

# DENSIDAD DE ESTADOS DE MODELOS DESORDENADOS

D. Domínguez\* y C. Wiecko\*\*

Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica, CC 439, 8400 San Carlos de Bariloche

Desarrollamos, a partir de una representación del modelo tight-binding para redes hipercúbicas desordenadas en producto directo de estructuras unidimensionales, una aproximación que permite calcular la densidad de estados a través del conocimiento de autovalores y autoestados en una dimensión. Dado que está basada en las propiedades de localización en cadenas desordenadas, la aproximación trabaja bien en la región de parámetros donde CPA falla. Presentamos resultados numéricos para la aleación binaria, donde reproducimos la estructura de picos de la banda minoritaria, y para el desorden gaussiano, donde obtenemos correctamente el comportamiento exponencial de la cola de la densidad de estados.

La idea central de este trabajo es obtener aproximaciones para el cálculo de las propiedades espectrales de sistemas desordenados en dimensión  $d \geq 2$  a partir del conocimiento de autovalores y autoestados en una dimensión. Estudiamos un modelo "tight-binding" para electrones en un medio desordenado con desorden diagonal<sup>1</sup>. Escribimos la matriz del hamiltoniano en términos de producto directo de matrices:

$$H = \sum_{ijk} \epsilon_{ijk} A_k \otimes A_j \otimes A_i + A_k \otimes A_j \otimes B_1 + \quad (1)$$

$$+ A_k \otimes B_j \otimes A_i + B_k \otimes A_j \otimes A_i$$

donde los índices  $i, j, k$  identifican las coordenadas discretas  $x, y, z$  de un sitio en una red cúbica,  $\epsilon_{ijk}$  es la energía de sitio (que es una variable aleatoria en el modelo), y las matrices  $A_L$  de sitio y  $B_L$  de "hopping" están definidas en términos de proyectos:

$$A_L = |L\rangle\langle L| \quad (2)$$

$$B_L = |L\rangle\langle L+1| + |L+1\rangle\langle L|$$

Esta manera de escribir  $H$  refleja explícitamente la simetría de dilución dimensional de estructuras hipercúbicas hace poco señalada por Pastawski y Wiecko<sup>2</sup>.

En (1) podemos separar hamiltonianos bloque que corresponde a cadenas unidimensionales a partir de los dos primeros sumandos de (1), los cuales identificamos como:

$$H_{jk} = \sum_i \epsilon_{ijk} A_i + B_1 \quad (3)$$

Dado que en una dimensión todos los autoestados están exponencialmente localizados en sistemas desordenados<sup>3</sup>, vamos a diagonalizar los  $H_{jk}$  con matrices unitarias  $U_{jk}$  cuyas columnas son los autoestados ordenados según su sitio de localización:

$$U_{jk}^{-1} H_{jk} U_{jk} = D_{jk} \text{ (diagonal)} \quad (4)$$

Al efectuar la transformación unitaria (4) (que para  $H$  vendría dada por  $U = \sum_{jk} A_k \otimes A_j \otimes U_{jk}$ ) los dos últimos sumandos de (1) que conectan las cadenas  $jk$  entre sí en la red cúbica son transformados en una serie complicada de términos. La aproximación consiste en dejarlos invariantes frente a la transformación (4) lo cual es adecuado en el límite de desorden grande donde hay localización fuerte de los autoestados de las cadenas  $jk$ . Entonces, luego de aplicar (4) y afectar la aproximación antedicha, queda el hamiltoniano efectivo:

$$H'_{ef} = \sum_{ijk} \epsilon_{ijk}^{(1)} A_k \otimes A_j \otimes A_L + A_k \otimes B_j \otimes A_L + \quad (5)$$

$$+ B_k \otimes A_j \otimes A_L$$

donde  $\epsilon_{ijk}^{(1)}$ , las nuevas energías de sitio, son los autovalores de los  $H_{jk}$  ordenados según su sitio de localización  $L$ . Es fácil ver que  $H'_{ef}$  representa un ensamble de sistemas bidimensionales desacoplados.

El segundo paso del método consiste en separar nuevamente hamiltonianos bloque unidimensional es a partir de los dos primeros sumandos de (5), a los que llamamos  $H_{Lk}$  (pues llevan una suma sobre  $j$ ). Nuevamente, efectuamos la transformación unitaria que diagonaliza los  $H_{Lk}$  y, bajo la misma aproximación que en el paso anterior, escribimos el nuevo hamiltoniano efectivo:

$$H''_{ef} = \sum_{lmk} \epsilon_{lmk}^{(2)} A_k \otimes A_m \otimes A_L + B_k \otimes A_m \otimes A_L \quad (6)$$

\* Becario del CONICET

\*\* Miembro de la Carrera del Investigador del CONICET

donde  $\epsilon_{Lk}^{(2)}$  son los autovalores de los  $H_{Lk}$  ordenados según su sitio de localización  $m$ . Ahora  $H_{ef}^{(3)}$  consiste en un ensemble de cadenas unidimensionales desacopladas con índice  $Lm$  que pueden ser diagonalizadas directamente en el último paso del método.

Los autovalores  $\epsilon_{Lmn}^{(3)}$  así obtenidos consisten en nuestra "aproximación de autoestados localizados" (LEA según sus siglas en inglés) para el espectro de una red cúbica desordenada. En general, para un problema de  $d$  dimensiones, el LEA requiere  $d$  pasos.

Vamos a remarcar que el método está basado en dos aserciones: a) la suposición de que todos los estados localizan en sitios distintos en una dimensión; b) la aproximación de que las transformaciones unitarias dejan invariantes los términos que conectan cadenas.

Hemos comprobado numéricamente que ambas suposiciones funcionan bien cuando el desorden es fuerte<sup>4</sup>.

Finalmente vamos a ilustrar el funcionamiento de LEA mediante dos ejemplos.

Primero analizamos el caso del desorden gaussiano, en el que los  $\epsilon_{ijk}$  tienen la distribución de probabilidad:

$$\rho(\epsilon) = \frac{1}{\sqrt{2\pi w}} e^{-\epsilon^2/2w^2} \quad (7)$$

Comparamos numéricamente los resultados que se obtienen mediante LEA con el método de Dean<sup>7</sup> que permite obtener la densidad integrada de estados exactamente pero con el costo de mucho tiempo de computación. En la figura 1 mostramos la densidad integrada de estados cuando el desorden gaussiano es  $W = 3$ . Se ve que el acuerdo de LEA (lí-

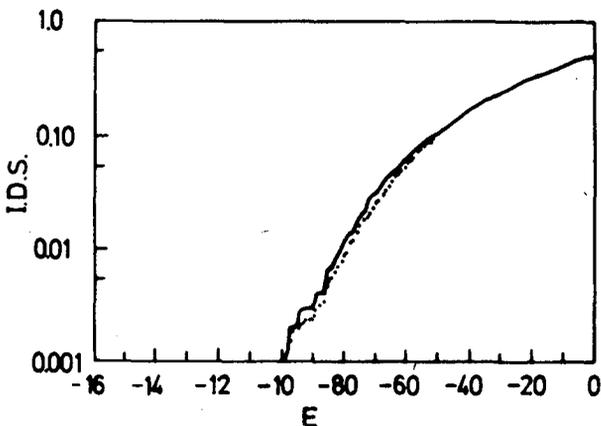


Figura 1: Densidad integrada de estados (IDS) para el modelo con desorden gaussiano,  $W = 3$ . Línea punteada: método de Dean (exacto), línea de puntos: aproximación LEA.

nea punteada) con los resultados exactos (línea sólida) es excelente. En particular, verificamos que las colas de la densidad de estados verifican la ley:

$$D(E) \approx e^{-|E|/2AW^2} \quad (8)$$

obteniendo valores de  $A$  coincidentes (en un 5%) con valores obtenidos numéricamente en un trabajo reciente<sup>5</sup>. La eficacia de LEA deja de ser buena para desórdenes menores que  $W \approx 2$ .

En segundo lugar analizamos el problema de la aleación binaria que corresponde a:

$$\rho(\epsilon) = c \delta(\epsilon + W) + (1 - c) \delta(\epsilon - W) \quad (9)$$

En la figura 2 mostramos los resultados para la densidad de estados obtenida con LEA (línea punteada) con los resultados del método de Dean (línea sólida), para concentración  $c = 0.1$  y desorden  $W = 5$ .

Vemos que LEA reproduce bien los bordes de banda y gaps del modelo y la estructura de tres picos de la banda minoritaria, aunque no concuerda bien con la forma general de la banda mayoritaria. Esto es consistente con las aproximaciones del método pues en la banda minoritaria es donde hay localización. Usualmente se calcula la densidad de estados en este modelo mediante CPA<sup>6</sup>, pero este método no puede reproducir la estructura de picos de la banda minoritaria, en cambio LEA sí.

En conclusión, hemos implementado un método numérico para calcular densidades de estado en modelos con desorden diagonal que permite obtener buenos resultados donde CPA falla y que requiere poco tiempo de computación (puede hacerse en interactivo de VAX) comparada con métodos de diagonalización exacta.

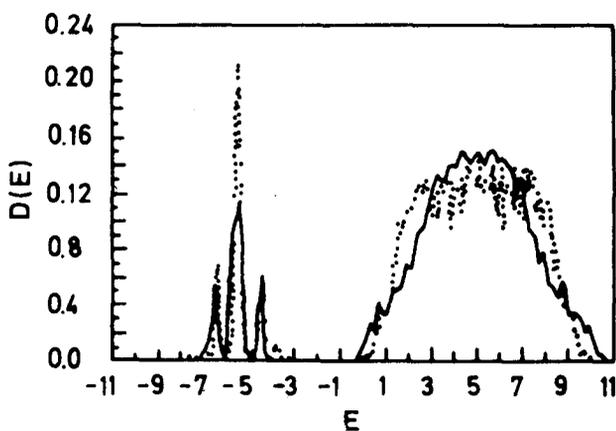


Figura 2: Densidad de estados para la aleación binaria,  $c = 0.1$ ,  $W = 5$ . Línea punteada: método de Dean (exacto), línea de puntos: aproximación LEA.

## REFERENCIAS

1. J. M. Ziman, *Models of Disorder* (Cambridge University Press, Cambridge, 1979).
2. H. M. Pastawski y C. Wiecko, *Phys. Rev. A* 36, 5854 (1987).
3. K. Ishii, *Supp. Pro. Theor. Phys.* 53, 77 (1973).
4. D. Dominguez y C. Wiecko, enviado a *Phys. Rev. B*.
5. Q. Li, C. M. Soukoulis, E. N. Economou, *Phys. Rev. B* 37, 8289 (1988).
6. P. Soven, *Phys. Rev.* 156, 809 (1967).
7. P. Dean, *Rev. Mod. Phys.* 44, 127 (1972).