

# Regularidad en el desorden: localización de Anderson

A. V. Malyshev, F. Domínguez-Adame y V. A. Malyshev

*We present a simple approach to Anderson localization of quasi-particles (electrons or holes, for instance) in one-dimensional disordered lattices. Localization of eigenstates is explained by two-parameters scaling arguments. We compare the size scaling of the level spacing in the bare energy spectrum of the quasi-particle (in the ideal lattice) with the size scaling of the renormalized disorder seen by the quasi-particle. The former decreases faster than the latter upon increasing the system size, giving rise to mixing and, consequently, to localization of the bare quasi-particle eigenfunctions in the thermodynamic limit. We provide as well a self-consistent method to calculate theoretically the localization length. Our approach, based on the standard perturbation theory, is suitable for introducing the concept of localization in Solid State Physics courses.*

## 1. Introducción

Los fenómenos cuánticos en sólidos cristalinos a baja temperatura, como el transporte de carga y energía, absorción óptica y propiedades térmicas, ponen de manifiesto la naturaleza de los estados de las cuasi-partículas. De acuerdo con el teorema de Bloch, la función de onda es el producto de una función de Bloch, que presenta la misma simetría de traslación que la red cristalina, y una onda plana [1]. Por tanto, la amplitud de probabilidad es uniforme en toda la red, esto es, los estados están extendidos en el espacio.

Sin embargo, no todos los materiales presentan estructura cristalina, como sucede con los metales y semiconductores amorfos o los agregados moleculares, estando caracterizados por una distribución aleatoria de los átomos o las moléculas que lo componen [2]. Dado que entonces el potencial del sólido no es periódico, no se puede aplicar el teorema de Bloch y no debe esperarse que los estados de las cuasi-partículas sean estados de Bloch. El modelo más sencillo que contiene los ingredientes básicos para describir la materia desordenada fue introducido hace tiempo por Anderson [3]. En su trabajo de 1958, Anderson estableció que los estados de las cuasi-partículas en sólidos desordenados tridimensionales (3D) son localizados en el espacio, siempre que el desorden fuera suficientemente elevado. *Localizado* significa aquí que la amplitud de probabilidad de la cuasi-partícula es no nula sólo en una región finita del sólido. En 1977, Anderson recibió el Premio Nobel junto a Mott y van Vleck por "sus investigaciones teóricas fundamentales sobre la estructura electrónica de sistemas magnéticos y desordenados" [4].

A pesar de sus más de cuarenta años de historia, el problema de la localización de Anderson es objeto de ardua e intensa investigación. Este interés se debe en gran parte a los problemas que surgen en nanotecnología y física de sistemas moleculares. En dichos sistemas hay varios ingredientes comunes, como el papel relevante que desempeñan el desorden y los efectos cuánticos, así como una dimensionalidad reducida. Pero en sistemas de baja dimensionalidad el problema de localización de Anderson tiene sus propias peculiaridades. En este sentido, Mott y Twose concluyeron que todos los estados de sistemas desordenados unidimensionales (1D) son localizados en el límite termodinámico, por muy pequeño que fuera el desorden [5]. Posteriormente, Abrahams y *col.* [6] confirmaron este hecho mediante la

teoría de escala, extendiendo estas consideraciones a sistemas bidimensionales (2D) desordenados (se recomienda la lectura de los artículos de revisión [7-9]). Hasta la fecha, la teoría de escala ha explicado muchos fenómenos, siempre que el desorden no fuera correlacionado, el sistema fuera invariante bajo inversión temporal y el intercambio de las cuasi-partículas entre diferentes átomos o moléculas fuera de corto alcance (este último concepto quedará claro algo más adelante). Destaquemos que hay excepciones a estas restricciones, y entonces la teoría de escala convencional falla estrepitosamente (véase, por ejemplo, la Ref. [10]).

En este trabajo trataremos un modelo 1D de enlace fuerte muy sencillo, en el cual se asigna un único orbital y un valor aleatorio de su energía a cada nodo de la red. La integral de intercambio es constante y distinto de cero sólo entre nodos que son vecinos próximos. La localización de los autoestados se puede explicar cualitativa y cuantitativamente tras comparar el escalado de dos parámetros, que son el espaciado de niveles en el sistema ordenado y el desorden efectivo detectado por la cuasi-partícula. Con este análisis, comprobamos que los estados son siempre localizados en el límite termodinámico y proporcionamos una regla autoconsistente para estimar la longitud de localización.

## 2. Red ordenada

Como ya hemos avanzado, partiremos de una ecuación de enlace fuerte en la que asignamos un orbital a cada nodo, con energía  $\varepsilon_l$ , en una red 1D con  $N$  nodos y espaciado unidad. Las amplitudes de la función de onda en los nodos,  $\psi_l$ , verifican entonces la siguiente ecuación

$$\varepsilon_l \psi_l - J(\psi_{l+1} + \psi_{l-1}) = E \psi_l. \quad (1)$$

Esta ecuación puede ser resuelta sin grandes dificultades cuando las energías de los nodos son iguales,  $\varepsilon_l \equiv \bar{\varepsilon} = \text{const}$ , resultando entonces un modelo sencillo de sólido cristalino. Imponiendo condiciones periódicas de contorno y empleando el teorema de Bloch encontramos que

$$\psi_{lK}^0 = \frac{1}{\sqrt{N}} \exp(iKl), \quad (2)$$

donde  $K = 2\pi k/N$  y  $l, k$  son enteros tales que  $0 \leq l, k \leq N-1$ . Destaquemos que la probabilidad  $|\psi_{lK}^0|^2$  de encontrar a la cuasi-partícula en un determinado nodo (átomo o molécula)

del sólido es constante e igual a  $1/\sqrt{N}$ , es decir, se trata de un estado que se extiende uniformemente sobre toda la red. Sustituyendo (2) en la ecuación (1) se obtiene la relación de dispersión

$$E_K^0 = \bar{\varepsilon} - 2J \cos(K), \quad (3)$$

donde el superíndice hace referencia explícita a la ausencia de desorden.

### 3. Red desordenada: límite perturbativo

En una red desordenada la energías  $\varepsilon_l$  son diferentes para los distintos nodos. Entonces podemos describir la ecuación (1) como

$$D_l \psi_l + \bar{\varepsilon} \psi_l - J(\psi_{l+1} + \psi_{l-1}) = E \psi_l, \quad (4)$$

donde  $D_l \equiv \varepsilon_l - \bar{\varepsilon}$  es la desviación de la energía del nodo respecto al valor medio. Supondremos en adelante que las variables no están correlacionadas espacialmente y que se distribuyen de acuerdo con la función de distribución

$$\mathcal{P}(D_l) = (2\pi\sigma^2)^{-1/2} \exp\left(-\frac{D_l^2}{2\sigma^2}\right), \quad (5)$$

por lo que su valor medio es nulo,  $\langle D_l \rangle = 0$ , y la desviación típica es  $\sigma = \langle D_l D_l \rangle^{1/2}$  (los corchetes  $\langle \dots \rangle$  indican promedio sobre la distribución  $\mathcal{P}$ ).

A continuación escribimos la ecuación (4) en la representación  $K$ . Para ello, debemos multiplicar (4) por una onda de Bloch (2) y sumar sobre todos los nodos de la red, con lo que se obtiene

$$(E - E_K^0) \psi_K = \sum_{K'} V_{KK'} \psi_{K'}, \quad (6)$$

donde  $E_K^0$  viene dada por (3) y las restantes variables son:

$$\psi_K = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l \psi_l \exp(iKl), \quad (7a)$$

$$V_{KK'} = \frac{1}{N} \sum_{l=0}^{N-1} D_l \exp[i(K - K')l]. \quad (7b)$$

Los elementos de matriz  $V_{KK'}$  son muy relevantes en la discusión que presentaremos a continuación. Los elementos diagonales,  $V_{KK}$ , indican simplemente un desplazamiento de la energía del estado  $K$  al introducir la perturbación

$$\Delta E_K = V_{KK} = \frac{1}{N} \sum_{l=0}^{N-1} D_l \quad (8)$$

cuyo valor resulta ser independiente del estado pero dependiente de la realización particular del desorden. Notemos, además, que el valor medio de este desplazamiento para diversas realizaciones es nulo puesto que  $\langle D_l \rangle = 0$ . Sin embargo, la varianza es no nula y viene dada por

$$\begin{aligned} B_{KK} &\equiv \langle (\Delta E_K)^2 \rangle = \frac{1}{N^2} \sum_{l,l'=0}^{N-1} \langle D_l D_{l'} \rangle = \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{l=0}^{N-1} \langle D_l^2 \rangle = \frac{\sigma^2}{N}. \end{aligned} \quad (9)$$

Para llegar a este resultado hemos tenido en cuenta que  $\langle D_l D_{l'} \rangle = 0$  cuando  $l \neq l'$ . Para una colección de redes, el desplazamiento en energía debido al desorden conduce al ensanchamiento inhomogéneo de los niveles.

Los elementos no diagonales,  $V_{KK'}$ , describen la mezcla (o dispersión) de los estados de las cuasi-partículas. Por esta razón, son las magnitudes responsables del fenómeno de localización. Nuevamente obtenemos  $\langle V_{KK'} \rangle = 0$  pues  $\langle D_l \rangle = 0$ , mientras que su varianza es

$$B_{KK'} \equiv \langle |V_{KK'}|^2 \rangle = \frac{\sigma^2}{N}. \quad (10)$$

La magnitud

$$\sqrt{B_{KK'}} = \frac{\sigma}{\sqrt{N}}$$

indica el valor típico de la fluctuación del acoplamiento  $V_{KK'}$  entre los diferentes estados. Para un tamaño de red dado, el desorden será *perturbativo* siempre que este acoplamiento sea menor que el espaciado de niveles en la red ordenada,  $\delta E^0$  (véase la figura 1a):

$$\delta E^0 \gg \frac{\sigma}{\sqrt{N}} \equiv \sigma_{\text{ef}}. \quad (11)$$

En este caso, la mezcla de estado de Bloch es muy débil y entonces esperamos que los estados perturbados estén muy extendidos sobre la red. En esta situación límite, las cuasi-partículas *ven* un desorden efectivo promediado, cuya magnitud está reducida un factor  $\sqrt{N}$  respecto al valor original,  $\sigma$ . Este efecto se conoce en la literatura científica como *estrechamiento por intercambio*. Nótese que es precisamente el valor de este desorden efectivo el que debe compararse con el espaciado de niveles para determinar si el desorden es o no perturbativo.

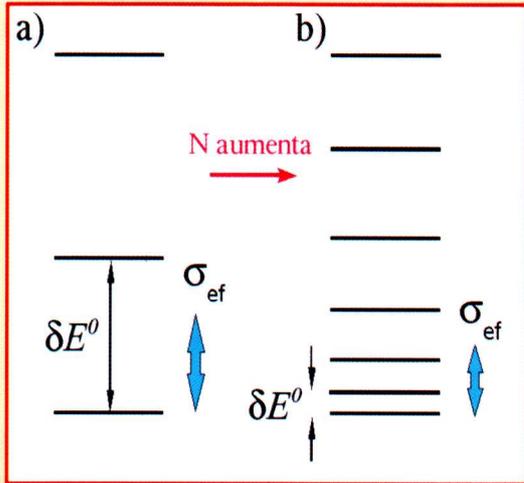
No obstante, sería erróneo concluir que los estados son extendidos cuando  $N \rightarrow \infty$  (límite termodinámico) a partir de los argumentos esgrimidos para el desorden perturbativo. Desde luego, la teoría de escala convencional predice que los estados deben ser localizados [6]. Desde nuestra perspectiva, la razón por la que los estados son realmente localizados estriba en el hecho de que las magnitudes  $\delta E^0$  y  $\sigma_{\text{ef}}$  escalan de manera diferente con el tamaño  $N$  de la red. Para concretarlo más, fijémonos en el fondo de la banda del sistema ordenado,  $K \ll 1$ , donde la relación de dispersión es parabólica  $E_K^0 = \bar{\varepsilon} - 2J + JK^2$  y el espaciado de niveles toma su valor mínimo. Entonces

$$\delta E^0 \cong \frac{4\pi^2 J}{N^2}. \quad (12)$$

Vemos, pues, que  $\delta E^0$  disminuye más deprisa que  $\sigma_{\text{ef}}$  al aumentar  $N$ . Por tanto, incluso si el desorden es perturbativo para un cierto tamaño y se cumple la condición (11), esta condición se invierte finalmente para un tamaño mayor (véase la figura 1b). Cuando esto ocurre, los estados de Bloch están fuertemente mezclados y aparece la localización, como debe ocurrir (véase la figura 2). Por tanto, la condición

$$\delta E^0 = \sigma_{\text{ef}}. \quad (13)$$

indica el inicio de la localización, en el sentido de que la longitud de localización es menor que el tamaño de la red.



**Figura 1.** Diagrama esquemático de desorden a) perturbativo y b) no perturbativo. Las líneas continuas indica los niveles más bajos en la red ordenada, siendo  $\delta E^0$  el espaciado de niveles. La flecha sombreada indica el valor del desorden efectivo  $\sigma_{ef} = \sigma/\sqrt{N}$ .

#### 4. Redes desordenadas: límite no perturbativo

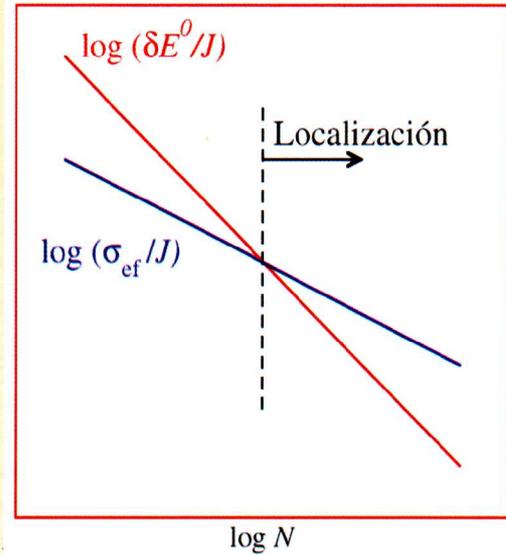
Cuando el desorden es elevado y el tamaño del sistema es grande, los estados son espacialmente localizados. Sin embargo, a pesar del desorden de la red, los niveles presentan una cierta regularidad, específicamente en los bordes de la banda, donde los efectos de localización son más acusados. Para mostrarlo, introduciremos brevemente lo que se ha dado en llamar *estructura oculta* de los niveles en los bordes de la banda de un sistema 1D desordenado [11-13]. De acuerdo con esto, los estados de más baja energía obtenidos para una realización particular del desorden se localizan en segmentos de longitud típica  $N^*$  (longitud de localización). Dichos niveles se agrupan en conjuntos de dos o incluso más estados que están localizados en el mismo segmento de longitud  $N^*$  (véanse los estados encerrados por elipses en la figura 3). Dentro de cada segmento, los niveles más bajos se ordenan de acuerdo con la ecuación (3), pero reemplazando el tamaño de toda la red,  $N$ , por la longitud típica del segmento,  $N^*$ . Conviene destacar que las funciones de onda asociadas a cada segmento recuerdan mucho a las conocidas funciones de una partícula cuántica en un pozo de potencial infinito, en el sentido de que tiene una simetría de paridad casi perfecta y que el número de nodos visibles de la función crece progresivamente con la energía.

Para determinar  $N^*$  seguiremos una regla autoconsistente propuesta por primera vez en la Ref. [11]. Para ello debemos recordar que los niveles más bajos de cada segmento se parecen a los niveles de un sistema ordenado pero de longitud  $N^*$ . En tal caso, la longitud de localización es exactamente la longitud de este sistema, por lo que podemos aplicar la condición (13) pero reemplazando  $N$  por  $N^*$ . Al hacerlo obtenemos

$$N^* = \left( \frac{4\pi^2 J}{\sigma} \right)^{2/3} = 11,59 \left( \frac{J}{\sigma} \right)^{2/3}. \quad (14)$$

El prefactor numérico depende ligeramente de las condiciones de contorno, y se puede encontrar sin dificultad que  $N^* = (3\pi^2 J/\sigma)^{2/3} \cong 9.57(J/\sigma)^{2/3}$  en redes abiertas.

A pesar de la aparente simplicidad de este razonamiento, la regla autoconsistente conduce a resultados sorprendentemente buenos. De hecho, un extensivo estudio numérico llevado a cabo en la Ref. [14] encontró que  $N^* = 8.71 (J/\sigma)^{0.67}$  en cadenas abiertas. Además, esta regla también permite analizar modelos donde el desorden es correlacionado [13].

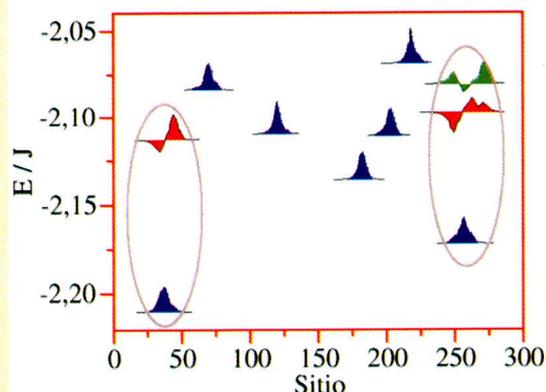


**Figura 2.** Diagrama esquemático del escalado del espaciado de niveles de la red ordenada,  $\delta E^0$ , y el desorden efectivo,  $\sigma_{ef}$ , para una magnitud de desorden suficientemente pequeña.

#### 5. Conclusiones

Hemos discutido el problema de localización de Anderson en redes 1D desordenadas, cerca del fondo de la banda. Para ello, hemos introducido una teoría de escala de dos parámetros, que son el espaciado de niveles en la red ordenada y el desorden efectivo detectado por la cuasi-partícula. El primero de ellos escala como  $\sim N^{-2}$  mientras que el segundo lo hace como  $\sim N^{-1/2}$ , por lo que es menor que el primero cuando nos aproximamos al límite termodinámico  $N \rightarrow \infty$ . Por tanto, las autofunciones resultan fuertemente mezcladas, con la consiguiente localización de las mismas. Un razonamiento similar en el centro de la banda, donde el espaciado de niveles escala como  $N^{-1}$ , nos permite afirmar que los estados también resultarán finalmente localizados en el límite termodinámico. Asimismo hemos formulado una regla autoconsistente para determinar la longitud de localización, que proporciona resultados sorprendentemente exactos cuando se compara con los obtenidos mediante técnicas numéricas.

Para acabar, nos gustaría destacar que la validez de nuestros argumentos de escala no se restringe a sistemas 1D. Como es sabido, el modelo de Anderson en redes 3D presenta una transición deslocalizado-localizado en el centro de la banda al aumentar el grado de desorden [3]. En este modelo, el espaciado de niveles en el centro de la banda escala como  $\sim N^{-1}$ , mientras que el desorden efectivo se comporta como  $\sim N^{-3/2}$ . Por tanto, si para un cierto tamaño el desorden es perturbativo, seguirá así al aumentar  $N$  puesto que ahora el desorden efectivo decrece más rápido que el espaciado de



**Figura 3.** Estados cerca del fondo de la banda, obtenidos por diagonalización de la ecuación (3) para una cadena con  $N=300$  y  $\sigma = 0.2J$ . La línea de base de cada función indica la energía del estado. Se observa que los estados se pueden agrupar en conjuntos (unidos por elipses), asociados a cada segmento de longitud típica  $N^*$ .

niveles, siendo entonces incapaz de localizar los estados. Por el contrario, cuando el desorden es grande comparado con el ancho de la banda, los estados serán localizados. Este tipo de razonamientos permite comprender el motivo por el que el modelo de Anderson en sistemas 3D presenta una transición deslocalizado-localizado en el centro de la banda. En consecuencia, podemos esperar que este análisis proporcione resultados correctos en determinados problemas de localización. Por ejemplo, cuando el intercambio es de largo alcance, nuestra teoría de escala predice que para cierto parámetro pueden aparecer estados extendidos en uno de los bordes de la banda, en redes 1D y 2D [15]. Esta predicción ha sido efectivamente verificada mediante métodos supersimétricos y cálculo numérico [16]. Debemos destacar que las ideas básicas presentadas en este trabajo sólo requieren

conocimientos de teoría de perturbaciones, pero no utiliza mecánica cuántica avanzada o teoría de campos. Por todo ello, creemos que pueden ser útiles para presentar la descripción de la estructura electrónica de sólidos no cristalinos en cursos introductorios de Física del Estado Sólido.

### Bibliografía

- [1] W. A. HARRISON, *Solid State Theory* (Dover Publications, New York, 1980).
- [2] J. M. ZIMAN, *Models of Disorder* (Cambridge University Press, Cambridge, 1979).
- [3] P. W. ANDERSON, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958).
- [4] Véase <http://www.nobel.se/physics/laureates/1977/>
- [5] N. F. Mott y W. D. Twose, *Adv. Phys.* **10**, 107 (1961).
- [6] E. ABRAHAMS, P. W. ANDERSON, D. C. LICCIARDELLO, y T. V. RAMAKRISHNAN, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 673 (1979).
- [7] D. J. THOULESS, *Rep. Prog. Phys.* **13**, 93 (1974).
- [8] P. A. LEE y T. V. RAMAKRISHNAN, *Rev. Mod. Phys.* **57**, 287 (1985).
- [9] B. KRAMER y A. MACKINNON, *Rep. Prog. Phys.* **56**, 1469 (1993).
- [10] E. Díez, A. SÁNCHEZ, y F. DOMÍNGUEZ-ADAME, *Revista Española de Física* **13**, N° 4, 23 (1999).
- [11] V. A. MALYSHEV, *Opt. Spekt.* **71**, 873 (1991) [*Opt. Spectr.* **71**, 505 (1991)]; *J. Lumin.*, **55**, 225 (1993).
- [12] V. MALYSHEV y P. MORENO, *Phys. Rev. B* **51**, 14587 (1995).
- [13] V. A. MALYSHEV, A. RODRÍGUEZ, y F. DOMÍNGUEZ-ADAME, *Phys. Rev. B* **60**, 14140 (1999).
- [14] A. V. MALYSHEV y V. A. MALYSHEV, *Phys. Rev. B* **63**, 195111 (2001).
- [15] A. RODRÍGUEZ, V. A. MALYSHEV, y F. DOMÍNGUEZ-ADAME, *J. Physics A: Math. & Gen.* **33**, L161 (2000).
- [16] A. RODRÍGUEZ, V. A. MALYSHEV, G. SIERRA, M. A. MARTÍN-DELGADO, J. RODRIGUEZ-LAGUNA y F. DOMÍNGUEZ-ADAME, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 27404 (2003).

**A. V. Malyshev, F. Domínguez-Adame y V.A. Malyshev**  
están en el GISC. Dpto. de Física de Materiales.  
Univ. Complutense de Madrid

## LIBROS Y PUBLICACIONES RECIBIDOS

- **Óptica Geométrica.** María Sagrario Millán, Jaime Escofet, Elisabet Pérez. Ariel Ciencia. 2004. 306 pp.
- **Entrelazamiento.** El mayor misterio de la Física. Amir D. Aczel. Editorial Crítica. 2004. 270 pp.
- **Anales de la Real Academia Nacional de Farmacia.** Vol. LXIX. N° 4. 2003.
- **Brazilian Journal of Physics.** Vol. 34. N°1. Marzo 2004.
- **La Gaceta de la Real Sociedad Matemática Española.** Vol. 7, N° 1. Abril 2004.
- **Nuclear España.** N° 239. Marzo 2004.
- **Physics Today.** Vol. 57. N° 3. Marzo 2004.
- **Europhysics News.** Vol. 35. N° 2. Abril 2004.
- **Journal of the Korean Physical Society.** Vol. 44. N° 2. Febrero 2004.
- **Ibérica,** actualidad tecnológica.
- **Revista Mexicana de Física.** Vol. 50. N° 1. febrero 2004.
- **Teorías del Todo.** Hacia una explicación fundamental del Universo. John D. Barrow. Editorial Crítica. 2004. 251 pp.