

Deslocalización en sistemas continuos desordenados

E. Lazo, M. E. Onell

Depto. de Física, Facultad de Ciencias, U. de Tarapacá, Arica, Chile

Email: elazo@uta.cl; monell@uta.cl

Resumen

En esta Charla se muestra que el mecanismo de dilución de sistemas desordenados resulta ser un mecanismo universal para generar estados extendidos o deslocalizados en sistemas discretos y continuos. Se encuentran las condiciones matemáticas que permiten determinar el número y la posición energética de los estados deslocalizados. El número de elementos usados para diluir el sistema desordenado determina el número de estados extendidos en sistemas discretos; en el caso de sistemas continuos, dicho número determina el conjunto de condiciones matemáticas independientes, cada una de las cuales permite generar un número infinito de estados deslocalizados.

INTRODUCCION

La naturaleza de los estados electrónicos en modelos desordenados en la aproximación de enlace estrecho con desorden sin correlación en la energía por sitio, fue estudiada inicialmente por Anderson [1]. Allí se discutió por primera vez la localización de los estados cuánticos en conexión con propiedades de transporte de redes desordenadas. Posteriormente, se probó que en sistemas de Anderson unidimensionales todos los estados son localizados por muy pequeño que sea el desorden [2]. Recientemente, ha sido reportada la aparición de estados deslocalizados o extendidos en sistemas de Anderson unidimensionales [3-12]. En estos trabajos, la presencia de correlación de corto o largo alcance en el desorden es el mecanismo responsable de la aparición de estados extendidos. Estos resultados han sido recientemente confirmados en forma experimental [13,14]. La aparición de estados extendidos en sistemas desordenados al azar, pero diluidos por distribuciones periódicas de energías por sitio ha sido motivo de interés en el último tiempo [15-20]. En la Ref. [17] un sistema desordenado al azar se diluye mediante un conjunto de k energías por sitio ε_k distribuidas de acuerdo a una función periódica $f(k)$ de modo que $\varepsilon_k = f(k)$. En dicho trabajo se demuestra que es posible obtener un conjunto estados deslocalizados o extendidos, cuyo número depende, básicamente, de las simetrías que presente la función periódica $f(l_1)$.

En esta Charla de Física mostraremos a través de un ejemplo muy sencillo, que el proceso de dilución también es un mecanismo capaz de generar infinitos estados extendidos o deslocalizados en sistemas continuos con desorden composicional. El mecanismo de dilución en sistemas desordenados continuos ha sido recientemente estudiada en forma preliminar [21].

La dilución consiste en introducir elementos no desordenados entre sitios desordenados [15,16]. En este contexto, recientemente hemos realizado un estudio sistemático del efecto que produce el proceso de dilución en sistemas discretos unidimensionales con desorden sustitucional en la aproximación de enlace estrecho [17,18,19]. Parte de los resultados anteriores fueron publicados en la Revista Charlas de Física No. 16 [20]. Allí mostramos que la ecuación dinámica del sistema discreto en la aproximación de enlace estrecho viene dada por:

$$z_n \phi_n - \phi_{n-1} - \phi_{n+1} = 0, \quad (1)$$

donde $z_n = (\varepsilon_n - E)$, Acá ε_n representa la energía por sitio en la posición n de la red unidimensional y E representa la energía cuántica permitida del electrón en la red.

También mostramos que se obtiene un conjunto finito de estados extendidos, cuyo número y posición energética dependen del número y de la simetría de la distribución de energías por sitio de los átomos que diluyen al sistema desordenado, los cuales se introducen entre dos sitios vecinos desordenados.

Antes de estudiar el comportamiento de los sistemas desordenados diluidos, explicaremos algunos conceptos básicos, necesarios para la comprensión de los fenómenos en estudio. En primer lugar debemos decir que en los sistemas periódicos discretos, es decir, sistemas sin ningún tipo de desorden, todas las funciones de onda son extendidas o deslocalizadas, y que en los sistemas discretos unidimensionales desordenados, sin correlación en el desorden, todas las funciones de onda son localizadas. Sin embargo, si llega a existir correlación en el desorden, es posible encontrar estados extendidos o deslocalizados. De este modo, para estados extendidos, la amplitud de la función de onda tiene valores distintos de cero en cualquier punto de la cadena. Por oposición, para estados localizados, la amplitud de la función de onda es distinta de cero sólo en una región muy pequeña de la cadena unidimensional.

Este comportamiento se puede verificar calculando los valores que asume la llamada “longitud de localización” L_c . Esta magnitud depende de la energía E y del tipo de desorden existente en la cadena lineal. La longitud de localización normalmente se calcula, en términos numéricos, a través de otra magnitud llamada “exponente de Lyapunov” γ , la que corresponde al inverso de la longitud de localización L_c y que depende de los mismos parámetros que L_c , es decir,

$$\gamma = \frac{1}{L_c}$$

Si la función de onda es extendida, la longitud de localización L_c es del orden del largo N de la cadena en estudio, $L_c \approx N$. Al hacer crecer el largo N , crece también L_c , de modo que para $N \rightarrow \infty$, $L_c \rightarrow \infty$. Lo anterior implica que para funciones extendidas, el exponente de Lyapunov γ tiende a cero, $\gamma \rightarrow 0$, cuando $N \rightarrow \infty$. Por su parte, para estados localizados, cuando $N \rightarrow \infty$ el exponente de Lyapunov se mantiene siempre mayor que cero, $\gamma > 0$.

EL MODELO

Los resultados planteados en la Introducción fueron obtenidos para sistemas discretos diluidos en la aproximación de enlace estrecho. Sin embargo, uno podría preguntarse si los resultados obtenidos para dichos sistemas, siguen siendo válidos para sistemas continuos. Es decir, ¿cuáles son los cambios que se producen sobre el número y la posición de los estados extendidos, cuando usamos el mecanismo de dilución sobre sistemas continuos?. Este aspecto fue discutido por Bellisard [22] y Kohmoto [23], quienes obtuvieron una ecuación discreta exacta, que presenta la misma forma que la ec. (1), para el modelo continuo de Kronig-Penney con funciones delta. Posteriormente, Sánchez y colaboradores [8] encontraron un mecanismo completamente general para tratar con potenciales

unidimensionales arbitrarios $V(x)$. La ecuación de Schroedinger (con $\hbar = 2m = 1$) viene dada por:

$$-\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + V(x)\phi(x) = E\phi(x), \quad (2)$$

donde $\phi(x)$ es la función de onda cuántica del electrón en la red y E es su autoenergía. Después de realizar unas pocas operaciones algebraicas, se obtiene una relación matemática, llamada mapa de Poincaré [8], que relaciona la función de onda en tres sitios diferentes, consecutivos y arbitrarios:

$$z_n\phi_n - t_{n,n-1}\phi_{n-1} - t_{n,n+1}\phi_{n+1} = 0, \quad (3)$$

donde $\phi_n = \phi(x_n)$. Por su parte, z_n , $t_{n,n-1}$ y $t_{n,n+1}$ dependen, en cierta forma complicada, del tipo de potencial $V(x)$ empleado y de la energía E del electrón. Es importante destacar que esta transformación no implica la pérdida de información al pasar de la ecuación de Schroedinger (2) al mapa de Poincaré (3).

En esta Charla estudiaremos un sistema continuo unidimensional desordenado, con potenciales tipo delta igualmente espaciados, con amplitudes λ_n escogidas al azar. Es decir, el potencial $V(x)$ viene dado por:

$$V(x) = \sum_{n=0}^N \lambda_n \delta(x - x_n), \quad (4)$$

donde λ_n rotula las amplitudes de las deltas, con $\lambda_n \in (\lambda_i, \lambda_f)$, $\lambda_i, \lambda_f > 0$. Para este potencial $V(x)$ específico, el mapa de Poincaré (3) se reduce a la siguiente relación:

$$\left(2 \cos q + \frac{\lambda_n}{q} \sin q\right) \phi_n - \phi_{n+1} - \phi_{n-1} = 0, \quad (5)$$

con $q = d\sqrt{E}$ y donde $d = (x_{n+1} - x_n)$ representa la distancia entre dos sitios vecinos. En esta Charla consideramos que la distancia d entre dos sitios vecinos es constante, $d = 1$.

Antes de estudiar el sistema desordenado y diluido, consideremos que la distribución de valores de la amplitud λ_n es una función absolutamente arbitraria, es decir, la distribución puede ser completamente al azar, puede ser absolutamente periódica, puede ser una mezcla de estas situaciones, o incluso puede ser el caso diluido que estudiaremos mas adelante. En cualquier caso, si llega a ocurrir que la variable q toma un valor particular q_c tal que

sin $q_c = 0$, con $q_c \neq 0$, entonces en la ecuación (5) desaparece el término que contiene el desorden λ_n , y la ecuación resultante asume la forma de la ecuación correspondiente a un sistema periódico:

$$2 \cos q_c \phi_n - \phi_{n+1} - \phi_{n-1} = 0, \quad (6)$$

Como consecuencia, para ese particular valor q_c , el estado cuántico es extendido o deslocalizado y en consecuencia, el exponente de Lyapunov γ tiende a cero. Es decir, para ese específico valor de q_c , la amplitud de la función de onda tiene valores distintos de cero en cualquier punto de la cadena unidimensional que estamos estudiando. Es importante destacar que la condición matemática $\sin q = 0$ se cumple para infinitos valores q_k , lo cual genera un conjunto infinito numerable de energías $E_k = q_k^2 = k^2 \pi^2$, $k \geq 1$, para cada una de las cuales el exponente de Lyapunov γ tiende a cero, es decir, para cada una de estas energías específicas E_k existe un estado extendido o deslocalizado [21,24,25]. En este caso específico, la aparición de estos estados extendidos está asociada a la existencia de correlación espacial en la distribución de impurezas en la red.

Nótese que en la ecuación (6), y sólo para el valor específico del parámetro q_c , no queda ningún vestigio del tipo de desorden existente en la distribución de amplitudes de las deltas, es decir, las energías de los estados extendidos $E_k = q_k^2 = k^2 \pi^2$ son las mismas, independientemente del tipo de distribución en la amplitud de las deltas λ_n . En conclusión, estos estados extendidos van a estar presentes en cualquier tipo de distribución de λ_n , es decir, en sistemas ordenados o desordenados. Estos estados extendidos aparecen porque el sistema posee una correlación de largo alcance debida a que todas y cada una de las deltas se encuentran igualmente espaciadas: $d = (x_{n+1} - x_n) = 1$.

Para estudiar la posibilidad de generar nuevos estados extendidos en este modelo con desorden composicional, estudiaremos ahora el caso de un sistema desordenado diluido. Para simplificar el modelo, consideremos que en las posiciones “pares” de la red unidimensional, las amplitudes λ_{2n} del potencial tipo delta se obtienen al azar del conjunto (λ_i, λ_f) , $\lambda_i, \lambda_f > 0$. En cambio, en las posiciones “impares”, las amplitudes del potencial tipo delta tienen un valor constante $\lambda_{2n\pm 1} = \lambda_0 = cte$. De este modo, el sistema desordenado al azar está diluido, uno por medio, con una delta de amplitud constante. Ciertamente, el sistema completo sigue siendo desordenado, y por lo tanto, en principio y de acuerdo a la teoría de localización de Anderson [1], todos los estados cuánticos permitidos deberían ser localizados, con la excepción del conjunto infinito numerable de estados extendidos que acabamos de estudiar.

Escribamos el mapa de Poincaré (5) en la forma siguiente:

$$z_n \phi_n - \phi_{n-1} - \phi_{n+1} = 0, \quad (7)$$

donde hemos definido

$$z_n = a + b\lambda_n, \quad (8)$$

con

$$a = 2 \cos q; \quad b = \frac{\sin q}{q}. \quad (9)$$

Nótese que el desorden asociado con la amplitud de las deltas λ_n , aparece explícitamente en el término $z_n = a + b\lambda_n$. Aplicando el mapa de Poincaré (7) a los sitios pares e impares de la red unidimensional, podemos escribir:

$$z_0 \phi_{2n-1} - \phi_{2n-2} - \phi_{2n} = 0, \quad (10)$$

$$z_{2n} \phi_{2n} - \phi_{2n-1} - \phi_{2n+1} = 0, \quad (11)$$

$$z_0 \phi_{2n+1} - \phi_{2n} - \phi_{2n+2} = 0. \quad (12)$$

En la primera y la tercera ecuaciones hemos escrito $z_{2n\pm 1} = z_0$ porque la amplitud de los potenciales tipo delta en los sitios impares es constante.

Eliminando los sitios con índice impar, es decir, realizando un proceso de decimación, las ecuaciones (10), (11) y (12) pueden ser reescritas en la forma:

$$[z_0 z_{2n} - 2] \phi_{2n} - \phi_{2n-2} - \phi_{2n+2} = 0 \quad (13)$$

o explícitamente:

$$[(a + b\lambda_0)(a + b\lambda_{2n}) - 2] \phi_{2n} - \phi_{2n-2} - \phi_{2n+2} = 0. \quad (14)$$

Las ecuaciones (13) o (14) representan completamente al sistema desordenado diluido original.

El desorden contenido en el producto $z_0 z_{2n} = (a + b\lambda_0)(a + b\lambda_{2n})$ puede ser eliminado si ocurre cualquiera de las dos condiciones: *i*) $b = 0$, o *ii*) $z_0 = (a + b\lambda_0) = 0$.

En el caso *i*) $b = \frac{\sin q}{q} = 0$, encontramos de nuevo la solución $\sin q = 0$, y la ecuación (14)

queda:

$$[2(2 \cos^2 q - 1)] \phi_{2n} - \phi_{2n-2} - \phi_{2n+2} = 0, \quad (15)$$

ecuación que representa a un sistema periódico para cada q que cumple con la ecuación $\sin q = 0$.

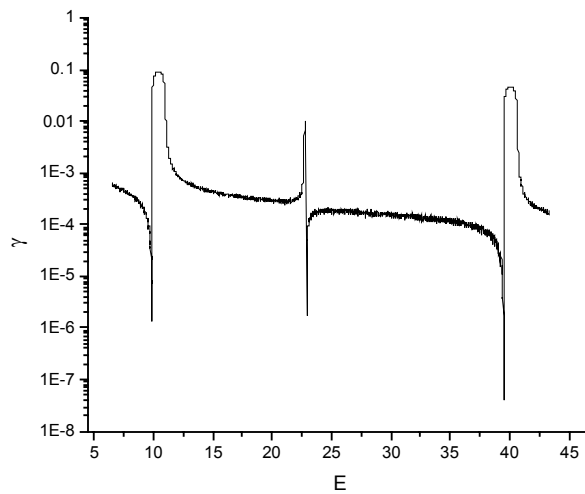
En el caso *ii*) $z_0 = (a + b\lambda_0) = 0$, para cada valor específico de $q_j = \sqrt{E_j}$, tal que $z_0 = 0$, la ecuación (14), asume la forma correspondiente a un sistema periódico:

$$2\phi_{2n} + \phi_{2n-2} + \phi_{2n+2} = 0. \quad (16)$$

El cumplimiento de la condición $z_0 = 0$ determina la existencia de un conjunto infinito de valores q_j , para cada uno de los cuales la función de onda es extendida. Dichos valores se obtienen como soluciones de la ecuación no lineal [21]:

$$\left(2 \cos q_j + \frac{\lambda_0}{q_j} \sin q_j \right) = 0. \quad (17)$$

Para tener una idea gráfica del comportamiento del sistema desordenado para los distintos valores de energía posibles, consideremos que las amplitudes de las deltas de los sitios pares λ_{2n} se obtienen al azar del conjunto $(0,1)$, y que la amplitud de las deltas en los sitios impares, usadas para diluir el sistema, vale $\lambda_{2n\pm 1} = \lambda_0 = 0.7$. La figura muestra el exponente de Lyapunov γ como función de la energía E en una región pequeña de todo el rango de energía para el sistema desordenado diluido.



Allí se puede ver que el exponente de Lyapunov γ tiende a cero sólo para tres valores de energía E , por lo tanto, de acuerdo a lo analizado más arriba, existen sólo tres estados

extendidos en todo el rango de energías mostrado en la figura. Los picos centrados en $E = 9.8696$ y $E = 39.4784$ corresponden a los estados extendidos dados por la expresión $E_k = q_k^2 = k^2 \pi^2$, $k \geq 1$ que mostramos más arriba para modelos con cualquier tipo de desorden en la amplitud de las deltas. En cambio, el tercer pico centrado en la energía $E = 22.900$, corresponde a un nuevo estado extendido, asociado exclusivamente con el proceso de dilución mostrado en esta Charla, ya que la energía $E = 22.900$ es solución de la ecuación:

$$\left(2 \cos \sqrt{E_j} + \frac{0.7}{\sqrt{E_j}} \sin \sqrt{E_j} \right) = 0. \quad (18)$$

Existen infinitos de valores de la energía E_j que son solución de la ecuación (18), es decir, existe un conjunto infinito de estados extendidos en el sistema continuo desordenado y diluido. Esto quiere decir, que si graficamos γ versus E en un rango de energía más amplio, aumenta el número de valores de energía para los cuales el exponente de Lyapunov γ tiende a cero, de tal modo que si hacemos crecer la energía hasta infinito, aparecen también infinitos nuevos estados extendidos.

En resumen, hemos demostrado, analítica y numéricamente, que el mecanismo de dilución de un sistema continuo desordenado permite generar un nuevo conjunto infinito estados deslocalizados o extendidos. La generalización del presente modelo para el caso de dilución con mayor número de átomos es directa, y se espera que aparezca un número infinito de energías correspondientes a estados extendidos, siempre y cuando se cumplan ciertas condiciones de simetría en el conjunto de amplitudes que diluyen al sistema desordenado.

Referencias

1. P. W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958)
2. E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, T. V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979); I. M. Lifshitz, S. A. Gredeskul, L. A. Pastur, *Introduction to the Theory of Disordered Systems*, Wiley, New York, 1988
3. J. C. Flores, J. Phys.: Condens. Matter **1**, 8471 (1989)
4. D. H. Dunlap, H. L. Wu, P. W. Phillips, Phys. Rev. Lett. **65**, 88 (1990); H. L. Wu, P. W. Phillips, Phys. Rev. Lett. **66**, 1366 (1991); P. W. Phillips, H. L. Wu, Science **252**, 1805 (1991)
5. S. Gangopadhyay, A. K. Sen, J. Phys. Condens. Matter **4**, 3725 (1992)
6. P. K. Datta, D. Giri, K. Kundu, Phys. Rev. B **47**, 10727 (1993)
7. S. N. Evangelou, D. E. Katsanos, Phys. Lett. A **164**, 456 (1992); S. N. Evangelou, A. Z. Wang, S. J. Xiong, J. Phys.: Condens. Matter **6**, 4937 (1994)
8. A. Sánchez, F. Domínguez-Adame, J. Phys. A: Math. Gen. **27**, 3725 (1994); A. Sánchez, E. Maciá, F. Domínguez-Adame, Phys. Rev. B **49**, 147 (1994)

9. E. Diez, A. Sánchez, F. Domínguez-Adame, Phys. Rev. B **50**, 14359 (1994); F. Domínguez-Adame, E. Diez, A. Sánchez, Phys. Rev. B **50**, 8115 (1995)
10. M. Hilke, J. Phys. A: Math. Gen. **27**, 4773 (1994); M. Hilke, J. C. Flores, Phys. Rev. B **55**, 52 (1997)
11. F. A. B. F. de Moura, M. Lyra, Phys. Rev. Lett. **81**, 3735 (1998); F. A. B. F. de Moura, M. Lyra, Physica A **266**, 465 (1999)
12. F. M. Izrailev, A. A. Krokhin, Phys. Rev. Lett. **82**, 4062 (1999); F. M. Izrailev, A. A. Krokhin, S. E. Ulloa, Phys. Rev. B **63**, 41102 (2001)
13. V. Bellani, E. Diez, R. Hey, L. Toni, L. Tarricone, G. B. Parravicini, F. Domínguez-Adame, R. Gómez-Alcalá, Phys. Rev. Lett. **82**, 2159 (1999); V. Bellani, E. Diez, A. Parisini, L. Tarricone, R. Hey, G. B. Parravicini, F. Domínguez-Adame, Physica E **7**, 823 (2000)
14. U. Kuhl, F. M. Izrailev, A. A. Krokhin, H. J. Stöckmann, Appl. Phys. Lett. **77**, 633 (2000)
15. M. Hilke, J. Phys. A: Math. Gen. **30**, L367 (1997)
16. W. Deng, Physica B, **279**, 224 (2000)
17. E. Lazo, M. E. Onell, Physica B **299**, 173 (2001)
18. E. Lazo, M. E. Onell, Physics Letters A **283**, 376 (2001)
19. M. E. Onell, E. Lazo, Rev. Mex. Fís. **48 Suplemento 3**, 66 (2002)
20. E. Lazo, M. E. Onell, Rev. Char. Fís. **16**, 47 (2001)
21. M. E. Onell, E. Lazo, Rev. Fac. Ing. **10**, 63 (2002)
22. J. Bellisard, A. Bovier, and J. M. Ghez, Rev. Math. Phys. **4**, 1 (1992)
23. M. Kohmoto, Phys. Rev. B **34**, 5043 (1986)
24. K. Ishii, Suppl. Prog. Theo. Phys. **53**, 77 (1973)
25. A. Sánchez, F. Domínguez-Adame, J. Phys. A: Math. Gen. **25**, 10211 (1994)