

Capítulo 3

Difusión

Un problema elemental en la teoría de probabilidades es el clásico problema de la caminata aleatoria. La solución es la de una ecuación de difusión; en la cual la probabilidad de encontrar nuevamente a la partícula en el sitio inicial (en d dimensiones) es

$$P(t, r = r_0) \sim \frac{1}{(Dt)^{\frac{d}{2}}}. \quad (3.1)$$

Este comportamiento difusivo es de gran importancia en la física, pues aparece en numerosas situaciones. Los ejemplos típicos son la difusión de líquidos (la gota de tinta en el vaso de agua), la difusión del calor, o la difusión asociada a la conductividad eléctrica. Para todos estos casos se han desarrollado aproximaciones semiclásicas que, conteniendo principalmente elementos de la descripción cuántica, apelan a suposiciones sobre la manera en que actúa el ambiente o las componentes del problema que no se pueden resolver (dinámica de muchos cuerpos, colisiones elásticas e inelásticas, etc.). Una de las descripciones más importantes es la ecuación de Boltzmann. La principal aproximación en esta descripción es lo que Boltzmann llamó la *Stosszahlansatz*, y es que después de cada colisión la partícula pierde toda memoria de su evolución anterior. Esto, más la suposición de que existe un tiempo medio entre colisiones (o un camino libre medio) y la inclusión de la Regla de Oro de Fermi como ley para el decaimiento hacia el estado de

equilibrio, lleva a una ecuación que describe exitosamente muchos sistemas en la física actual. Sin embargo, como toda aproximación semiclásica, existen sistemas donde la ecuación falla en describir la dinámica. Generalmente, la falla se debe a la no inclusión de efectos de interferencia cuántica en la descripción. Ejemplos típicos de esto son el efecto Aharonov-Bhomb, o el efecto Hall cuántico.

Como antes, buscaremos un sistema soluble exactamente que muestre, al menos para cierto intervalo, una dinámica aproximable por la difusiva. Para esto necesitaremos revisar conceptos que nos permitan modelar el efecto de impurezas, colisiones y decoherencia.

3.1 Desorden y Localización

Los modelos de materiales idealmente ordenados tienen soluciones relativamente simples. Debido a la simetría translacional, los estados que describen a los objetos cuánticos (electrones, fonones, espines) son del tipo de Bloch. Estos objetos gozan de la propiedad de moverse a lo largo de todo el sistema. En la realidad, estos sistemas ideales no existen. Las imperfecciones típicas tales como impurezas, dislocaciones, vacancias, etc., pueden llegar a pasar desapercibidas dentro del error experimental, siempre y cuando la concentración de las mismas sea pequeña. De todas maneras, las soluciones con simetría traslacional sólo pueden servir como una primera aproximación a la descripción del sistema; aunque la concentración sea pequeña las imperfecciones pueden tener algún tipo de efecto global en el sistema. Sin embargo si la concentración deja de ser pequeña, es necesario abandonar las viejas soluciones y comenzar con un nuevo modelo desde cero.

Existen muchas maneras de introducir cambios simples en la descripción de un material ideal para que representar las imperfecciones. Como ejemplos, se puede perturbar las posiciones de los átomos de una red, se puede cambiar la cantidad de vecinos de cada átomo, disponer átomos de diferentes tipos en posiciones al azar (para aleaciones), se puede alterar los elementos de acople de los átomos de la red, etc. Todos estos reciben el nombre de modelos de desorden, y van acompañados típicamente de una variable W que

mide el *grado* de este desorden. Quizá uno de los modelos más simples es el modelo de desorden de Anderson, en el cual se toma un Hamiltoniano tight binding y se fija la energía de cada sitio de la red al azar en un intervalo $[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}]$. Este modelo, originalmente propuesto para la difusión de espines, ha sido exitosamente aplicado a diferentes áreas de la física, en particular a la que nos interesa aquí que es la de transporte. Es en esta área donde aparece un fenómeno intrínsecamente ondulatorio provocado por el desorden que tiene implicaciones muy importantes: la localización [KM93]. Recordemos de mecánica cuántica elemental las soluciones para un pozo finito de potencial. Para energías mayores a las del límite del pozo, el espectro de energía es continuo y las funciones de onda son ondas planas extendidas en todo el espacio. Sin embargo, para energías menores a la del pozo, el espectro es discreto y las autofunciones decaen exponencialmente más allá de la frontera del pozo. Esto es lo que se interpreta como que la función de onda esta *localizada* en una región del espacio.

Cuando uno tiene un sistema cuántico suficientemente desordenado, se dice que la función de onda está localizada cuando su amplitud decrece exponencialmente con la distancia, y el exponente con el que decrece se define como

$$\gamma = \lim_{|\vec{R}| \rightarrow \infty} -\frac{1}{2|\vec{R}|} \ln \left(\psi^*(\vec{R}) \psi(\vec{R}) \right). \quad (3.2)$$

Pensemos en un sistema unidimensional para definir algunos conceptos. Si tenemos una cadena discreta con una constante a es posible escribir la ecuación de Schrödinger como diferencias finitas

$$\frac{\hbar^2}{2ma^2} [\psi(x+a) - 2\psi(x) + \psi(x-a)] + U(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (3.3)$$

Si llamamos

$$x = na, \quad (3.4)$$

$$u_n = \psi(x), \quad (3.5)$$

$$V = -\frac{\hbar^2}{2ma^2}, \quad (3.6)$$

$$\varepsilon = E - 2V, \text{ y} \quad (3.7)$$

$$E_n = U(x), \quad (3.8)$$

entonces podemos escribir la ecuación de Schrödinger como

$$-Vu_{n+1} + E_n u_n - Vu_{n-1} = \varepsilon u_n. \quad (3.9)$$

Resolviendo para u_{n+1} encontramos una ecuación de recurrencia

$$u_{n+1} = -\frac{\varepsilon - E_n}{V} u_n - u_{n-1}, \quad (3.10)$$

que puede escribirse matricialmente como

$$\begin{pmatrix} u_{n+1} \\ u_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\varepsilon - E_n}{V} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_n \\ u_{n-1} \end{pmatrix} = \mathbf{P}_n \begin{pmatrix} u_n \\ u_{n-1} \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

\mathbf{P}_n es la llamada *matriz de promoción a través del sitio n* . Así podemos escribir

$$\begin{pmatrix} u_{n+1} \\ u_n \end{pmatrix} = \mathbf{P}_n \mathbf{P}_{n-1} \mathbf{P}_{n-2} \cdots \mathbf{P}_2 \mathbf{P}_1 \begin{pmatrix} u_1 \\ u_0 \end{pmatrix} = \mathbf{P}_L \begin{pmatrix} u_1 \\ u_0 \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

De esta manera podemos poner una condición inicial en los sitios 0 y 1 y mediante las matrices de promoción ver cual es la amplitud a cualquier distancia arbitraria. Para un sistema de largo L con estas condiciones iniciales definimos la función de Green desde el sitio 1 al sitio L como

$$G_{1L}(\varepsilon) = (\mathbf{P}_L)_{11}^{-1} = \sum_{\alpha} \frac{u_L^*(\varepsilon_{\alpha}) u_1(\varepsilon_{\alpha})}{\varepsilon - \varepsilon_{\alpha}}. \quad (3.13)$$

donde con α se numeran los autoestados. Si la amplitud de estos decae con la distancia

exponencialmente,

$$u_L(\varepsilon_\alpha) \sim e^{-\frac{L-L_\alpha}{\xi_\alpha}}; \quad u_1(\varepsilon_\alpha) = e^{-\frac{L_\alpha}{\xi_\alpha}}, \quad (3.14)$$

con lo que

$$G_{1L}(\varepsilon) \sim e^{-\frac{L}{\xi}}, \quad (3.15)$$

con el menor exponente ξ para el estado α tal que $\varepsilon \approx \varepsilon_\alpha$. Se llama a ξ la longitud de localización del sistema. Si suponemos que el sistema es ordenado ($E_n = E_0 \forall n$), y buscamos los autovalores de $(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{P})$,

$$\lambda^\pm = e^{\pm\gamma} = \frac{1}{2V} \left[(\varepsilon - E_0) \pm \sqrt{(\varepsilon - E_0)^2 - 4V^2} \right]. \quad (3.16)$$

Si $|\varepsilon - E_0| > 2|V|$ (banda de estados permitidos) γ es complejo, en el caso contrario es real. Notemos que la matriz \mathbf{P} es simpléctica, es decir $\det \mathbf{P} = \lambda^+ \lambda^- = 1$. Los autovectores son

$$u^+ = \frac{1}{\sqrt{2 \sinh \gamma}} \begin{pmatrix} e^{\frac{\gamma}{2}} \\ e^{-\frac{\gamma}{2}} \end{pmatrix} \quad u^- = \frac{1}{\sqrt{2 \sinh \gamma}} \begin{pmatrix} e^{-\frac{\gamma}{2}} \\ e^{\frac{\gamma}{2}} \end{pmatrix}. \quad (3.17)$$

Podemos entonces encontrar el exponente de localización como (para una condición inicial general)

$$\gamma = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{2L} \ln \left\| (\mathbf{P}_L \mathbf{P}_{L-1} \cdots \mathbf{P}_1)^+ (\mathbf{P}_L \mathbf{P}_{L-1} \cdots \mathbf{P}_1) \right\|, \quad (3.18)$$

$$= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{2L} \ln \left\| \mathbf{S} \prod_{i=1}^L \begin{pmatrix} e^{2\gamma} & 0 \\ 0 & e^{-2\gamma} \end{pmatrix} \mathbf{S}^{-1} \right\|, \quad (3.19)$$

$$= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{2L} \ln \left\| \mathbf{S} \begin{pmatrix} e^{2L\gamma} & 0 \\ 0 & e^{-2L\gamma} \end{pmatrix} \mathbf{S}^{-1} \right\|. \quad (3.20)$$

donde \mathbf{S} es la matriz que diagonaliza a \mathbf{P} . Esto es válido para cualquier condición inicial excepto un conjunto de medida nula que son los autovectores del sistema. Alternativa-

mente, si elegimos un estado inicial cualquiera $u^i = au_0 + u_1b$, el estado u_L será

$$u_L \simeq e^{\eta L} \langle u^+ | u^i \rangle + e^{-\eta L} \langle u^- | u^i \rangle, \quad (3.21)$$

por lo que podemos definir

$$\gamma = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{2L} \ln \|u_L^2 + u_{L-1}^2\|, \quad (3.22)$$

siendo esta última la definición más práctica para efectuar cálculos numéricos. γ es llamado también *exponente de Lyapunov*, y se relaciona con la longitud de localización ξ del sistema como

$$\xi = \frac{a}{\gamma}. \quad (3.23)$$

Encontramos que la matriz de promoción se hace exponencialmente grande con el tamaño del sistema. Esto está directamente relacionado por (3.13) con que la función de Green sea exponencialmente chica, y esto es lo que indica la presencia de estados exponencialmente localizados. Gracias a la relación entre la función de Green y la matriz de promoción es posible definir también la longitud de localización como

$$\frac{1}{\xi} = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{2L} \ln |G_{1L}(\varepsilon)|^2. \quad (3.24)$$

La longitud de localización también se puede estudiar mediante propiedades espectrales del sistema,

$$\frac{1}{\xi}(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{+\infty} N_0(E) \ln |\varepsilon - E| dE, \quad (3.25)$$

con $N_0(E)$ la densidad de estados para la energía E .

El método de la matriz de promoción es fácilmente escalable a sistemas cuasi unidimensionales (por ejemplo, un sistema de tamaño $L_2 \times L_3 \times L$, con $L \gg L_{2,3}$, hablamos

de *capas* de tamaño $L_2 \times L_3$). La matriz de promoción entre capas pasa a ser

$$\mathbf{P}_L = \begin{pmatrix} (\varepsilon \mathbf{I} - \mathbf{E}_L) \mathbf{V}^{-1} & -\mathbf{I} \\ \mathbf{I} & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.26)$$

donde ahora \mathbf{E}_L es una matriz de tamaño $M \times M$ que contiene las autoenergías y los elementos de acople de los sitios de la capa L , y \mathbf{V} es otra matriz que contiene los elementos de transición de una capa a la siguiente. Estos sistemas son útiles porque se los puede pensar de manera tal que un autoestado de una capa se mezcla solamente con el mismo autoestado de la capa siguiente, lo que da como resultado un sistema con M^2 cadenas lineales independientes, llamadas *canales*.

Si ahora volvemos incluir desorden en la autoenergías de cada sitio, el producto de matrices transferencia cumple con el teorema de Oseledec [Ose68], que afirma que existe una matriz asintótica

$$\mathbf{\Gamma} = \lim_{L \rightarrow \infty} (\mathbf{P}_L \mathbf{P}_L)^{\frac{1}{2L}} \quad (3.27)$$

con autovalores $e^{\gamma_M}, e^{\gamma_{M-1}}, \dots, e^{\gamma_1}, e^{\gamma_{-1}}, \dots, e^{\gamma_{-M}}$ (con $\gamma_j = -\gamma_{-j}$). Estos $2M$ autovalores, dos por cada canal (o sea, modo transversal de la capa), son los exponentes característicos de Lyapunov para el sistema, y el menor de ellos es la inversa de la longitud de localización.

Para el cálculo numérico de la longitud de localización en un sistema de varios canales, hay que sortear la dificultad de encontrar el menor exponente de Lyapunov cuando la matriz transferencia diverge como el mayor de ellos. La manera de lograrlo es tomar las $2M$ condiciones iniciales en los vectores

$$\begin{aligned} |\Lambda^k\rangle &= (u_1^k, u_2^k, \dots, u_M^k, u_{M+1}^k, \dots, u_{2M}^k), \\ k &= M, M-1, \dots, 1, -1, -2, \dots, -M. \end{aligned} \quad (3.28)$$

y aplicar la matriz promoción a ellas. Para cada nueva iteración nuevos vectores $|\Lambda^k\rangle$ son obtenidos. Para obtener la base ortogonal correspondiente a los autovalores con los

exponentes de Lyapunov, el algoritmo requiere de vez en cuando una redefinición de los vectores

$$|\Lambda^k\rangle \leftarrow |\Lambda^k\rangle - \sum_{j < k} \frac{\langle \Lambda^j | \Lambda^k \rangle}{\langle \Lambda^j | \Lambda^j \rangle} |\Lambda^j\rangle, \quad (3.29)$$

que es sacar del vector k la componente de todos los vectores correspondientes a los exponentes de Lyapunov más grandes que γ_k . Después de la L -ésima operación los vectores $|\Lambda_{(L)}^k\rangle$ se aproximarán a los autoestados del teorema de Oseledec y cada exponente de Lyapunov es

$$\gamma_k = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{-1}{2L} \ln \langle \Lambda_{(L)}^k | \Lambda_{(L)}^k \rangle, \quad (3.30)$$

el mínimo exponente asociado con la longitud de localización es el que corresponde a $k = 1$.

3.2 Camino Libre Medio

Clásicamente se define el camino libre medio ℓ como la distancia promedio en la cual una partícula tiene una colisión con una impureza. La ecuación de difusión relaciona el camino libre medio según

$$\ell^2 = 2D\tau, \quad (3.31)$$

donde τ es el tiempo medio entre colisiones y D es la constante de difusión del sistema. La visión clásica de este fenómeno puede ser extendida a la cuántica como aquella distancia en la cual la función de onda ha sufrido colisiones que le han hecho perder la coherencia de fase.

Se puede realizar una conexión entre el camino libre medio y la longitud de localización para sistemas cuasi-unidimensionales a través de la conductividad de los mismos. Esta deducción es debida a Thouless [Tho77]. Supongamos un alambre de largo L mucho mayor a su sección A . A temperaturas lo suficientemente bajas como para disminuir el efecto de decoherencia debido a los fonones, la longitud de localización ξ será el largo del sistema L_c para el cual la resistencia unidimensional (h/e^2) sea del orden 1. La

conductividad estándar para un gas de electrones

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}, \quad (3.32)$$

con n la cantidad de electrones por unidad de volúmen hasta la energía de Fermi, τ el tiempo medio entre colisiones y m la masa del electrón. Reemplazamos $m = \frac{\hbar k_F}{v_F}$, con k_F el número de onda de un electrón en la superficie de Fermi y la velocidad de Fermi $v_F\tau = \ell$,

$$\sigma = \frac{e^2}{\hbar} \frac{n\ell}{k_F}. \quad (3.33)$$

Tomando la cantidad de electrones (sin contar la degeneración de spin)

$$n = \frac{k_F^3}{6\pi^2}, \quad (3.34)$$

e igualando ahora

$$\frac{e^2}{\hbar} = \sigma \frac{A}{L} = \frac{e^2}{\hbar} \frac{n\ell A}{k_F L} = \frac{e^2}{\hbar} \frac{k_F^2}{6\pi^2} \frac{\ell A}{L} \quad (3.35)$$

y despejando para L obtenemos

$$\xi = L = \frac{\pi}{3} \left(\frac{k_F^2}{\pi^2} A \right) \ell. \quad (3.36)$$

La parte que está entre paréntesis puede interpretarse como la cantidad de canales habilitados M_a del sistema, ya que es la cantidad de medias ondas que entran en la sección del alambre

$$M_a = \frac{A}{\left(\frac{\lambda}{2}\right)^2} = \frac{k_F^2}{\pi^2} A. \quad (3.37)$$

Esta relación de proporcionalidad, $\xi \sim M_a \ell$, ha sido encontrada también mediante la teoría de modelos σ no-lineales ([PZIS90], [EL83], [Dor83]). Es interesante notar la arbitrariedad del coeficiente en esta relación. Para la cuenta realizada más arriba en tres dimensiones, este factor es $\pi/3$, si la hubieramos hecho para dos dimensiones el factor sería $\pi/2$. Más aún, el requerimiento de que la resistencia sea del orden de la unidad es

también arbitrario. Mediante argumentos físicos es posible requerir que la resistencia sea del orden $1/2$, con lo que los factores se duplican. Todo esto enfatiza la necesidad de una búsqueda numérica del factor.

Podemos calcular el camino libre medio de electrones en un sistema unidimensional semiclásicamente mediante la regla de Oro de Fermi. Definiendo el camino libre medio como

$$\ell = \tau v_F \quad (3.38)$$

con τ el tiempo medio entre colisiones y v_F la velocidad de Fermi de los electrones. Para el sistema unidimensional v_F se puede escribir como

$$v_F = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k} = \frac{2a}{\hbar} \sqrt{V^2 - \left(\frac{\varepsilon - E_0}{2} \right)^2}. \quad (3.39)$$

El tiempo medio τ se puede aproximar mediante la ROF. Supongamos un potencial desordenado suficientemente débil como para que los estados de los electrones puedan ser los estados de Bloch

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{ikna} |n\rangle. \quad (3.40)$$

Calculemos entonces el tiempo de decaimiento para un estado k ,

$$\frac{1}{\tau_k} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{k'} |\langle k' | U | k \rangle|^2 \delta(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k). \quad (3.41)$$

Reemplazando con 3.40 vemos que

$$\langle k' | U | k \rangle = \frac{1}{N} \sum_n \sum_{n'} e^{i(kn - k'n')} E_n \delta_{n,n'} = \sum_n e^{i(k - k')n} E_n. \quad (3.42)$$

Con esto

$$\frac{1}{\tau_k} = \frac{2\pi}{\hbar N^2} \sum_{k'} \sum_n \sum_{n'} e^{-i(k - k')n} E_n e^{i(k - k')n'} E_{n'} \delta(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k). \quad (3.43)$$

Siendo E_n energías desordenadas no correlacionadas de esta doble suma sólo quedan los

términos $n = n'$, con lo que

$$\begin{aligned}\frac{1}{\tau_k} &= \frac{2\pi}{\hbar N^2} \sum_{k'} \sum_n E_n^2 \delta(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar N} \sum_{k'} \langle E_n^2 \rangle \delta(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k).\end{aligned}\tag{3.44}$$

Esta suma en k puede ser pasada a una integral en energía, por lo que queda la densidad de estados finales posibles luego de una colisión. Al ser el sistema unidimensional esta densidad de estados finales posibles es la mitad de la densidad de estados totales (porque se supone dispersión hacia atrás). Con esto queda

$$\frac{1}{\tau_k} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{N_0}{2} \langle E^2 \rangle.\tag{3.45a}$$

Suponiendo que el potencial $U(x)$ es un desorden del tipo de Anderson entre $[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}]$, pasamos el promedio en energía a una integral sobre la distribución de probabilidad

$$\langle E^2 \rangle = \frac{1}{W} \int_{-\frac{W}{2}}^{\frac{W}{2}} s^2 ds = \frac{W^2}{12},\tag{3.46}$$

con lo que

$$\frac{1}{\tau_k} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{N_0}{2} \frac{W^2}{12}.\tag{3.47}$$

Solo resta calcular la densidad de estados $N_0(\varepsilon)$. Si el sistema es una cadena unidimensional, la función de Green nos dice que

$$N_0(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi \sqrt{V^2 - \left(\frac{\varepsilon - E_0}{2}\right)^2}}.\tag{3.48}$$

Recordamos que el tiempo que predice la ROF es la constante de decaimiento del cuadrado de la función de onda, no la amplitud. Como nos interesa definir el camino libre medio como la constante de decaimiento de la función de onda de un electrón, debemos

tomar *el doble* del tiempo de (3.45a). Poniendo todo esto en (3.38), obtenemos

$$\ell = a \frac{24 \left(4V^2 - \left(\frac{\varepsilon - E_0}{2} \right)^2 \right)}{W^2}. \quad (3.49)$$

Este resultado es idéntico al obtenido para la longitud de localización para un sistema unidimensional en [TTB] y [Tho73]. Partiendo de la ecuación (3.25) e integrando se pasa a

$$\frac{1}{\xi(\varepsilon)} = -\frac{1}{L} \operatorname{Re} \int_0^L dx \int_E^\infty (G(x, x, E) - G^0(x, x, E)). \quad (3.50)$$

Esta ecuación se puede expandir perturbativamente como vimos de la ecuación de Dyson,

$$\begin{aligned} \frac{1}{\xi(\varepsilon)} = & -\frac{1}{L} \operatorname{Re} \int_0^L dx \int_0^L dx_1 \int_E^\infty G^0(x, x_1, E) V_1(x_1) G^0(x_1, x, E) dE \\ & -\frac{1}{L} \operatorname{Re} \int_0^L dx \int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 \int_E^\infty G^0(x, x_1, E) V_1(x_1) G^0(x_1, x_2, E) \times \\ & V_1(x_2) G^0(x_2, x, E) dE. \end{aligned} \quad (3.51)$$

Si escribimos la función de Green como (3.13) y utilizando que las autofunciones son ortogonales es fácil demostrar que

$$\frac{\partial G^0(x, x, E)}{\partial E} = - \int_0^L G^0(x, x_1, E) G^0(x_1, x, E) dx_1. \quad (3.52)$$

Aplicando esto a (3.51) se llega a

$$\begin{aligned} \frac{1}{\xi(\varepsilon)} = & -\frac{1}{L} \operatorname{Re} \int_0^L dx_1 G^0(x_1, x_1, E) V_1(x_1) \\ & -\frac{1}{2L} \operatorname{Re} \int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 \int_E^\infty G^0(x_2, x_1, E) V_1(x_1) G^0(x_1, x_2, E) \times \\ & V_1(x_2) G^0(x_2, x_1, E) \dots \end{aligned} \quad (3.53)$$

Una manera de escribir la función de Green para los estados de Bloch de un sistema

es

$$G^0(x_1, x_2, E) = \frac{m}{i\hbar^2} \frac{\psi(x_1)\psi^*(x_2)}{\text{Im}(\psi'(x_1)\psi^*(x_2))}, \quad (3.54)$$

donde la velocidad de la partícula es $v = (\hbar/m) \text{Im}(\psi'(x_1)\psi^*(x_2))$. Reemplazando con esto en (3.53) llegamos a

$$\frac{1}{\xi(\varepsilon)} = \frac{m^2}{2\hbar^2 [\text{Im}(\psi'(x_1)\psi^*(x_2))]^2 L} \left| \int_0^L dx_1 \psi^*(x_1) V_1(x_1) \psi(x_1) \right|^2. \quad (3.55)$$

Como la densidad de estados del sistema es $L/2\pi\hbar v$, tenemos en la expresión la velocidad multiplicada por una expresión que es idéntica a la de la Regla de Oro de Fermi, es un tiempo de decaimiento del estado ψ a ψ^* (choque con salida hacia atrás). Con esto

$$\xi(\varepsilon) = 2v\tau. \quad (3.56)$$

Calculando estas cantidades como antes se llega a la igualdad del camino libre medio (3.49) con la longitud de localización. Con esta fórmula $\xi(0) = \frac{96V^2}{W^2}$. Resultados numéricos ([CKM81], [Pic86]) encuentran que

$$\xi(0) = \frac{105V^2}{W^2} \quad (3.57)$$

, esta diferencia es debida a anomalías en el centro de la banda ([KW81], [DG84], [Lam84]).

Mediante la Regla de Oro de Fermi se puede definir la función de Green para un estado k de un sistema desordenado [AGD63]

$$\langle G_{kk}(\varepsilon) \rangle \simeq \frac{1}{\varepsilon - E_k + i/2\tau_k} \quad (3.58)$$

donde $\langle \rangle$ significa promedio sobre ensemble. Con la transformada de Fourier de esta función es posible calcular la función de Green media para una muestra de tamaño L ,

$$\langle G(1, L) \rangle = \int \frac{dk}{2\pi} \langle G_{kk}(\varepsilon) \rangle e^{-ikL} = G^0(1, L) e^{-\frac{L}{2\ell}}, \quad (3.59)$$

con G^0 la función de Green para el sistema ordenado. Esta ecuación quiere decir que el promedio sobre ensemble de la función de Green en un sistema desordenado de largo L es igual a la función de Green del sistema ordenado atenuado por una exponencial con el camino libre medio como longitud característica. Si uno piensa en la función de Green como propagador, con un modo del sistema ordenado que entra en la muestra por la izquierda, la amplitud de probabilidad de que salga el mismo modo por la derecha esta atenuada exponencialmente con el camino libre medio; que en este caso sería la distancia típica que recorre el modo entrante antes de sufrir una colisión que lo lleve a otro modo (canal) y está asociada a un tiempo de vida medio entre cada colisión..

Veamos ahora como es posible evaluar la función de Green numéricamente. Pensemos en un sistema desordenado de largo L con M canales (o sitios por capa). Este sistema representa una muestra en la cual vamos a realizar mediciones. Lo que queremos calcular es la función de Green exacta para la muestra, y esto es posible gracias a una *decimación* [LPD90] de es básicamente reemplazar todos las capas intermedias del sistema por un Hamiltoniano efectivo entre dos capas. Para ejemplificar esto, supongamos primero un sistema de tres sitios con energías E_1 , E_2 y E_3 respectivamente. Escribiendo la ecuación de Schrödinger matricial $(\varepsilon \mathbf{I} - \mathbf{H})\mathbf{u} = 0$ como un conjunto de ecuaciones,

$$(\varepsilon - E_1)u_1 - V_{12}u_2 = 0 \quad (3.60)$$

$$-V_{21}u_1 + (\varepsilon - E_2)u_2 - V_{23}u_3 = 0 \quad (3.61)$$

$$-V_{32}u_2 + (\varepsilon - E_3)u_3 = 0. \quad (3.62)$$

Despejando u_2 de 3.61 y sustituyendo en 3.60 y 3.62, llegamos a un sistema efectivo de dos sitios

$$(\varepsilon - E_1 - \Delta_1)u_1 - \bar{V}_{13}u_3 = 0 \quad (3.63)$$

$$\bar{V}_{31}u_1 - (\varepsilon - E_3 - \Delta_3)u_3 = 0, \quad (3.64)$$

con

$$\Delta_1 = V_{12} \frac{1}{\varepsilon - E_2} V_{21} \quad (3.65)$$

$$\Delta_3 = V_{32} \frac{1}{\varepsilon - E_2} V_{23} \quad (3.66)$$

$$\bar{V}_{13} = V_{12} \frac{1}{\varepsilon - E_2} V_{23}. \quad (3.67)$$

De aquí es fácil imaginar que aplicando recursivamente esta fórmula se puede *decimar* sistemas de considerable tamaño y complejidad, llevándolos a dos sitios con energías y acoples efectivos que representan todo lo que había en el medio. También es simple efectuar decimaciones para sistemas cuasi-unidimensionales, reemplazando las constantes por las matrices correspondientes.

Una vez realizado el esquema de decimación para toda la muestra es necesario calcular la función de Green de este sistema para cada canal o modo transversal existente en el mismo. Esto se logra conectando los extremos de la muestra a *alambres* infinitos y ordenados. El sistema completo quedaría como un sistema ordenado para las capas menores a 0 y mayores a L , con la muestra en el centro. Estos *alambres* son el contacto con reservorios que absorben o emiten los electrones necesarios para que ocurra el transporte en el estado estacionario del sistema. Como calculamos en el capítulo anterior, estos alambres tienen una energía con un aparte real $\Delta_{L,R}$ y una imaginaria $\Gamma_{L,R}$ (L y R representan el lead izquierdo y el derecho respectivamente). Estas últimas tienen que ver con la velocidad a la que los estados escapan del sistema (Regla de Oro de Fermi).

En el proceso de decimación conectar los alambres a la muestra implica corregir con la energía $\Sigma = \Delta - i\Gamma$ la autonenergía del primer y ultimo sitios. Numéricamente, los alambres tienen la ventaja de que al ser ordenados, es posible calcular analíticamente los modos transversales para cada capa, y por lo tanto es posible calcular (haciendo los cambios de base correspondientes) la corrección a la energía de cada sitio de los bordes de

la muestra. Con el Hamiltoniano efectivo completo (incluyendo la decimación de todo el sistema desordenado más la corrección a la energía por los alambres), es posible el cálculo de la función de Green completa mediante la inversión de una matriz de tamaño $2M \times 2M$ (con M la cantidad de canales).

En la teoría de la conductividad de Landauer [Lan70], esta es proporcional a la transmitancia total T del sistema calculada cuánticamente. La función de Green es de gran importancia porque se puede demostrar que [Pas92]

$$T(\varepsilon) = \text{Tr} \left(2\mathbf{\Gamma}_L(\varepsilon) \mathbf{G}_{LR}(\varepsilon) 2\mathbf{\Gamma}_R(\varepsilon) \mathbf{G}_{RL}^+(\varepsilon) \right) \quad (3.68)$$

donde ε es la energía de Fermi en el sistema. Efectuando los cambios de base correspondientes se puede calcular la transmitancia de un canal hasta el otro lado de la muestra como

$$T_k(\varepsilon) = \sum_{k'=1}^M 2\Gamma_k(\varepsilon) |G_{kk'}(\varepsilon)|^2 2\Gamma_{k'}(\varepsilon) \quad (3.69)$$

Numéricamente, se calculó un promedio sobre realizaciones de desorden para la función de Green mediante el método recientemente explicado. Se efectuó el cálculo de la constante de atenuación de (3.59) para cada canal k , que llamaremos $\ell_o^k(\varepsilon)$, mediante

$$\ell_o^k(\varepsilon) = -\frac{L}{2 \ln \frac{|\langle G_{kk}(\varepsilon) \rangle|}{|G_{kk}^0(\varepsilon)|}}, \quad (3.70)$$

Con estos definimos un promedio $\ell_o(\varepsilon)$ sobre los canales *abiertos* para esa energía¹

$$\ell_o(\varepsilon) = \sum_{k=1}^{M_a} \frac{1}{M_a(\varepsilon)} \ell_o^k(\varepsilon). \quad (3.71)$$

Con $M_a(\varepsilon)$ la cantidad de canales abiertos a esa energía. Esta constante resulta distinta del camino libre medio $\ell(\varepsilon)$ del sistema porque para pocos canales [Tho77] $\xi(\varepsilon) \sim$

¹Con abierto queremos decir que esa energía cumple $E_k - 2V < \varepsilon < E_k + 2V$, o sea que la localización es mínima y, si el sistema es ordenado, los autoestados serían extendidos.

$M_a(\varepsilon)\ell(\varepsilon)$, y entonces la longitud de localización puede ser del orden del camino libre medio. Lo que estamos afirmando es que la función de Green cumple

$$\langle G(0, L) \rangle = G^0(0, L) e^{-\frac{L}{\varepsilon}} e^{-\frac{L}{2\ell}}, \quad (3.72)$$

o sea que la atenuación exponencial de la función de Green puede ser aproximada con descripciones semiclásicas como la Regla de Oro de Fermi (camino libre medio ℓ), pero no predice efectos de interferencia cuántica como la localización ξ de la función de onda. La longitud ℓ_o (camino libre medio observado numéricamente) es tal que

$$\langle G(0, L) \rangle = G^0(0, L) e^{-\frac{L}{2\ell_o}}, \quad (3.73)$$

y

$$\ell_o^{-1} = \ell^{-1} + \frac{1}{2}\xi^{-1}. \quad (3.74)$$

Para encontrar el camino libre medio predicho por la Regla de Oro de Fermi basta con reemplazar la longitud de localización para obtener

$$\ell(\varepsilon) = \frac{M_a + 1}{M_a} \ell_o(\varepsilon) = \frac{M_a + 1}{M_a^2} \sum_{k=1}^{M_a} \ell_o^k(\varepsilon). \quad (3.75)$$

Tenemos ahora todas las herramientas para buscar un Hamiltoniano modelo que muestre comportamiento difusivo. Es necesario un análisis conjunto de todas las variables.

3.3 Busqueda del modelo

Sabemos, gracias a todos los estudios presentados previamente, que un posible modelo para las colisiones con impurezas es el modelo de Hamiltoniano tight binding con desorden en las energías de sitio. Pero vimos anteriormente que este desorden tiene un efecto que no existe en la teoría clásica de partículas colisionando: la localización. Este efecto es exclusivamente un efecto de la interferencia de las ondas con que se describe a las

partículas en mecánica cuántica.

Nuestro objetivo es claro: debemos encontrar un sistema en donde el efecto de localización no empañe la dinámica provocada por las impurezas (desorden) en el sistema, y a la vez que no confine a las funciones de onda a tamaños menores que los del sistema.

Cuantitativamente, estos límites se pueden escribir como

$$\ell \ll L \ll \xi. \quad (3.76)$$

Podemos clasificar en cuatro los regímenes de transporte para sistemas con desorden de Anderson en orden de desorden decreciente:

- Régimen fuertemente localizado: Este es cuando la longitud de localización es menor al tamaño del sistema ($\xi < L$);
- Régimen difusivo: Cuando la longitud de localización es más grande que L pero el camino libre medio ℓ es menor a L ($\ell < L < \xi$);
- Régimen balístico: Cuando el camino libre medio ℓ es mayor a L , y la mezcla de los estados por el desorden es mayor al espaciado medio de niveles ($1 < \frac{\ell}{L} < p_F L$, con p_F el momento de Fermi); y
- Límite limpio: Cuando la perturbación a la energía de cada estado es menor a la separación media de niveles Δ ($\frac{\ell}{L} > p_F L$).

El segundo régimen, el difusivo, deja de lado inmediatamente a los sistemas estrictamente unidimensionales, en los que $\ell = \xi$. Debemos pasar a sistemas cuasi-unidimensionales. El Hamiltoniano básico que proponemos es un Hamiltoniano tight binding a primeros vecinos de capas de M sitios[CPUM98]

$$H = \sum_{n=1}^L \mathbf{E}_n |n\rangle \langle n| + \mathbf{V}_{n,n+1} |n\rangle \langle n+1| + \mathbf{V}_{n+1,n} |n+1\rangle \langle n|, \quad (3.77)$$

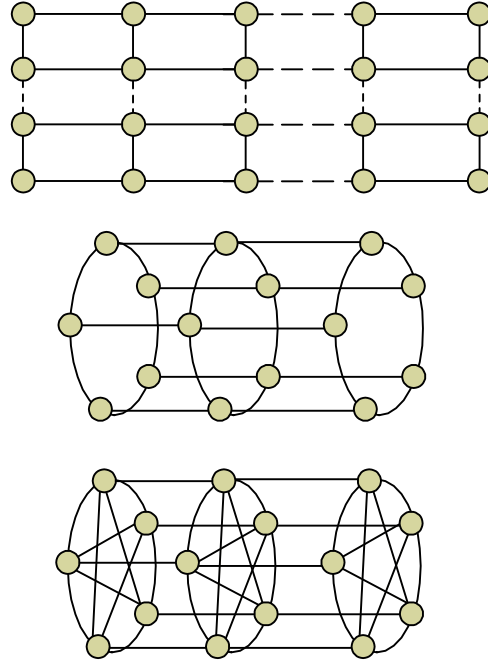


Figura 3-1: De arriba hacia abajo, esquemas de los tres modelos hamiltonianos utilizados: cinta, Cilindro y Estrella

donde $|n\rangle$ es un vector de dimensión M y \mathbf{E}, \mathbf{V} son matrices de dimensión $M \times M$. $|n\rangle$ representa el estado localizado en la capa n .

Las tres variantes estudiadas están representados en la figura 3-1.

En todas estas variantes se tomó $\mathbf{V}_{n,n+1} = \mathbf{V}_{n+1,n} = \mathbf{V}\mathbf{I}$, con condiciones de contorno periódicas en el largo. La primera variante es una red cuadrada de ancho L_2 y largo L , a la que llamaremos **cinta**. El segundo, es la misma cinta pero con condiciones periódicas de contorno en el ancho. Lo llamaremos **cilindro**. El último (y novedoso) es un sistema de largo L y donde cada capa tiene L_2 sitios que están acoplados todos con todos entre si con una constante de acople $\frac{1}{\sqrt{L_2}}$. A este sistema lo llamaremos **estrella**. Las autoenergías de los sitios en todos los modelos se tomaron de una distribución cuadrada de ancho $[-W/2, W/2]$. Las propiedades se harán evidentes cuando efectuemos un análisis espectral de los tres sistemas.

Nótese que en todos los casos la cantidad de canales M es igual a la cantidad de sitios

en cada capa L_2 , por lo que usaremos indistintamente las dos cantidades.

3.3.1 Propiedades espectrales

Es interesante el estudio del espectro de los sistemas propuestos para un entendimiento acabado de cada uno de ellos. Primeramente veremos la densidad de estados de los sistemas y su relación con los canales (modos transversales), luego un pequeño estudio sobre la distribución de diferencias de energía entre niveles consecutivos.

Para calcular las autoenergías en un sistema ordenado se puede utilizar la fórmula de Bloch

$$E_k = E_0 - \sum_{j \neq n} V_{nj} e^{i(n-j)ka}, \text{ con } k = \frac{\pi s}{a(N+1)}, \text{ y } s = 1, 2, \dots, N. \quad (3.78)$$

En el sistema de la cinta y en el cilindro las energías son

$$E_k = E_0 - 2V \cos ka \quad (3.79)$$

resultado típico de la aproximación tight binding a primeros vecinos. Aplicando esto a cada capa con L_2 sitios resulta que las energías de cada modo transversal se encuentran separadas. Cada modo transversal da lugar a diferentes canales unidimensionales de conducción, y la energía de cada uno de esos canales estará centrada en la energía del modo transversal correspondiente. La energía de cada estado k para el canal α será

$$E_{\alpha k} = E_\alpha - 2V_z \cos ka \quad (3.80)$$

$$= E_0 - 2V_{xy} \cos na - 2V \cos ka, \quad (3.81)$$

con

$$\alpha = \frac{\pi l}{a(M+1)}, \text{ y } l = 1, 2, \dots, M$$

para la cinta y

$$n = \frac{2\pi l}{aM}, \text{ y } l = 0, 1, 2, \dots, M-1$$

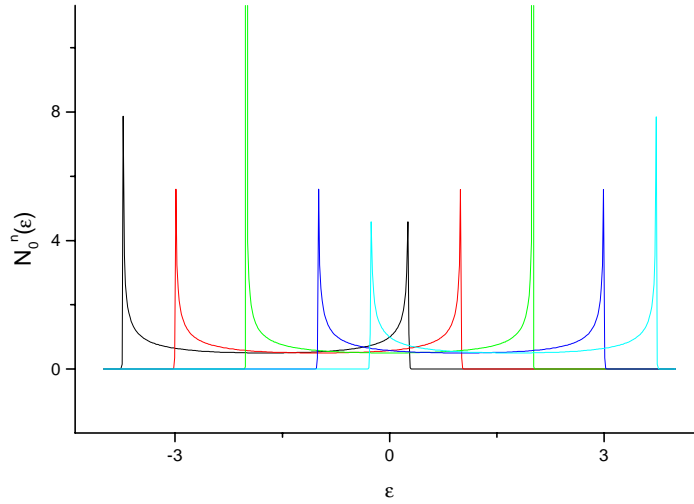


Figura 3-2: Densidad de estados por canal para una cinta con $M = 5$. Se puede apreciar que la forma general es una densidad de estados para una cadena unidimensional en cada una de las cinco energías de los modos transversales de la cinta. Cada color representa un canal diferente. La densidad de estados total será la suma de las individuales.

para el cilindro (esto es por las diferentes condiciones de contorno). La densidad de estados será típicamente lo que se puede observar en la figura 3-2.

Como la conducción a través de una cadena unidimensional sólo se puede dar cuando la energía está dentro de la banda de estados extendidos, llamaremos a cada canal como *abierto* o *habilitado* cuando la energía se encuentre en la zona de conducción de cada canal. Esto nos hace observar que tanto en la cinta como en el cilindro sólo en una pequeña parte del espectro se encuentran todos los canales habilitados (cerca del centro de la banda), y en el resto sólo una parte de ellos. Esto tiene consecuencias importantes en el estudio de la conductividad de estos sistemas; en el caso ordenado por ejemplo la conductividad es una función constante de a trozos. En cada parte su valor es el número de canales habilitados por la unidad de conductividad e^2/h (figura 3-3, calculada mediante métodos que se explicarán en el próximo capítulo y en [DP90]).

La total conectividad de cada capa en el modelo de la estrella tiene un efecto drástico

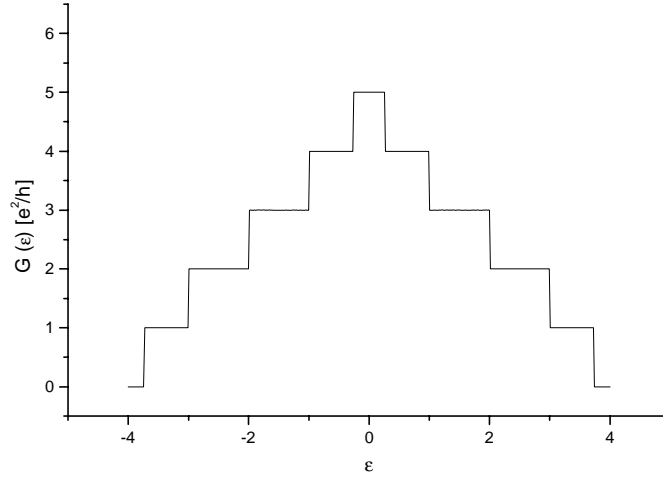
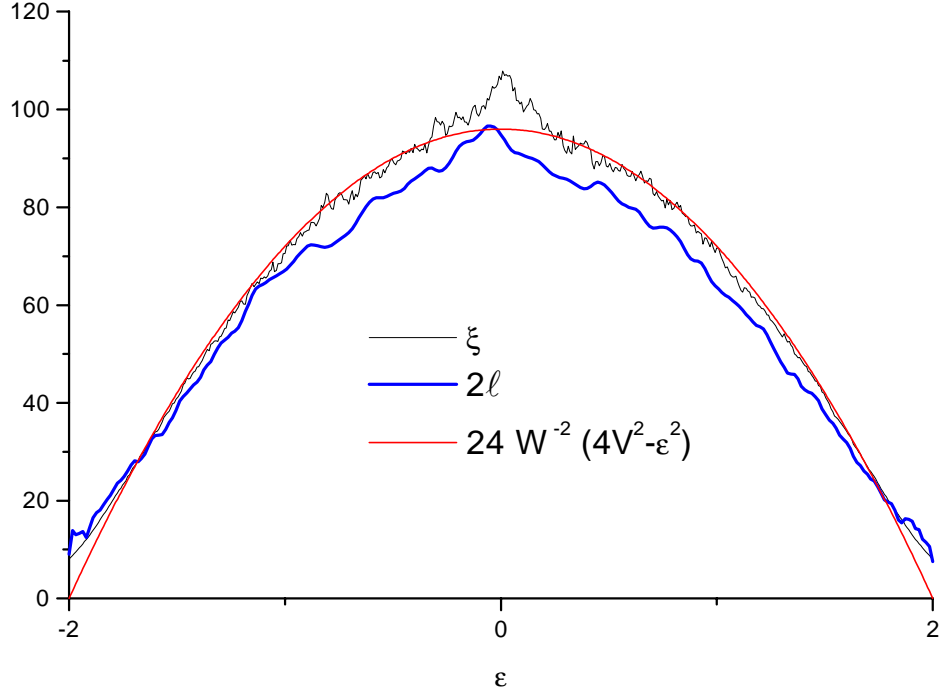


Figura 3-3: Conductividad en función de la energía para una cinta con $M = 5$ y $W = 0$. Nótese (comparando con el gráfico anterior) como la conductividad cambia por una unidad cada vez que se habilita o cierra un canal.

en las energías de cada modo transversal calculadas con (3.78):

$$E_n = \begin{pmatrix} \frac{M-1}{\sqrt{M}} & , \text{ si } n = 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{M}} & , \text{ si } n \neq 0 \end{pmatrix}, \text{ con } n = \frac{2\pi l}{aL} \text{ y } l = 0, 1, \dots, L-1. \quad (3.82)$$

Esto tiene como consecuencia en la densidad de estados que existe un gran rango de energía en el que *todos menos un* canales están habilitados, y el otro se separa del resto cuando M se hace más grande. Este sistema es interesante por este hecho, ya que el tener la mayoría de los canales abiertos en la mayor parte del espectro, puede colaborar a aumentar la longitud de localización. La idea subyacente en esto es que cuando un electrón colisiona y pasa a otro canal, mientras más de estos estén disponibles menos posibilidades habrá de generar la interferencia que causa la localización. Esto lo hace el sistema más interesante a estudiar.



Figura~3-4: Comparación entre el camino libre medio calculado y la longitud de localización calculados numéricamente con la predicción teórica de ?? para una cadena unidimensional con desorden $W = 1$.

3.3.2 Camino libre medio y longitud de localización

Para el cálculo numérico del camino libre medio y la longitud de localización de los sistemas se utilizaron los métodos explicados anteriormente. Se puede observar los resultados obtenidos en las figuras 3-4, 3-5, 3-6, 3-7 y 3-8.

Es muy bueno el ajuste encontrado para la ley $\xi(\varepsilon) \sim M_a(\varepsilon)\ell(\varepsilon)$ para los modelos de la cinta, el cilindro y la estrella. Resulta de los gráficos que el factor de proporcionalidad es de orden 1.

Para el sistema unidimensional (figura 3-4) el valor obtenido de longitud de localización es indistinguible del encontrado numéricamente por otros autores (ecuación (3.57)).

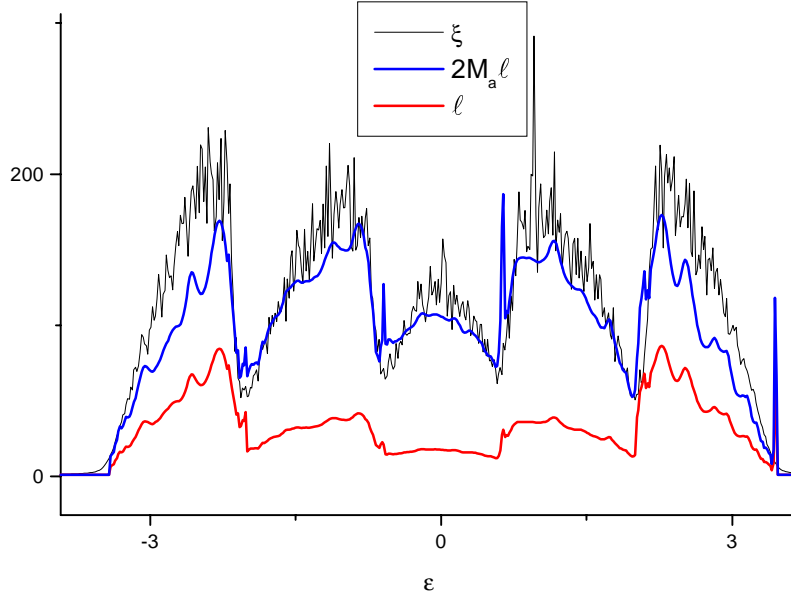
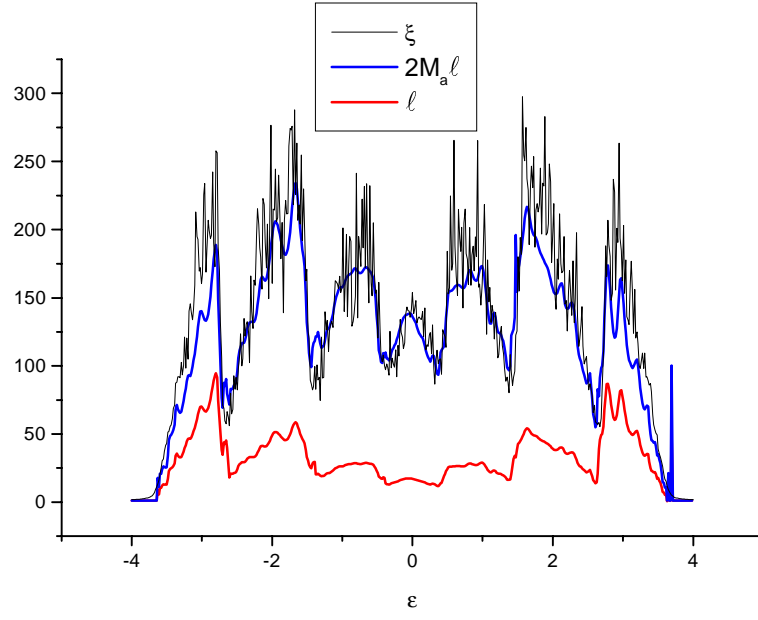


Figura 3-5: Comparación entre el camino libre medio calculado y la longitud de localización calculados numéricamente para una cinta de ancho $L_2 = 3$ y $W = 1$. También se incluye el resultado de $2M_a(\varepsilon)\ell(\varepsilon)$, que debe ser igual a la longitud de localización.

Es notable en los gráficos el efecto de los bordes de las bandas asociadas a cada canal. Aunque el método de cálculo es robusto pese a las divergencias de la función de Green en esos puntos, se producen discontinuidades tanto en el camino libre medio ℓ como en la longitud de localización ξ .

Se comprobó numéricamente la dependencia $\ell \sim \frac{1}{W^2}$, y la misma dependencia de ξ para todos los sistemas. Se estudió la dependencia de la longitud de localización en función del ancho de la capa M . En [KM93] se encuentra que la longitud de localización de las cintas crece según aumenta el ancho de la capa. Sin embargo, dependiendo del desorden $\xi(M)$ puede tender a un valor asintótico o continuar creciendo indefinidamente. Se dice que para desordenes mayores a un desorden crítico W_c la longitud de localización



Figura~3-6: Comparación entre el camino libre medio calculado y la longitud de localización calculados numéricamente para una cinta de ancho $L_2 = 4$ y $W = 1$. También se incluye el resultado de $2M_a(\varepsilon)\ell(\varepsilon)$, que debe ser igual a la longitud de localización. Notesé como el camino libre medio disminuye con el solapamiento de las bandas.

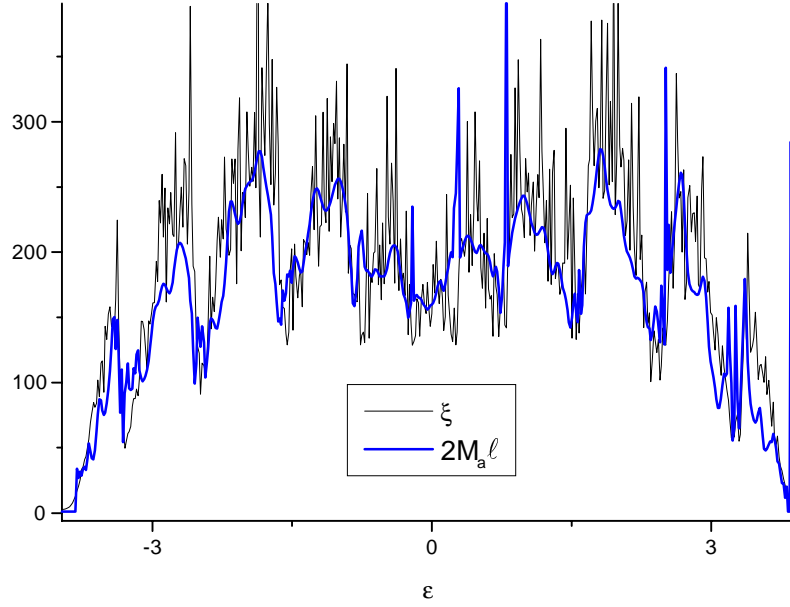
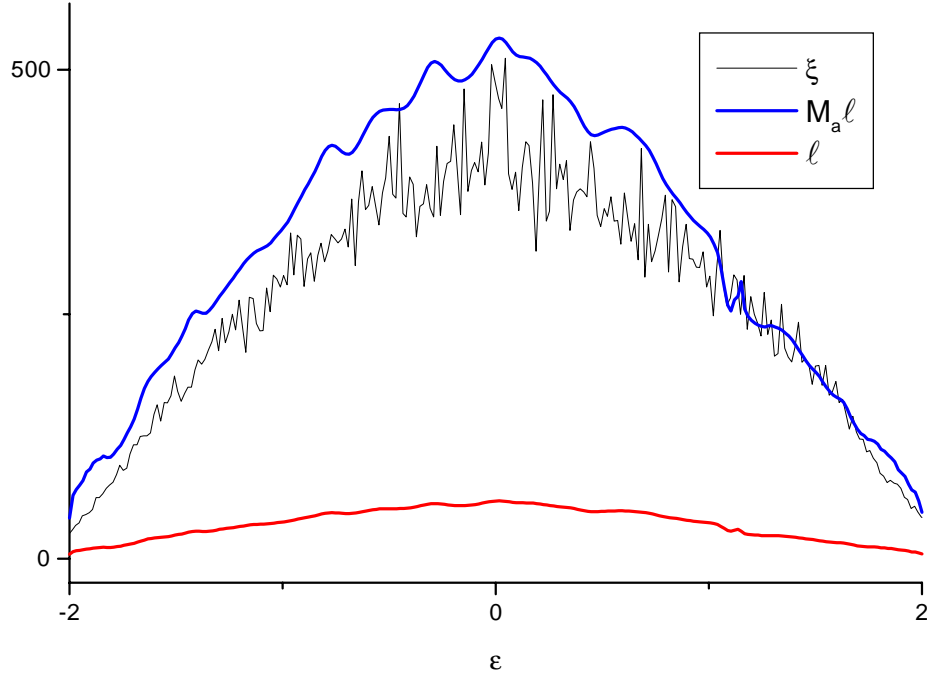


Figura 3-7: Comparación entre $2M_a(\epsilon)\ell(\epsilon)$ y la longitud de localización calculados numéricamente para una cinta de ancho $L_2 = 6$ y $W = 1$. Aunque el ajuste sigue siendo bueno, el aumento en la cantidad de bandas provoca discontinuidades marcadas en el cálculo de ambas cantidades.

tiende siempre a un valor asintótico, los estados son siempre localizados y el sistema es un aislante. Para desordenes menores a W_c la longitud de localización siempre crece con el ancho del sistema, los estados son extendidos y se dice que el sistema es un conductor. El pasaje de aislante a conductor mediante el incremento del desorden (por ejemplo con temperatura) se llama transición de Anderson. Se pudo ver en el sistema estrella aquí estudiado que la longitud de localización crece como \sqrt{M} , y que para desordenes muy fuertes la longitud de localización es una constante para cada desorden. Sin embargo, no se estudió la ubicación del punto de transición.

Otro aspecto destacable de los resultados es el hecho de que tanto el camino libre medio como la longitud de localización en el sistema estrella para el canal aislado (alejado en energía) son mucho más grandes que para la zona donde el resto de los canales están



Figura~3-8: Comparación entre el camino libre medio calculado y la longitud de localización calculados numéricamente para la estrella de ancho $L_2 = 10$ y $W = 1$. También se incluye el resultado de $2M_a(\varepsilon)\ell(\varepsilon)$, que debe ser igual a la longitud de localización. Notesé como el camino libre medio (y la longitud de localización) son mucho menores a los de la cinta y el cilindro. Tanto ℓ como ξ para el canal separado en energía (no incluído en el gráfico) son mucho mayores a los de los canales degenerados en energía.

habilitados.

Después de estos análisis no se puede elegir alguno de los sistemas por la relación entre camino libre medio y longitud de localización. En todos permanece constante la relación $\xi \simeq 2M\ell$, contrariando nuestra suposición de que una mayor conectividad en la capa daría al sistema estrella una longitud de localización más grande. Si parece conveniente este sistema porque es equivalente a un sistema unidimensional con la relación entre la longitud de localización y el camino libre medio cambiada. Al tener $M - 1$ canales unidimensionales superpuestos las magnitudes físicas tienen la misma forma funcional

con respecto a la energía que en el sistema unidimensional. Los bordes de banda y la cantidad de canales habilitados variando con la energía de los otros sistemas pueden tener efectos no previstos en la dinámica.

3.4 Dinámica

Para el estudio de la dinámica de los sistemas se aplicó el mismo método que en el capítulo anterior, respetando la búsqueda de soluciones exactas para la ecuación de Schrödinger. Se diagonalizó el Hamiltoniano entero y se calculó la evaluación según sus autovectores y autovalores. Se modificó sin embargo la función de autocorrelación calculada. Lo que nos interesaba preguntar a este sistema es la probabilidad de volver a encontrar la partícula en la misma capa en que estaba inicialmente. Esto es un intento de independizarse de la dinámica transversal a la dirección del alambre. Por todo esto, la función de autocorrelación a la capa estudiada es

$$P_{ii} = \sum_{\alpha=1}^M P_{i,\alpha\alpha} = \sum_{\alpha=1}^M \left| \langle i, \alpha | e^{-i\frac{Ht}{\hbar}} | i, (t=0) \rangle \right|^2, \quad (3.83)$$

donde $\langle i, \alpha |$ es la autofunción (en la base de sitio) del sitio α en la capa i . La función de onda inicial, por las mismas razones que las explicadas recientemente, no se tomó como una probabilidad 1 en un sitio determinado, sino como una mezcla al azar de sitios de una capa i . Estas consideraciones son útiles para el cálculo numérico de sistemas finitos, sin embargo a tiempo infinito la función de autocorrelación de capa debería ser igual a la de sitio.

Se promedió sobre diferentes realizaciones de desorden. Este promedio no afecta el resultado obtenido para la función de autocorrelación, sólo está destinado a una mejor apreciación del gráfico. Se calculó la dinámica para los sistemas estudiados para varios desordenes y anchos de capa. Los resultados más representativos son aquellos que se muestran en las figuras 3-9 y 3-10.

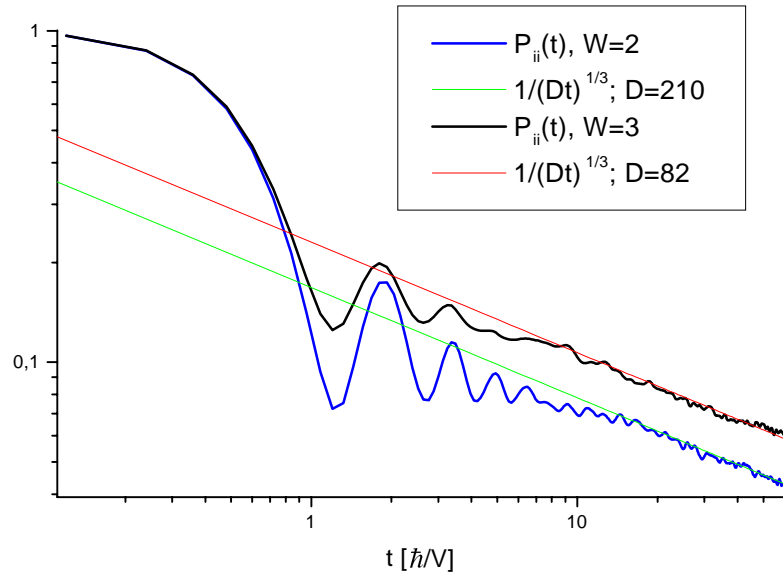


Figura 3-9: Función de autocorrelación de la capa para el sistema estrella con tamaño $L_2 = 12, L = 100$ y 2×10^3 promedios, junto con sus respectivos ajustes con una ley de potencias.

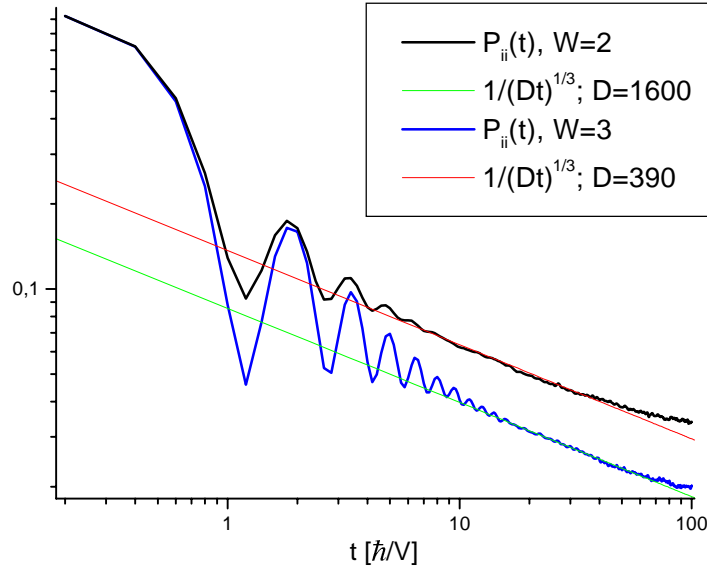


Figura 3-10: Función de autocorrelación de la capa para el sistema cilindro con tamaño $L_2 = 12, L = 100$ y 2×10^3 promedios, junto con sus respectivos ajustes con una ley de potencias. Notar que los ajustes no son tan buenos como para la estrella, ya que localizan antes. También, las constantes de difusión son un orden de magnitud más grandes. La dinámica para el sistema cinta es similar a la aquí mostrada.

Lo primero y más notable de los gráficos es que después de un tiempo inicial la dinámica del sistema sigue una ley de potencia. Esta ley no depende del ancho o del largo del sistema. Lo remarcable es que el exponente de esta ley no es el esperado $\frac{1}{2}$, sino que en todos los casos el ajuste resulta con el exponente $\frac{1}{3}$. Decimos coeficiente esperado por la ecuación 3.1, ya que modelamos un sistema unidimensional con $d = 1$.

Este coeficiente $1/3$ está relacionado con el coeficiente $2/3$ encontrado en [Imr81] y [GAA83]. La idea principal es que las funciones de onda involucradas en el sistema tienen una dimensión distinta de la esperada, por ejemplo menor a 1. Esto sería un caso de lo que se denomina dimensión fractal, en la que las impurezas (en este caso el desorden) "perforan" la probabilidad de encontrar a la función de onda en ciertas partes del espacio. Para que la dimensión sea distinta de la del espacio real es necesario que

esta "perforación" sea de manera fractal. Esto significa, rápidamente, que la estructura a gran escala de estas "perforaciones" se repita a todas las escalas a las cuales observemos el sistema.

La dinámica para tiempos cortos es similar a la encontrada en el capítulo anterior y en [Usa95] para cadenas ordenadas (y a su vez, dinámica que dura un tiempo del orden del tiempo de Debye). A tiempos largos, donde en el capítulo anterior se observaba un eco mesoscópico, el desorden ha provocado que la función de autocorrelación se estabilice alrededor de una constante, lo que implica una localización de la función de onda. Se observó que la constante de difusión D no dependía de la cantidad de canales M del sistema y sí del desorden W .

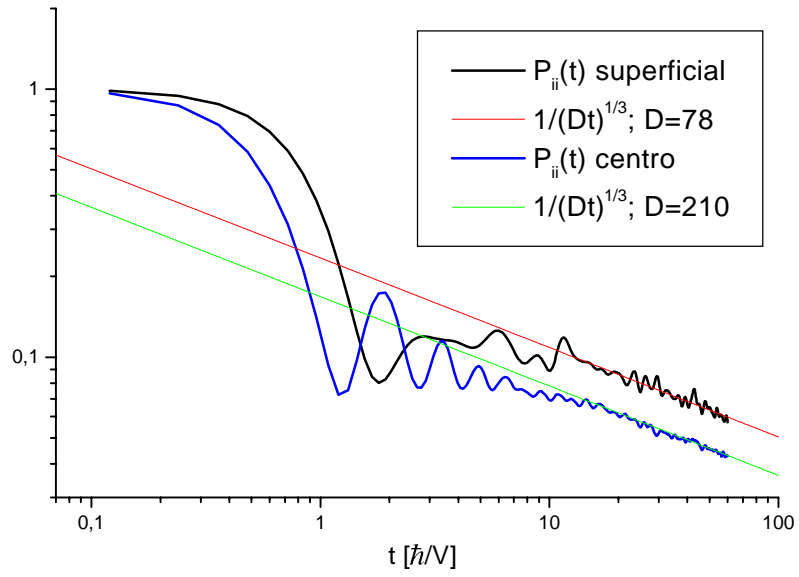
En [Usa95] se estudia la diferencia entre la difusión cuántica en cadenas ordenadas para el centro de una muestra y la superficie. Para el interior de la muestra el comportamiento es

$$P_{ss} = J_0^2 \left(\frac{2Vt}{\hbar} \right) \rightarrow \frac{\hbar}{\pi Vt}, \quad (3.84)$$

sin embargo para la superficie de la muestra

$$P_{cc} = \frac{4}{\left(\frac{2Vt}{\hbar} \right)^2} J_1^2 \left(\frac{2Vt}{\hbar} \right) \rightarrow \frac{1}{\pi} \left(\frac{\hbar}{Vt} \right)^3. \quad (3.85)$$

Vemos que la difusión cuántica del centro sigue una ley de potencias más rápida que la difusión clásica para una dimensión. La difusión superficial tiene incluso lo que podría llamarse superdifusión cuántica, con una ley de potencias aun mayor. Este hecho llevó a estudiar si algún efecto de este tipo podría verse en los sistemas recientemente estudiados. El resultado se puede ver en la figura 3-11. Claramente estos gráficos no manifiestan señales de superdifusión, ya que no sólo el exponente de la ley de potencias es el mismo que para la difusión en el centro de la muestra, sino que inclusive el coeficiente de difusión del sistema (relacionado con la ordenada de la recta que ajusta la dinámica difusiva) es menor para la superficie, indicando entonces una menor difusión. Una de las probables razones de este comportamiento puede ser la existencia de estados superficiales



Figura~3-11: Comparación de la evolución de la función de autocorrelación de la capa para un estado superficial y otro en el centro de la muestra, para un tamaño del sistema $L_2 = 12, L = 100$ y $W = 2$.

más localizados que el resto.

Nuevamente mencionamos que es posible realizar conexiones entre las propiedades dinámicas con las propiedades del espectro de los sistemas. Este último es el usualmente estudiado por ser de menor costo computacional. Comentaremos ahora algunas de estas conexiones.

Es posible separar desde el estudio del espectro los cuatro regímenes para el transporte mencionados anteriormente [CnR⁺98]. La manera de hacerlo es mediante el estudio de la distribución del espaciamiento normalizado $s = \delta\varepsilon/\Delta$, con $\delta\varepsilon = \varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i$ y $\Delta = \langle \delta\varepsilon \rangle$. Es reconocido en la teoría de matrices aleatorias ([Kre96], [BWP79], [SVP95]) que cuando los niveles de energía están correlacionados esta distribución es la distribución de Wigner-Dyson

$$P_W(s) = \frac{\pi s}{2} \exp\left(-\frac{\pi s^2}{4}\right), \quad (3.86)$$

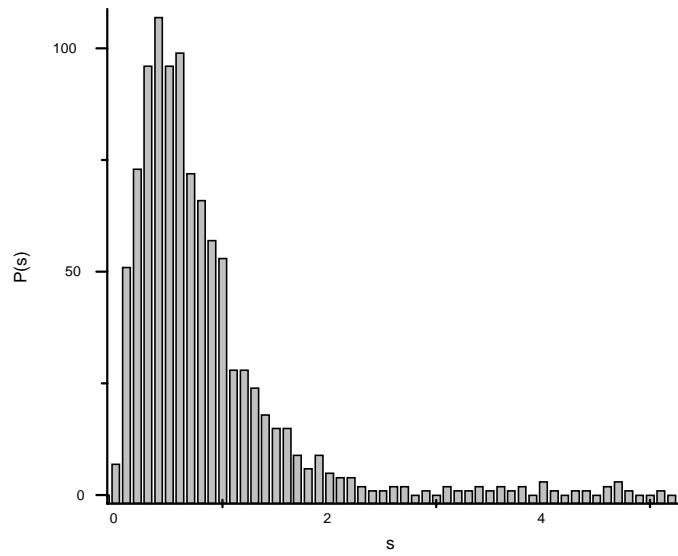
lo que corresponde a los regímenes difusivos y balísticos. Para los otros dos no existe correlación entre niveles y la distribución que se espera es la Poissoniana

$$P_P(s) = \exp(-s). \quad (3.87)$$

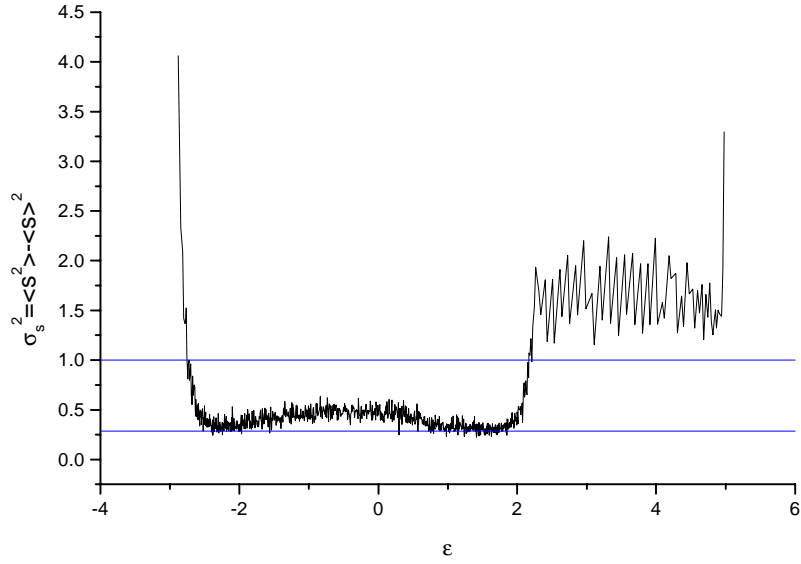
Para reconocer claramente entre ambas distribuciones basta con calcular la varianza de s , $\sigma_s^2 = \langle s^2 \rangle - \langle s \rangle^2$. Los valores de esta varianza son 1 y 0.286 para la distribución de Poisson y de Wigner-Dyson respectivamente. Los resultados para la varianza se pueden ver en la figura 3-13, donde claramente la distribución es del tipo de Wigner-Dyson.

Para distinguir entre el régimen difusivo y el balístico es necesario el estudio de otra variable, que es la fluctuación en el número de niveles de energía en un ancho de energía E . El estudio de esta variable es de excesivo costo computacional y no fué realizado en este trabajo, quedándonos solamente con el estudio de la distribución del espaciamiento de energías. Para distinguir entre el régimen balístico y difusivo se estudió directamente la relación entre el camino libre medio y la localización de los sistemas.

Se puede observar en la figura 3-12 que para los canales degenerados de la estrella la



Figura~3-12: Distribución de probabilidad del espaciamiento de energía renormalizado s para el sistema estrella con $M = 10$ y $W = 3V$. La forma cualitativa es la de una distribución de Wigner-Dyson, indicando que el sistema se encuentra en el régimen difusivo-balístico.



Figura~3-13: Varianza de las distribuciones de espaciamiento de niveles en función de la energía para el sistema de la estrella con $M = 10$ y $W = 2$. En azul, la varianza de las distribuciones de Poisson (1) y de Wigner-Dyson (0.286). Nótese que para las energías en que los canales son degenerados, la varianza es similar a la de Wigner-Dyson, mientras que para el canal alejado en energía la varianza es aproximadamente de Poisson.

distribución es de Wigner-Dyson, mientras que para el canal aislado es Poissoniana. Esta diferencia se relaciona con la gran simetría del modo transversal asociado a ese canal, que al tener igual amplitud en todos los sitios de la capa promedia el desorden a un desorden efectivo menor. Esto es una justificación de porque el camino libre medio resulta mucho mayor para las energías correspondientes a este canal que las del resto.

Hemos visto en el capítulo anterior como el orden en el sistema genera espectro homogéneos (en amplitud y espaciado) que generan una difusión cuántica en donde la interferencia constructiva genera grandes efectos puramente cuánticos. El desorden genera espectros con correlaciones complicadas entre los niveles, que llevan a nuevos efectos como la difusión clásica y eventualmente a la localización de los estados. Veremos en el próximo capítulo como el agregado a estos modelos de un ambiente que produce relajación (equivalente a choques inelásticos) puede imponer un nuevo orden en el espectro, a una escala mucho más pequeña, y que consecuencias puede traer esto.