento en la localización y la pérdida de las ventanas de transición entre estados localizados y extendidos parece no depender únicamente de la proporción entre el desorden diagonal y fuera de la diagonal, sino también, de la intensidad del desorden de las energías de sitio.

Por otro lado, comparando la extensión de los autoestados en el modelo de Anderson que se muestran en la Figura 5.2 con las curvas obtenidas al agregar desorden en las interacciones a primeros vecinos, las cuales se muestran en las Figuras 5.3 y 5.5, generadas con el mismo desorden diagonal $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$, vemos que la presencia de los elementos subdiagonales desordenados genera que los estados sean más localizados aunque el desorden de los elementos $h_{n,m}$ sea débil y este efecto aumenta a medida que el desorden aumenta, generando que la transición efectiva de localización-deslocalización se reduzca de manera considerable.

Ley del semicírculo para el modelo tridiagonal

Al desarrollar la teoría del colectivo BRM, en el capítulo 4, mencionamos, entre otras cosas, que este colectivo seguía la distribución para sus eigenvalores conocida como ley del semicírculo, siempre que se cumpliera la condición $b/N \ll 1$ y $N \rightarrow \infty$. De manera que para el caso tridiagonal $b = 1$ y N suficientemente grande deberíamos poder apreciar la distribución antes mencionada.

En la Figura 5.7 se aprecian los datos obtenidos para la distribución de los autovalores de una matriz tridiagonal con $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$ y variando σ_γ^2 de manera proporcional a la varianza diagonal, mientras que en la Figura 5.8, se muestran los datos para el caso $\sigma_\epsilon^2 = 0.2$ con la misma variación proporcional para la varianza de las subdiagonales. En ambos casos hemos considerado H de tamaño $N \times N$ con $N = 2000$. En la gráfica podemos apreciar que el espectro de energía sigue la distribución de la ley del semicírculo como se esperaba y que además, los autovalores satisfacen la ley de escalamiento $R = \sqrt{\sigma_\epsilon^2 b}$, dado que al usar esta normalización todas las curvas tienen el mismo radio sin importar la variación del desorden.

5.3.2. Modelo tridiagonal con correlaciones fuera de la diagonal principal

Al considerar el modelo tridiagonal (5.3.9) con desorden fuera de la diagonal principal tenemos la posibilidad de agregar correlaciones entre sus elementos, tal como lo hicimos

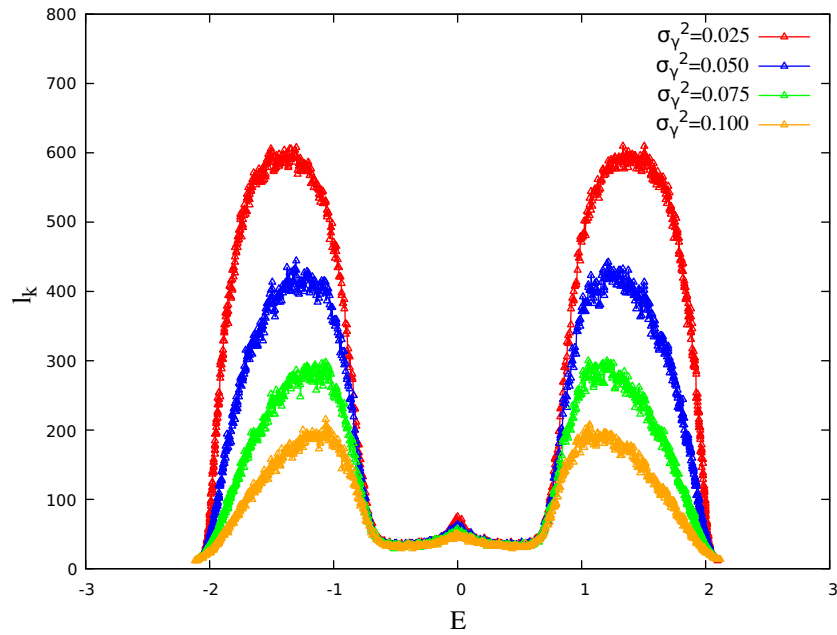


Figura 5.3: Longitud de localización entrópica para el modelo tridiagonal (5.3.9), considerando $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$ y variando proporcionalmente σ_γ^2 en $1/4, 1/2, 3/4, 1$ veces σ_ϵ^2 . Para H de tamaño 1000×1000 y 100 realizaciones del desorden.

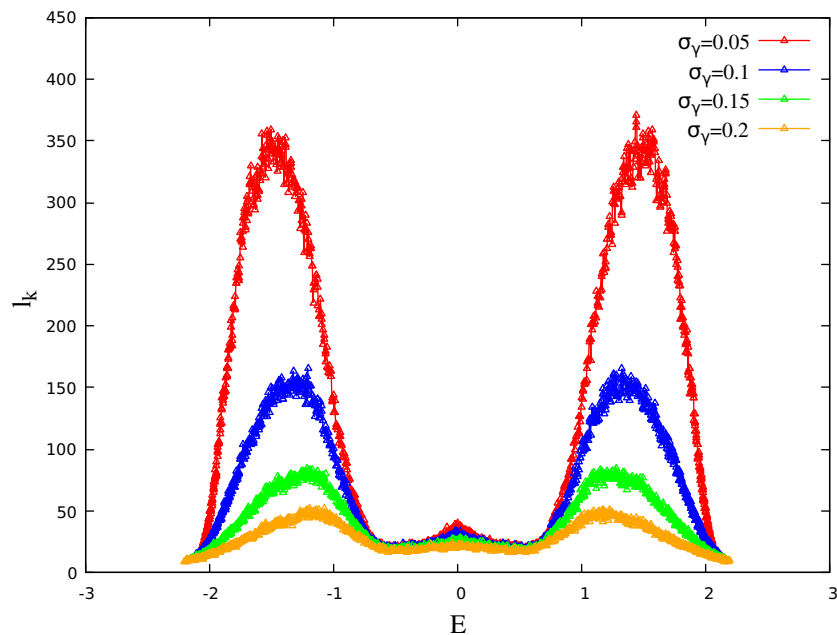


Figura 5.4: Longitud de localización entrópica para el modelo tridiagonal (5.3.9), considerando $\sigma_\epsilon^2 = 0.2$ y variando proporcionalmente σ_γ^2 en $1/4, 1/2, 3/4, 1$ veces σ_ϵ^2 . Para H de tamaño 1000×1000 y 100 realizaciones del desorden.

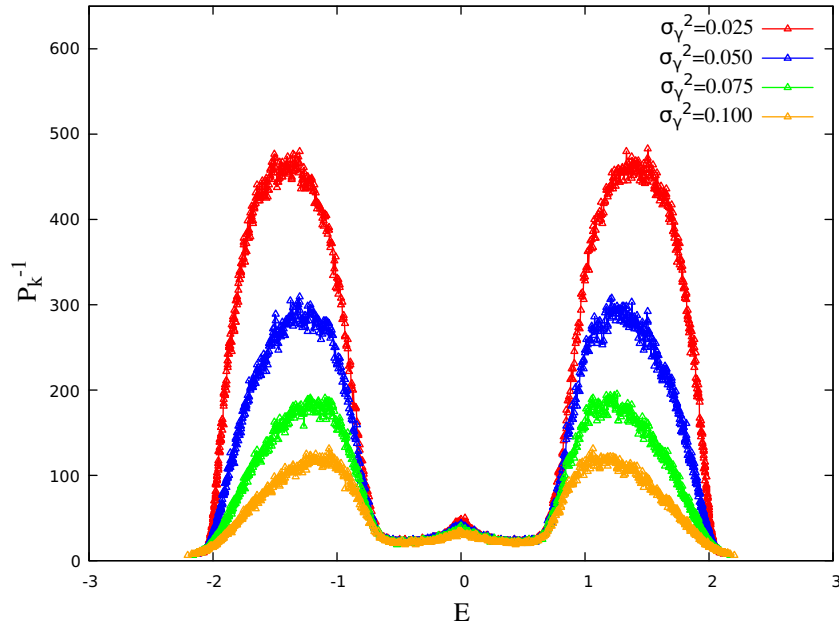


Figura 5.5: Razón de participación inversa para el modelo tridiagonal con correlaciones, considerando $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$ y σ_γ^2 en $1/4, 1/2, 3/4, 1$ veces σ_ϵ^2 . Para H de tamaño 1000×1000 y 100 realizaciones del desorden.

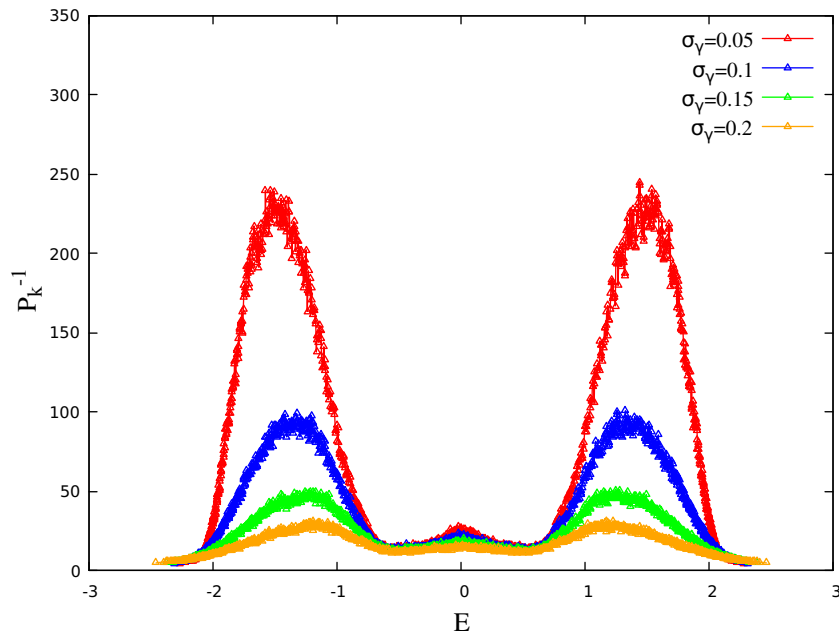


Figura 5.6: Razón de participación inversa para el modelo tridiagonal (5.3.9) con correlaciones, considerando $\sigma_\epsilon^2 = 0.2$ y σ_γ^2 en $1/4, 1/2, 3/4, 1$ veces σ_ϵ^2 . Para H de tamaño 1000×1000 y 100 realizaciones del desorden.

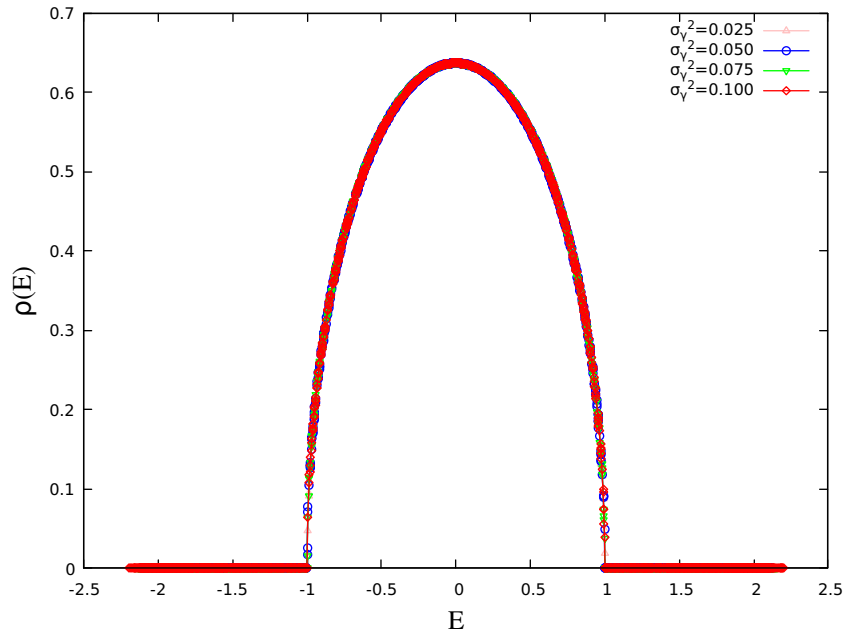


Figura 5.7: Distribución del espectro de energías siguiendo la ley del semicírculo para $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$ y σ_γ^2 en $1/4, 1/2, 3/4, 1$ veces σ_ϵ^2 . Con H de tamaño 2000×2000 , realizando una normalización de los autovalores considerando $R = \sqrt{\sigma_\epsilon^2 b}$.

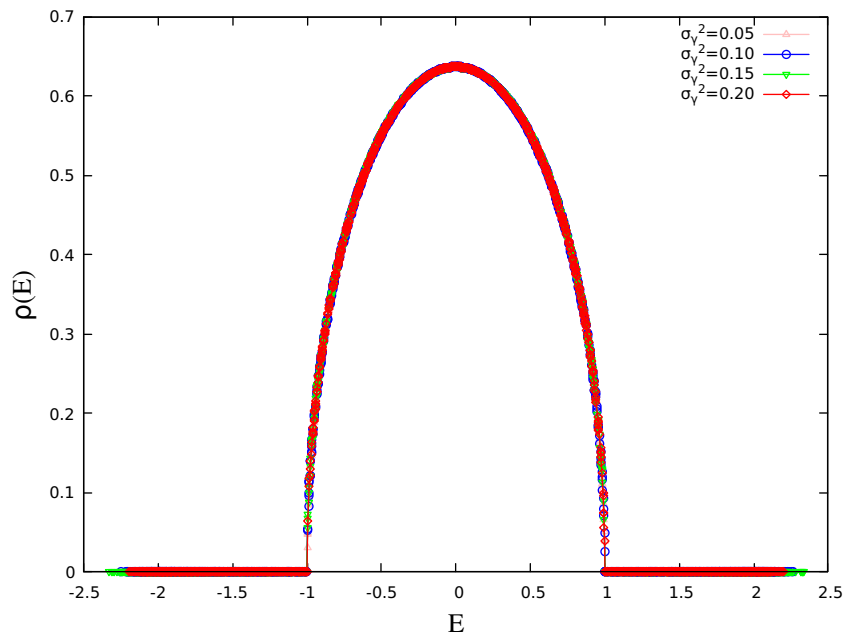


Figura 5.8: Distribución del espectro de energías siguiendo la ley del semicírculo para $\sigma_\epsilon^2 = 0.2$ y σ_γ^2 en $1/4, 1/2, 3/4, 1$ veces σ_ϵ^2 . Con H de tamaño 2000×2000 , realizando una normalización de los autovalores considerando $R = \sqrt{\sigma_\epsilon^2 b}$.

para las energías de sitio en el modelo de Anderson, para las cuales en la sección 2.5 describimos el procedimiento para generar una secuencia de elementos correlacionados, en particular mediante correlaciones de largo alcance. Y estudiamos el efecto en las propiedades de localización al agregar este tipo de correlación en los elementos diagonales del modelo de Anderson, encontrando que específicas correlaciones del desorden generan una transición efectiva de localización-deslocalización de los autoestados en un modelo unidimensional. Ahora bien, al considerar los elementos fuera de la diagonal como aleatorios surge la posibilidad de agregar correlaciones a estos elementos y estudiar el cambio en las propiedades de localización comparándolas con el modelo tridiagonal (5.3.9) sin correlaciones en las subdiagonales.

En las Figuras 5.9 y 5.11 podemos apreciar las gráficas generadas al resolver el problema de autovalores para la matriz H considerando a sus elementos como correlacionados en cada diagonal a partir de (5.1.4) y el algoritmo descrito en 2.5.

En las gráficas se muestra el promedio de los datos obtenidos para la longitud de localización entrópica y la razón de participación inversa, considerando $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$ y variando σ_γ^2 de la siguiente manera: $\sigma_\gamma^2 = \frac{\sigma_\epsilon^2}{4}, \frac{\sigma_\epsilon^2}{2}, \frac{3\sigma_\epsilon^2}{4}, \sigma_\epsilon^2$; para el desorden dentro y fuera de la diagonal principal de H , respectivamente.

Si analizamos a detalle la extensión de los autoestados en las Figuras 5.9 y 5.11 en comparación con los que se muestran en las Figuras 5.3 y 5.5, podemos apreciar que las correlaciones de los elementos subdiagonales preservan la transición de localización-deslocalización generada por las correlaciones del desorden en las energías de sitio. Sin embargo, al aumentar el desorden los estados se localizan más y más y la transición metal-aislante se ve disminuida nuevamente.

En las Figuras 5.13 y 5.14 se muestra el promedio de la razón de participación inversa para los casos $\sigma_\gamma^2 = \frac{\sigma_\epsilon^2}{4}, \frac{\sigma_\epsilon^2}{2}$ y $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$, comparando la extensión de los autoestados en el caso con correlaciones (línea roja) y el caso sin correlaciones en los elementos de las subdiagonales (línea azul). En estos gráficos se aprecian ambos efectos de manera más concreta, por un lado, el hecho de que las correlaciones preservan la transición localización-deslocalización y por el otro, que a pesar de aumentar la extensión de los estados en los extremos de la banda de energía el efecto de deslocalización sigue disminuyendo al aumentar el grado de desorden.

Ley del semicírculo para el modelo tridiagonal con correlaciones

Un punto más que podemos estudiar al agregar correlaciones en las subdiagonales del modelo tridiagonal (5.3.9) es el efecto que estas correlaciones tiene en los autovalores del sistema, principalmente en su distribución de probabilidad a través de la ley del semicírculo dada en la expresión (3.0.4). Mediante la cual obtenemos los datos que aparecen en la Figura 5.15, para los cuales, podemos apreciar que se mantiene la distribución mediante la ley del semicírculo.

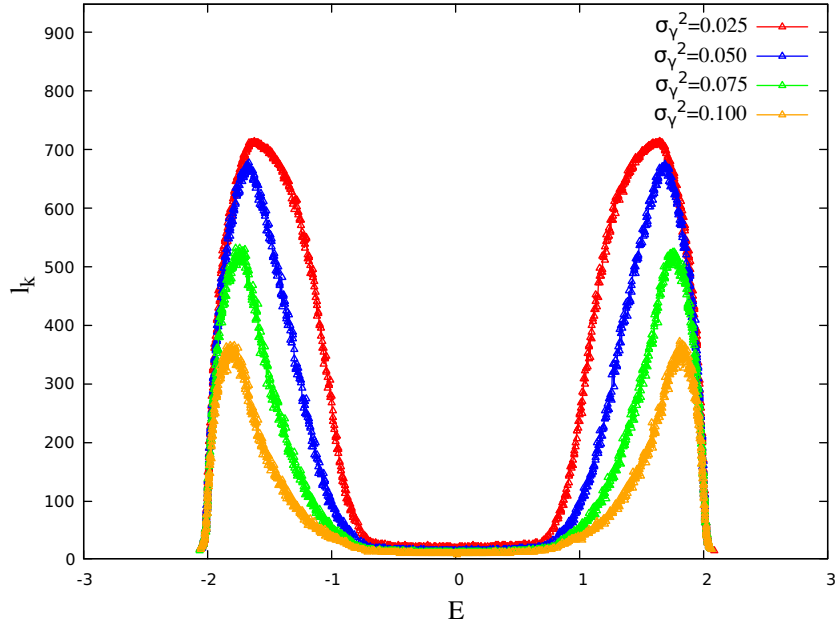


Figura 5.9: Longitud de localización entrópica para el modelo tridiagonal (5.3.9) con correlaciones, considerando $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$ y σ_γ^2 en $1/4, 1/2, 3/4, 1$ veces σ_ϵ^2 . Para H de tamaño 1000×1000 y 100 realizaciones del desorden.

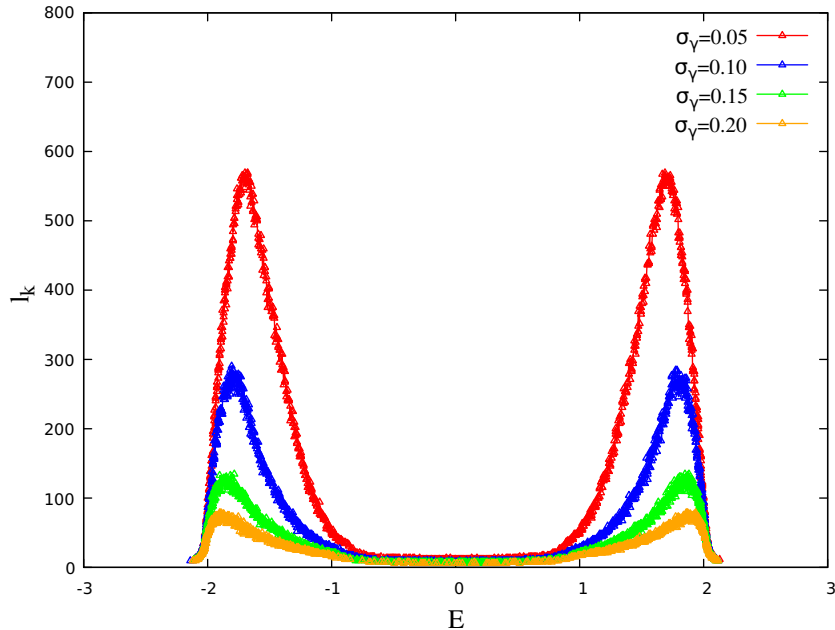


Figura 5.10: Longitud de localización entrópica para el modelo tridiagonal (5.3.9) con correlaciones, considerando $\sigma_\epsilon^2 = 0.2$ y σ_γ^2 en $1/4, 1/2, 3/4, 1$ veces σ_ϵ^2 . Para H de tamaño 1000×1000 y 100 realizaciones del desorden.

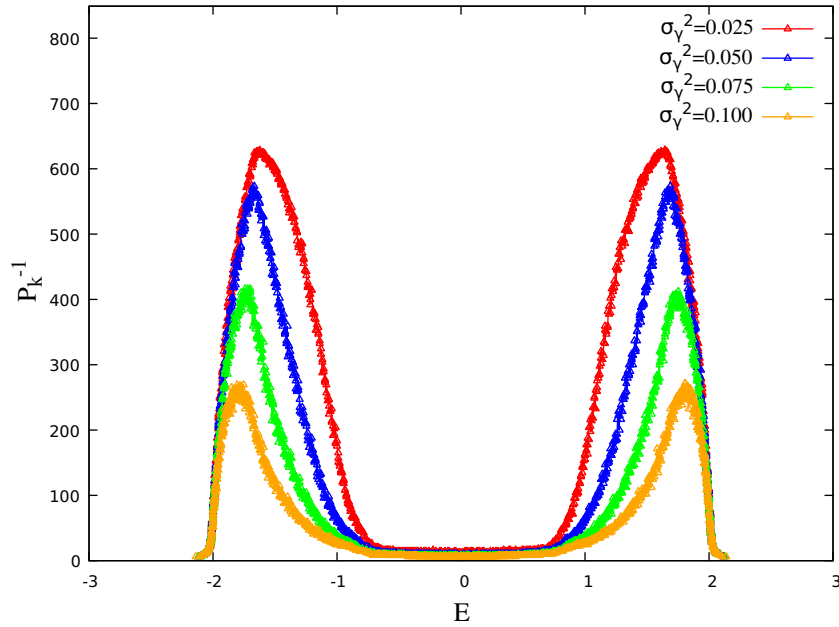


Figura 5.11: Razón de participación inversa para el modelo tridiagonal (5.3.9) con correlaciones, considerando $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$ y σ_γ^2 en $1/4, 1/2, 3/4, 1$ veces σ_ϵ^2 . Para H de tamaño 1000×1000 y 100 realizaciones del desorden.

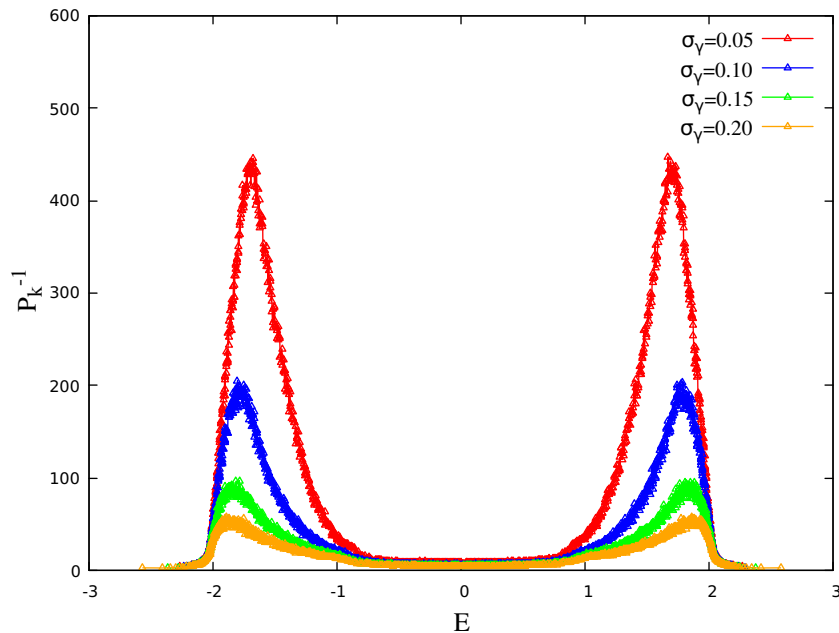


Figura 5.12: Razón de participación inversa para el modelo tridiagonal (5.3.9) con correlaciones, considerando $\sigma_\epsilon^2 = 0.2$ y σ_γ^2 en $1/4, 1/2, 3/4, 1$ veces σ_ϵ^2 . Para H de tamaño 1000×1000 y 100 realizaciones del desorden.

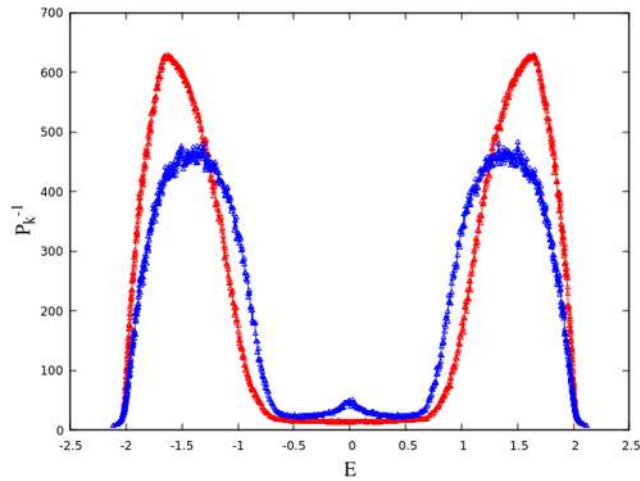


Figura 5.13: Razón de participación inversa para el modelo tridiagonal (5.3.9), $b = 1$, sin correlaciones en las subdiagonales (línea azul) y con correlaciones (línea roja), considerando $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$ y $\sigma_\gamma^2 = \frac{\sigma_\epsilon^2}{4}$. Para H de tamaño 1000×1000 y 100 realizaciones del desorden.

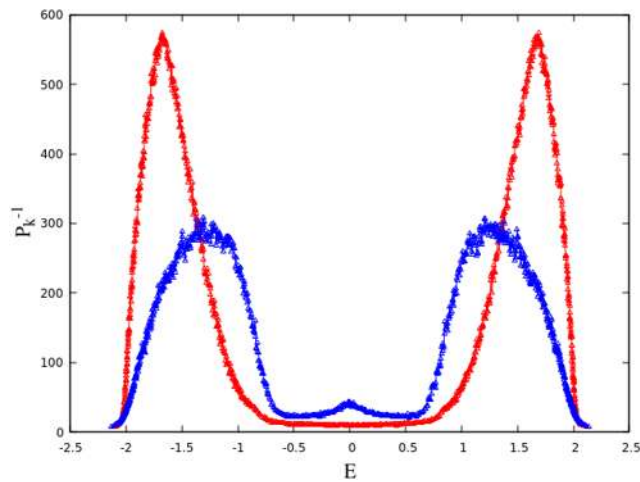


Figura 5.14: Razón de participación inversa para el modelo tridiagonal (5.3.9), $b = 1$, sin correlaciones en las subdiagonales (línea azul) y con correlaciones (línea roja), considerando $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$ y $\sigma_\gamma^2 = \frac{\sigma_\epsilon^2}{2}$. Para H de tamaño 1000×1000 y 100 realizaciones del desorden.

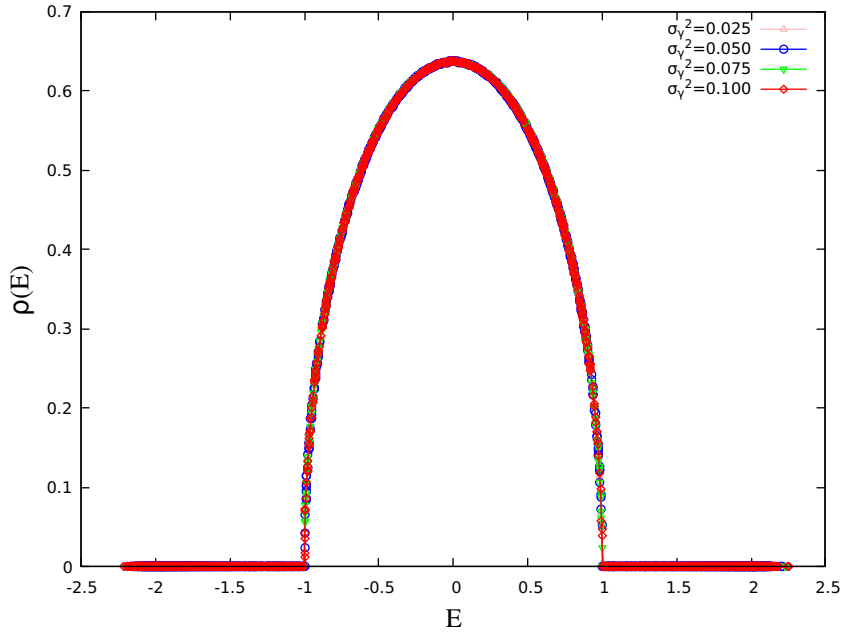


Figura 5.15: Distribución del espectro de energías siguiendo la ley del semicírculo para $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$ y σ_γ^2 en $1/4, 1/2, 3/4, 1$ veces σ_ϵ^2 para una matriz tridiagonal con correlaciones en todas las diagonales, siendo H de tamaño 2000×2000 , realizando una normalización de los autovalores considerando $R = \sqrt{\sigma_\epsilon^2 b}$.

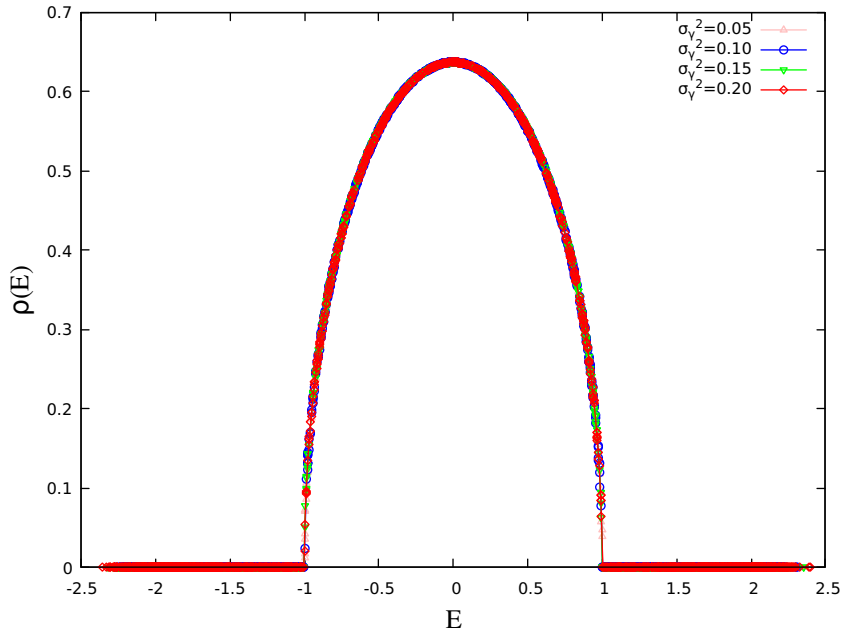


Figura 5.16: Distribución del espectro de energías siguiendo la ley del semicírculo para $\sigma_\epsilon^2 = 0.2$ y σ_γ^2 en $1/4, 1/2, 3/4, 1$ veces σ_ϵ^2 para una matriz tridiagonal con correlaciones en todas las diagonales, siendo H de tamaño 2000×2000 , realizando una normalización de los autovalores considerando $R = \sqrt{\sigma_\epsilon^2 b}$.

5.4. Modelo multidigonal

Para terminar el análisis de los modelos de enlace fuerte que hemos trabajado a lo largo de los diferentes capítulos consideraremos el modelo multidigonal, con $b > 1$. Sistema que podemos interpretar físicamente como un modelo unidimensional con saltos a b vecinos en la red. De esta manera, la representación matricial de (5.1.1) toma la forma general

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & 1 + h_{1,2} & h_{1,3} \dots & h_{1,b} & 0 \dots & & 0 & 0 \\ 1 + h_{1,2} & \epsilon_2 & 1 + h_{2,3} \dots & h_{2,b} & 0 \dots & & 0 & \\ h_{1,3} & 1 + h_{2,3} & \epsilon_2 & 1 + h_{3,4} \dots & h_{3,b} & 0 \dots & \vdots & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & & & \\ h_{1,b} \dots & & 1 + h_{b-1,b} & \epsilon_b & 1 + h_{b,b+1} \dots & h_{b,2b} & 0 \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & & & \\ 0 \dots & h_{N-2,N-1} & 1 + h_{N-2,N-1} & \epsilon_{N-1} & 1 + h_{N-1,N} & & & \\ 0 & 0 \dots & h_{N-2,N} & 1 + h_{N-1,N} & \epsilon_n & & & \end{pmatrix} \quad (5.4.11)$$

5.4.1. Papel clave del término laplaciano

Para analizar el modelo (5.4.11) sin el término laplaciano, veamos la matriz descrita en (5.4.11) como la suma de dos matrices, $H = H_L + L$, donde L contiene las entradas correspondientes al término laplaciano dadas por la siguiente expresión:

$$\langle n | L | m \rangle = \delta_{n,m-1} + \delta_{n,m+1} \quad (5.4.12)$$

Estos elementos, como veremos a continuación, juegan un papel muy importante en la transición de estados extendidos y estados localizados.

Para empezar, consideremos H_L tal que los elementos ϵ_n tienen media nula y varianza σ_ϵ^2 y son correlacionados utilizando la densidad espectral (5.1.4), mientras que los elementos de las subdiagonales, $h_{n,m}$, son variables aleatorias idénticamente distribuidas que satisfacen las propiedades (5.1.7).

Bajo estas condiciones de los elementos en las diagonales de la matriz banda y considerando $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$, $\sigma_\gamma^2 = 0.05$ para el desorden en la diagonal principal y el resto de las subdiagonales, además de no considerar el término correspondiente al laplaciano, obtenemos H en la forma:

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & h_{1,2} & h_{1,3} \dots & h_{1,b} & 0 \dots & & 0 & 0 \\ h_{1,2} & \epsilon_2 & h_{2,3} \dots & h_{2,b} & 0 \dots & & 0 & \\ h_{1,3} & h_{2,3} & \epsilon_3 & \dots & & & & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots & \\ h_{1,b} \dots & & h_{b-1,b} & \epsilon_b & h_{b,b+1} \dots & h_{b,2b} & 0 \dots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \\ 0 \dots & h_{N-3,N-1} & h_{N-2,N-1} & \epsilon_{N-1} & h_{N-1,N} & & & \\ 0 & 0 \dots & h_{N-2,N} & h_{N-1,N} & \epsilon_n & & & \end{pmatrix} \quad (5.4.13)$$

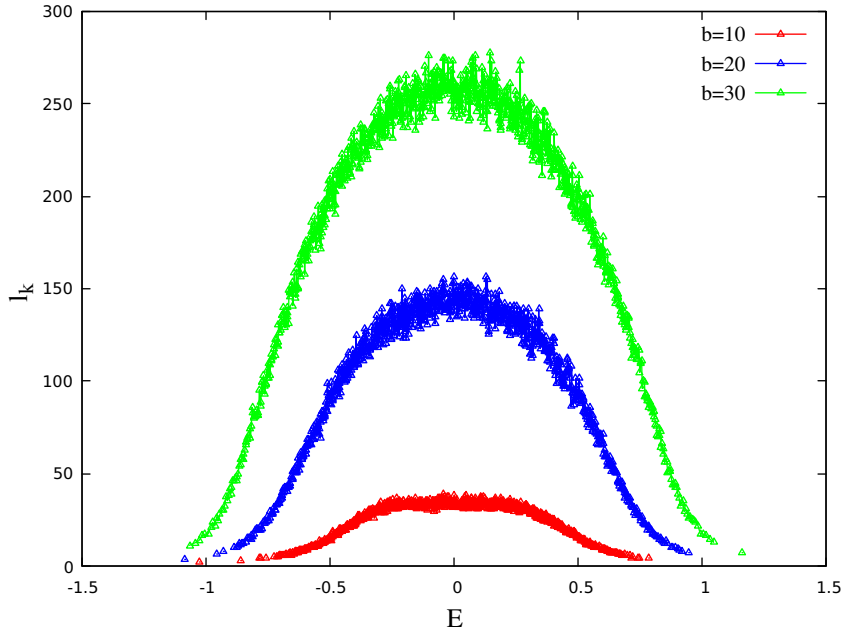


Figura 5.17: Longitud de localización entrópica para el modelo (5.4.13) sin término laplaciano con $h_{n,m}$ i.i.d. Considerando $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$ y $\sigma_\gamma^2 = 0.05$. Además, H de tamaño 1000×1000 y 100 realizaciones del desorden.

Realizando el estudio para dos casos particulares, por un lado, para los elementos $h_{n,m}$ i.i.d. y por el otro, correlacionados con ayuda de la densidad espectral dada en (5.1.4), al tiempo que la anchura de la semibanda toma los valores $b = 10$, $b = 30$ y $b = 50$ subdiagonales; tenemos los siguientes resultados:

Como podemos apreciar en las curvas de la Figura 5.17 todos los estados son localizados para el caso sin correlaciones en las subdiagonales y de igual manera para el caso con correlaciones en todas las diagonales, que se muestra en la Figura 5.18. Basados en los datos de las gráficas podemos ver que las correlaciones generan un incremento tanto del espectro energía y un aumento en la extensión de los estados de (5.4.13), sin ser posible apreciar una transición localización-deslocalización de los estados electrónicos, lo que nos dice que el término laplaciano es fundamental para obtener la transición metal-aislante en el modelo unidimensional, para cualquier número de interacciones entre vecinos, es decir, para cualquier número de subdiagonales ($b > 1$) con o sin correlaciones, como lo muestran los datos presentados que corresponden a 10, 30 y 50 subdiagonales (véase también la Figura 5.22).

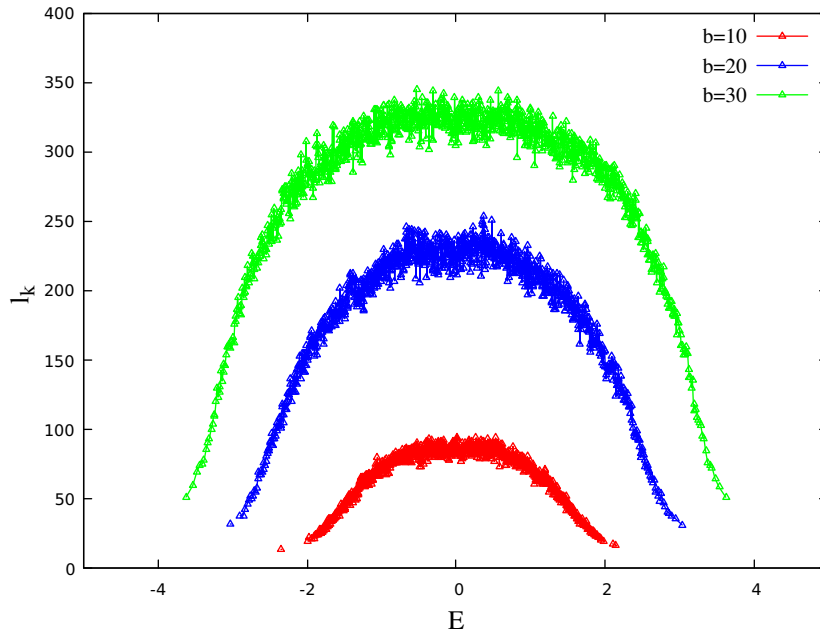


Figura 5.18: Longitud de localización entrópica para el modelo (5.4.13) sin término laplaciano con elementos $h_{n,m}$ correlacionados, considerando $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$ y $\sigma_\gamma^2 = 0.05$. Además, H de tamaño 1000×1000 y 100 realizaciones del desorden.

5.5. Modelo multidigonal con desorden

Ahora, agregamos el término laplaciano al modelo multidigonal (5.4.11) descrito al inicio de esta sección, es decir, tal que las entradas de la matriz tienen las propiedades estadísticas:

$$\langle \epsilon_n \rangle = 0, \quad \langle \epsilon_n^2 \rangle = \sigma_\epsilon^2 = 0.1 \quad (5.5.14)$$

para las energías de sitio, las cuales son correlacionadas a partir de la densidad espectral del desorden dada en (5.1.4), mientras que

$$\langle h_{n,m} \rangle = 0, \quad \langle h_{n,m}^2 \rangle = \sigma_\gamma^2 = 0.05 \quad (5.5.15)$$

son elementos aleatorios independientes e idénticamente distribuidos que corresponden a las entradas fuera de la diagonal principal.

Veremos que las propiedades de localización del sistema se modifican de manera importante, por un lado logramos recuperar la transición entre estados localizados y estados extendidos con claros bordes de movilidad; como lo muestran las Figuras 5.19 y 5.21, donde aparece el promedio de la longitud de localización entrópica y de la razón de participación inversa. En ambas figuras podemos apreciar que, de manera similar al caso tridiagonal cuando aumentábamos el grado de desorden, conforme b crece la diferencia entre la extensión espacial de los autoestados más localizados y de los más “extendidos” se reduce y la transición metal-aislante presente en el modelo de Anderson tiende a desaparecer, aún con la presencia del término laplaciano. Este hecho es mucho más evidente

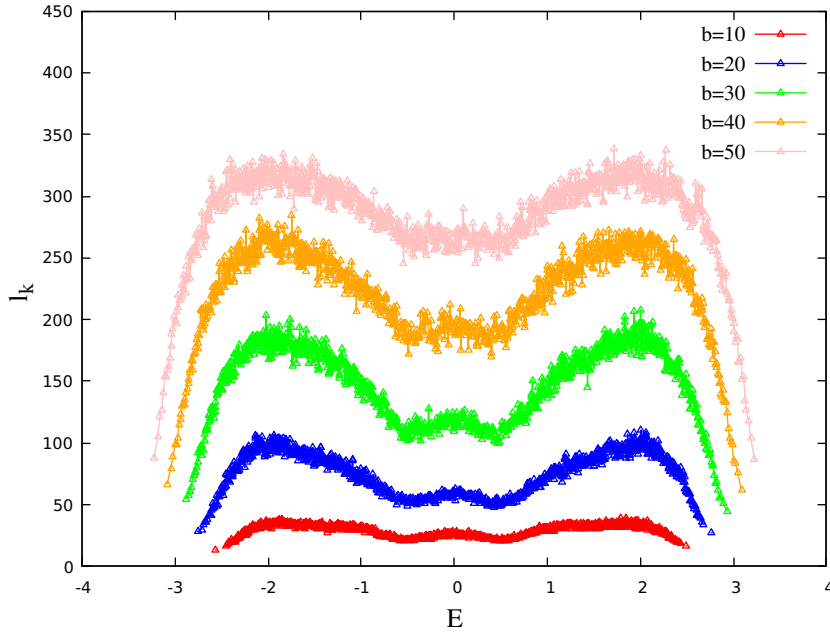


Figura 5.19: Longitud de localización entrópica para el modelo multidigonal (5.4.11) considerando H de tamaño 1000×1000 , $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$ y $\sigma_\gamma^2 = 0.05$ y correlaciones solamente en las energías de sitio.

cuando analizamos los casos de 10 y 50 subdiagonales por separado, de los cuales mostramos el promedio de la razón de participación inversa en la Figura 5.20. Con ayuda de las curvas podemos observar que para 10 subdiagonales los estados más localizados tienen una extensión de alrededor de 15 sitios, mientras que los más extendidos cerca de 25, lo que nos da una diferencia en extensión de casi el doble entre unos y otros, con un cociente de la longitud entre los estados extendidos y los localizados de 1.5. Por su parte, para el caso de 50 subdiagonales los estados más localizados tienen una extensión de alrededor de 150 sitios en la red, mientras que los estados más extendidos de 200 sitios, lo que representa un cociente de 1.33, marcando una reducción en la diferencia relativa de la transición metal-aislante al aumentar el número de subdiagonales.

Además, en la Figura 5.22 se muestra el modelo (5.4.11) el cual incluye el término laplaciano y es comparado con el sistema 5.4.13 que no contiene este término; como podemos apreciar la diferencia en las propiedades de localización es muy notoria debido a que para el caso sin laplaciano no es posible obtener una transición entre regímenes, la cual si está presente en el caso con el laplaciano.

Ley del semicírculo para el modelo multidigonal

De igual manera que hicimos para la matriz tridiagonal (5.3.9), podemos analizar la distribución de los autovalores para el modelo multidigonal (5.4.11), en la Figura 5.23

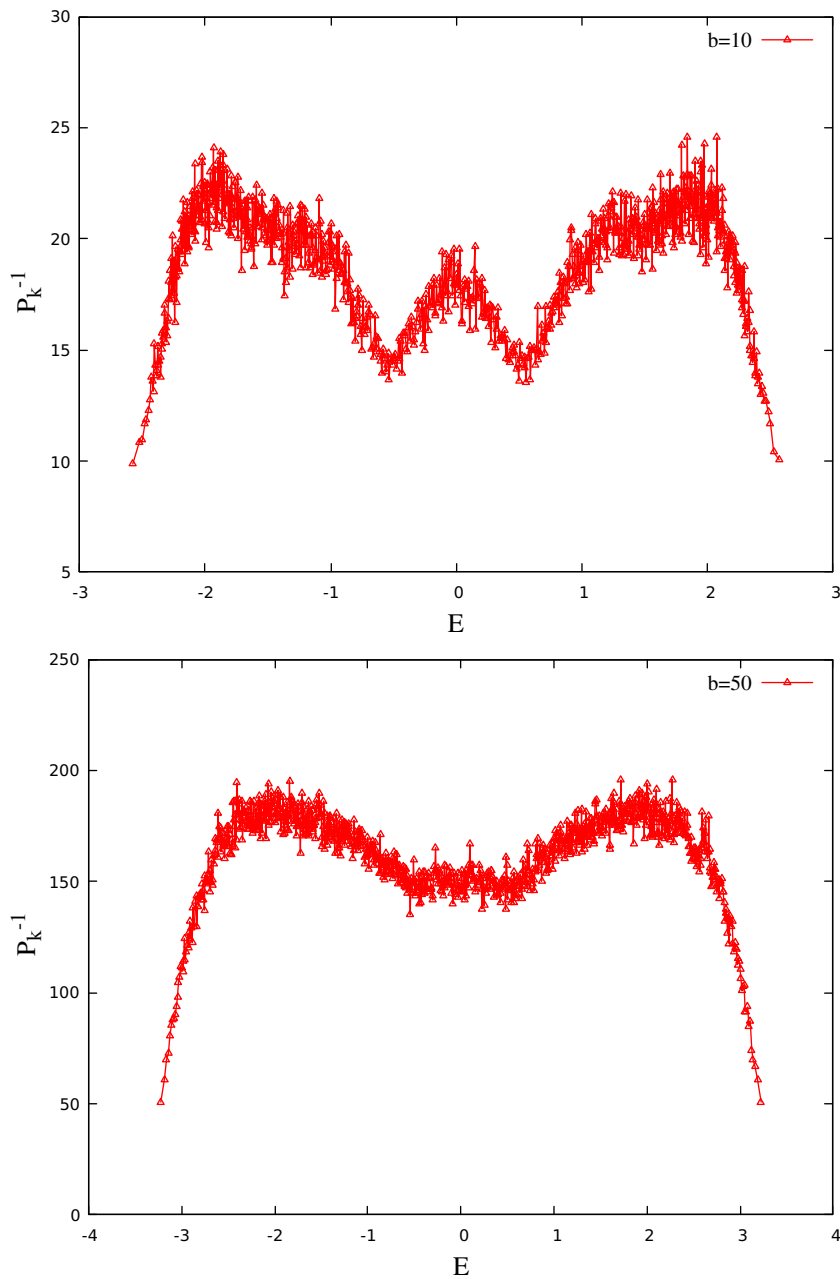


Figura 5.20: Razón de participación inversa para $b = 10$ y $b = 50$ considerando H de tamaño 1000×1000 , $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$ y $\sigma_\gamma^2 = 0.05$ y correlaciones solamente en las energías de sitio.

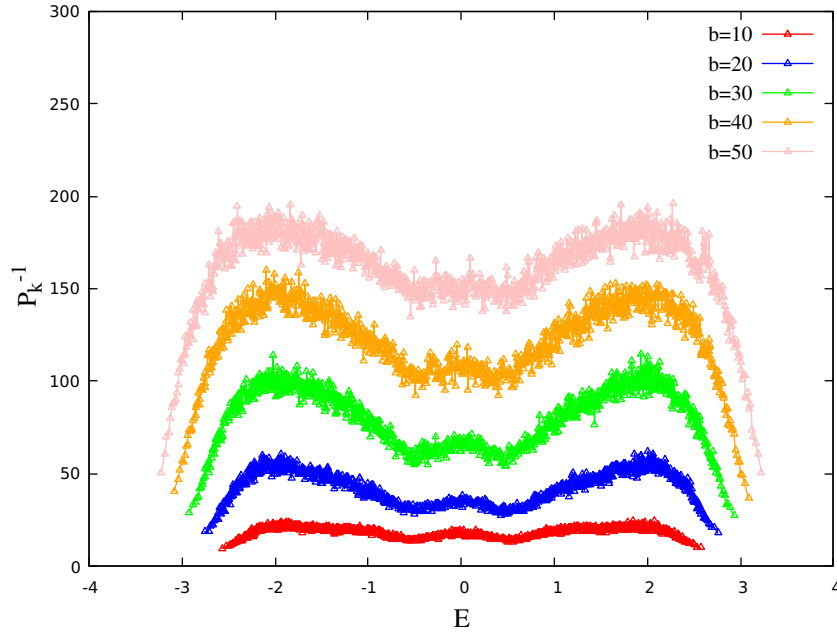


Figura 5.21: Razón de participación inversa para el modelo multidagonal (5.4.11) considerando H de tamaño 1000×1000 , $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$ y $\sigma_\gamma^2 = 0.05$ y correlaciones solamente en las energías de sitio.

se muestran los datos obtenidos mediante el uso de (3.0.4) para los autovalores de H obtenido del modelo multidagonal (5.4.11). Estos resultados muestran que el espectro de energías se distribuye siguiendo la ley del semicírculo, como lo esperábamos de acuerdo a las características del colectivo BRM.

5.5.1. Modelo multidagonal con correlaciones

A continuación analizaremos el efecto que tiene en las propiedades de localización el agregar correlaciones de largo alcance en los elementos de las subdiagonales, es decir, considerando $h_{n,m}$ con media nula, varianza $\sigma_\gamma^2 = 0.05$ y correlacionados a lo largo de cada subdiagonal a partir de la densidad espectral del desorden dada en (5.1.4). La intención es ver si con la ayuda de estos nuevos elementos correlacionados podemos recuperar la transición localización-deslocalización que se pierde al aumentar la anchura de la banda. Por su parte las energías de sitio serán correlacionadas con la misma densidad espectral (5.1.4), tendrán media nula y varianza $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$. Nótese que consideramos correlaciones entre elementos de una misma diagonal, pero no entre elementos de diagonales distintas.

En las Figuras 5.24 y 5.25 podemos apreciar el promedio de la longitud de localización entrópica y la razón de participación inversa obtenidos a partir de los autoestados del sistema para H dada en 5.4.11) de tamaño 1000×1000 , cuyas entradas satisfacen las propiedades estadísticas antes descritas.

A partir de la extensión de los autoestados, en especial en la zona de transición de esta-

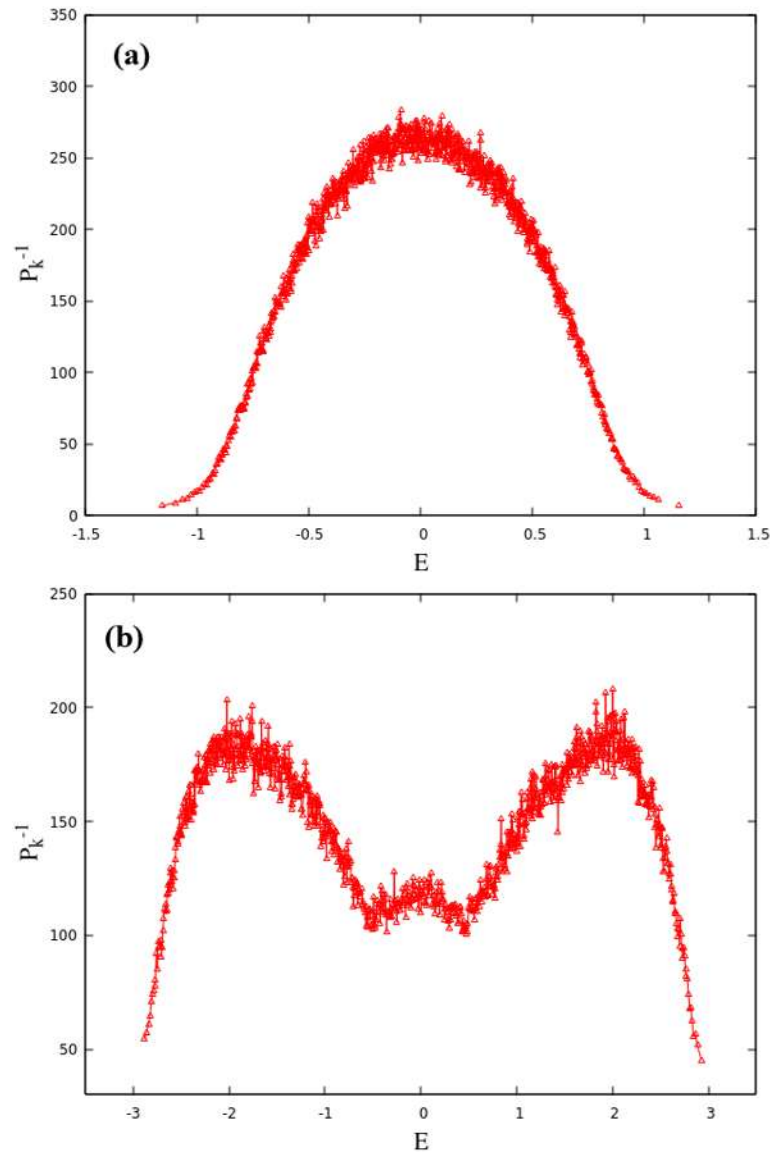


Figura 5.22: Longitud de localización entrópica para los modelos (a) Sin término laplaciano (5.4.13) (b) Con término laplaciano (5.4.11), en el caso correspondiente a $b = 30$, H de tamaño 1000×1000 , $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$ y $\sigma_\gamma^2 = 0.05$

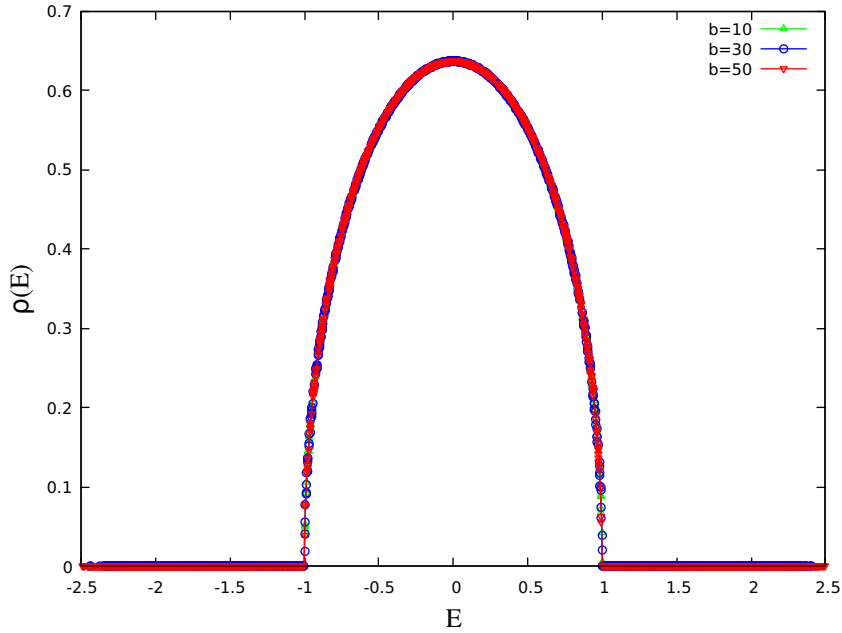


Figura 5.23: Distribución del espectro de energías siguiendo la ley del semicírculo para $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$ y $\sigma_\gamma^2 = 0.05$ para las matrices tales que $b = 10$, $b = 30$ y $b = 50$, siendo H de tamaño 2000×2000 , realizando una normalización de los autovalores considerando $R = \sqrt{\sigma_\epsilon^2 b}$.

dos localizados y estados extendidos, podemos apreciar que para el aumento sucesivo de la anchura de la semibanda b la transición metal-aislante se logra mantener con mucha mayor claridad que para las gráficas mostradas en 5.19 y 5.21. Sin embargo, debemos destacar que las correlaciones no son suficientes para detener por completo la pérdida de la transición efectiva en el sistema. Hemos logrado mostrar que prolongan la presencia del fenómeno de transición entre estados localizados y extendidos, tanto para el modelo tridiagonal (5.3.9) con aumento sucesivo del desorden subdiagonal como para el modelo (5.4.11) con un aumento sucesivo del número de subdiagonales, pero no son suficientes para preservar totalmente la transición.

La diferencia en la extensión de los autoestados en la zona de transición entre estados localizados y estados extendidos al agregar las correlaciones se logra apreciar con mucha mayor claridad en la Figura 5.27, donde se muestra la comparación entre el caso sin correlaciones fuera de la diagonal principal en el modelo (5.4.11) y con correlaciones en todas las subdiagonales en el mismo, para $b = 30$ (Figura 5.27 (a)) y $b = 50$ (Figura 5.27 (b)). Para ambos valores de b es evidente que la transición metal-aislante es más notoria en el caso con correlaciones a lo largo de todas las subdiagonales, sin embargo, también es apreciable la pérdida de la transición entre estados extendidos y localizados al crecer b . En adición a esto, para identificar la diferencia de extensión relativa al aumentar el número de subdiagonales podemos analizar los casos de 10 subdiagonales y 50 subdiagonales con correlaciones en los elementos de matriz. Las gráficas correspondientes a estos casos

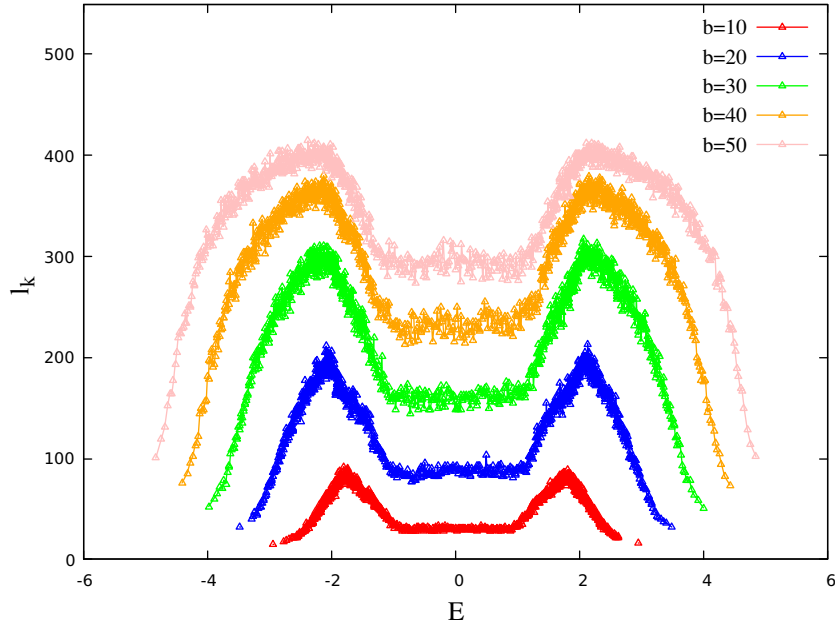


Figura 5.24: Longitud de localización entrópica para el modelo multidagonal (5.4.11) considerando H de tamaño 1000×1000 , $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$ y $\sigma_\gamma^2 = 0.05$ y correlaciones en todas las subdiagonales, variando la anchura de la semibanda b .

se muestran en la Figura 5.26 donde tenemos que para el caso de 10 subdiagonales el cociente de la extensión entre los estados extendidos y los estados localizados es de 2.5 mucho mayor que en el caso sin correlaciones que lo estimamos como 1.66, además, para el caso de 50 subdiagonales sí hay una reducción de la distancia relativa a un valor de 1.56 para el caso correlacionado, pero sigue siendo mayor a la aproximada para el caso sin correlaciones y $b = 50$ cuyo valor fue de 1.33. Entonces, podemos concluir que las correlaciones espaciales permiten preservar la transición entre estados localizados y estados extendidos, pero que aún con esta mejora parcial, la pérdida de la transición es clara al agregar un mayor número de subdiagonales.

Además del efecto de preservar las ventanas de transición efectiva entre regímenes, podemos destacar que al igual que mencionamos para el modelo sin término laplaciano (5.4.13), la presencia de correlaciones del desorden en las subdiagonales aumenta tanto la anchura de la banda de energía como la extensión de los autoestados.

Ley del semicírculo para el modelo multidagonal con correlaciones

De nueva cuenta podemos analizar si las correlaciones en los elementos de las subdiagonales generan una modificación en las propiedades estadísticas de los autovalores a través de la ley del semicírculo. Para ello, consideremos H como en (5.4.11) de tamaño 2000×2000 , $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$ y $\sigma_\gamma^2 = 0.05$, además de la relación (3.0.4) para la distribución del

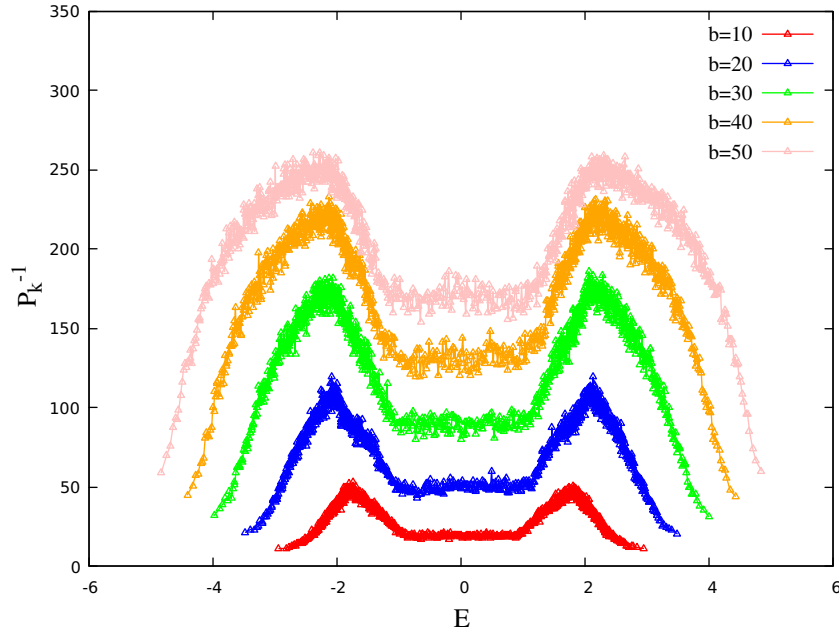


Figura 5.25: Razón de participación inversa para el modelo multidiagonal (5.4.11) considerando H de tamaño 1000×1000 , $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$ y $\sigma_\gamma^2 = 0.05$ y correlaciones en todas las subdiagonales, variando la anchura de la semibanda b .

espectro de energías del sistema.

En la Figura 5.28 se muestran los resultados obtenidos para el ancho de la semibanda $b = 10$, $b = 30$ y $b = 50$. Mediante la curva podemos apreciar que, al igual que en los casos anteriores, la distribución de probabilidad sigue siendo la misma, es decir, sigue la ley del semicírculo.

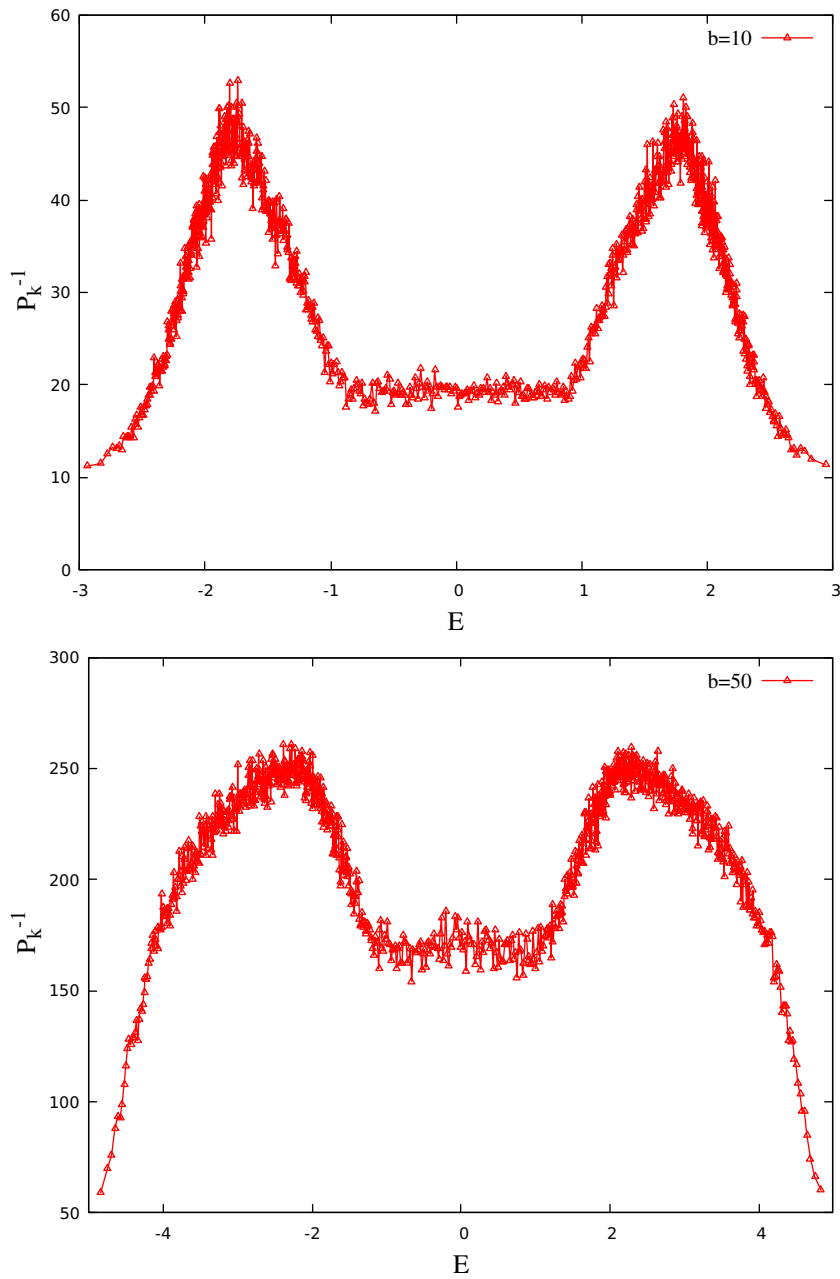


Figura 5.26: Razón de participación invezza para $b = 10$ y $b = 50$ considerando H de tamaño 1000×1000 , $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$ y $\sigma_\gamma^2 = 0.05$ y correlaciones en todas las subdiagonales.

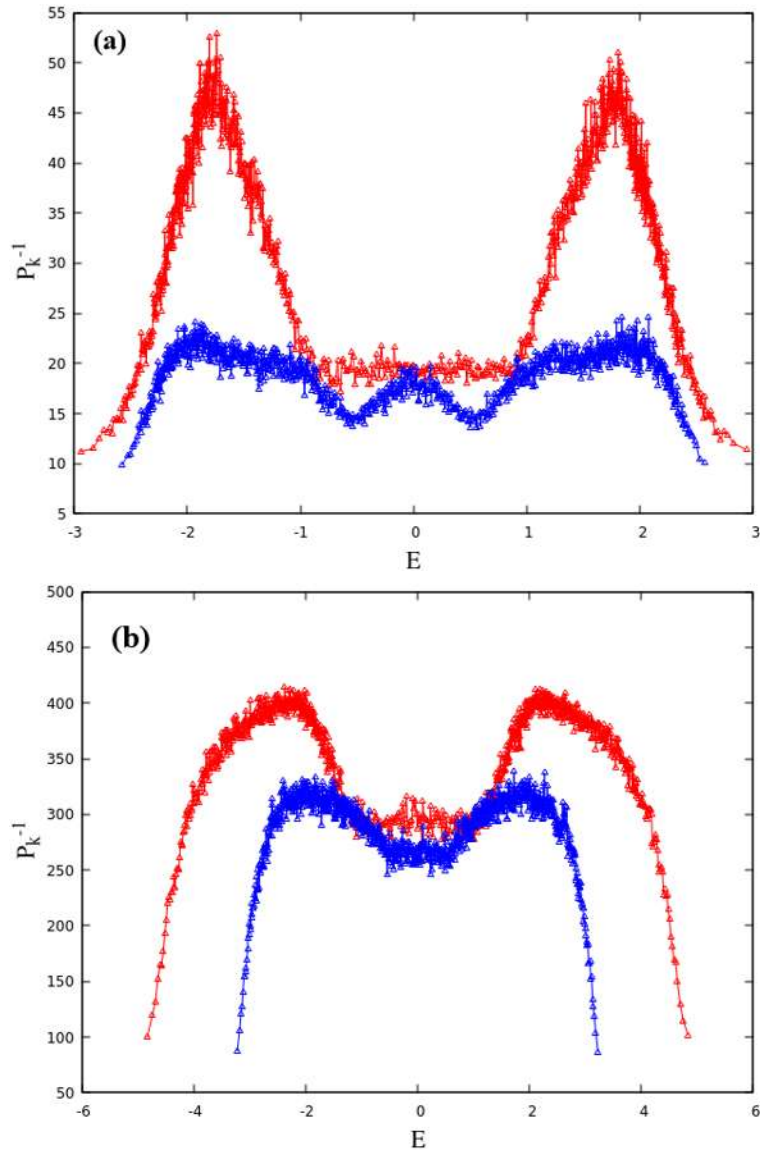


Figura 5.27: Razón de participación inversa para el modelo multidigonal (5.4.11) (a) $b = 10$, la línea azul corresponde al caso sin correlaciones, mientras que la roja al caso correlacionado (b) $b = 50$, la línea azul corresponde al caso sin correlaciones, mientras que la roja al caso correlacionado. Considerando H de tamaño 1000×1000 , $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$ y $\sigma_\gamma^2 = 0.05$.

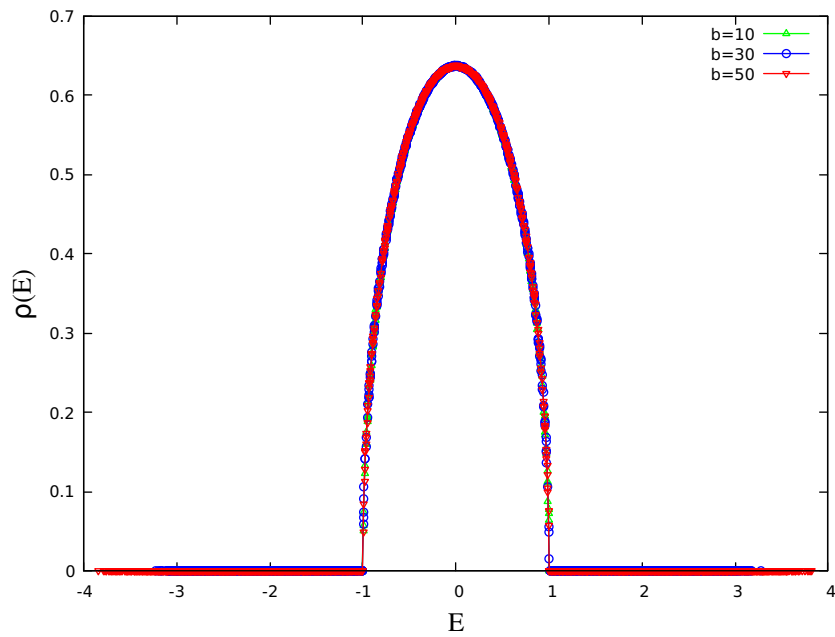


Figura 5.28: Distribución del espectro de energías siguiendo la ley del semicírculo para $\sigma_\epsilon^2 = 0.1$ y $\sigma_\gamma^2 = 0.05$ para las matrices con elementos correlacionados, tales que $b = 10$, $b = 30$ y $b = 50$, siendo H de tamaño 2000×2000 , realizando una normalización de los autovalores considerando $R = \sqrt{\sigma_\epsilon^2 b}$.

Capítulo 6

Conclusiones

Nuestro principal objetivo en este trabajo consistió en estudiar numéricamente modelos de enlace fuerte con desorden dentro y fuera de la diagonal principal. Los resultados numéricos obtenidos nos permiten concluir lo siguiente:

a) Se corroboró la información teórica existente referente al modelo con desorden puramente diagonal e interacciones a primeros vecinos en la red, conocido como modelo de Anderson, es decir, se logró observar que el sistema presenta solamente estados localizados si las energías de sitio son variables aleatorias independientes y que es posible lograr una transición efectiva de localización-deslocalización si el desorden presenta específicas correlaciones de largo alcance.

b) Se mostró que el desorden no-diagonal sin correlaciones tiende a eliminar la transición efectiva debida a las correlaciones de las energías de sitio. La reducción del efecto de deslocalización es tanto mayor cuanto más fuerte el desorden no-diagonal. El desorden no-diagonal puede fortalecerse tanto aumentando la varianza de los elementos de matriz correspondientes cuanto incrementando la anchura de la banda.

c) Se mostró que, si la intensidad del desorden no-diagonal es moderada, cuando las amplitudes aleatorias de salto presentan las mismas correlaciones de largo alcance de las energías de sitio a lo largo de cada subdiagonal, se preserva parcialmente una transición efectiva de localización-deslocalización. Es necesario añadir que, cuando la intensidad del desorden no-diagonal crece demasiado, las correlaciones no impiden que la transición se atenúe hasta perderse. Adicionalmente, se encontró que las correlaciones no solo permiten preservar las ventanas de localización-deslocalización en los modelos de enlace fuerte, sino que también generan un aumento de la banda de energía y un incremento de la extensión de los estados, tanto de la zona de localización como en la región correspondiente a estados extendidos.

d) Se mostró que en todas las variantes de los modelos de enlace fuerte estudiados, con y sin correlaciones y con cualquier número de subdiagonales, se satisface la denominada ley del semicírculo para la distribución del espectro de energías de la matriz banda aleatoria.

6.1. Trabajo a futuro

Dentro del análisis que nos resta por hacer debemos incluir la extensión del estudio numérico mediante la implementación de subrutinas específicas para tratar matrices con estructura de banda, lo cual nos permitirá analizar el comportamiento de los autovalores y autovectores para un sistema de talla mucho mayor a los considerados en el estudio expuesto en esta tesis. Además de extender el estudio del problema de autovalores podemos analizar, también de manera numérica, el comportamiento de la difusión de un paquete de onda y la forma en que se localiza al transcurrir el tiempo, de igual manera con la finalidad de determinar las propiedades de localización y transporte en los diferentes modelos.

En adición a esto, dado que el trabajo realizado en esta tesis se basa únicamente en un estudio numérico y que no existen los resultados teóricos necesarios para explicar con precisión los fenómenos descritos aquí, a continuación surge la necesidad de buscar la manera de estudiar analíticamente los modelos de enlace fuerte antes mencionados, con la finalidad de corroborar la información que hemos presentado. Como destacamos anteriormente esta no parece ser una tarea fácil, sin embargo, hay varios caminos mediante los cuales podemos abordar el problema, por un lado, existe la posibilidad de generalizar el método del mapa hamiltoniano utilizado para el modelo con desorden puramente diagonal, tratando ahora el sistema con interacciones a b vecinos en la red como un conjunto de osciladores paramétricos acoplados y aplicar un estudio similar para determinar las propiedades de localización de los modelos con desorden correlacionado. Otra posibilidad surge del trabajo de Flores descrito en [8] quien ha desarrollado un método para reducir un problema con desorden dentro y fuera de la diagonal a un problema con desorden únicamente en la diagonal principal, y una tercera opción a considerar es el método de Lanczos que establece que cualquier problema de la mecánica cuántica puede reducirse a una cadena semi-infinita representada por una matriz tridiagonal (véase [2] para más detalles), de manera que podemos reducir nuestras matrices multidiagonales a una matriz banda tridiagonal, lo que simplificaría el problema a tratar de manera considerable.

Capítulo 7

Apéndice A

7.0.1. Teoría de Probabilidad

Para desarrollar de manera adecuada las características de la RMT, debemos primero precisar algunas definiciones y conceptos importantes de la teoría de probabilidad, las cuales enunciamos a continuación.

Definición 4: Espacio de probabilidad. Es un espacio Ω (conjunto no vacío con elementos $\omega \in \Omega$, llamados eventos) que tiene asociada una σ -álgebra \mathcal{A} y una medida \mathbf{P} .

Donde \mathcal{A} es un conjunto de subconjuntos de Ω que satisface las siguientes propiedades:

- a) \mathcal{A} es no vacía.
- b) Si $A \in \mathcal{A} \implies A^c \in \mathcal{A}$.
- c) Si $\{A_n\}$ es una sucesión finita o numerable de elementos de \mathcal{A} entonces $\cup_n A_n \in \mathcal{A}$.

Y con \mathbf{P} una función tal que a todo suceso $A \in \mathcal{A}$ le corresponde un número real $\mathbf{P}(A)$, llamado la probabilidad de A , de manera que:

- a) $\forall A \in \mathcal{A} \implies \mathbf{P}(A) \geq 0$.
- b) $\mathbf{P}(\emptyset) = 0$.
- a) Sea $\{A_n\} : \mathbb{N} \longrightarrow \mathcal{A}$ tal que $A_i \cap A_j = \emptyset \forall i, j \implies \mathbf{P}(\cup_n A_n) = \sum_n \mathbf{P}(A_n)$.
- d) $\mathbf{P}(\Omega) = 1$

Definición 5: Variable aleatoria. Considere un espacio de probabilidad $\{\Omega, \mathcal{A}, \mathbf{P}\}$, entonces, una variable aleatoria \mathbf{X} es una función:

$\mathbf{X} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ tal que si $x \in \mathbb{R}$, entonces $\{\omega : \omega \in \Omega, \mathbf{X}(\omega) \leq x\} \in \mathbf{A}$.

Además, decimos que dos Variables aleatorias \mathbf{X} y \mathbf{Y} son independientes si para todo $a < b, c < d \in \mathbb{R}$ se verifica:

$$\mathbf{P}(a < \mathbf{X} \leq b, c < \mathbf{Y} \leq d) = \mathbf{P}(a < \mathbf{X} \leq b)\mathbf{P}(c < \mathbf{Y} \leq d). \quad (7.0.1)$$

Definición 6: Distribución de probabilidad. Una distribución de probabilidad $\rho(x)$ de la variable aleatoria \mathbf{X} está asociada a una distribución acumulativa $P(x)$ de tal manera que:

$$P(x) = \mathbf{P}(\mathbf{X} \leq x) = \int_{-\infty}^x \rho(y)dy. \quad (7.0.2)$$

De esta manera podemos hablar de un conjunto de variables aleatorias independientes idénticamente distribuidas (i.i.d por sus siglas en inglés) como aquellas variables aleatorias independientes con la misma distribución de probabilidad asociada.

Bibliografía

- [1] P. W. ANDERSON, *Phys. Rev.* 109, 1492 (1958)
- [2] GIUSEPPE GROSSO, GIUSEPPE PASTORI PARRAVICINI *Solid State Physics, Second edition*
- [3] CHARLES KITTEL *Introduction to Solid State Physics, Eighth edition*
- [4] NEIL W. ASHCROFT, N. DAVID MERMIN *Solid State Physics, First edition*
- [5] ELEFThERIOS N. ECONOMOU, *Green's Functions in Quantum Physics, third edition*
- [6] PETER MARKOS, COSTAS M. SOUKOULIS, *Wave propagation from electrons to photonic crystals and left-handed materials*
- [7] P. A. LEE, T. V. RAMAKRISHNAN, *Rev. Mod. Phys.* 57, 287 (1985)
- [8] J. C. FLORES, *Transport in models with correlated diagonal and off-diagonal disorder (1989)*
- [9] THOULESS, D. J., *Phys. Rep.* 13, 93 (1974)
- [10] BERNHARD KRAMER, ANGUS MACKINNON *Rep. Prog. Phys.* 56 1469 (1993)
- [11] Y. IMRY, *Introduction to Mesoscopic Physics, Oxford University Press, Oxford (1997)*
- [12] V. I. TATARSKII, *Wave Propagation in a Turbulent Medium, Mc-Graw- Hill, New York (1961)*; L. A. CHERNOV, *Waves Propagation in a Random Medium, Dover, New York (1967)*; YU. A. KRAVTSOV, *Rep. Prog. Phys.*, 39 (1992)
- [13] P. SHENG, *Introduction to Wave Scattering, Localization and Mesoscopic Phenomena, 2nd. ed., Springer Verlag, Berlin (2006)*
- [14] A. ASPECT, M. INGUSCIO, *Phys. Today* 62, 30 (2009); L. SANCHEZ- PALENCIA, M. LEWENSTEIN, *Nature Phys.* 6, 87 (2010); G. MODUGNO, *Rep. Prog. Phys.* 73, 102401 (2010); B. SHAPIRO, *J. Phys. A: Math. Theor.*, 45, 143001 (2012)
- [15] D. S. WIERSMA, P. BARTOLINI, A. LAGENDIJK, R. RIGHINI, *Nature* 390, 671 (1997); M. STÖRZER, P. GROSS, C. M. AEGERTER, G. MARET, *Phys. Rev. Lett.* 96, 063904 (2006); T. SCHWARTZ, G. BARTAL, S. FISHMAN, M. SEGEV, *Nature* 446, 52 (2007)

-
- [16] YAN V. FYODOROV, ALEXANDER D. MIRLIN *Phys. Rev. Lett.*, 69, 7 (1992)
- [17] F. M. IZRAILEV, A. A. KROKHIN, N. M. MAKAROV *Phys. Rep.* 512, 125-254 (2012)
- [18] FELIX M. IZRAILEV, TSAMPIKOS KOTTOS, G. P. TSIRONIS *Phys. Rev.* 52, 5 (1995)
- [19] F. M. IZRAILEV, A. A. KROKHIN *Phys. Rev. Lett.* 82, 20 (1999)
- [20] E. ABRAHAMAS, P. W. ANDERSON, D.C. LICCIARDELLO, T. V. RAMAKRISHNAN *Phys. Rev. Lett.* 42, 10 (1979)
- [21] F. J. WEGNER *Z. Phys.* 25, 327 (1979)
- [22] A. CRISANTI, G. PALADIN, A. VULPIANI *Products of Random Matrices in statistical Physics*
- [23] ORIOL BOHIGAS, MARIE-JOYA GIANNONI *Chaotic motion and random matrix theories*
- [24] THOMAS GUHR, AXEL MÜLLER-GROELING, HANS A. WEIDENMÜLLER *Phys. Rep.* 299, 184-425, (1998)
- [25] MADAN LAL MEHTA *Random matrices, third edition (2004)*
- [26] FRITZ HAAKE, SVEN GNUTZMANN, MAREK KUŚ *Quantum Signatures of Chaos, Fourth Edition*
- [27] R. E. BORLAND *The Nature of the Electronic States in Disordered Systems, (1963)*
- [28] F. M. IZRAILEV *J. Phys. A: Math. Gen.* 22 865, (1989);
- [29] CASATI G, CHIRIKOV B V, FORD J, IZRAILEV F M *Lecture Notes in Physics* 93 334; CHIRIKOV B V, IZRAILEV F M, SHEPELYANSKY D L *Sov. Sci. REv.* 2C 209
- [30] F. M. IZRAILEV *Simple models of quantum chaos: spectrum and eigenfunctions (1990)*
- [31] FRITZ HAAKE, SVEN GNUTZMANN, MAREK KUŚ *Quantum Signatures of Chaos, Fourth Edition*
- [32] SHMUEL FISHMAN, D. R. GREMPER, R. E. PRANGE *Phys. Rev. Lett.* 49, 8 (1982)
- [33] GIULIO CASATI, LUCA MOLINARI, FELIX IZRAILEV *Phys. Rev. Lett.* 64, 16 (1990)
- [34] LUCA MOLINARI; *Band random matrices, kicked rotator and disordered systems*
- [35] ALEXANDER D. MIRLIN, YAN V. FYODOROV, FRANK-MICHAEL DITTES, JAVIER QUEZADA, THOMAS H. SELIGMAN; *Transition from localized to extended eigenstates in the ensemble of power-law random banded matrices (1996)*
-

- [36] ALEXANDER D MIRLIN, YAN V FYODOROV *J. Phys. A: Math. Gen.* 26, L551-L558 (1993)
- [37] T. H- SELIGMAN, J. J. M. VERBARSCHOT, M. R. ZIRNBAUER *Phys. Rev. Lett.* 53, 3 (1994)
- [38] I.C. PERCIVAL *J. Phys.* 6 (1973) L229
- [39] R.A. PULLEN, A.R. EDMONDS *J. Phys. A* 14 (1981) L477
- [40] YAN V. FYODOROV, ALEXANDER D. MIRLIN *Phys. Rev. Lett.* 71, 3 (1993)
- [41] YAN V. FYODOROV, ALEXANDER D. MIRLIN *Scaling Propierties of Localization in Random Band Matrices: A σ -Model approach* (1991)
- [42] FRIEDER KALLSCH, DANIEL BRAAK *Exact density of states for finite Gaussian random matrix ensembles via supersymmetry* (2002)
- [43] YAN V. FYODOROV, ALEXANDER D. MIRLIN *Scaling Properties of Localization in Random Band Matrices: A α -Model Approach* (1991)
- [44] YAN V. FYODOROV, ALEXANDER D. MIRLIN *Physical Review Letter*, 69, 7 (1992)
- [45] WILLIAM H. PRESS, SAUL A. TEUKOLSKY, WILLIAM T. VETTERLING, BRIAN P. FLANNERY *Numerical Recipes in Fortran 77, vol. 2, Second Edition*