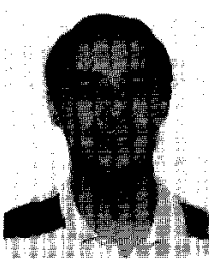
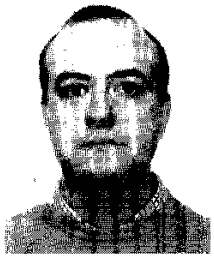
Revista Española de Física **13** (4), 1999

Conjetura que algo queda: el "teorema" de localización de Anderson

Enrique Díez, Angel Sánchez y Francisco Domínguez-Adame





ABSTRACT: When electrons are constrained to move within a plane or a straight line, strange things occur. For instance, under usual circumstances, they are expected not to conduct electricity at low temperatures. This lack of electrical conductivity in one- and two-dimensional random systems at zero temperature has been one of the most striking effects in Solid State Physics. Indeed, the 1977 Nobel prize for physics was awarded, partly, for the formulation of the *principle of localization*, which is the explanation of this phenomenon. However, nature once again surprised us: in the beginning of this decade, the generality of this property was questioned and, very recently, one of the most controversial theoretical predictions, the violation of localization when the disorder is correlated, has been experimentally confirmed.

1. UN POCO DE HISTORIA

Quizá con demasiada frecuencia encontramos situaciones en Física (¡y no sólo en Física!) en las que se han dado por válidas afirmaciones no suficientemente contrastadas. Tampoco son raras las ocasiones en las que se ha pretendido extrapolar conjeturas y admitir como ciertos *teoremas* que, real y rigurosamente, tienen una validez limitada. En estas líneas queremos presentar un ejemplo de un falso "teorema" o "principio" de la Física del Estado Sólido que no ha sido completamente desenmascarado hasta fechas muy recientes.

Nuestra historia comienza en 1958 con la publicación en Physical Review del artículo de Phil Anderson titulado *Ausencia de Difusión en Ciertas Redes Aleatorias* (*Absence of Diffusion in Certain Random Lattices*, [1]), en el que introdujo el modelo que ahora lleva su nombre, y que dio origen al concepto de localización de la función de onda debida al desorden presente en algunos sólidos no cristalinos. Este trabajo supuso una revolución ya que hasta entonces el pilar de la Física del Estado Sólido era el llamado teorema de Bloch, que afirma que en cualquier sólido *periódico* los estados electrónicos son extendidos, esto es, los electrones pueden encontrarse con igual probabilidad en cualquier región del mismo. Cuando el sólido es desordenado no se cumple este teorema, como ya se sabía, pero se ignoraban las características de los estados electrónicos en tal situación. El avance fundamental de Anderson fue demostrar que, si el desorden es suficientemente grande, los estados electrónicos son localizados, esto es, cada electrón ocupa un pequeño volumen del sistema, y un electrón en ese estado tiene una probabilidad despreciable de encontrarse en otra región del sólido. Es evidente que la existencia o no de estados extendidos afecta enormemente la conductividad eléctrica de los materiales: de hecho, se produce una transición de fase cuántica, al pasar de una fase metálica, en la que tenemos estados extendidos, a una fase aislante, en la que todos los estados son localizados. Esta transición metal-aislante, como todas las transiciones de fase cuánticas, ocurre a temperatura cero; el parámetro de control en estas transiciones no es la temperatura como ocurre en una transición líquido-vapor, sino algún otro parámetro externo, que en este caso es grado de desorden.

Poco después de la aparición del artículo de Anderson, Mott y Twose publicaron en 1961 un extenso trabajo en el que conjeturaron que, en una dimensión espacial, todos los estados electrónicos son localizados *sea cual sea el tipo y grado de desorden* [2]. A diferencia de lo que sucede en tres dimensiones, en este caso no existe un umbral en el grado de desorden para la aparición de estados localizados. Dado que se encontró un resultado similar para sistemas en dos dimensiones, se *postuló* que la transición metal-aislante antes mencionada sólo podría tener lugar en un sistema tridimensional, mientras que para una y dos dimensiones la única fase posible a temperatura cero de un sistema desordenado para *cualquier* tipo y *cantidad* de desorden sería la fase aislante. Por estos y otros trabajos, Phil Anderson y Neville Mott (que además fue hecho caballero) compartieron con John Van Vleck el Premio Nobel de Física en 1977 [3].

A estos trabajos pioneros siguieron más de cuarenta años de investigación sobre fenómenos de localización, área que se convirtió en muy activa dentro de la Física del Estado Sólido. Para el lector interesado en un tratamiento riguroso del origen de la *localización* de Anderson y

sus efectos sobre las propiedades de transporte, recomendamos la lectura de los artículos de revisión de Bergmann [4] y de Lee y Ramakrishnan [5]. Conviene mencionar que, además, se ha observado que los efectos de localización por desorden no son exclusivos de los electrones en los sólidos sino que aparecen también en sistemas *clásicos* constituidos por masas unidas mediante muelles o en la propagación de la luz en medios altamente desordenados, en donde aparecen modos de oscilación que quedan confinados en una zona reducida del espacio. Por tanto, la localización de Anderson es un fenómeno con alto grado de universalidad, lo que justifica el enorme esfuerzo dedicado a su estudio y comprensión durante tantos años. Todo este trabajo llevó finalmente a aceptar, aunque nunca hubo una prueba rigurosa, que los estados electrónicos en una y dos dimensiones en sistemas desordenados sólo podían ser localizados, para *cualquier* tipo y cantidad de desorden. Tal es el consenso sobre este punto que muchos libros de introducción a la Física de Estado Sólido lo recogen, y más de uno lo denomina "teorema" de localización; libros que habrán de ser corregidos porque, hoy día, por fin, sabemos que esta afirmación no es completamente correcta y es, de hecho, falsa en sistemas en los que el desorden presenta ciertos tipos de correlaciones. Veamos cómo se ha establecido esta conclusión.

2. LA DÉCADA DE LOS 90

La primera sacudida de consideración que afectó al "teorema" de localización ocurrió a causa de los trabajos publicados por César Flores a finales de 1989 [6] y por Dave Dunlap y colaboradores a mediados de 1990 [7]. Estos modelos se basan en la aproximación de enlace fuerte que es habitual en Física del Estado Sólido y que, para entender lo que sigue, resumiremos brevemente sin entrar en detalles técnicos. Con esta aproximación se pretende analizar el comportamiento de la función de onda de un electrón en un sólido en regiones mucho mayores que el volumen atómico. Si, por simplificar, suponemos que el átomo n-simo de un cierto sólido unidimensional tiene un único nivel de energía, ε_n, –la generalización al caso de muchos niveles no es difícil–, entonces la amplitud de la función de onda de un electrón con energía E en la posición del átomo n-simo, ψ_n, satisface la ecuación $E\psi_n = \varepsilon_n \psi_n - J(\psi_{n+1} + \psi_{n-1})$. En este modelo el parámetro J mide, en cierta manera, la facilidad con la que el electrón puede pasar de un átomo a otro vecino.

Si pretendemos describir un sólido desordenado, escogemos, por ejemplo, las energías ε_n de manera aleatoria. En el modelo de Anderson las energías ε_n están distribuidas de manera uniforme en un intervalo de anchura dada. La característica más importante es que las variables aleatorias ε_n son *independientes* unas de otras, diciéndose entonces que no hay *correlación* de ningún tipo. Y en este modelo si es cierto que todos los estados son localizados. Esta afirmación sigue siendo correcta cuando las variables aleatorias sólo pueden tomar dos valores, llamémosles ε_A y ε_B, pero siempre que no exista ningún tipo de correlación entre ellas (este es un ejemplo de aleación binaria desordenada unidimensional). ¿Qué ocurre si modificamos ligeramente las reglas para generar las energías ε_n? Para dar respuesta a esta cuestión, Dunlap y colaboradores [7] estudiaron la aleación binaria unidimensional desordenada pero con la salvedad de que las energías de un tipo, digamos ε_B, aparecen aleatoriamente en el sólido unidimensional pero siempre formando parejas, a las que llamaron *dímeros*. Esta manera de generar la secuencia de energías puede parecer artificial, pero algunos polímeros, como la polianilina, presentan realmente esta *correlación de corto alcance*. El resultado fundamental (y sorprendente, en un momento en el que nadie dudaba del "teorema" de localización) de estos investigadores fue que $\sqrt{N}$ estados electrónicos, siendo N el número de átomos de la cadena, parecían ser realmente deslocalizados. Más sorprendente aún es que dichos estados se concentran cerca de una energía determinada que no depende de la realización concreta del desorden ni de la fracción de dímeros sino que viene determinada por una cierta condición de resonancia. La primera y más inmediata aplicación de este resultado fue la posible explicación de la inusualmente elevada conductividad eléctrica de algunos polímeros dopados.

Como cabía esperar, este resultado atrajo a otros investigadores, que empezaron a trabajar en este y otros modelos discretos similares que parecían presentar también estados extendidos. En poco tiempo quedó claro que los estados electrónicos descubiertos por Dunlap y colaboradores eran realmente extendidos y bastante *robustos*, es decir, si se mejoraban los modelos incluyendo efectos no lineales y de la interacción electrón-electrón seguían existiendo. También se consideraron los sistemas clásicos análogos, y se comprobó que los efectos de la correlación de corto alcance también son importantes en sistemas constituidos por masas unidas mediante muelles, lo que implica que las correlaciones pueden originar efectos medibles notables en casi cualquier sistema físico desordenado. El problema es que no todo el mundo estaba de acuerdo con estos resultados y se llegó al extremo de que algún artículo que sostenía la existencia de estados extendidos fue rechazado en revistas de mucho prestigio porque el censor, pese a no encontrar ningún error, se negaba a aceptar que algo contrario al "teorema" de localización fuese correcto.

3. SUPERREDES CON DESORDEN INTENCIONADO

Pese a la relativamente abundante evidencia teórica en favor de la existencia de sistemas desordenados unidimensionales con estados extendidos, la generalidad de la comunidad científica los ignoró en buena medida y siguió creyendo el "teorema" de localización. Era, pues, patente la necesidad de la verificación experimental de las predicciones realizadas. Sin embargo, aunque dichas predicciones eran bastante claras, la pregunta fundamental se centraba en decidir qué sistema experimental era el más adecuado. Los polímeros conductores para los que se había propuesto el modelo de desorden correlacionado no eran, sin duda, los candidatos ideales ya que existe una multitud de factores –como la falta de control estructural– que podían hacer que los resultados no fueran concluyentes. Es entonces cuando nuestro grupo de trabajo propuso el camino que finalmente ha llevado a la comprobación experimental de unas predicciones que inicialmente eran un simple problema teórico; aparecen así en escena las *superredes de semiconductores*.

Es necesario ahora abrir un breve paréntesis para explicar someramente qué son las superredes de semiconductores. Estos sistemas mesoscópicos, de escala nanométrica, fueron propuestos originalmente por Leo Esaki en 1970, quien recibió por ello el Premio Nobel tres años más tarde, y consisten en una estructura formada por láminas muy finas (unos pocos nanometros) de dos materiales semiconductores, como son GaAs y $Ga_{1-x}Al_xAs$, de manera alternada. Los portadores presentes en el sistema se mueven bajo la acción de un potencial originado por las discontinuidades de las bandas de conducción, E_c, y de valencia, E_v, de ambos semiconductores, según se indica en la Figura 1, con una masa efectiva que es significativamente menor que la masa un electrón

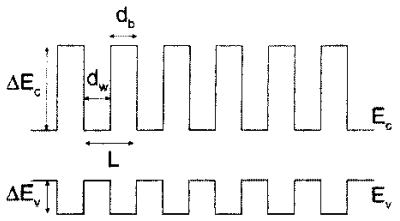


Figura 1. Perfiles de los bordes de las bandas de conducción, E_c, y de valencia, E_v, en una superred $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$. Las barreras están constituidas por $Ga_{1-x}Al_xAs$ mientras que los pozos son de GaAs.

libre. Los valores de las discontinuidades ΔE_c y ΔE_v dependen de los semiconductores que forman la superred, pero en el caso que nos ocupa están típicamente entre 100 y 300 meV. Si la superred es periódica, es decir, las capas se repiten ordenadamente, entonces aparecen minibandas de energía, similares a las bandas en un cristal pero mucho más estrechas, y los estados electrónicos son extendidos.

Estas superredes, que tienen numerosas aplicaciones tecnológicas que sería muy largo resumir aquí, entran en nuestra historia porque a mediados de los años ochenta se utilizaron para demostrar experimentalmente la localización de Anderson. Para ello, se fabricaron y midieron superredes en las que los valores de las anchuras de las láminas, denotadas por d_b y d_w en la Figura 1, se eligieron de manera completamente aleatoria. Así se pudo observar experimentalmente, mediante el estudio de propiedades ópticas, que los estados electrónicos son localizados, de acuerdo con la teoría de Anderson. De esta manera, al iniciarse esta década había bastante evidencia experimental de la existencia de la localización de Anderson, sobre todo en superredes de semiconductores $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ desordenadas intencionadamente. Ello fue posible gracias al enorme desarrollo en los últimos años de la técnica de epitaxia de haces moleculares (MBE, del inglés *Molecular Beam Epitaxy*), que permite crecer estructuras con el tipo y cantidad de desorden que queramos, libres practicamente de imperfecciones no deseadas. Las superredes fueron así un laboratorio ideal para comprobar las predicciones teóricas de los efectos del desorden.

A la vista del éxito de los experimentos encaminados a comprobar la existencia de localización de Anderson en superredes de semiconductores, nuestro grupo comenzó el trabajo teórico necesario para generalizar el modelo de Dunlap y colaboradores y aplicarlo a las superredes. Este paso era imprescindible, ya que en el modelo discreto de Dunlap y colaboradores la aparición de estados extendidos depende de una condición de resonancia que podría no ser válida en situaciones más realistas. Por ello, estudiamos un modelo continuo del tipo Kronig-Penney, como aparece en los textos de introducción a la Física del Estado Sólido, donde consideramos la presencia de desorden correlacionado en las intensidades de los potenciales tipo δ de Dirac [8]. Afortunadamente, fuimos capaces de encontrar una condición de resonancia que originaba también estados extendidos y comprobamos, además, que las propiedades de transporte eran muy diferentes cuando existen correlaciones de corto alcance.

Este resultado positivo nos motivó a avanzar en el estudio de la superredes de semiconductores como candidatas a la verificación experimental de la existencia de estados extendidos en sistemas con desorden correlacionado. El modelo que propusimos fue una superred con pozos de dos anchuras diferentes mientras que las barreras presentaban todas la misma anchura. Los pozos se sitúan al azar a lo largo de la superred, pero se impone la condición de que uno de ellos siempre aparezca formando parejas (*dímeros*). Finalmente llegamos a la *conclusión teórica* de que las superredes de semiconductores con desorden correlacionado pueden presentar transporte cuasi-balístico y de que incluso la presencia moderada de defectos de crecimiento no intencionados –algo que es inevitable en cualquier superred real– no destruía por completo las buenas propiedades de transporte [9].

4. COMPROBACIÓN EXPERIMENTAL

Los resultados que acabamos de resumir eran muy prometedores pero, debemos admitirlo, los modelos tenían sus limitaciones y por tanto sus predicciones debían contrastarse con los experimentos. Para llevar acabo esta comprobación convencimos (¡no sin esfuerzo!) a un grupo del Paul Drude Institut für Festkörperelektronik de Berlin, uno de los mejores laboratorios del mundo en el crecimiento de heterorestructuras semiconductoras, y a otro de la Universitá degli Studi di Pavia, que tenía experiencia en la caracterización óptica y eléctrica de superredes de semiconductores, para iniciar una colaboración tendente a resolver de una vez por todas este asunto. Finalmente, se crecieron tres tipos de superredes de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ mediante epitaxia por haces moleculares con 200 barreras de 3.2 nm de espesor. En la superred *ordenada* los 200 pozos eran todos iguales con un espesor de 3.2 nm. En la superred *desordenada*, 58 de los pozos, de manera aleatoria en la superred fueron fabricados con un espesor de 2.6 nm, mientras que en la superred *correlacionada* se impuso que estos 58 pozos aparecieran aleatoriamente pero en parejas [10]. De esta manera pudimos comparar los efectos del desorden, correlacionado o no, con los resultados de las superredes ordenadas.

En una primera etapa del trabajo se realizó la caracterización óptica de las muestras mediante medidas de fotoluminiscencia desde 11 K hasta temperatura ambiente. Se encontró que las superredes presentan un máximo de emisión bien definido pero cuya energía depende del tipo de superred [10]. En el caso de la superred *ordenada* el máximo de la emisión se sitúa en 1.688 eV, mientras que en la superred *desordenada* aparece en 1.72 eV y en la superred *correlacionada* la espectro de emisión está centrado en 1.70 eV. Estos valores de la energía coinciden razonablemente bien con los valores que predecían nuestros modelos teóricos para los tres tipos de superredes, indicando que las predicciones que habíamos formulado eran fundamentalmente correctas.

La prueba definitiva de la presencia de estados extendidos en la superred *correlacionada* vino de las medidas de transporte. Se determinó la resistencia eléctrica de los tres tipos de superredes en función de la temperatura, medida recogida en la Figura 2. La resistencia eléctrica de la superred *correlacionada*, por debajo de unos 40 K, es muy similar a la observada en superredes *ordenadas*, como debería ocurrir de ser ciertas nuestras predicciones teóricas (las pequeñas diferencias entre ambas se debe a una menor anchura en la superred *correlacionada* del intervalo de energía donde se sitúan los estados extendidos). Por el contrario, la superred *desordenada* presenta una resistencia mucho mayor, consistente con la presencia de estados localizados. Otra prueba a favor de esta interpretación radica en el hecho de que la resistencia de la superred *desordenada* depende de la temperatura en todo el rango, mientras que en las otras dos superredes se observa una región a baja temperatura en que la resistencia es constante e independiente de la temperatura, señal inequívoca de transporte electrónico a través de estados extendidos.

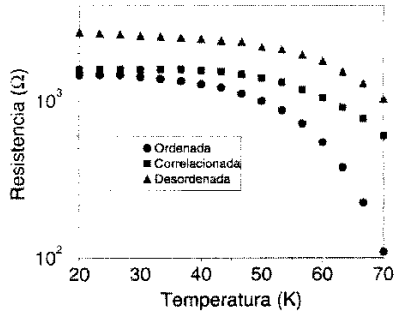


Figura 2. Dependencia de la resistencia eléctrica en función de la temperatura en superredes $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$.

5. CONCLUSIONES

A lo largo de esta exposición hemos discutido el uso y el abuso del *mal* llamado teorema de localización. Es cierto, y así lo indican tanto los resultados teóricos como los datos experimentales, que en general los sistemas de baja dimensionalidad con desorden *no* correlacionado presentan estados localizados. Sin embargo, ha quedado establecido que este resultado no es cierto cuando el desorden presenta correlación de algún tipo. Este hecho se puso de manifiesto con los trabajos ya citados de comienzos de la presente década, pero ha quedado definitivamente clarificado, a nuestro juicio, con los resultados experimentales que hemos obtenido. Es oportuno señalar que la aparición de estados extendidos en sistemas con desorden correlacionado no se restringe al tipo de correlación de corto alcance que hemos presentado: así, Moura y Lyra [11] han encontrado recientemente evidencias de estados extendidos cuando la correlación es de largo alcance. Este hecho tiene una enorme relevancia en el estudio del transporte en sistemas biológicos como la secuencia de nucleóticos en las moléculas de ADN, sistemas que no son periódicos pero que por contener información presentan este tipo de correlaciones. Por otra parte, la posibilidad de tener estados extendidos en sistemas desordenados con unas características especiales, controlables mediante el grado y tipo de desorden, abre un enorme campo a posibles aplicaciones prácticas de estos resultados. Sin embargo, aparte de la importancia que tenga o deje de tener el ejemplo que hemos discutido aquí, queda, creemos, otra conclusión de carácter más general: los teoremas han de ser demostrados, y han de serlo de manera que queden claras las hipótesis necesarias para que sean válidos. Aceptarlos sin prueba, y defenderlos sólo con la fe en su certidumbre (escondiendo la cabeza como el avestruz), es un serio error originado normalmente por un estudio meramente superficial del problema, error que los investigadores en cualquier campo, fieles al método científico, deberíamos ser muy cuidadosos en evitar.

Es de justicia dar las gracias a Rainer Scharf, que fue la persona que nos introdujo al trabajo de Dave Dunlap, iniciando así nuestra investigación en esta línea. Gracias también a las personas con las que hemos colaborado y, en particular, a Enrique Maciá, Gennady Berman, Felix Izrailev y Miguel Angel Rodríguez, por numerosas y muy inspiradoras discusiones. Esta investigación ha sido financiada por la DGES (Proyecto PB96-0119) y por la CAM (Proyecto 07N/0034/98).

BIBLIOGRAFÍA

[1] ANDERSON, P.W. (1958): *Phys. Rev.* **109**, 1492.
[2] MOTT, N.F. Y TWOSE, W.D. (1961): *Adv. Phys.* **10**, 107.
[3] Se puede encontrar información sobre cada uno de los premiados en la dirección de Internet http://www.nobel.se/laureates/physics-1977.html
[4] BERGMANN, G. (1984): *Phys. Rep.* **107**, 1.
[5] LEE, P.A. Y RAMAKRISHNAN, T.V. (1985): *Rev. Mod. Phys.* **57**, 287.
[6] FLORES, J.C. (1989): *J. Phys.: Condens. Mater* **1**, 8471.
[7] DUNLAP, D.H., WU, H.L. Y PHILLIPS, P. (1990): *Phys. Rev. Lett.* **65**, 88.
[8] SÁNCHEZ, A. Y DOMÍGUEZ-ADAME, F. (1994): *J. Phys. A: Math. Gen.* **27**, 3725.
[9] DÍEZ, E., SÁNCHEZ, A. Y DOMÍNGUEZ-ADAME, F. (1995): *IEEE J. Quantum Electron.* **31**, 1919.
[10] BELLANI, V., DÍEZ, E., HEY, R., TONI, L., TARRICONE, L., PARRAVICINI, G.B., DOMÍNGUEZ-ADAME, F. Y GÓMEZ-ALCALÁ, R. (1999): *Phys. Rev. Lett.* **82**, 2159.
[11] MOURA, F.A.B.F. Y LYRA, M.L. (1998): *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3735.

E. Díez y A. Sánchez
están en el Dpto. de Matemáticas de la Universidad Carlos III de Madrid
F. Domínguez-Adame
está en el Dpto. de Física de Materiales de la U.C.M.

El Departamento de Física de los Materiales de la UNED en colaboración con el Servicio de Radiofísica y Radioprotección del Hospital Universitario de la Paz

Ofrece

A través del Programa de Formación del Área de la Salud

EL CURSO DE EXPERTO PROFESIONAL

ASPECTOS FÍSICOS DEL USO DE LAS RADIACIONES EN MEDICINA. RADIOPROTECCIÓN

(Código 112)

Plazo de matrícula: hasta el 15 de Octubre. *Duración*: 6 meses.
Precio: 36.414 ptas. *Dedicación*: 150 horas (Metodología a distancia)