

# Índice general

<b>1. El comienzo</b>	<b>3</b>
1.1. La motivación del estudio . . . . .	3
1.2. Objetivo . . . . .	5
<b>2. Introducción</b>	<b>6</b>
2.1. La física de los semiconductores . . . . .	6
2.1.1. Impurezas . . . . .	7
2.1.2. Mecanismos de relajación . . . . .	8
2.1.3. Transición Metal-Aislante . . . . .	9
2.1.4. Teoría de Matsubara -Toyozawa . . . . .	12
2.1.5. Mecanismo de relajación de espín ISA . . . . .	13
2.1.6. Time Resolved Faraday Rotation . . . . .	14
<b>3. Teoría</b>	<b>16</b>
3.1. Método de masa efectiva . . . . .	16
3.2. Bases No Ortogonales en Mecánica Cuántica . . . . .	17
3.2.1. Transformación de base no unitaria . . . . .	20
3.2.2. Operador unidad . . . . .	21
3.2.3. Evolución temporal . . . . .	22
3.2.4. Problema generalizado de autovalores . . . . .	23
3.3. Concepto de Decaimiento . . . . .	23
3.3.1. Tiempo de relajación . . . . .	26
3.3.2. Relación de indeterminación de energía-tiempo . . . . .	28
3.3.3. Percolación . . . . .	29
<b>4. Resultados</b>	<b>31</b>
4.1. Integrales de energía y <i>Overlap</i> . . . . .	32
4.2. Cadena Lineal . . . . .	32
4.2.1. Polarización en cadenas de espines . . . . .	33
4.2.2. Cadena Cuasi-periódica . . . . .	34
4.2.3. Cadena Periódica . . . . .	41
4.2.4. Sistemas Desordenados . . . . .	44
4.2.5. Localización y Transición . . . . .	46
4.3. Sistemas Bidimensionales . . . . .	47
4.3.1. Sistemas Ordenados . . . . .	47
4.3.2. Sistemas Desordenados . . . . .	49

4.3.3. Localización y Transición . . . . .	50
<b>5. Conclusiones</b>	<b>56</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>59</b>

# Capítulo 1

## El comienzo

### 1.1. La motivación del estudio

La posibilidad de utilizar el espín del electrón como unidad de información hizo que en las últimas décadas la atención sobre esta propiedad de los electrones creciera considerablemente. El espín del electrón se puede utilizar para almacenar información. El espín, al estar ligado a una carga que bajo determinadas condiciones se mueve, transporta la información. Para explotar entonces esta utilidad es necesario que el tiempo de vida del estado sea suficientemente largo y que no cambie antes de ser medido. Kikkawa y Awschalom [1], en su artículo de 1998, reportaron tiempos de relajación de espín en materiales semiconductores (*bulk*) de más de 100 ns en GaAs con una concentración de donores de alrededor de  $10^{16} \text{cm}^{-3}$ , renovando el interés de este tipo de materiales en posibles dispositivos espintrónicos. Posteriormente, en 2002, la investigación de Dzhioev [2] *et.al* presentaba resultados de la dependencia del tiempo de relajación en función de la densidad del donores. En la Fig. 1.1 tomada de la Ref. [2] se observa que hay un comportamiento peculiar en  $2 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3}$  que está asociado a la transición metal-aislante (MIT) que ocurre en la banda de impurezas del semiconductor n-dopado. La física alrededor de esta transición permanece hasta el día de hoy sin ser completamente explicada, a pesar de la proliferación de investigaciones en esta área. Varios factores contribuyen a la complejidad del estudio, entre ellos la correlación electrónica y el desorden en el sistema. El estudio de la relajación de espín de electrones en la banda de impurezas, y en particular, cerca de MIT, es el objetivo general de la línea de investigación en la cual se encuadra esta tesis. Dado que el transporte de carga ha sido muy estudiado en este régimen, actualmente el desafío es entender la relación entre el espín y las propiedades de transporte en sistemas con densidades cercanas a la crítica.

En primer lugar, se deben identificar los diferentes mecanismos de relajación según sus principios físicos y el papel y relevancia de cada uno en los distintos regímenes. A

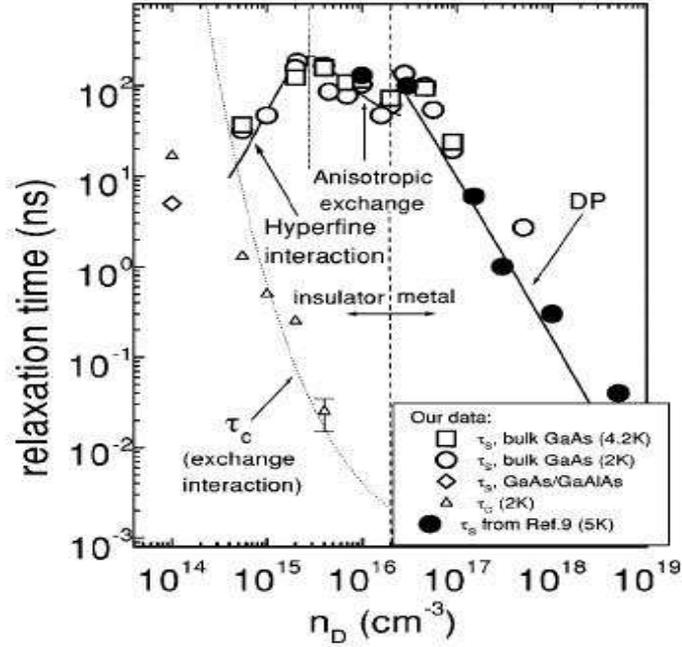


FIG. 3. Spin-relaxation time  $\tau_s$  and spin-correlation time  $\tau_c$  as functions of donor concentration in  $n$ -GaAs. Solid lines: theory.

Figura 1.1: Tiempos de relajación en función de la densidad. La curva pertenece a los resultados experimentales obtenidos por Dzhioev *et. al* en la referencia [2]

propósito de esto, en un trabajo reciente Shklovskii [3] estudió la relajación de espín mediante el mecanismo de D'yakonov-Perel para electrones de la banda de conducción cerca de la transición metal-aislante. Por su parte, Tamborenea, Weinmann y Jalabert [4] propusieron un nuevo mecanismo (ISA) de relajación de espín en la banda de impurezas que también debe considerarse en densidades cercanas a la crítica. Mientras que el mecanismo de D'yakonov-Perel relaciona directamente la coherencia del espín con la relajación del momento, en el ISA la relajación del espín se relaciona con un tiempo medio de salto entre impurezas (*mean hopping time*).

El estudio del transporte dependiente del espín ya había sido de interés en trabajos anteriores en sistemas que presentaban el fenómeno de Magnetoresistencia Gigante, cuyo descubrimiento fuera reportado en 1988 por Fert y Grünberg (aunque lo hicieron en forma independiente, ambos ganaron el Premio Nobel de Física por eso en 2007).

Hoy en día también se estudian estos fenómenos en sistemas de baja dimensionalidad. ¿Qué significa baja dimensionalidad? La escala de longitud de un electrón libre es de aproximadamente 100 angstroms (1 angstrom =  $10^{-10}$  metros). Entonces, cuando se estudia un sistema en el cual la escala en una de sus dimensiones es menor, decimos que el electrón está confinado en esa dimensión. Por ejemplo, los *quantum wires* son esencial-

mente estructuras en las que el electrón es capaz de propagarse en una única dimensión dando lugar a una conductancia no nula. Por el contrario, en un *quantum well* los electrones se pueden mover en dos dimensiones y los *quantum dots* confinan las tres dimensiones. Lejos de ser sólo idealizaciones, la fabricación de estas nanoestructuras se ha convertido, a partir de la utilización de la litografía (a mediados de 1980), en una verdadera “ingeniería” que busca controlar de manera precisa los tamaños de las muestras [5].

## 1.2. Objetivo

Como se mencionó anteriormente, el objetivo general del proyecto es entender la relajación de espín en la banda de impurezas. Para esto, uno de los objetivos particulares es calcular por medio de simulaciones numéricas el tiempo de relajación del espín en sistemas con un número finito de impurezas, considerando para ello el mecanismo ISA mencionado anteriormente.

El objetivo general de esta tesis es la familiarización con la dinámica cuántica de un electrón en la banda de impurezas. Específicamente, hacer una caracterización teórica y numérica de procesos de decaimiento o relajación en dicho sistema.

Los objetivos principales de este trabajo son tres. Primero, formular la teoría de la evolución cuántica de un electrón en sistemas de impurezas utilizando un modelo hidrogenoide para éstas. Dado que al haber desorden en la distribución de las impurezas no existe ninguna restricción respecto de la distancia mínima entre éstas [6], no se utiliza la aproximación de funciones ortogonales y entonces se incluye el *overlap* en el cálculo. Segundo, para estudiar la dinámica se desarrollan programas numéricos para computar la evolución cuántica en sistemas de impurezas con un ordenamiento lineal y bidimensional. Para estudiar el efecto del desorden, se distribuyen aleatoriamente las impurezas. En este caso el desorden es estructural, a diferencia de muchos trabajos que introducen el desorden en los elementos diagonales y no-diagonales del Hamiltoniano de manera prescriptiva a través de una dada distribución de probabilidad. Como tercer objetivo se pretende establecer el grado de corrección de aproximaciones utilizadas usualmente en la literatura: exclusión de las integrales de energía que involucran tres centros (las tres impurezas en el *hopping* están ubicadas en posiciones diferentes) y de las integrales de *overlap*. Las integrales de tres centros son del tipo  $\langle \Phi_i | V_m | \Phi_j \rangle$  donde  $V_m$  es el potencial generado por la impureza  $m$  ( $\neq i, j$ ).

En la próxima sección se presenta de manera introductoria temas de la física relacionados con los semiconductores, empezando por una descripción general de estos sistemas hasta los modelos que explican la transición metal-aislante.

# Capítulo 2

## Introducción

### 2.1. La física de los semiconductores

Cuando hablamos de materiales conductores y aislantes la mayoría de la gente sabe de lo que se trata. Sin embargo hay un tercer tipo de material que no goza de mucha popularidad, pero que está presente en todos los dispositivos electrónicos de nuestra vida cotidiana: el semiconductor. Un semiconductor no tiene las propiedades ni de un aislante ni de un conductor, sino que está ubicado en una posición intermedia, es decir que bajo determinadas condiciones es capaz de conducir corriente eléctrica [7]. La característica común a todos los semiconductores es que a medida que aumenta la temperatura, la resistividad del material decrece (al contrario que un metal). A temperatura  $T = 0 K$  (cero absoluto) la conductividad es nula. En la física de la materia condensada, todas estas propiedades encuentran su explicación en la denominada estructura electrónica de bandas del material. Algunos conceptos son esenciales para entender esto al menos cualitativamente. Un semiconductor cristalino consiste en un arreglo de iones ordenados periódicamente, en el cual un electrón puede estar ligado a un ión si su energía está en un determinado rango de valores (aquel correspondiente a la banda de valencia) o bien puede moverse libremente por el cristal en caso de estar en la banda de conducción. La Fig. 2.1 ayuda a visualizar este concepto. Vemos que entre la banda de conducción y la de valencia hay una zona donde la densidad de estados es nula, es decir, que es una zona prohibida y ningún electrón puede tener una energía correspondiente a este *band gap*. Típicamente en un semiconductor la diferencia de energía entre el máximo de la banda de valencia y el mínimo de la de conducción (es decir el valor del *band gap*) es de 1 o 2 eV, mientras que en un aislante es de 6 eV. El valor del *gap* en un semiconductor es suficientemente chico como para que la energía térmica permita que un electrón salte de la banda inferior a la superior. Consecuentemente, la conductividad a  $T = 0 K$  es nula y a medida que crece la temperatura, una mayor cantidad de electrones pasan a la banda de conducción,

aumentando así la conductividad del material.

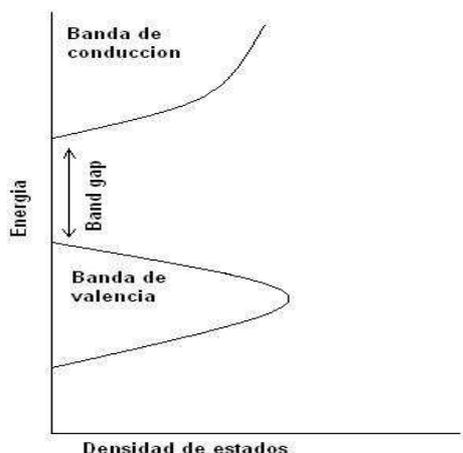


Figura 2.1: Esquema típico de la densidad de estados en función de la energía para un semiconductor.

### 2.1.1. Impurezas

Si quitamos algún ion de su sitio en la red ordenada descrita en la sección anterior creamos una vacancia, o si simplemente lo sustituimos por un ion de otro tipo tenemos una impureza. El proceso de agregar impurezas en un semiconductor se conoce como dopaje. Existen dos tipos de semiconductores dopados: los tipo  $p$  y los  $n$ . En los primeros, la impureza se denomina aceptora porque al faltarle un electrón para completar su banda de valencia y hacer más estable la unión, toma un electrón de la banda de valencia de la red huésped, creando “huecos” en la misma. La presencia de varias impurezas genera una nueva banda de energía próxima a la banda de valencia. Por el contrario, el dopaje tipo  $n$  consiste en introducir impurezas que luego de unirse al cristal, tienen un electrón que queda débilmente ligado a la impureza. El nuevo estado se forma entonces cerca de la banda de conducción, a una distancia del orden de unos pocos meV.

La descripción de esta nueva banda de energía puede realizarse bajo la aproximación de enlaces fuertes [8]. Cuando hay presentes muchas impurezas, se puede utilizar la aproximación de masa efectiva, por la cual podemos “empaquetar” todos los detalles del cristal huésped en una masa efectiva para los electrones, y a través de una constante dieléctrica modificada. De esta manera el problema se simplifica considerablemente. La formación de esta nueva banda se da de la siguiente forma. En tanto y en cuanto las impurezas se encuentren suficientemente alejadas, las energías que tengan los electrones serán las

mismas, ya que cada electrón no siente la influencia de los demás iones. Pero a medida que los iones se acercan, la interacción entre ellas hace que ese *único* nivel de energía que existía se divida en diferentes niveles dando origen a una nueva banda de energía. El ancho de esta banda (la diferencia entre el máximo y el mínimo valor de energía) crece a medida que la distancia entre impurezas disminuye. Además, el espaciamiento entre la banda de impurezas y la de conducción depende de la carga del ion. A medida que la carga crece, esta diferencia aumenta.

Algunos ejemplos son el boro, el galio, el arsénico y el fósforo, los cuales son utilizados habitualmente para dopar semiconductores de silicio. En la sección de Método de masa efectiva tratamos con mayor profundidad el modelo que utilizamos en el trabajo para describir la banda de impurezas.

### 2.1.2. Mecanismos de relajación

El estado de una partícula puede estar especificado por muchas variables como por ejemplo el momento, la energía, el espín, *etc.* Dependiendo de la dinámica del sistema, cualquiera de estas magnitudes puede cambiar o conservarse. Supongamos que estamos considerando el espín de un electrón, y que debido a cierta interacción éste cambia de estado. Uno de los aspectos que nos puede interesar es el tiempo que tarda en hacerlo, que generalmente se denomina tiempo de relajación. Este puede utilizarse de dos formas diferentes. Puede referirse al tiempo que tarda un dado estado de un electrón en cambiar o bien, en el caso de varios espines, para indicar el tiempo que le toma a un sistema con una población inicial no balanceada alcanzar el equilibrio.

Los mecanismos de relajación son los responsables de estos cambios en el sistema. En el caso concreto del espín en semiconductores algunos de éstos se conocen como Elliot-Yafet, D'yakonov-Perel, Bir Aronov Pikus o el de interacción hiperfina. A continuación daremos una breve descripción de cada uno.

Elliot Yafet está basado en el hecho de que en un cristal real las funciones de onda de Bloch de los electrones de conducción no son autoestados de espín debido a la interacción espín-orbita con los iones de la red [9]. De esta manera los electrones tienen una mezcla de estados de espín, determinada entre otras cosas por el momento del electrón. No obstante, siempre que la interacción espín órbita sea pequeña respecto del ancho de banda, esta interacción se puede tratar como una perturbación y por consiguiente, los estados tendrán una composición mayoritaria de un dado espín respecto del otro. Si se cumple esta condición es razonable entonces denominar un estado como “*up*” o “*down*”, según la amplitud de cada componente de espín. En este mecanismo, los autoestados modificados están degenerados, dado que están relacionados entre sí por una operación de inversión espacial y temporal. Hay que notar que un potencial independiente del espín

puede acoplar ambos estados. Siguiendo este razonamiento, recientemente Tamborenea, Weinmann y Jalabert propusieron que un mecanismo de este tipo [4] (*Impurity Spin Admixture* o ISA) debe considerarse en la banda de impurezas. Más adelante explicamos este mecanismo más en detalle.

En el caso especial de cristales sin simetría de inversión (como los tipo zinc-blenda) se aplica el mecanismo de D'yakonov-Perel [10], que enuncia que debido a esta asimetría los electrones con espín “*up*” y espín “*down*” tienen diferentes energías aún teniendo el mismo momento. Esto es equivalente a tener un campo magnético interno  $\mathbf{B}(\mathbf{k})$  alrededor del cual la precesión del espín está determinada. La interacción es del tipo  $\mathbf{B}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{S}$ . Basado en el hecho de que la diferencia de energía entre las bandas “*up*” y “*down*” es mucho menor que la frecuencia típica de dispersión (o *scattering*) debida a impurezas o contornos, el espín del electrón no llega a completar un ciclo completo en la precesión alrededor del eje definido por  $\mathbf{B}(\mathbf{k})$ . Luego del choque, la precesión es alrededor del eje  $\mathbf{B}(\mathbf{k}')$ . Las consecuencias para el espín del electrón son el cambio en la dirección de precesión y en la frecuencia. En este mecanismo, el tiempo de relajación de espín es inversamente proporcional al tiempo de relajación de momento. En presencia de un campo magnético externo, este mecanismo queda suprimido y no es tenido en cuenta.

Por otro lado, el mecanismo de Bir-Aronov-Pikus[10] considera el tiempo de relajación debida a la interacción de intercambio entre electrones y huecos. Esta interacción depende de los electrones y los huecos que participan en ella y actúa sobre el espín de los electrones como un campo magnético efectivo. Nuevamente, el espín realiza un movimiento de precesión alrededor del eje de este campo. Sin embargo, el espín de los huecos cambia a una velocidad mucho mayor que la frecuencia de precesión, haciendo que el campo magnético generado por los huecos fluctúe y consecuentemente, el eje de precesión se difunde como en el caso de D'yakonov-Perel. Este mecanismo debe ser considerado en semiconductores en los cuales el solapamiento entre funciones de onda de electrones y huecos es significativo.

### 2.1.3. Transición Metal-Aislante

Cuando se aplica el método de *enlaces fuertes* a un sistema con un número finito de impurezas, en general se dice que el nivel atómico de cada impureza por separado se reemplaza (debido a la interacción con las demás) por una banda de energías con un dado ancho [8]. Sin embargo, esta denominación puede llevar a confusiones, ya que por ejemplo, en un semiconductor ligeramente dopado, los electrones se encuentran localizados alrededor de cada impureza y no se desplazan hacia las impurezas vecinas. Sus estados se dicen “*localizados*”. Sin embargo, dependiendo de la densidad de impurezas, es posible que esta banda de energía adquiera un comportamiento más “*metálico*”. Entre los diferentes

fenómenos que llevan a esta transición se encuentran el de Mott, el de Anderson y el de Lifschitz.

### Transición de Mott

Como mencionamos anteriormente, el ancho de la banda de impurezas disminuye a medida que la distancia entre impurezas se hace mayor. Sin embargo, la descripción del estado electrónico sigue siendo a través de una función de onda plana modulada, de manera que los electrones se mueven sin sufrir *scattering*. Dado que cada impureza contribuye (o toma) un electrón, las bandas tienen la mitad de sus estados ocupados (debido al espín están doblemente degeneradas). Es decir que si las impurezas están ordenadas periódicamente, el régimen es metálico sin importar cuán lejos se hallan las impurezas entre sí. Este argumento es claramente incorrecto porque la aproximación es válida en tanto el ancho de banda sea suficientemente grande de manera que el modelo de electrón independiente todavía se aplique. Cuanto más alejadas se encuentren las impurezas entre ellas, más angosto será el ancho de la banda. Cuanto más angosto, la interacción electrón-electrón comienza a ser del orden del ancho de la banda y en consecuencia, la aproximación de electrón independiente deja de ser válida. De hecho, si se considera que la energía de interacción entre dos electrones que se encuentran en el mismo sitio es  $U_0$  y que la distancia entre impurezas es suficientemente grande, entonces en cada sitio el electrón puede tener una energía  $E_0$  o  $E_0 + U_0$  dependiendo si hay o no otro electrón en el sitio. A medida que acercamos las impurezas, ese único estado se transforma en una banda y a su vez ésta se ensancha conforme la distancia decrece. Entonces si  $U_0$  es mayor que el ancho de la banda, el material es dieléctrico. La banda inferior está totalmente ocupada ya que acepta exactamente un número de electrones igual a la cantidad de sitios. En un cierto valor  $A$  (ver Fig. 2.2), desaparece el *band-gap* y el sistema se vuelve metálico. Esta transición se conoce como Transición de Mott, y si bien ha sido estudiada exhaustivamente, queda por entender la conductividad eléctrica en el punto de transición. Es importante notar que esta transición tiene como eje central la correlación electrónica, y se da aún en arreglos perfectamente ordenados. El efecto del desorden -despreciando la interacción electrón electrón- está contemplado en el modelo de Anderson.

### Transición de Anderson

El modelo de Anderson usa la aproximación de electrón independiente pero tiene en cuenta el desorden en un sistema. La transición que describe el modelo está caracterizada por la localización de las funciones de onda. Originalmente el sistema considerado por

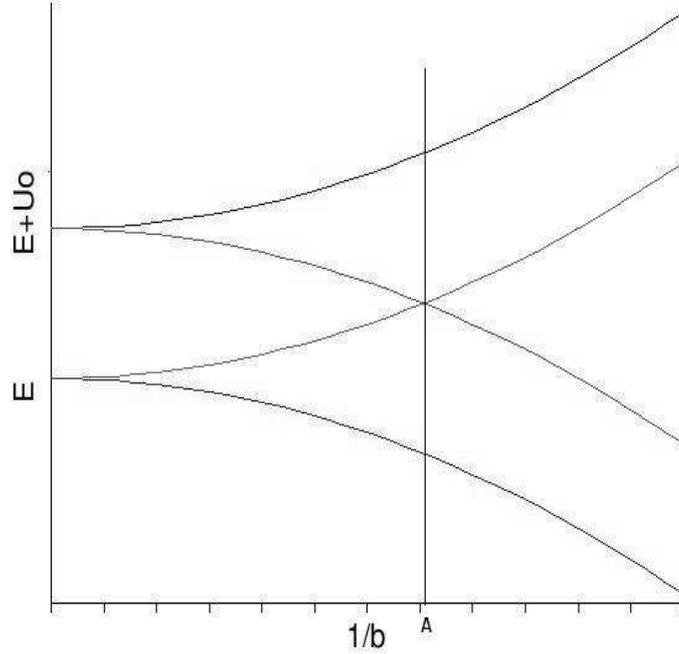


Figura 2.2: Dependencia del ancho de banda con la distancia entre impurezas  $b$ . A la izquierda de  $A$  es un aislante y a la derecha, un conductor.

Anderson constaba de un arreglo periódico con valores de energía de sitios distribuidos aleatoriamente. Definir la condición de localización matemáticamente no es un problema menor. Anderson usó el siguiente criterio. A  $t=0$  el electrón se encuentra en un estado  $|\psi_i(0)\rangle$ , la cual es una función orbital del sitio  $i$ . Al evolucionar, esta función cambiará ya que no es autofunción del hamiltoniano, y para tiempos largos se puede analizar el valor de  $|\psi_i(t)|^2$ . Si los estados no están localizados,  $\lim_{t \rightarrow 0} |\psi_i(t)|^2 = 0$ , ya que el paquete de onda inicial se dispersa. Por el contrario, si los estados están localizados, la función de onda inicial adquiere contribuciones de sus vecinas con amplitudes exponencialmente chicas, y en consecuencia,  $\lim_{t \rightarrow 0} |\langle \Psi(0) | \Psi(t) \rangle|^2$  tendrá un valor finito.

La transición de Anderson está ligada con el fenómeno de percolación en el siguiente sentido. El Hamiltoniano del modelo es

$$H = \sum_j \epsilon_j a_j^\dagger a_j + \sum_{j,m \neq 0} I(m) a_j^\dagger a_{j+m}$$

donde  $\epsilon_j$  representa la energía del electrón en el sitio  $i$  aislado. También podemos limitar la interacción a primeros vecinos de manera que  $I(m) = I$  si  $j - m = \pm 1$ . Ahora consideramos una banda de energía de ancho  $\Delta$  de orden  $I$  y hacemos una clasificación

de las impurezas en “*resonantes*” o no “*no resonantes*”, según su energía esté o no dentro de esta banda. Luego definimos que dos impurezas resonantes están conectadas si son primeras vecinas o tienen una primera vecina resonante en común. Los conglomerados que se forman se conocen como *clusters* y dentro de éstos el valor absoluto de la función de onda es casi constante. Fuera de ellos vale cero. El tamaño de estos *clusters* determina la extensión de la función de onda. La fracción de sitios resonantes es del orden de  $I/W$ . Para valores chicos de este parámetro hay unos pocos *clusters* aislados, pero a partir de un valor crítico aparece un *cluster* infinito. El parámetro crítico en cuestión se puede calcular usando la teoría de percolación que describimos brevemente en una sección próxima.

#### 2.1.4. Teoría de Matsubara -Toyozawa

Entre los modelos más antiguos que se ocuparon de estudiar sistemas con impurezas ubicadas aleatoriamente se encuentra el modelo de Matsubara Toyozawa [11]. Este describe la conducción de la banda de impurezas en semiconductores, utilizando un modelo hidrogénico para cada impureza. Usando el formalismo de funciones de Green logra calcular la densidad de estados así como conductividad para concentraciones altas. A diferencia del modelo de Anderson, aquí se considera un desorden estructural, por lo tanto las energías de sitio y los elementos no-diagonales mantienen una relación. Si bien en estos sistemas diferentes efectos más o menos independientes entre sí afectan la conducción por impurezas, los experimentos demuestran que para un semiconductor tipo-n y para densidades suficientemente altas, de  $10^{17}$  o  $10^{18}$  impurezas por cc. , los portadores se mueven en la banda de impurezas, haciendo la influencia de correlación despreciable.

Esencialmente, el Hamiltoniano del modelo de MT es el siguiente

$$H = \sum_{m \neq n} \sum V_{mn} a_m^* a_n$$

donde  $a_m^*$  y  $a_n$  representan los operadores de creación y destrucción en el sitio m y

$$V_{mn} = \int \Phi_m(r) \frac{-e^2}{|r - R_m|} \Phi_n(r)$$

En este modelo no se tiene en cuenta el *overlap* entre las funciones de onda, y en las integrales de energía sólo se tiene en cuenta la impureza dispersora coincidente con uno de los orbitales.

### 2.1.5. Mecanismo de relajación de espín ISA

El mecanismo propuesto recientemente en la referencia [4] es un mecanismo relacionado con el de Elliot-Yafet. El punto en común es que en ambos, los estados electrónicos relevantes no son autoestados del operador de espín, sino que contrariamente se conocen como estados de impurezas con mezcla de espín (o ISA por sus siglas en inglés). Esta particularidad hace que sean posibles las transiciones con salto de espín (o *spin-flip*) mediadas por potenciales que no dependen de éste. Por otro lado, la principal diferencia es que mientras el mecanismo de EY considera estados electrónicos deslocalizados (electrones en la banda de conducción), el mecanismo ISA se ocupa de la relajación debida al *hopping* con cambio en el espín entre estados localizados de la banda de impurezas. Dado que este trabajo se centra en este mecanismo vamos a describirlo con cierto detalle a continuación. Esencialmente, el mecanismo se construye incorporando dentro del modelo de Matsubara-Toyozawa (MT, explicado anteriormente) la interacción espín órbita. La función de onda del estado fundamental se escribe

$$[\Psi_{0,\sigma}] = \sum_k \Phi(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} [u_{\mathbf{k},\sigma}] (\mathbf{r}) \quad (2.1)$$

donde  $[u_{\mathbf{k},\sigma}]$  es un espinor que representa la parte periódica de la función de Bloch que es afectado por la interacción espín órbita. Usando la aproximación  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  de Kane [12], este espinor es

$$[\hat{u}_{\mathbf{k}\sigma}] = [u_{\sigma}^{(0)}] + \mathbf{k} \cdot [\mathbf{u}_{\sigma}^{(1)}] \quad (2.2)$$

donde

$$[\mathbf{u}_{\sigma}^{(1)}] = \alpha_1 ([\mathbf{R}\sigma] + \alpha_2 \mathbf{S} \times [\mathbf{R}\sigma])$$

El estado  $[\mathbf{u}_{\sigma}^{(1)}]$  no es un autoestado del operador  $S_z$ , pero como el valor medio respecto de  $[\mathbf{u}_{\sigma}^{(1)}]$  es más cercano a  $\sigma$  que a  $-\sigma$ , lo etiquetamos como el estado  $\sigma$ . El vector  $\mathbf{R} = (|X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle)$  representa los tres estados tipo- $p$  de los estados de valencia.  $\mathbf{S}$  es el operador de momento angular. Finalmente el estado centrado en la impureza  $m$  es

$$[\hat{\Psi}_{m\sigma}] (\mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_m) \left\{ [u_{\sigma}^{(0)}] (\mathbf{r}) + \frac{i}{a_B^*} \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_m)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_m|} [\mathbf{u}_{\sigma}^{(1)}] (\mathbf{r}) \right\} \quad (2.3)$$

El Hamiltoniano que se considera es como el del modelo MT, pero se agrega un término más que considera el *spin-flip*.

$$H_1 = \sum_{m \neq m', \sigma} t_{m'm}^{\bar{\sigma}\sigma} c_{m'\bar{\sigma}}^\dagger c_{m\sigma} \quad (2.4)$$

donde el elemento  $t_{m'm}$  tiene en cuenta *todas* las impurezas.

$$t_{m'm}^{\bar{\sigma}\sigma} = \sum_{p \neq m} = \langle \hat{\Psi}_{m'\hat{\sigma}} | V_p | \hat{\Psi}_{m\sigma} \rangle \quad (2.5)$$

Lo notable es que el término con  $\langle \hat{\Psi}_{m'\hat{\sigma}} | V_{m'} | \hat{\Psi}_{m\sigma} \rangle$  es cero debido a la simetría de la integral angular, por lo cual hay que considerar las integrales de tres centros. La evaluación de las integrales de tres centros presenta dificultades y no tienen una expresión cerrada. En el límite en que  $r_{mm'} \gg a$  se puede avanzar y llegar a un resultado analítico. En la transición metal-aislante  $r_{mm'}/a = 3,7$ .

Por otro lado, se define  $\gamma_{mm'}$  como un promedio del ángulo de rotación del espín. Con esto, el tiempo de relajación de espín para este mecanismo está dado por

$$\frac{1}{\tau_s} = \frac{2}{3} \frac{\langle \gamma^2 \rangle}{\tau_c} \quad (2.6)$$

donde  $\langle \gamma^2 \rangle$  es el promedio de *ensemble* de  $\gamma_{mm'}$ .  $\tau_c$  puede interpretarse como el tiempo que tarda un electrón en abandonar una impureza. A través de cálculos numéricos queremos calcular este tiempo, incluyendo en él la influencia del *overlap* entre las funciones de onda hidrogenoide y realizando las integrales en forma numérica sin necesidad de ninguna aproximación.

### 2.1.6. Time Resolved Faraday Rotation

Hasta ahora hemos venido hablando de los modelos y la teoría necesaria para describir los fenómenos que nos interesan. Pero no debemos perder de vista que hay resultados experimentales que en última instancia son los que queremos explicar e interpretar. Actualmente se utiliza para estudiar la dinámica del espín una técnica conocida como “*Time Resolved Faraday Rotation*” (TRFR)[13], con la cual se consigue una resolución que va de los femto a los microsegundos. Esencialmente la técnica tiene dos etapas. Primero la perturbación de la magnetización de un sistema y a continuación, el monitoreo de ella a través del efecto de rotación de Faraday, es decir que es una técnica de tipo *pump-probe*.

Con luz circularmente polarizada incidiendo sobre la muestra, se consigue generar una población no balanceada de espines que da lugar a una magnetización neta. Posteriormente, con un retraso de temporal  $\Delta t$ , se incide con luz linealmente polarizada. El efecto de Faraday es la rotación de luz linealmente polarizada al atravesar un medio con magnetización, ya sea espontánea o inducida. Luego de atravesar la muestra, el ángulo de polarización habrá cambiado un cierto ángulo proporcional a la magnetización del

material. Variando el valor de  $\Delta t$ , se mide la magnetización en función del tiempo.

Esta técnica resulta apropiada para observar fenómenos de dispersión de espines, así como la evolución y la relajación de la magnetización de la subred. Una de las principales virtudes que tiene además es que no necesita de la fotoexcitación de los portadores de carga.

# Capítulo 3

## Teoría

En esta sección describimos toda la teoría que hemos utilizado antes de comenzar con las simulaciones numéricas, además de algunos aspectos relacionados con la interpretación de los resultados que surgieron en el transcurso del trabajo. Recordamos en primer lugar que la ecuación que queremos resolver es

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi \quad (3.1)$$

### 3.1. Método de masa efectiva

Una banda se dice no degenerada si tiene no más que una doble degeneración por espín cerca de su punto extremo. En este caso se puede ver, bajo ciertas aproximaciones, la impureza como un ion hidrogenoide “sumergido” en la red huésped, cuya influencia está cuantificada en la constante dieléctrica y la masa efectiva del electrón en el punto extremo. La forma de llegar a este resultado es la siguiente. En una red ideal, el Hamiltoniano de electrón independiente

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(\mathbf{r})$$

tiene como solución las funciones de Bloch

$$\phi_{n,\mathbf{k}} = \frac{1}{V_0^{1/2}} \cdot u_{n,\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

donde  $u_{n,\mathbf{k}}$  es una función periódica que tiene el período de la red,  $\mathbf{k}$  es el vector de onda y  $n$  indica la banda y el espín.  $V_0$  es una constante de normalización. En el caso en que el mínimo de  $E_n(k)$  ocurra en  $k = 0$  (el extremo se encuentra en el centro de la zona de Brillouin), se puede asumir que las soluciones de la ecuación anterior de este punto

como  $E_n(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$ , donde  $m$  es la masa efectiva del electrón. Al agregar *una* impureza, el problema a resolver es

$$(H_0 + U)\psi = E\psi$$

donde  $U = \frac{-e^2}{\epsilon r}$  suponiendo que la impureza está en el origen.

Se puede buscar entonces una solución que se exprese como [14].

$$\psi = \sum_{n', \mathbf{k}'} B_{n'}(\mathbf{k}') \phi_{n', \mathbf{k}'}$$

Por otro lado, dado que la localización de un electrón alrededor de una impureza es mucho mayor que la constante de red, entonces la función de onda contiene contribuciones de los vectores de onda más chicos (comparados con los vectores de la red recíproca). Es decir, que  $B_n(\mathbf{k})$  es apreciable en un entorno alrededor del centro de la zona de Brillouin. Utilizando esta aproximación, se llega a la siguiente ecuación

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{\epsilon r} \right) F(\mathbf{r}) = E F(\mathbf{r}) \quad (3.2)$$

que coincide con la ecuación de Schrödinger del átomo de hidrógeno, excepto por la masa efectiva y la constante dieléctrica. Recordando la solución del estado fundamental

$$F(r) = (\pi a^3)^{-1/2} e^{-r/a}$$

con  $a = 4\pi\hbar^2\epsilon/me^2$  y el espectro de estados ligados

$$E_t = -\frac{1}{t^2} \frac{e^4 m}{32\pi^2 \epsilon^2 \hbar^2}$$

Puesto que vamos a utilizar este modelo en nuestras simulaciones es necesario definir las unidades *naturales* que vamos a utilizar. La masa efectiva para el GaAs es  $m^* = 0,067m_0$  y la constante dieléctrica es aproximadamente 12.85. Luego se derivan las siguientes unidades

$$a^* = 100 \text{ \AA} \quad E_H = 11,036 \text{ meV} \quad t = 0,06 \text{ ps}$$

## 3.2. Bases No Ortogonales en Mecánica Cuántica

Con lo presentado en la sección anterior ya podemos plantear nuestro problema. Utilizamos la aproximación de *tight binding* para resolver el caso de muchas impurezas, considerando que cada impureza aporta un orbital tipo-s y construimos la base con cada

uno de éstos. Esta una aproximación que se ha usado en varios trabajos [15][16][17].

Las funciones de base que empleamos son funciones de onda tipo hidrogenoides  $\phi_i$ , con un radio efectivo de Bohr modificado. La Ec. de Schrödinger independiente del tiempo es

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \sum_m \frac{-e^2}{\epsilon |\mathbf{r} - \mathbf{R}_m|} \right) \psi = E \psi$$

Dentro del modelo *tight-binding* la solución a la ecuación que se plantea es de la forma

$$\psi = \sum_i c_i \phi_i(\mathbf{r})$$

siendo  $\phi_i$  el conjunto de funciones de base.

Reemplazando  $\psi$  en la ecuación de Schrödinger, obtenemos

$$\begin{aligned} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \sum_m V_m(\mathbf{r}) \right) \sum_i c_i \phi_i(\mathbf{r}) &= E \sum_i c_i \phi_i(\mathbf{r}) \\ &\rightarrow \int \phi_j^*(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \end{aligned} \quad (3.3)$$

A partir de lo último, llegamos a una ecuación matricial del tipo

$$\mathbf{H} \mathbf{V} = \mathbf{S} \mathbf{V} \mathbf{E} \quad (3.4)$$

donde  $S$  es la matriz de *overlap* con elementos  $S_{ij} = \int \phi_i^* \phi_j d\mathbf{r}$  y  $\mathbf{V}$  es la matriz en cuyas columnas se ubican los autovectores. La Ec. 3.4 se conoce como “problema generalizado de autovalores”. En este punto es conveniente hacer algunas observaciones respecto de la Ec. 3.4.

Por un lado, si la multiplicamos por  $S^{-1}$  la ecuación adquiere la forma habitual para la matriz  $S^{-1}H$ . Sin embargo, esta matriz ya no tiene las propiedades de hermiticidad que garanticen que los autovalores sean reales, aunque sea sólo una condición suficiente, pero no necesaria. Se puede ver que dado que la matriz  $S$  representa de alguna manera la “métrica” del sistema, y por lo tanto debe ser definida positiva, entonces siempre existe su inversa. Por otro lado, ortonormalizando previamente la base, se consigue que la Ec. 3.4 (en la nueva base) tenga la forma habitual y los autovalores sean reales.

Respecto de la utilización de bases no ortogonales en mecánica cuántica, en su trabajo de 1949 [18], Löwdin presenta uno de los primeros trabajos que abordan el tema de *overlap* tanto en moléculas como en sólidos cristalinos, en el cual demuestra que su efecto es considerable (en determinados casos) y no puede ser despreciado como lo habían hecho varios trabajos hasta ese momento.

Una de las observaciones que hace Löwdin sobre los elementos de matriz del Hamilto-

niano es interesante. Cuando tenemos un sistema que contiene varios puntos de energía cero que pueden ser escogidos arbitrariamente, podemos cambiar este origen  $H \mapsto H+k$ . Todas las cantidades de energía que dependen del origen tendrán el mismo cambio, mientras que las cantidades físicas deben ser invariantes. En una base no ortogonal el cambio que debe realizarse es el siguiente

$$\mathbf{H} \rightarrow \mathbf{H} + k(\mathbf{S})$$

lo cual muestra, según el autor, que la matriz  $H$  no puede tener posiblemente una interpretación física. Sin embargo,  $H'$ , la matriz del Hamiltoniano escrita en una base previamente ortogonalizada, tendría un cambio

$$H' \rightarrow H' + kI$$

o equivalentemente

$$H'_{ij} \rightarrow H'_{ij} + k\delta_{ij}.$$

Sin embargo, los nuevos estados ya no tienen una interpretación física clara. Por ejemplo, en nuestro caso, cada elemento de la nueva base ortogonalizada contendría una mezcla de todos los orbitales 1s.

Usando el mismo argumento, lo que sugiere esta observación es que de la Ec. 3.4 podríamos deducir que  $S^{-1}H \rightarrow S^{-1}H + kI$ , y entonces  $S^{-1}H$  -que *no* es un cambio de base- podría tener significado físico. La pregunta que surge es qué significado físico le podemos atribuir al elemento de matriz  $(\mathbf{S}^{-1}\mathbf{H})_{ij}$ . Veamos una forma más directa de llegar a esto. En algunos trabajos anteriores [19][20] que tratan la no ortogonalidad se propone la creación de un nuevo espacio con elementos  $|\phi^i\rangle$  con su correspondiente espacio dual  $\langle\phi^k|$ . La construcción de estos dos nuevos conjuntos es

$$|\phi^k\rangle = \sum_l S_{kl}^{-1*} |\phi_l\rangle$$

y

$$\langle\phi^k| = \sum_l S_{kl}^{-1} \langle\phi_l|$$

respectivamente. Por cómo fueron construidos estos elementos se cumple que

$$|\Psi\rangle = \sum_i c_i |\phi_i\rangle \rightarrow \langle\phi^k|\Psi\rangle = \sum_{i,l} c_i S_{kl}^{-1} \langle\phi_l|\phi_i\rangle = \sum_{i,l} c_i S_{kl}^{-1} S_{li} = \sum_i c_i \delta_{ik} = c_k$$

Si ahora definimos  $H_j^i = \langle \phi^i | H | \phi_j \rangle$  y  $\langle \phi^j | \Psi \rangle = \Psi^j$  podemos ver que

$$H_j^i \Psi^j = E \Psi^i$$

que tiene la forma de la ecuación de Schrödinger habitual y que si la reescribimos es

$$\sum_{i,l} c_i S_{kl}^{-1} \langle \phi_l | H | \phi_i \rangle = \sum_{i,l} c_i S_{kl}^{-1} H_{li} = E c_k$$

la cual es equivalente a la ecuación matricial 3.4.

Si bien los elementos de matriz  $\langle \phi_i | H | \phi_j \rangle$  ;  $i \neq j$  no tienen significado físico, los nuevos elementos que construimos  $H_j^i$  sí lo tienen por lo señalado anteriormente. Si bien es bastante sugerente esta notación no hay que perder de vista que los nuevos elementos con supraíndice no pueden ser asociados inmediatamente, por ejemplo en nuestro caso, con el orbital de un sitio. La utilización de este tipo de notación es muy útil en problemas de una partícula (teorías de campo medio para átomos, moléculas y sólidos) a la vez que es utilizada en segunda cuantificación. [19]

### 3.2.1. Transformación de base no unitaria

Generalmente aparecen en la literatura transformaciones de una base ortogonal a otra base ortogonal, en cuyo caso la transformación es unitaria. En este trabajo en particular es necesario encontrar la transformación que lleve de una base no-ortogonal (la de estados hidrogenoides centrados en cada impureza) a una base ortogonal. Vamos a deducir en un camino muy corto cómo calcular la norma de un estado o vector en una base no ortogonal. Usamos por comodidad la notación de Einstein para la contracción de índices.

Tomamos un estado cuántico que vive en un espacio de Hilbert con un producto interno ya definido y de norma positiva.

$$\alpha = \alpha_i |\Psi_i \rangle \tag{3.5}$$

donde  $|\Psi_i \rangle$  es un conjunto de estados ortonormales. Los  $\alpha_i$  corresponden a los coeficientes de la expansión del estado en esta base. Podemos formar un vector cuyas componentes sean estos mismos coeficientes.

Si ahora elegimos describir el mismo estado en una base no ortogonal

$$\alpha = \alpha'_i |\Phi_i \rangle \tag{3.6}$$

Como el estado  $\alpha$  es el mismo, se obtiene entonces que

$$|\alpha\rangle = \alpha_i |\Psi_i\rangle = \alpha'_j |\Phi^j\rangle \quad (3.7)$$

Antes de continuar es necesario introducir un poco más de notación. Llamaremos  $\langle \Psi_i |$  al conjunto de elementos de la base del espacio dual. La relación de ortogonalidad es

$$\langle \Psi_i | \Psi_j \rangle = \delta_{ij} \quad (3.8)$$

Por el contrario, la relación para los  $|\Phi_i\rangle$  es

$$\langle \Phi_i | \Phi_j \rangle = S_{ij} \quad (3.9)$$

donde  $S_{ij}$  denota el “*overlap*” entre los estados. En el espacio dual el estado  $\langle \alpha |$  se escribe de la siguiente forma

$$\langle \alpha | = \alpha_j^* \langle \Psi_j | = \alpha_j'^* \langle \Phi_j | \quad (3.10)$$

Luego la norma de un estado está definida como el producto interno de él mismo con su dual

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \alpha \rangle &= \alpha_j^* \alpha_i \langle \Psi_j | \Psi_i \rangle = \alpha_j'^* \alpha_i' \langle \Phi_j | \Phi_i \rangle \\ &= \alpha_i^* \alpha_i = \alpha_j'^* \alpha_i' S_{ij} \end{aligned} \quad (3.11)$$

En la base no ortogonal, la norma de un estado no es la suma del cuadrado de los coeficientes sino que es una combinación determinada por los elementos de *overlap*. De la Ec. 3.11 podemos asociar a  $S$  con la métrica del espacio. En forma matricial, la expresión anterior es

$$\overline{\alpha}^T \overline{\alpha} = \overline{\alpha}'^T \overline{S} \overline{\alpha}' \quad (3.12)$$

El hecho de trabajar con funciones no ortogonales hace que una serie de expresiones tomen una forma diferente, como por ejemplo el operador unidad que consideramos en la próxima sección.

### 3.2.2. Operador unidad

El operador unidad en bases no ortogonales es

$$\sum_{k,m} |\Phi_k\rangle S_{km}^{-1} \langle \Phi_m| = I \quad (3.13)$$

lo cual puede verificarse fácilmente aplicando un ket  $|\Phi_l\rangle$  y observando que

$$\sum_m S_{km}^{-1} \langle \Phi_m | \Phi_l \rangle = \delta_{kl}$$

Los coeficientes  $a_i$  de un estado  $\Psi$  escrito en la base no ortogonal son entonces

$$a_i = \sum_m S_{im}^{-1} \langle \Phi_m | \Psi \rangle \quad (3.14)$$

### 3.2.3. Evolución temporal

Una solución de la Ec. 3.1 es

$$e^{(-i/\hbar)\bar{S}^{-1}\bar{H}t} \bar{c}(0)$$

Llegado a este punto, podemos verificar que esta solución conserva la normalización del estado a tiempo cero. Vale mencionar que no estamos probando la validez de la utilización de bases no ortogonales, sino que estamos viendo que todo es consistente dentro del contexto de no-ortogonalidad.

Si utilizamos el vector cuyas componentes son los coeficientes de la expansión, la norma se expresa según la Ec. 3.12 de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \bar{c}^T(t) \bar{S} \bar{c}(t) &= \bar{c}^T(0) \left( e^{(-i/\hbar)(\bar{S}^{-1}\bar{H})t} \right)^T \bar{S} \left( e^{(-i/\hbar)(\bar{S}^{-1}\bar{H})t} \right) \bar{c}(0) \\ &= \bar{c}^T(0) \left( e^{(i/\hbar)(\bar{S}^{-1}\bar{H})^T t} \right) \bar{S} \left( e^{(-i/\hbar)(\bar{S}^{-1}\bar{H})t} \right) \bar{c}(0) \\ &= \bar{c}^T(0) \left( e^{(i/\hbar)(\bar{H}\bar{S}^{-1})t} \right) \bar{S} \left( e^{(-i/\hbar)(\bar{S}^{-1}\bar{H})t} \right) \bar{c}(0) \end{aligned} \quad (3.15)$$

donde hemos usado que tanto  $\bar{H}$  como  $\bar{S}^{-1}$  son hermíticas. Si llamamos a  $e^{(-i/\hbar)(\bar{S}^{-1}\bar{H})t} = A$ , entonces lo que debemos ver es que

$$A^T \bar{S} A = \bar{S} \quad (3.16)$$

o lo que es equivalente

$$\left( e^{(-i/\hbar)S^{-1}Ht} \right)^T S e^{(-i/\hbar)S^{-1}Ht} = \sum_n \frac{(it/\hbar)^n (HS^{-1})^n}{n!} S \sum_m \frac{(-it/\hbar)^m (S^{-1}H)^m}{m!} \quad (3.17)$$

Pero como

$$(HS^{-1})^n S = S(S^{-1}H)^n$$

podemos ver de las Ecs. 3.16 y 3.17 que

$$\begin{aligned}
A^T S A &= S \sum_n \frac{(it/\hbar)^n (S^{-1} H)^n}{n!} \sum_m \frac{(-it/\hbar)^m (S^{-1} H)^m}{m!} \\
&= S e^{(i/\hbar)S^{-1}Ht} e^{(-i/\hbar)S^{-1}Ht} \\
&= S
\end{aligned} \tag{3.18}$$

con lo que hemos probado la conservación de la normalización.

### 3.2.4. Problema generalizado de autovalores

Claramente el operador Hamiltoniano es hermítico y por consiguiente sus autovalores deben ser reales. Una forma de verlo es ortogonalizar previamente la base y luego escribir la matriz Hamiltoniana, que obviamente sería hermítica, asegurando de esta manera que los autovalores son reales. Dado que hay infinitas transformaciones de base, vamos a elegir una en particular de la siguiente manera. La matriz  $S$ , por ser una matriz definida positiva, admite una descomposición llamada *Cholesky*. Este procedimiento consiste en factorizar la matriz  $S = F F^T$  con  $F$  una matriz triangular inferior (y  $F^T$  su transpuesta conjugada).

Retomamos la Ec. 3.4

$$H v = E S v = E F F^T v \quad (\text{multiplico } F^{-1} \mapsto) \tag{3.19}$$

Además introducimos la identidad  $I = (F^{-1})^T F^T$  entre  $H$  y  $v$  y llamando  $F^T v = y$

$$F^{-1} H F^{-1T} F^T v = F^{-1} H F^{-1T} y = E F^T v = E y \tag{3.20}$$

La matriz que aparece en el segundo miembro

$$F^{-1} H F^{-1T}$$

es una matriz hermítica teniendo en cuenta que  $H$  también lo es.

## 3.3. Concepto de Decaimiento

El término decaimiento es utilizado de diversas maneras dentro de la física. Un decaimiento puede ser visto como la transición de un estado de mayor energía a uno de menor energía o la desexcitación de un estado. En todo proceso de decaimiento hay un tiempo (o más de uno) que lo caracteriza. En un contexto en el cual se tienen en cuenta

los espines de los electrones, el decaimiento puede ser considerado como el fenómeno por el cual un electrón, si inicialmente estaba con espín *up* pasa a estar con espín *down*. Equivalentemente, la relajación de un sistema de espines puede ser visto como el proceso que lleva a una población desbalanceada de espines a un estado con igual número de espines *up* que *down*.

Empezamos citando dos ejemplos donde la relajación obedece una ley exponencial. Como ejemplo podemos citar la Ecuación de Boltzmann [21], punto de partida en el tratamiento de fenómenos de transporte. En el caso del transporte de corriente eléctrica hay dos mecanismos con efectos opuestos que compiten. Por un lado el campo eléctrico externo y el efecto disipativo producto del *scattering* de los portadores con los defectos y fonones. A través de la Ecuación de Boltzmann podemos estudiar cómo es la distribución de las portadores en equilibrio térmico en presencia de estos dos efectos. En ausencia de perturbaciones externas y en equilibrio térmico la función distribución es

$$f_0(E(k)) = \frac{1}{e^{\frac{E(k)-E_F}{kT}} + 1}$$

Fuera del equilibrio la forma de esta función cambia y corresponde a la solución de la siguiente ecuación.

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right) + \mathbf{v} \cdot \nabla_r f - \frac{e}{\hbar} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \nabla_k f = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll}$$

donde el último término es el de colisiones. Dada la complejidad de la ecuación se suele utilizar una suposición sobre este término describiendolo de la siguiente manera

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = -\frac{f(k) - f_0(k)}{\tau(k)}$$

donde aparece explícitamente un tiempo  $\tau$  conocido como tiempo de relajación. Lo que hay detrás de esta suposición es que el *scattering* es el responsable de llevar al sistema hacia el equilibrio térmico. Supongamos que tenemos un campo eléctrico que crea una distribución estacionaria fuera del equilibrio  $f_{stat}(k)$ , luego la Ecuación de Boltzmann será

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{f - f_0}{\tau}$$

Con la condición inicial  $f(t=0, k) = f_{stat}$  la solución es

$$f - f_0 = (f_{stat} - f_0)e^{-t/\tau}$$

en la cual podemos ver que el ritmo con que se alcanza el equilibrio está dado por un comportamiento exponencial caracterizado por el tiempo  $\tau$ .

Otro ejemplo en el cual la Ecuación de Boltzmann da un comportamiento exponencial es el de la relajación de espines nucleares que se encuentran en un estado de no equilibrio generado por un campo magnético externo. En este caso lo que se analiza son las componentes longitudinal y transversal del vector de magnetización  $\mathbf{M}$ . Generalmente el campo magnético externo está en la dirección  $z$ . Por un lado tenemos una relajación para la componente  $z$  (longitudinal) dada por

$$M_z(t) = M_{z,eq.} - [M_{z,eq.} - M_z(0)]e^{-t/T_1}$$

y la componente transversal (perpendicular a la dirección del campo)

$$M_{xy}(t) = M_{xy}(0)e^{-t/T_2}$$

donde  $T_1$  y  $T_2$  son distintos. Vemos entonces que el fenómeno de decaimiento está relacionada con la ley exponencial.

En este trabajo lo que buscamos es estimar el tiempo medio de *hopping*, interpretando que este tiempo tiene que ser similar al que tarda un electrón en abandonar una impureza en la cual estaba alojado inicialmente. Nos referimos a  $\tau_c$  del mecanismo ISA. La forma que proponemos para caracterizar esta magnitud es la siguiente. En una dada distribución de impurezas, que pueden estar ordenadas o no, ponemos como estado inicial el estado orbital de una determinada impureza. Dado que este estado no es un autoestado del sistema, la probabilidad de que el estado posteriormente tenga una contribución del orbital inicial es una función del tiempo. El contexto dentro del cual podemos ubicar esta situación es el de decaimiento de una excitación local inicial, extensamente desarrollado en la física atómica y molecular.

Si bien es bastante natural asociar los fenómenos de decaimiento con comportamientos exponenciales, como vimos recientemente, esta idea es en determinadas condiciones errónea. En realidad, vamos a ver que la probabilidad de no-decaimiento  $P(t)$  (entendida como la probabilidad de que el sistema se mantenga en su estado inicial) no puede ser estrictamente exponencial. [22][23]

Una forma sencilla de probar esta observación es la siguiente. Supongamos que tenemos un estado inicial “inestable”  $|\Psi_{UN}\rangle$ . A un tiempo  $t$  este estado es

$$e^{-iHt} |\Psi_{UN}\rangle = A(t) |\Psi_{UN}\rangle + |\Phi(t)\rangle \quad (3.21)$$

donde  $|\Phi(t)\rangle$  satisface que  $\langle \Psi_{UN} | \Phi_t \rangle = 0$  y  $A(t) = \langle \Psi_{UN} | e^{-iHt} | \Psi_{UN} \rangle$ . Si ahora hacemos evolucionar al sistema hasta  $t'$  a través del operador  $e^{-iHt'}$  y luego proyectamos

sobre  $|\Psi_{UN}\rangle$  obtenemos que

$$A(t+t') = A(t)A(t') + \langle \Psi_{UN} | e^{-iHt'} | \Phi(t) \rangle \quad (3.22)$$

Lo importante de notar de la Ec. 3.22 es que si el último término fuera cero, entonces

$$A(t) = e^{-\alpha t}$$

con  $\alpha$  un número real positivo, sería una solución.

La interpretación de este término es que el estado inicial inestable es regenerado por los estados o productos del decaimiento.

Con respecto a la condición de que este término sea cero para todo tiempo, puede demostrarse que es imposible a menos que el espectro del Hamiltoniano cubra todo el eje real, lo cual es físicamente imposible ya que el conjunto de autovalores del Hamiltoniano siempre está acotado inferiormente. Este término contiene los efectos de memoria que hacen que el proceso sea no markoviano.

Por otro lado, la probabilidad de no decaimiento (o “*survival probability*”) está determinada por la dispersión en el espectro de energía del estado inicial [23]. De aquí surge que no hay una ley universal de decaimiento para estados inestables sino que es dependiente del contenido espectral del estado. De hecho, la única distribución espectral que da lugar a un decaimiento exactamente exponencial es la Lorentziana, la cual no está acotada inferiormente (no es físicamente posible). La existencia de esta cota produce además que para tiempos suficientemente largos, el decaimiento sea más lento que el exponencial.

Sluis y Gislason [24] estudiaron la evolución temporal de una distribución de energía Lorentziana truncada y encontraron que la función  $Q(t)$  (“*survival probability*”) exhibe tres regímenes de comportamiento. A tiempos muy cortos el decaimiento es lineal. Para tiempos intermedios no hay un comportamiento definido, si bien para un dado intervalo el comportamiento sí es exponencial. Finalmente, para tiempos largos, el ritmo de decaimiento va como  $1/t^2$ .

El hecho de que el decaimiento no sea estrictamente exponencial hace que la caracterización de un decaimiento a través del tiempo de relajación  $\tau$  (proveniente de  $e^{-t/\tau}$ ) no sea adecuado.

### 3.3.1. Tiempo de relajación

En el marco del estudio del decaimiento aparece naturalmente un tiempo que caracteriza al proceso: el tiempo de relajación. En nuestro caso, el tiempo de relajación está asociado con el tiempo que tarda el electrón en abandonar la impureza inicial. Este

tiempo puede ser calculado estudiando la probabilidad de no-decaimiento del sistema. En física, usualmente el tiempo de vida de un sistema (*lifetime*) está definido en el contexto de decaimientos exponenciales. En este caso  $P(t) = e^{-\Gamma t}$  y el tiempo de vida medio es  $1/\Gamma$ .

Sin embargo, como se mencionó en la sección anterior, los decaimientos estrictamente exponenciales no son siempre adecuados para describir decaimientos, y entonces se debe determinar qué tiempo de vida se calcula.

En general, la probabilidad de no decaimiento está dada por

$$Q(t) = |\langle \phi | \phi(t) \rangle|^2 = |\langle \phi | e^{-iHt} | \phi \rangle|^2 \quad (3.23)$$

La probabilidad de que el sistema no haya decaído en el tiempo  $t$  es  $Q(t)$ , mientras que la probabilidad de que decaiga entre  $t$  y  $t+dt$  es  $-Q'(t) dt$ . De esta manera el tiempo de vida medio [25] es

$$\tau = - \int_0^{\infty} t Q(t) dt \quad (3.24)$$

que luego de integrar por partes queda

$$\tau = \int_0^{\infty} Q(t) dt \quad (3.25)$$

Puede verificarse que en caso de que el decaimiento sea exponencial, el tiempo de vida medio coincide con el tiempo de relajación. Todavía es posible dar un paso más en este razonamiento. Supongamos que tenemos un estado  $|\Phi\rangle$  que expandido en la base de autoestados es

$$|\Phi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dE f(E) |E\rangle$$

Llamamos a  $P(E) = |f(E)|^2$  la función densidad de probabilidad y está definida de forma tal que  $f(E) < 0$  para  $E < E_{min}$ . La expresión para  $Q(t)$  es

$$Q(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE' \int_{-\infty}^{+\infty} dE P(E') P(E) \cos[(E - E')t]$$

Usando la identidad  $\int_{-\infty}^{+\infty} \cos(kt) dt = \pi \delta(k)$  y la Ec. 3.25 llegamos a que

$$\tau = \pi \int_{-\infty}^{+\infty} dE P(E)^2$$

De aquí se ve que el tiempo de vida puede calcularse a partir de la función distribución de probabilidad.

### 3.3.2. Relación de indeterminación de energía-tiempo

Cuando se habla de procesos de decaimientos no puede dejar de citarse la relación de indeterminación de energía-tiempo. Esta relación, que nada tiene que ver con el Principio de Incertidumbre de *Heisenberg*, es útil para estimar tiempos de decaimientos. Para cualquier operador  $R$  que no conmuta con el Hamiltoniano se cumple la relación [23]

$$\Delta_R \Delta_H \geq \frac{1}{2} | \langle [R, H] \rangle |$$

donde  $\Delta$  son las desviaciones *rms* de las distribuciones de los operadores en el estado en consideración. Por tratarse del operador Hamiltoniano, tenemos además la relación

$$| \langle [R, H] \rangle | = \hbar \frac{d \langle R \rangle}{dt}$$

con lo cual llegamos a

$$\Delta_R \Delta_E \geq \frac{1}{2} \hbar \frac{d \langle R \rangle}{dt} \quad (3.26)$$

conocida con el nombre de *Mandelstam-Tamm*. Ahora se puede definir un tiempo característico para la variación de  $R$

$$\tau_R = \Delta_R \left\{ \frac{d \langle R \rangle}{dt} \right\}^{-1}$$

de lo cual se deriva la relación de indeterminación

$$\tau_R \Delta_E \geq \frac{\hbar}{2} \quad (3.27)$$

El empalme con nuestra noción de probabilidad de no decaimiento se hace a través del operador de proyección  $R = |\Psi(0)\rangle \langle \Psi(0)|$ . Dado que es un operador de proyección y entonces  $R^2 = R$  se cumple que

$$(\Delta_R)^2 \equiv \langle R^2 \rangle - \langle R \rangle^2 = \langle R \rangle (1 - \langle R \rangle)$$

Dado que esta relación se cumple para todo tiempo, el estado que consideramos es  $|\Psi(t)\rangle$ . En consecuencia,  $\langle R \rangle = | \langle \Psi(t) | \Psi(0) \rangle |^2 = P$  es lo que venimos llamando la probabilidad de no-decaimiento del estado inicial.  $\Delta_E$  claramente no varía en el tiempo en tanto la energía del sistema se conserva. Por último se deduce de la Ec. 3.27 que

$$\{P(1-P)\}^{1/2} \Delta_E \geq \frac{1}{2} \hbar \left| \frac{dP}{dt} \right| \quad (3.28)$$

y resolviendo la integral

$$\Delta_E t \geq \frac{1}{2} \hbar \int_0^t (1 - P)^{-1/2} \frac{dP}{dt} dt = \hbar \arccos(\sqrt{P}) \quad (3.29)$$

Por ejemplo, el mínimo tiempo en el cual la probabilidad cae a  $1/2$  ( $\tau_{1/2}$ ) cumple que

$$\Delta_E \tau_{1/2} \geq \frac{\pi \hbar}{4}$$

mientras que si pensamos que para que el estado inicial se destruya completamente ( $|\Psi(t)\rangle$  es ortogonal a  $|\Psi(0)\rangle$ ) es necesario que

$$\Delta_E \tau_0 \geq \frac{\pi \hbar}{2}$$

### 3.3.3. Percolación

Queremos dar en esta sección una breve descripción de la teoría de percolación, usada habitualmente para modelar problemas de conducción en sistemas desordenados.

Comenzamos con un ejemplo que ilustra las ideas detrás de la teoría de percolación. Imaginemos una red en la cual los vértices son sitios que pueden contener líquido y la unión entre éstos son conexiones que permiten el flujo de un sitio a otro adyacente. En esta instancia, un único sitio húmedo hará que todos los demás se humedezcan. En problema de percolación comienza cuando introducimos algún tipo de elemento aleatorio en el sistema. Por ejemplo, ahora permitimos que las uniones estén bloqueadas de tal manera que impidan el flujo a través de ellas y además la probabilidad de que una unión esté desbloqueada es  $x$ . De esta manera la concentración relativa de sitios bloqueados y desbloqueados es  $1 - x$  y  $x$  respectivamente. Luego, si tenemos un sitio inicial húmedo, las dos posibilidades son: humedece a toda la red o sólo a un número finito de sitios. El resultado depende de la fracción de uniones desbloqueadas, aunque también de la posición inicial del sitio.

Sin embargo, si estudiamos el sistema como un todo, podemos considerar la probabilidad de que un sitio inicial (ubicado aleatoriamente) humedezca toda la red sin importar la posición original. En una red infinita esta probabilidad (llamada  $P^b(x)$ ) depende sólo de  $x$ . Entonces si  $x$  es chico  $P^b(x) = 0$ , mientras que si  $x$  se aproxima a 1, también lo hace  $P^b$ . El resultado más importante es que existe un valor crítico  $x_c$  por debajo del cual  $P_b = 0$  para todo  $x$ . Por encima de este valor  $P^b$  crece continuamente hasta valer uno.

Si bien esto es una muy breve introducción de teoría de percolación, resulta útil al analizar la evolución de un electrón en un sistema desordenado, observando que el comportamiento depende de la posición inicial y que la cantidad de estados extendidos

depende de la concentración de impurezas.

# Capítulo 4

## Resultados

En las secciones anteriores especificamos la teoría que vamos a usar como base para plantear nuestro problema. Vamos a ponerla en práctica a través de cálculos numéricos para ver la evolución temporal del electrón así como para caracterizar sistemas desordenados estructuralmente. El proceso es dividido en tres etapas. Por un lado, se escribieron los programas para generar las distribuciones tanto aleatorias como ordenadas. El resultado de estos programas son archivos de texto plano con las ubicaciones de las diferentes impurezas. La segunda etapa consiste en calcular los elementos de matriz del Hamiltoniano y de la matriz de Overlap. Como fue mencionado anteriormente, en el cálculo hay involucradas integrales de tres centros que no tienen una expresión cerrada. Por ello se realizaron las integrales en forma numérica. La salida son nuevamente dos archivos de texto conteniendo sendas matrices. En ambos casos el lenguaje de programación utilizado es C++ y todo el proceso se desarrolla sobre una plataforma UNIX.

A continuación se utilizan las matrices que resultan de las primeras etapas para realizar la evolución temporal del electrón. La manera de hacerlo es encontrando los estados estacionarios y realizar la evolución temporal (que en esta nueva base es trivial) de un estado inicial. Para ello es necesario resolver un problema de autovalores (o en el caso de considerar el *overlap* el problema de autovalores generalizado) y posteriormente describir la evolución. En este caso elegimos el programa MATLAB, debido a que la mayor fortaleza de éste son las operaciones con matrices y vectores. La resolución de problemas como por ejemplo de autovalores ya está implementado y no es necesario escribir los algoritmos o llamar a las librerías adecuadas. Por otro lado también se utilizó para visualizar los resultados.

## 4.1. Integrales de energía y *Overlap*

Como hemos mencionado previamente, en nuestro planteo aparecen integrales de tres centros: las dos funciones hidrogenoides centradas en impurezas diferentes y la impureza centro del potencial de Coulomb. Si bien las integrales de dos centros (la impureza centro del potencial coincide con la función hidrogenoide) sí tienen una expresión cerrada, las de tres centros deben ser calculadas numéricamente. En este caso se utilizaron coordenadas esféricas (en dos y tres dimensiones), situando como origen de coordenadas la impureza centro del potencial (a fin de cancelar la singularidad con el Jacobiano). El eje  $z$  coincide a su vez con el eje que une esta impureza con alguna de las otras dos. Para chequear que las integrales fueran correctamente calculadas, se compararon los resultados numéricos para integrales de dos centros en tres dimensiones con los resultados analíticos que figuran en la referencia [26]. En trabajos previos [17][15] se desprecian las integrales de tres centros argumentando que el centro dispersor es apantallado por los demás electrones. En el mecanismo ISA sí deben ser calculados este tipo de interacciones. Para las concentraciones que vamos a considerar, la distancia media entre impurezas es del orden de  $3 a_B^*$ . El *screening* de los demás electrones en la banda de impurezas no es efectivo para distancias de este orden y su contribución debería ser estadísticamente menor.

## 4.2. Cadena Lineal

Empezamos estudiando sistemas lineales de una dimensión. Primero consideramos cadenas ordenadas y luego desordenadas. La idea es observar el comportamiento temporal de un electrón en estos sistemas, a fin de poder comparar y eventualmente identificar la influencia del desorden. El tamaño de los sistemas va desde 4 hasta 100 impurezas.

Las primeras simulaciones (tanto en arreglos ordenados como desordenados) que se realizaron mostraban que el decaimiento no podía ser ajustado por una función exponencial. Surgió el interrogante de cómo caracterizar un decaimiento en este caso. Encontramos entonces que este comportamiento era observado en otros sistemas como por ejemplo cadenas de espines. El trabajo de la referencia [27] hizo que se volcara nuestra atención hacia un estudio más general de decaimientos, dentro del cual pudieramos encuadrar nuestros resultados. La solución fue abandonar la idea del decaimiento estrictamente exponencial y caracterizar con un tiempo de vida medio definido por la Ec. 3.25. Sin embargo, dado que los sistemas son finitos se usó en el límite superior el tiempo en el cual aparece el eco mesoscópico, ya que éste se distingue en la evolución y porque el valor de la probabilidad en ese punto es en general muy pequeño. Lo que se calcula entonces es el tiempo de vida medio de un electrón en una impureza. A continuación describimos brevemente el estudio

de la cadena de espines mencionado.

### 4.2.1. Polarización en cadenas de espines

En esta sección se describe un sistema similar al que se estudia en este trabajo. Se trata de una cadena lineal de espines en la cual se estudia la evolución de una excitación inicial local de espín [27]. El sistema se encuentra en presencia de un campo magnético externo y la interacción entre espines es a primeros vecinos a través de un Hamiltoniano  $H_{XY}$ . En particular la cadena contiene 20 espines y la interacción entre el primer espín (donde se encuentra la excitación inicial) y la segunda es débil. Considerando  $\varepsilon_0/V = 1,3$ ,  $V_0/V = 0,75$ , donde  $V$  es el elemento de interacción entre dos sitios consecutivos, exceptuando el primero,  $\varepsilon_0$  es la energía de sitio de la excitación local inicial y  $V$  son los demás elementos no-diagonales de la matriz. Las demás energías de sitio cumplen  $\varepsilon_n = 2V$ .

$$\begin{bmatrix} 1,3V & 0,75V & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0,75V & 2V & V & 0 & \dots & 0 \\ 0 & V & 2V & V & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \end{bmatrix}$$

Si construimos una matriz Hamiltoniana con estos valores y realizamos la evolución temporal (con nuestro programa) obtenemos un gráfico de la probabilidad de supervivencia versus el tiempo (en escala semilogarítmica) idéntico al que aparece en la referencia [27]. Ver Fig. 4.1.

Lo que se advierte en la Fig. 4.1 es un decaimiento no exponencial para tiempos cortos, en general de tipo cuadrático. Luego hay una etapa en la cual el comportamiento es exponencial, pero su duración y sus límites dependen del sistema. Posteriormente se observa una abrupta caída en la polarización (*survival collapse*). Lo que sucede en este punto es una interferencia destructiva entre la amplitud de probabilidad de supervivencia y la de retorno. Luego, un decaimiento tipo  $t^{-3}$  modulado con una frecuencia definida (*quantum diffusion*) y finalmente surge el eco mesoscópico característico de los sistemas finitos. El instante en que éste aparece es proporcional al número de sitios. En general lo que se observa con estos resultados son tres regímenes de comportamiento bien diferenciados. La ausencia de un decaimiento estrictamente exponencial hace que éste fenómeno sea no-Markoviano o equivalentemente, un sistema con efectos de memoria. Este trabajo motivó que intentáramos simular en nuestro sistema a través de un arreglo de impurezas cuasi-periódico la interacción débil entre la primera y la segunda impureza.

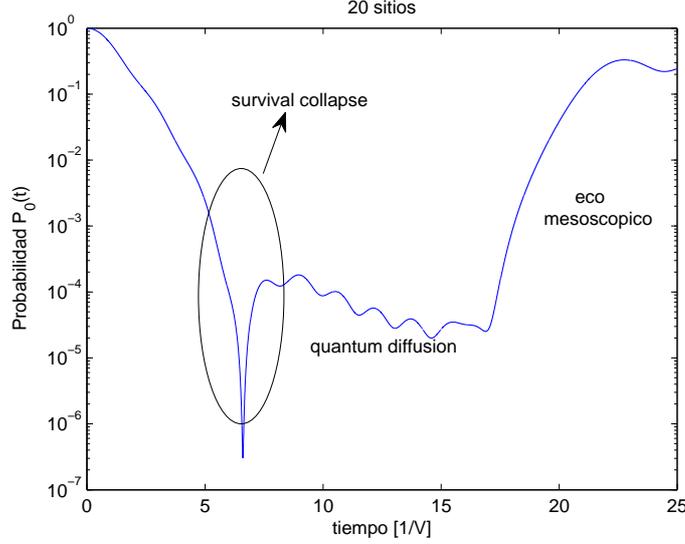


Figura 4.1: Con las siguientes relaciones:  $\epsilon_0 = 1.3$  V,  $V_0 = 0.75$  V y  $\epsilon = 2$  V se obtiene una evolución temporal idéntica a la citada por la referencia [27]

#### 4.2.2. Cadena Cuasi-periódica

Lo que intentamos con un sistema cuasi-periódico es obtener una matriz Hamiltoniana cuyos elementos cumplan en la mejor medida las relaciones de la cadena de espines de la sección anterior. Con esto queremos dar sustento a nuestro análisis de decaimientos, además de observar los efectos del solapamiento entre las funciones de onda. Para simular la interacción débil entre la primera y la segunda impureza se tomó una distancia mayor respecto de la distancia entre todas las demás impurezas y se consideraron interacciones entre todas las impurezas. Debido a que sólo consideramos interacciones internas (completamente determinadas por las posiciones de las impurezas) y ninguna perturbación externa (no tenemos parámetros libres), no fue posible encontrar un arreglo que cumpla las relaciones de la referencia [27]: no es posible hacer que el elemento de *hopping*  $V_{01}$  sea menor que  $V$  y que simultáneamente la energía de sitio sea mayor que  $V$ . No obstante, logramos con una determinada distribución un comportamiento parecido. Para un arreglo de 20 impurezas con una distancia entre ellas (en la parte periódica) de  $2.7143 a_0^*$  (radios de Bohr) y una distancia entre la primera y la segunda impureza de  $3.2673 a_0^*$ , se obtiene el gráfico de la Fig. 4.2. A primera vista, el *survival collapse* solo está presente en el caso sin *overlap*. El eco mesoscópico aparece en ambos casos, aunque a tiempos diferentes.

Si ahora tomamos una distancia mayor entre la primera y la segunda impureza, lo que se observa es la Fig. 4.3. El acoplamiento entre el estado inicial y el resto del sistema es menor en este caso. Se observa cómo inicialmente el régimen es más exponencial y las oscilaciones en la etapa inicial también han disminuido.

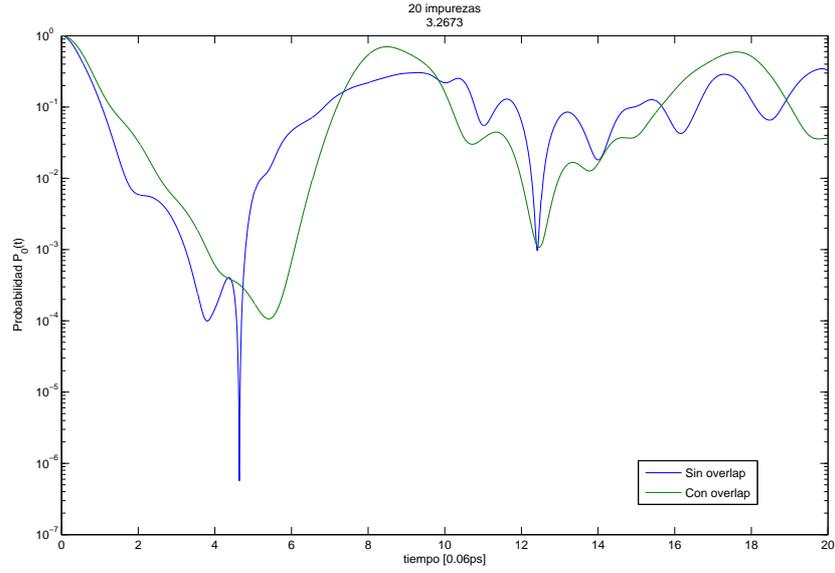


Figura 4.2: La evolución temporal de un sistema cuasi- periódico de 20 impurezas. La distancia entre la primera y la segunda impureza es mayor que la separación en la parte periódica.

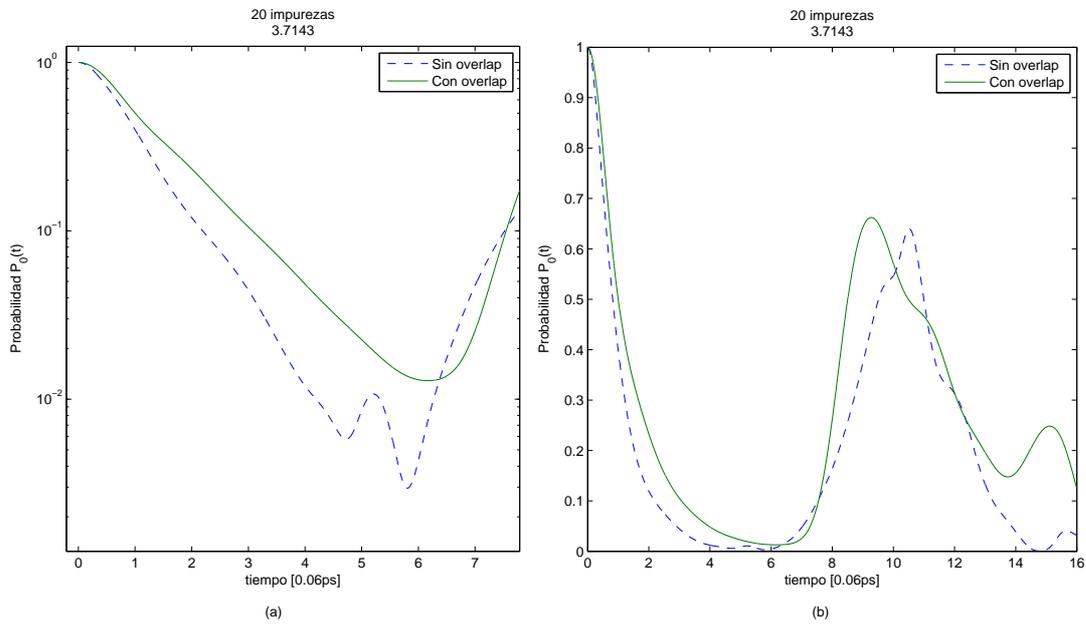


Figura 4.3: La distancia entre la primera y la segunda impureza es  $3.7143 a_B$ . Se observa un carácter más exponencial durante la etapa inicial (b) Una vista más detallada en escala semilogarítmica. En el resultado con *overlap* se advierte claramente un intervalo temporal con un comportamiento exponencial

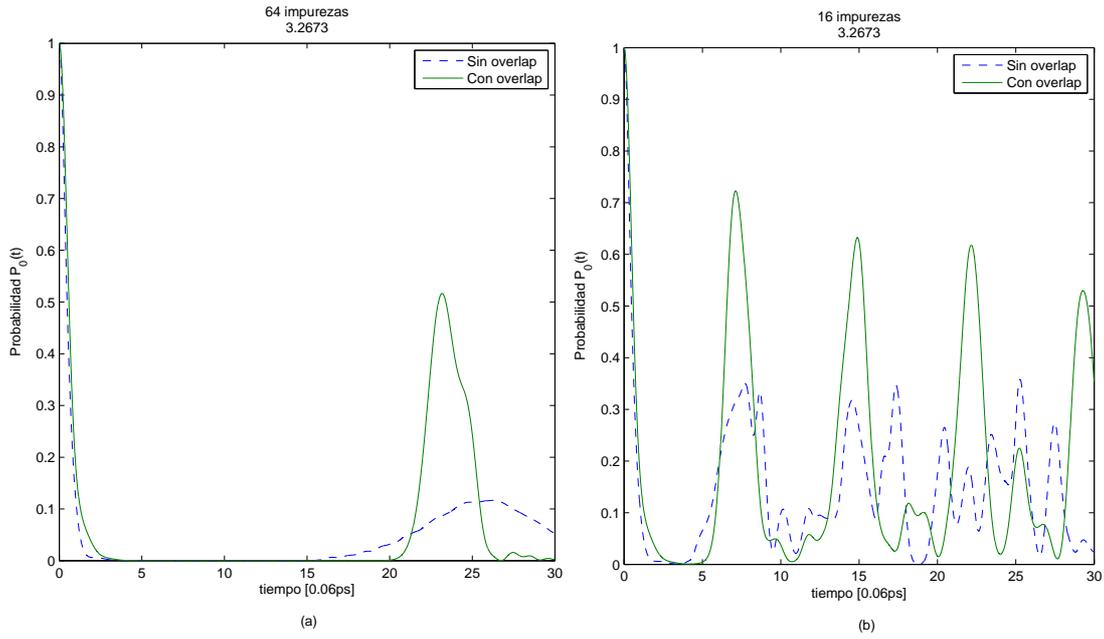


Figura 4.4: La evolución temporal para un sistema de 16 (a) y 64 (b) impurezas. Se observa que el tiempo de vida es el mismo pero el tiempo en el cual aparece el eco mesoscópico es diferente.

Por otro lado, vale la pena comparar las evoluciones temporales de sistemas con la misma densidad -que aquí se traduce en la misma distancia entre impurezas- pero diferente número de impurezas. En el gráfico de la Fig. 4.4 los sistemas tienen 16 y 64 impurezas. Se observa a simple vista que el comportamiento no difiere significativamente en la etapa inicial, pero el eco mesoscópico retrasa su aparición en el sistema de 64 impurezas. De hecho, pudo comprobarse que el tiempo en el cual comienza el eco es proporcional al número de impurezas, tal cual se afirma en la ref. [27]. Esto apoya la idea de que en una dimensión un sistema de 16 impurezas es para lo que a nosotros nos interesa un sistema suficientemente grande. El comportamiento posterior al eco está totalmente relacionado con el hecho de que el sistema es finito.

Podemos comparar el comportamiento temporal con la distribución o composición espectral del estado inicial. La Fig. 4.5 muestra que por ejemplo cuando se tiene en cuenta el *overlap*, la distribución es más simétrica (podemos decir que se parece más a una distribución Lorentziana) y en consecuencia el comportamiento para tiempos intermedios es más exponencial.

De las observaciones anteriores queda claro que las evoluciones temporales de un electrón al abandonar una impureza no están regidas por una ley exponencial. Sin em-

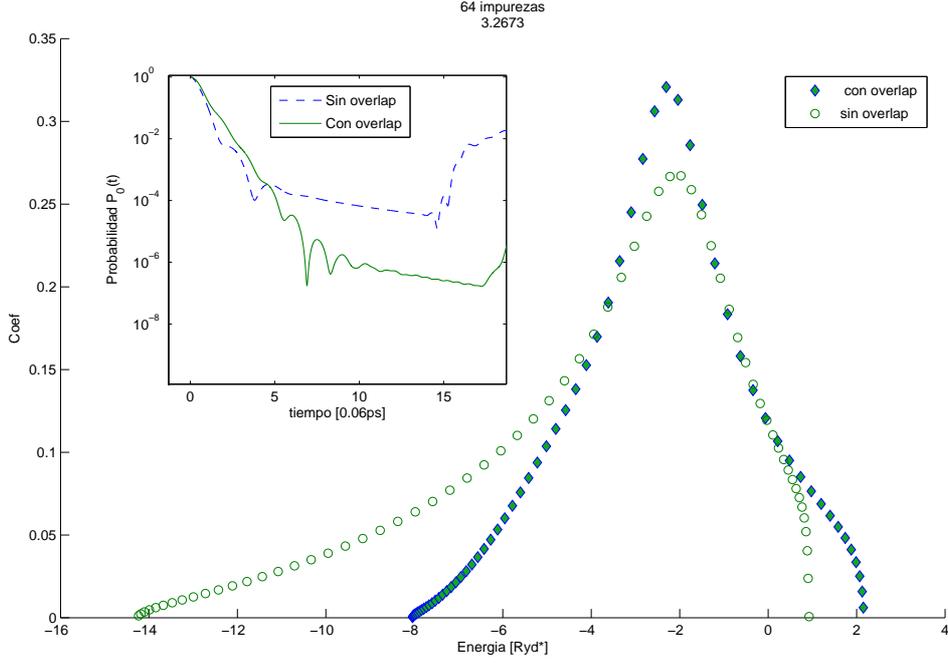


Figura 4.5: Distribución espectral del estado inicial. El caso sin *overlap* presenta mayor asimetría. La cola en al zona de bajas energías está relacionada con las oscilaciones iniciales de la probabilidad

bargo podemos caracterizar el decaimiento por un tiempo de vida medio (dado en la Ec. 3.25). Aprovechando que tenemos la distribución espectral del estado inicial en la Fig. 4.5 podemos verificar la relación de indeterminación de energía tiempo para estimar el tiempo de vida. Primero, el caso con *overlap* cumple que

$$\Delta_E = 1,4541 \implies \tau_{1/2} \geq 0,54 \quad ; \tau_0 \geq 1,08$$

según las definiciones de  $\tau$  en la sección 3.3.2 . En el otro caso

$$\Delta_E = 1,9534 \implies \tau_{1/2} \geq 0,40 \quad ; \tau_0 \geq 0,8$$

Estos valores pueden ser comparados cuando más adelante calculemos los tiempos de vida del estado.

Vamos a empezar con el cálculo de los tiempos de vida medios considerando el sistema cuasi-periódico. Al ir espaciando progresivamente la primera impureza de la segunda, la tendencia que se observa es que los tiempos de vida se van haciendo cada vez mayores como se ve en la Fig. 4.6. Los resultados muestran también que los tiempos calculados con *overlap* superan siempre a los obtenidos hasta una determinada distancia. Sin em-

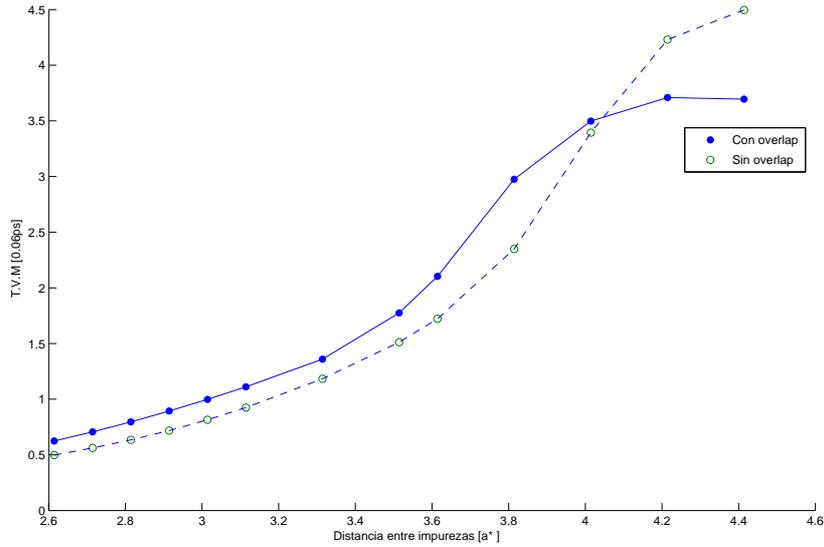


Figura 4.6: Tiempo de vida medio en función de la distancia entre la primera y la segunda impureza. A medida que esta distancia aumenta, los valores mínimos de la probabilidad aumentan y hay una transición progresiva hacia un régimen oscilatorio.

bargo, para estas distancias la probabilidad  $P_0$  oscila con una amplitud muy pequeña alrededor de un valor constante y pierde sentido hablar de decaimiento. El acoplamiento es suficientemente chico como para que el estado inicial decaiga.

Se estudió también el tiempo de vida medio para diferentes números de impurezas. En la Fig. 4.7 se puede notar que en todos los casos, los tiempos de vida medios son mayores cuando el cálculo incluye al *overlap*. Conforme aumenta la cantidad de impurezas, el tiempo tiende a mantenerse constante, debido a que si bien el eco mesoscópico va apareciendo más tarde, la contribución  $P_0$  al T.V.M. es despreciable porque su valor es muy pequeño antes (ver Fig. 4.4).

Para finalizar con el estudio de este sistema realizamos simulaciones basadas en el modelo de Matsubara-Toyozawa (MT) también utilizado en la referencia [17]. En ésta se consideran interacciones Coulombianas, pero sugiere que el efecto de apantallamiento causado por los demás electrones en los iones permite despreciar elementos de transición en los cuales el centro del potencial no coincida con algún centro de los orbitales de base. Es decir, que integrales del tipo  $\int \phi(|r - R_i|) V(|r - R_m|) \phi(|r - R_j|)$  con  $m \neq i, j$  son despreciadas. Por lo tanto los elementos diagonales son cero teniendo en cuenta que la energía de sitio fue tomada como cero. En nuestro estudio hasta aquí el desorden también estaba presente en los elementos diagonales.

Sin embargo no deja de lado el *overlap* el cual es incluido en el cálculo de la misma

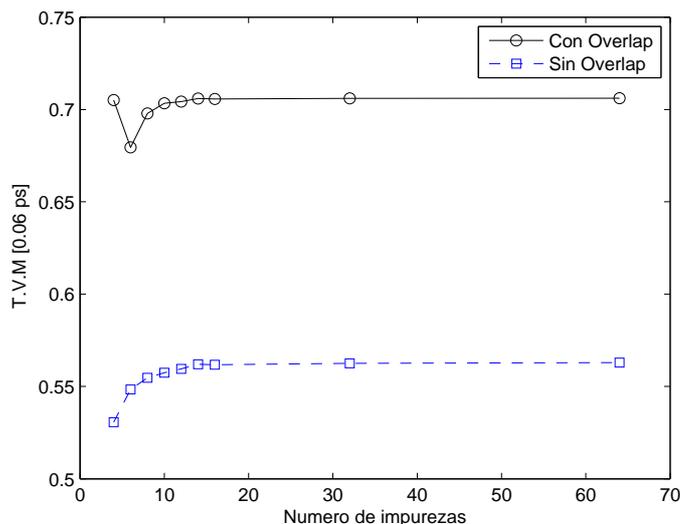


Figura 4.7: Los tiempos de vida medios se mantienen constantes a medida que crece la cantidad de sitios.

forma en que se hizo en este trabajo. Vale aclarar que en [17] lo que se estudia es la localización de los estados (que veremos más adelante) en función de las densidades para sistemas con estructuras tipo diamante (3 dimensiones) de 600 impurezas.

Bajo estas aproximaciones, la evolución temporal para el sistema de 20 impurezas está representada en la Fig. 4.8. La principal diferencia con el caso anterior (llamaremos modelo exacto al que considera la interacción con todas las impurezas) es que en MT la evolución en la etapa inicial es similar en el caso con y sin *overlap*.

El T.V.M para diferente número de impurezas (Fig. 4.9) en el modelo de MT es cualitativamente parecido al obtenido anteriormente, pero la diferencia entre el tiempo con y sin *overlap* es menor.

Por último vamos a mostrar un resultado que puede echar luz sobre la interpretación del *overlap*. En este caso vamos a ver la probabilidad en el sitio 2 (es decir el contiguo al sitio de la excitación inicial). En la Fig. 4.10 el gráfico de la derecha (a) corresponde al modelo de MT, mientras que el (b) es el exacto. Se ve claramente la correspondencia entre la curva con *overlap* de (a) y la curva sin *overlap* de (b).

Además se puede ver que en ambos casos en el instante inicial la probabilidad tiene un valor finito si se considera el *overlap* (debido a que el la proyección del estado inicial sobre la impureza 2 es distinta de cero). El ritmo al que crece esta probabilidad en función del tiempo es menor que en el caso sin *overlap*. Por esto mismo es que el tiempo de vida medio del estado inicial es más largo cuando se tiene en cuenta el *overlap*.

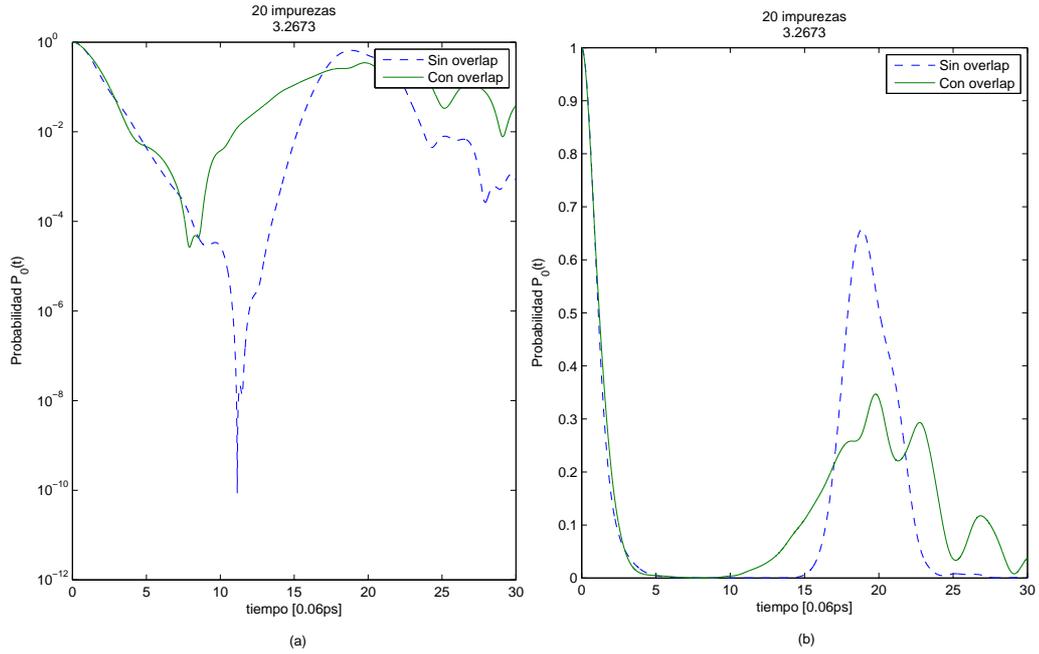


Figura 4.8: En esta evolución sólo se han tenido en cuenta elementos de matriz en los cuales uno de los orbitales coincide con el centro dispersor de Coulomb (modelo de Matsubara-Toyozawa.) Esta aproximación intenta capturar el efecto del *screening* causado por los demás electrones.

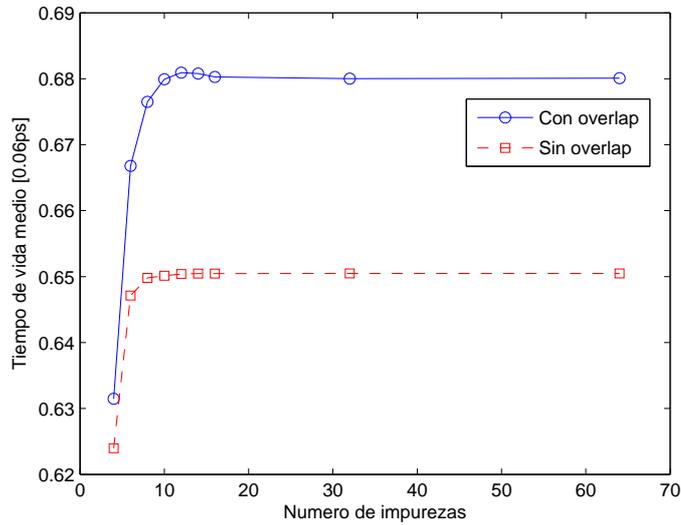


Figura 4.9: Probabilidad de no decaimiento en función del número de impurezas. En este resultado las interacciones son del tipo Matsubara-Toyozawa. [17]

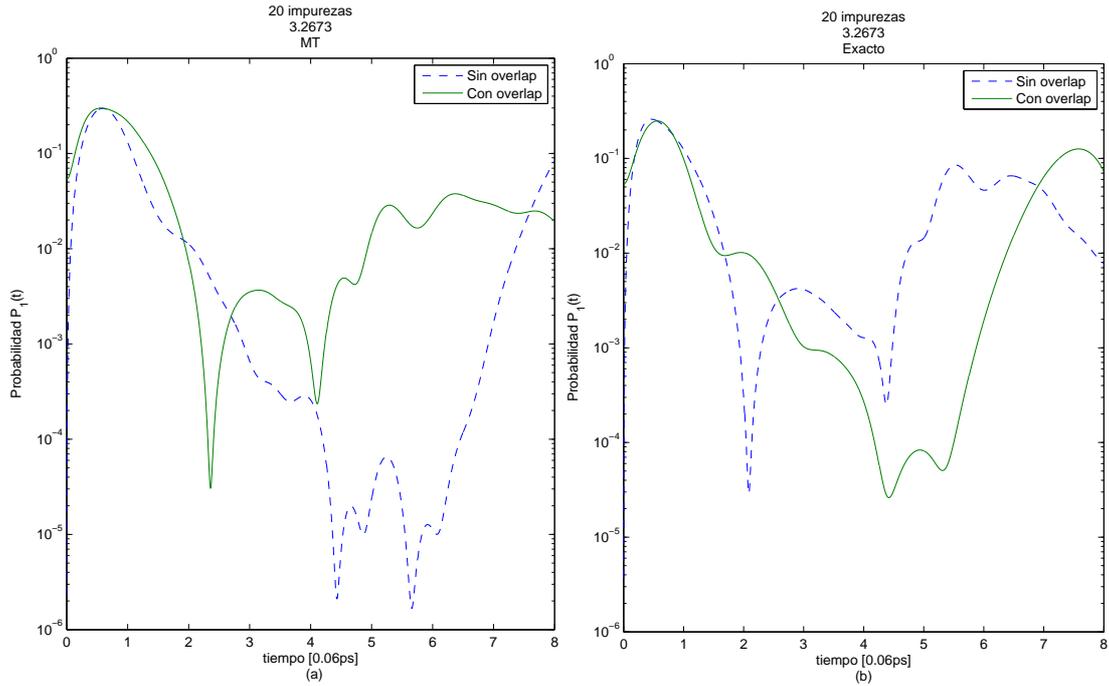


Figura 4.10: La probabilidad en el sitio 2. Hay una correspondencia entre la curva sin *overlap* del modelo MT (a) y la curva sin *overlap* en (b)

### 4.2.3. Cadena Periódica

Sin la separación extra introducida entre la primera y la segunda impureza el sistema de la sección anterior se vuelve periódico. Para estudiar la influencia de esta perturbación, se realizaron simulaciones con sistemas que contaban con diferentes números de impurezas.

En la Fig. 4.11 puede verse que en el caso del modelo MT aparece el *survival collapse* si se considera el *overlap*, aunque en el caso del cálculo exacto no puede identificarse claramente. La primera caída abrupta en la probabilidad parece ser demasiado prematura como para ser considerada *survival collapse*. Además, si bien todas las curvas son diferentes, podemos analizar la evolución en el modelo MT con *overlap*. En ésta no se observan oscilaciones (tipo *quantum beats*) al igual que la evolución sin *overlap* del modelo exacto. Es decir que se da la correspondencia ya encontrada en el caso cuasi-periódico entre las dos situaciones. De hecho pudo comprobarse que la distribución espectral del estado inicial es asimétrica en ambos casos. En investigaciones anteriores [28][29] fue analizada la influencia del *overlap* y todas concluyen que su efecto es similar al de considerar interacciones más allá de primeros vecinos.

Nuestra observación sugiere que esta idea puede ser extendida. El efecto del *overlap* es equivalente a modificar las interacciones entre diferentes sitios, de manera que esta

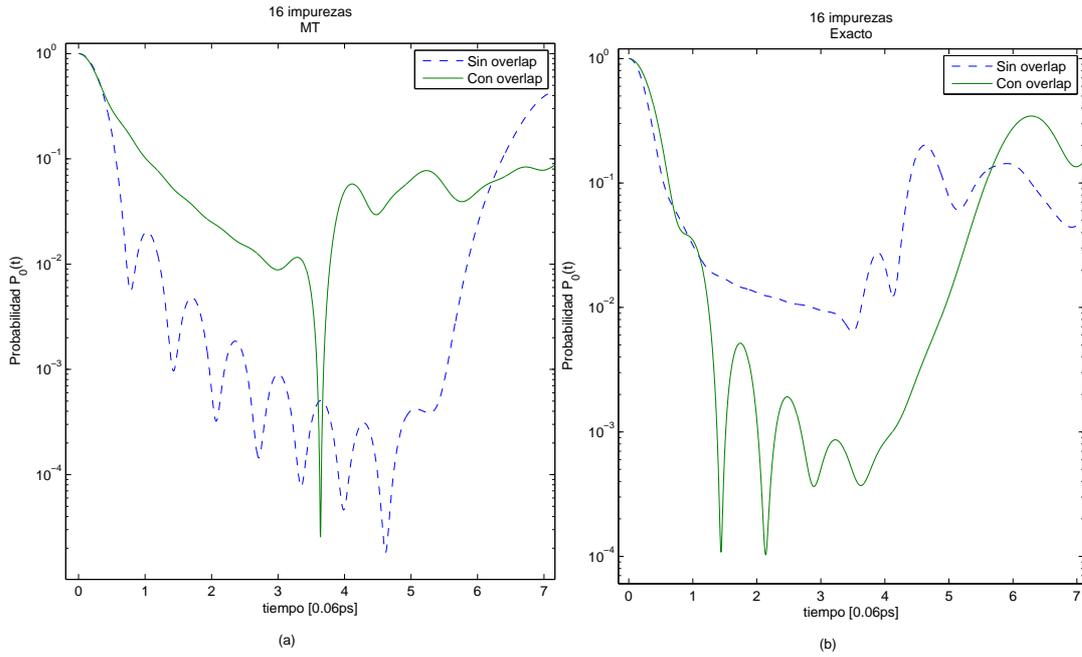


Figura 4.11: Probabilidad de no-decaimiento en función del tiempo para un sistema periódico de 16 impurezas. A diferencia del sistema cuasi-periódico, en este caso se observa el *survival collapse* en el caso con *overlap* para el modelo de Matsubara-Toyozawa

interacción ya no sólo depende de la distancia entre las dos ubicaciones como en el caso de MT, sino que también sea considerado el entorno de las impurezas involucradas en el *hopping*.

Para los sistemas periódicos también se calculó el T.V.M. en función del número de impurezas tanto para el modelo exacto (Fig. 4.12) como para el MT (Fig. 4.13). Respecto del arreglo cuasi-periódico, el T.V.M. resulta menor, y también se cumple que la tendencia es que se mantiene constante a medida que crece el número.

A diferencia del caso cuasi-periódico, en este caso la diferencia entre los tiempos con y sin *overlap* en el caso exacto (Fig. 4.12) es menor que en MT. Además el valor del T.V.M. medio obtenido con MT considerando el *overlap* es mucho mayor que el que resulta del cálculo exacto.

La idea de situar el electrón inicialmente en la primera impureza y dejarlo evolucionar libremente es que de esta manera podemos apreciar el decaimiento. De haberlo situado en alguno de los sitios en el medio de la cadena se hubieran observado más oscilaciones provenientes de la interacción con los vecinos a ambos lados causando más interferencia.

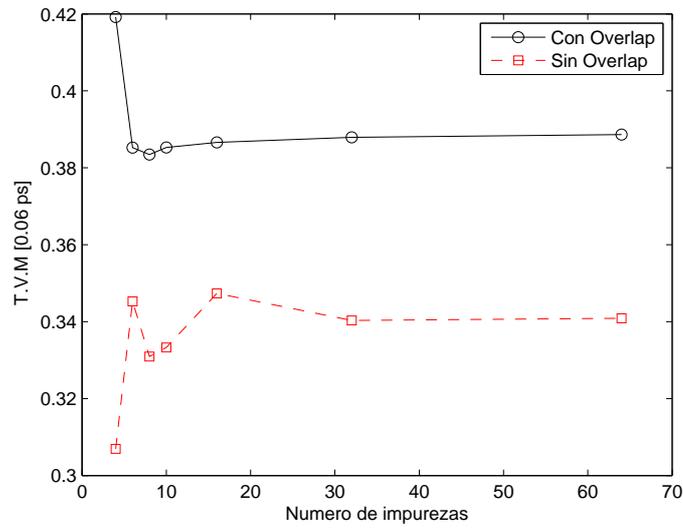


Figura 4.12: El tiempo de vida medio es menor que en los sistemas cuasi-periódicos, y análogamente se mantiene constante a medida que aumenta el número de impurezas. Se consideran interacciones con todas las impurezas

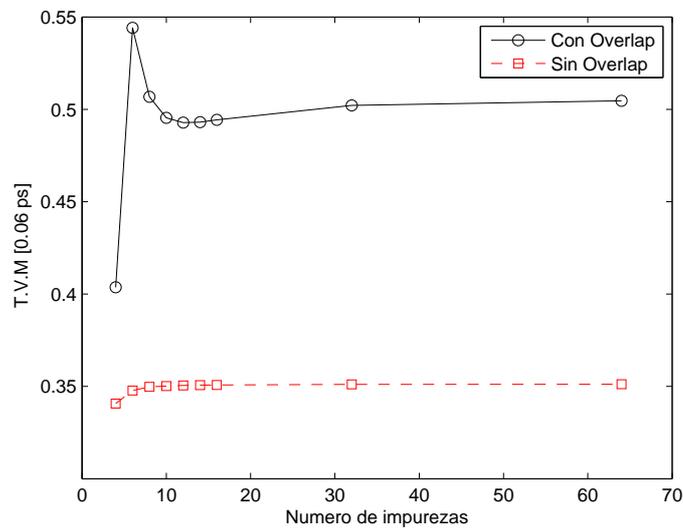


Figura 4.13: Las interacciones son del modelo de MT.

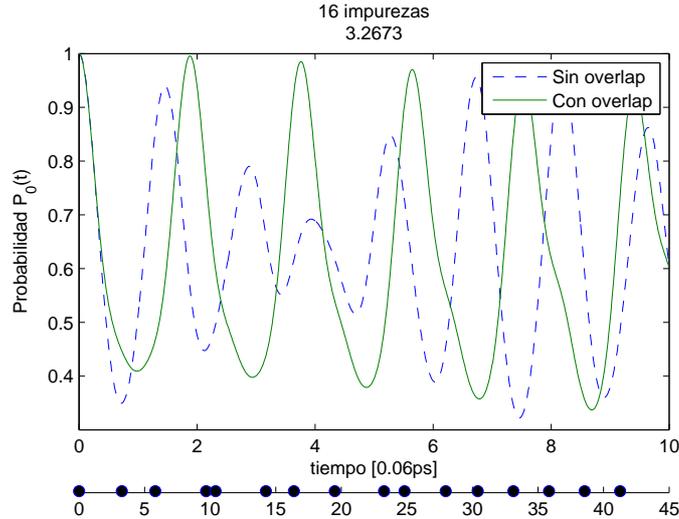


Figura 4.14: Probabilidad de no-decaimiento en función del tiempo para un sistema desordenado de 16 impurezas. En la figura de abajo se muestra el arreglo unidimensional de impurezas.

#### 4.2.4. Sistemas Desordenados

En los análisis anteriores, la distribución de impurezas era controlada y la separación entre ellas era tal que la densidad fuera cercana a la crítica. En los sistemas lineales desordenados que consideramos a continuación, el volumen del sistema sigue ajustándose a esta última condición, pero en este caso las impurezas son ubicadas en posiciones aleatorias. Tampoco tenemos ninguna restricción respecto de la distancia mínima para la separación entre iones. De hecho está comprobado experimentalmente que no hay efectos de repulsión (tipo *hard-core repulsive effects*) en la escala de  $a^*$ .

En este trabajo, inicialmente se realizaron varias simulaciones con distinto número de impurezas (entre 4 y 32 donores) y se observó que en general la probabilidad evolucionaba en el tiempo de manera oscilatoria.

Modificando el sistema cuasi-periódico de 16 impurezas, en el cual se observa un decaimiento, de forma tal que la primera y la segunda impureza se mantengan en sus posiciones originales y variando las demás de manera arbitraria, se generó un arreglo de impurezas desordenado. Los resultados de este nuevo sistema (Fig. 4.14) indican que al modificarlo levemente, el régimen cambia sensiblemente, estando caracterizado por oscilaciones más que por un decaimiento.

Lo que sugiere la Fig. 4.14 es que el electrón no está visitando todas las impurezas, sino que toda la dinámica se resuelve entre unas pocas impurezas, presumiblemente entre las más cercanas. Para comprobar esto se pueden seguir dos caminos. El primero consiste en

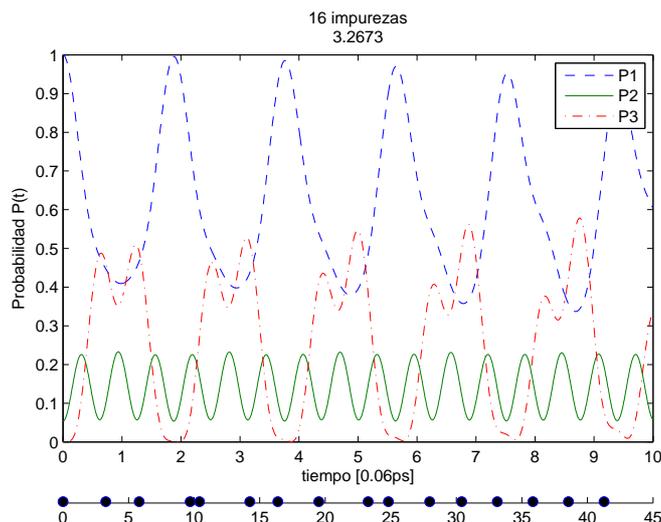


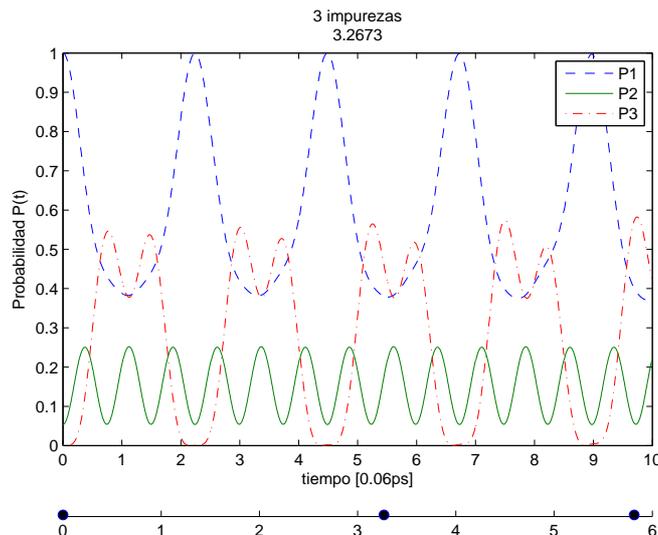
Figura 4.15: La probabilidad en las tres primeras impurezas para el mismo sistema que el de la Fig. 4.14

calcular la proyección de la función de onda sobre los orbitales de la impurezas 2,3,4,..etc. En particular, se observó que el electrón nunca llegaba a la impureza 4 inclusive, y en todo tiempo el flujo de probabilidad se repartía entre las tres primeras impurezas (ver Fig. 4.15).

Es decir que un sistema desordenado que conste sólo de las mismas tres primeras impurezas tiene el mismo comportamiento. De hecho, si generamos un arreglo con las tres primeras impurezas del sistema anterior, podemos ver en la Fig. 4.16 que la evolución del electrón es prácticamente la misma.

Podemos identificar este grupo de partículas con un *cluster*. Por otro lado, lo que este comportamiento sugiere es que uno de los autoestados de energía del sistema de 16 impurezas es similar a uno de los del sistema de 3 y que el estado inicial tiene una contribución mayoritaria de éste. En efecto, se pudo comprobar que la mayor contribución a la densidad local de autoestados estaba dada por cada uno de estos autoestados.

Este último ejemplo sugiere que si lo que queremos es calcular un tiempo de vida medio en un sistema desordenado, esto dependerá fuertemente de la ubicación inicial del electrón. Aquí nuestros resultados tienen una estrecha relación con la teoría de percolación. Para determinadas densidades, la posición inicial del electrón es crucial para su posterior evolución. Sin embargo podemos suponer, apoyándonos en la teoría de percolación, que partir de cierta densidad, el movimiento del electrón será de tipo difusivo sin importar su posición inicial. Por ello desviamos nuestro estudio hacia la caracterización de estas redes desordenadas. Lo que debemos observar es que a medida que la cantidad



de estados extendidos crece, debe ser mayor la probabilidad de que un electrón situado aleatoriamente en alguna impureza exhiba un decaimiento.

En un sistema desordenado se distinguen dos clases de estados: los localizados y los extendidos. En base a un dado criterio podemos clasificar cada uno de acuerdo a su índice de localización que veremos más adelante. A través de esto podremos también indicar la existencia de la transición metal-aislante que eventualmente pudiera existir.

#### 4.2.5. Localización y Transición

En la referencia [30] se utiliza un modelo como el de MT para estudiar un sistema bidimensional. Aquí lo aplicamos también para el caso unidimensional y posteriormente también en el caso bidimensional. La expresión para las interacciones coulombianas entre orbitales 1s hidrogenoides centrados en sitios  $j$  e  $i$ .

$$H_{ij} = -(1 + r_{ij})e^{-r_{ij}}$$

donde todo está expresado en unidades atómicas. Esta expresión proviene de despreciar en el cálculo todos los impurezas dispersoras que no sean la  $i$  o la  $j$ . Esta aproximación también es utilizada en la referencia [17] argumentando que la interacción con las demás impurezas es despreciable debido al *screening* del resto de los electrones.

Los sistemas contienen 100 sitios, y los elementos del hamiltoniano son calculados tanto para el modelo de MT como para el caso de interacciones con todas las impurezas. Las integrales numéricas las realizamos en tres dimensiones para tener una correspondencia

directa con la expresión del modelo MT. Para ponderar la localización de los autoestados seguiremos el enfoque de la referencia [17]. En éste se define un índice de participación inverso (IPR)

$$L_\lambda = \frac{\sum_{n=1}^N u_{n\lambda}^4}{\left(\sum_{n=1}^N u_{n\lambda}^2\right)^2}$$

el cual es una medida de la participación de cada orbital (o impureza) en un dado autoestado  $\lambda$  a través de las amplitudes  $u_{n\lambda}$ . Notar que  $L_\lambda$  tiene un valor de 1 para un estado localizado en una única impureza, mientras que en un estado delocalizado es  $O(1/N)$ . Dicho en otras palabras,  $L_\lambda^{-1}$  es una medida del número de impurezas participando en un dado modo. Una forma de caracterizar al sistema es contar la cantidad de estados extendidos usando como criterio que tengan un  $L_\lambda$  menor que cierto valor. El valor que tomamos en nuestro problema es 0.1 (= 10/numero de impurezas), ya que observamos que una autofunción con este valor cubre aproximadamente un 90 % del total del arreglo.

La Fig. 4.17 muestra la cantidad de estados con IPR menor que 0.1 para el modelo de interacciones exacto en función de la distancia media entre impurezas. Se observa que a medida que esta distancia aumenta, la cantidad de estados extendidos disminuye y además el efecto del *overlap* comienza a ser menor. Lo mismo sucede en el modelo de MT presentado en la figura a la derecha en 4.17. Aquí no se observa diferencia alguna entre considerar el *overlap* y despreciarlo. Otro diferencia para remarcar es que en el caso del modelo exacto la pendiente de la curva es mayor respecto del modelo MT.

Hasta aquí vimos que en general los decaimientos no pueden ser exponenciales para todo tiempo. Sabemos también que la posibilidad de decaimiento en sistemas desordenados depende de la ubicación inicial del electrón. Lo estudiado en sistemas moleculares sobre decaimientos puede ser aplicado en estos sistemas y hemos tomado de ahí la forma de caracterizar el decaimiento, para lo cual hemos necesitado explícitamente la probabilidad de no decaimiento en función del tiempo. Un enfoque interesante sería calcular un tiempo de vida medio a partir de la distribución espectral del estado inicial. Sobre todo en sistemas desordenados, donde el grado de localización de los autoestados determina la posibilidad de difusión del electrón.

## 4.3. Sistemas Bidimensionales

### 4.3.1. Sistemas Ordenados

Vamos a empezar el estudio de sistemas bidimensionales considerando arreglos no desordenados. Es decir que mantienen un cierto orden en su estructura como por ejemplo una red cuadrada. Por ejemplo, en la Fig. 4.18 se observa la evolución temporal de la

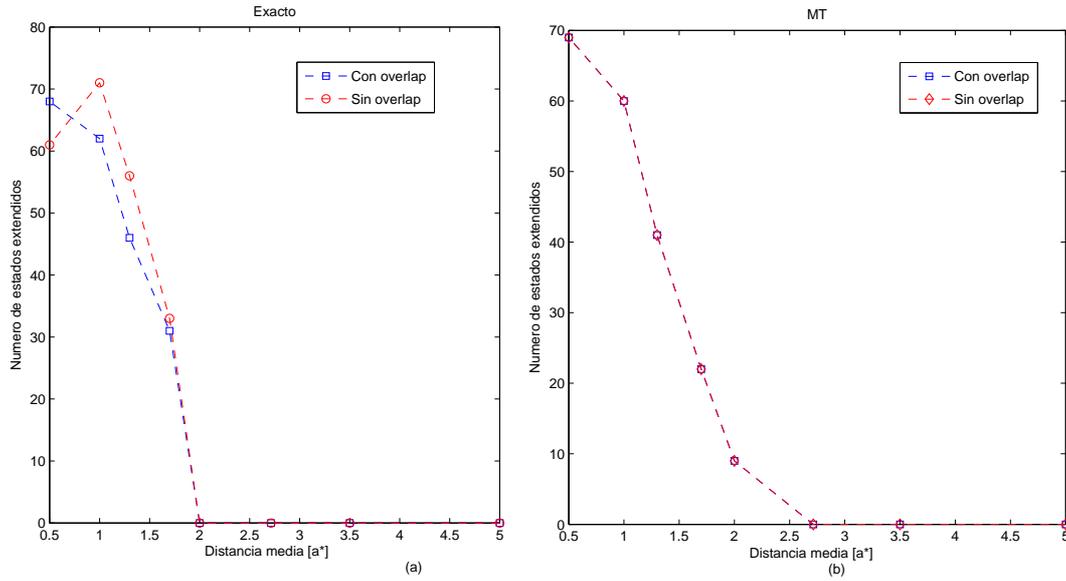


Figura 4.17: El número de estados extendidos (con  $L_\lambda < 0.1$ ) en función de la distancia media entre impurezas. A medida que la distancia aumenta los estados tienden a ser en su mayoría localizados.

probabilidad  $P_0$  para la impureza que está remarcada. En general, sea cual sea la impureza donde se encuentra inicialmente electrón, siempre es posible observar un comportamiento de decaimiento, manifestando que el electrón está visitando todo el sistema. Los efectos de finitud quedan reflejados en la aparición del eco mesoscópico al igual que en el caso unidimensional. En este caso también se observó que el decaimiento no era exponencial.

Consistentemente con esto, los índices de localización de este sistema deben ser chicos para todos los autoestados. En efecto, en la Fig. 4.19 se puede observar que en su gran mayoría los estados son extendidos. De hecho, todos tienen un IPR menor que 0.15 ( $IPR < 10/64$ ).

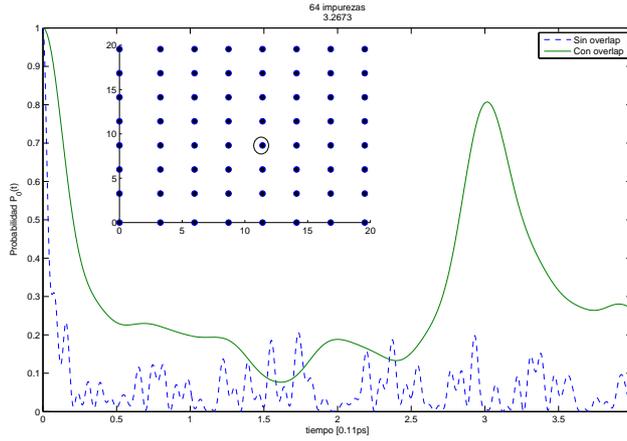


Figura 4.18: Evolución temporal de la probabilidad  $P_0$  si inicialmente el electrón está en el orbital de la impureza remarcada.

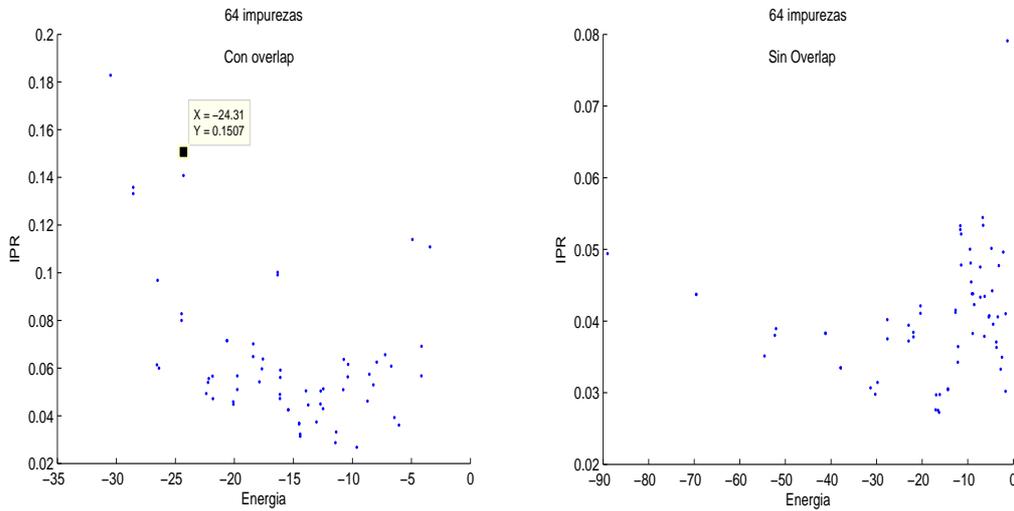


Figura 4.19: Índice de localización vs. energía para los casos (a) con *overlap* y (b) sin *overlap*

### 4.3.2. Sistemas Desordenados

Para ilustrar la diferencia con el caso ordenado, vamos a mostrar  $P_0(t)$  para dos ubicaciones iniciales del electrón.

En la Fig. 4.20 está esquematizado el sistema desordenado y dos impurezas A y B. Dependiendo de dónde se encuentre el electrón inicialmente, tenemos dos evoluciones temporales bien diferenciadas. El caso A no tiene vecinos muy próximos, mientras que B encuentra en su entorno más cercano varias impurezas. El gráfico a la izquierda en la Fig. 4.21 muestra el comportamiento para el sitio A, donde se distingue un decaimiento. En el otro caso el comportamiento es oscilatorio. El comportamiento oscilatorio está asociado

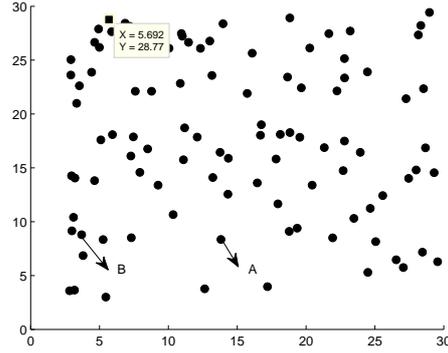


Figura 4.20: Esquema de una distribución de impurezas desordenada. Las evoluciones temporales de un electrón inicialmente en A o B corresponden a la Fig. 4.21

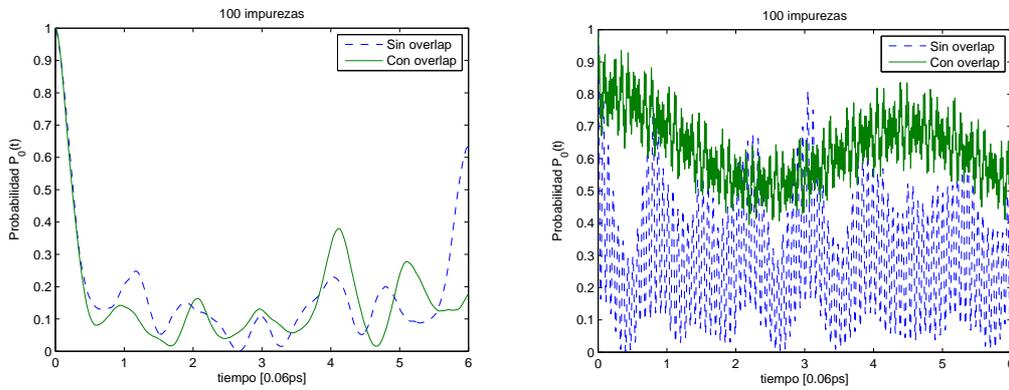


Figura 4.21: La evolución temporal de la probabilidad tiene un carácter de decaimiento (izquierda) correspondiente a una ubicación inicial en la impureza A. En el caso de B, se observan oscilaciones y la probabilidad nunca cae a valores menores que 0.4 (con *overlap*). Si no se considera el *overlap* los valores de probabilidad sí alcanzan valores muy cercanos a cero.

nuevamente a que el electrón no está visitando toda la red, sino que salta a las impurezas más cercanas.

### 4.3.3. Localización y Transición

En un sistema desordenado  $\mathbf{k}$  no es un buen número cuántico, y entonces no se puede hablar de una estructura de bandas  $E(\mathbf{k})$  ni de masa efectiva, momento cristalino, etc. Un concepto que todavía es válido es el de densidad de estados.

Los sistemas que consideramos contienen 100 impurezas y hemos realizado las simulaciones para diferentes densidades, tomando como parámetro la distancia media entre impurezas medida en radios de Bohr.

Usando también el modelo de MT, calculamos la densidad de estados. En la Fig. 4.23

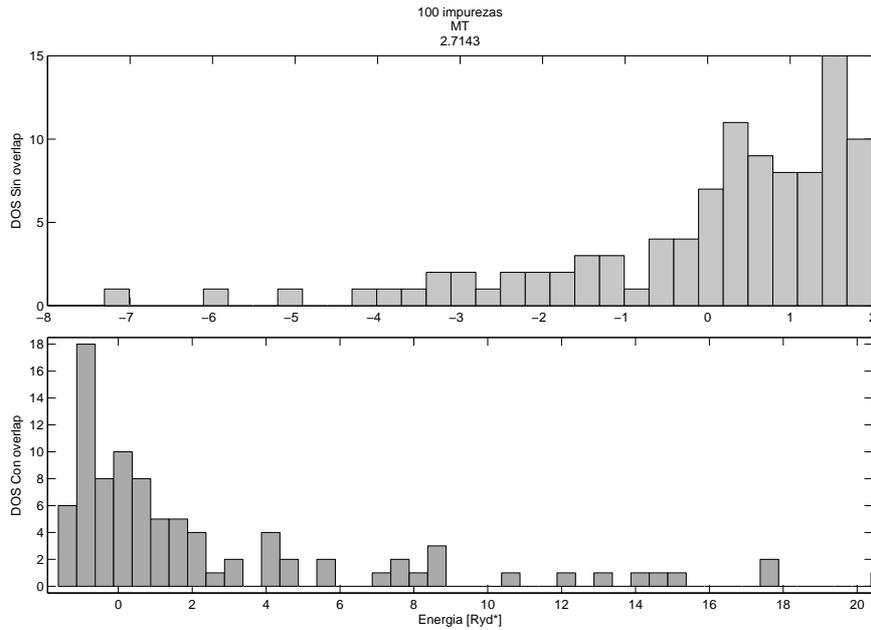


Figura 4.22: La densidad de estados en el modelo de MT.

los resultados muestran en ambos casos la asimetría que produce el *overlap*, prevaleciendo en la zona de bajas energías una región extensa de estados. Por el contrario, cuando se considera el *overlap*, esta asimetría parece reflejarse alrededor del cero de energía y también el ancho de banda crece considerablemente. La principal diferencia que hay entre las dos figuras es en el ancho de la banda. El caso *exacto* tiene un ancho mayor que el del modelo MT. Además, en cada caso por separado, al incluir el *overlap* también crece el ancho. Hay que notar sin embargo que a grandes rasgos la forma de las curvas es similar, es decir que al menos cualitativamente el modelo MT describe bien la densidad de estados. La asimetría que introduce el *overlap* fue reportada en trabajos anteriores en sistemas de tres dimensiones [16]. A partir de aquí consideramos para las interacciones

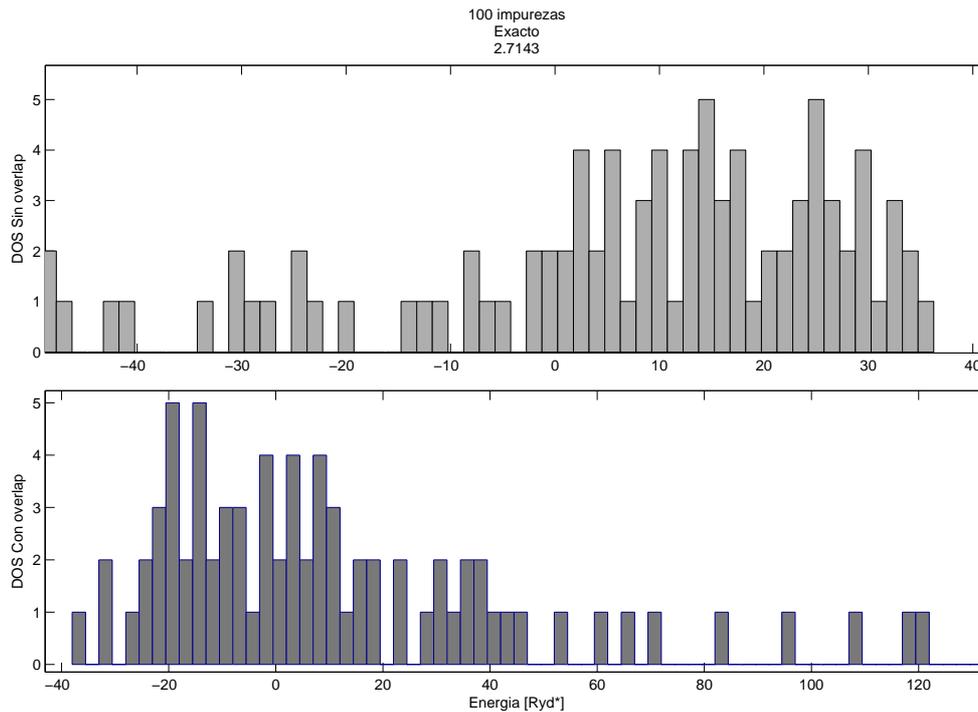


Figura 4.23: Densidad de estados en función de la energía. Se consideran interacciones con todas las impurezas.

el modelo de MT ya que el tiempo necesario para calcular los elementos de matriz en el caso exacto es muy grande. En la Fig. 4.24 los números en las esquinas representan las distancias medias (medidas en radios de Bohr) entre impurezas. Estos resultados sin *overlap* reflejan que a medida que crece la densidad -la distancia media entre impurezas decrece- la cantidad de estados localizados decrece y la dispersión en energía es mayor.

La Fig. 4.25 corresponde al caso con *overlap*. Cualitativamente estos resultados son correctos, dado que a medida que la densidad crece, la formación de *clusters* aislados es menos probable y por ende la cantidad de autoestados localizados debe también disminuir. Sin embargo, hay que notar que para las distancias intermedias no hay una región en la cual todos estados son localizados, sino que éstos se encuentran intercalados con los estados extendidos. En el caso sin *overlap*, a medida que la distancia disminuye, los estados localizados se van agrupando más en zona de energías positivas. En el caso con *overlap* no hay una tendencia clara.

En general, las observaciones respecto de la distribución del IPR y las diferencias entre considerar o no el *overlap* concuerdan con los resultados de la referencia [17], en el cual se estudia un sistema tridimensional (con mayor cantidad de impurezas) y las interacciones son de la misma forma (MT).

Siguiendo los pasos de la referencia [17], podemos trazar un corte para separar los

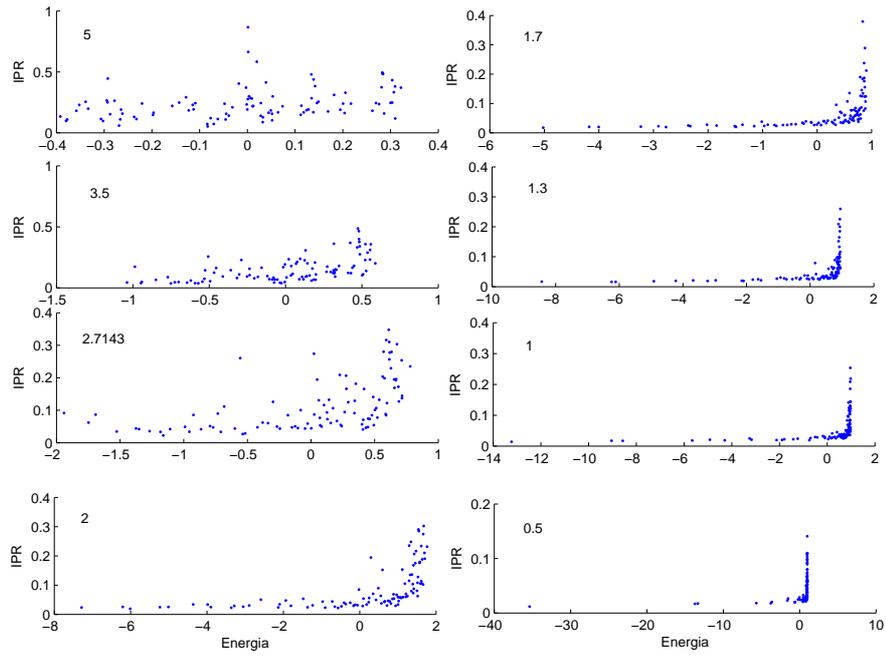


Figura 4.24: Índice de localización para diferentes distancias medias entre impurezas (sin *overlap*)

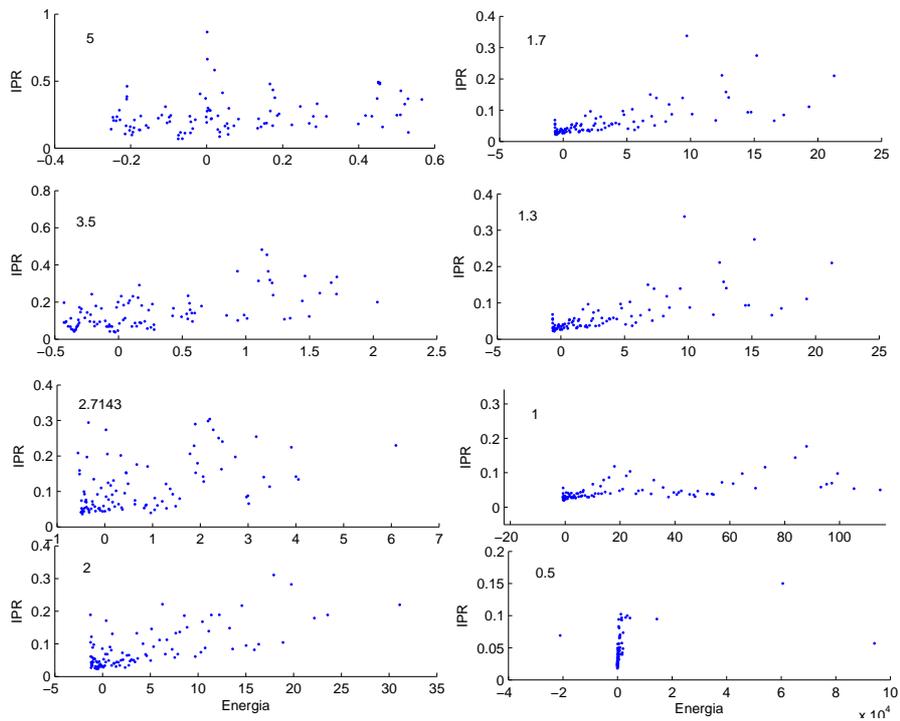


Figura 4.25: Lo mismo que la Fig. 4.24 pero con *overlap*. La densidad de estados en este caso tiene la asimetría opuesta respecto del gráfico 4.24

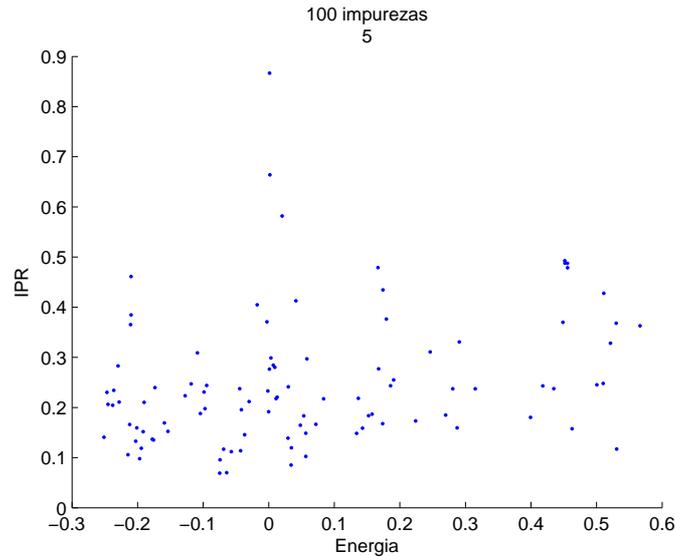


Figura 4.26: Los índices de localización en su gran mayoría mayores que 0.1 poniendo en evidencia que los autoestados son localizados.

estados localizados de los extendidos y así contar la cantidad de cada uno. En el caso de distancia 5 (sin overlap), la Fig. 4.26 muestra más en detalle que la mayoría de los estados son localizados. En particular, si ponemos el corte en  $10/N$ , la cantidad de estados con IPR menor que 0.1 es 7. En el caso con *overlap* son 5.

Tomando 0.1 como valor de corte tanto para el caso con y sin *overlap*, graficamos en la Fig. 4.27 la cantidad de estados extendidos ( $IPR < 0.1$ ) en función de las distancia media entre impurezas. Este gráfico muestra por un lado que para las distancias más grandes la influencia del overlap es menor y los índices coinciden, pero para las densidades mayores el efecto hace que la cantidad de estados extendidos sea mayor.

En la Fig. 4.27 vemos que la forma en que disminuye la cantidad de estados extendidos a medida que aumenta la distancia media es similar al caso unidimensional del modelo MT. Queda por analizar si en caso de considerar el modelo exacto la forma de la curva cambia y si el efecto del *overlap* es mayor, reproduciendo la tendencia observada en el caso unidimensional.

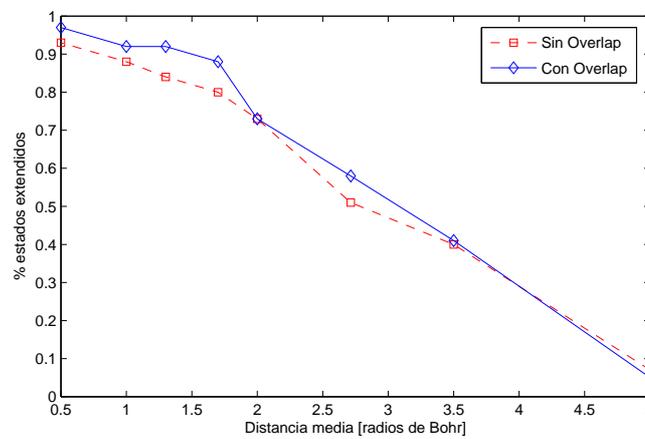


Figura 4.27: Número de estados extendidos vs. la distancia media entre impurezas para un sistema de 100 impurezas. Para distancias grandes los estados son en su mayoría localizados.

# Capítulo 5

## Conclusiones

Para estudiar la dinámica cuántica de un electrón empezamos considerando arreglos sencillos de impurezas con un ordenamiento lineal. Las cadenas cuasi-periódicas resultaron ser útiles para estudiar el decaimiento de una excitación inicial localizada, manifestando un comportamiento similar al observado en otros sistemas de investigaciones anteriores [27]. Al estudiar su evolución temporal se encontró que los decaimientos no obedecen una ley estrictamente exponencial, sino que su evolución puede ser dividida en tres etapas. Si bien en la etapa intermedia se puede llegar a considerar un comportamiento exponencial, su inicio y final no están siempre bien definidos, y es difícil establecer un criterio para el ajuste del tiempo de decaimiento. Introdujimos entonces el tiempo de vida medio de un estado (T.V.M.), el cual puede ser estimado a través de la relación energía-tiempo, aunque aquí lo calculamos en forma explícita en base a la definición y verificamos que la relación se cumple. Más allá de una simple comprobación, esta relación puede ser útil en caso de problemas macroscópicos o a la hora de promediar sobre posibles configuraciones. Por otro lado, consideramos en nuestros cálculos el *overlap* entre estados de la base (los estados hidrogenoides de las impurezas), el cual introduce la no-ortogonalidad de la base. Pretendimos con esto lograr una descripción más realista del problema. Verificamos que no surge ninguna inconsistencia en el hecho de plantear el problema en una base no-ortogonal (pero que tiene una interpretación física clara). Nuestros resultados sugieren que el efecto de considerar el *overlap* es similar a considerar en los términos de *hopping* el entorno de las impurezas involucradas. Esta idea extiende los resultados de otras investigaciones [28][29] que concluyen que su efecto es similar a incluir interacción a segundos vecinos.

En cuanto a los sistemas unidimensionales, encontramos que la inclusión del *overlap* hace que el T.V.M. de un estado sea mayor que sin éste. Sin embargo, al considerar el modelo de Matsubara-Toyozawa, vimos que la diferencia entre estos tiempos se hacía menor. Es decir que la influencia del *overlap* es mayor en el caso en que en las interacciones participan todas las impurezas. El T.V.M. calculado con el MT es muy cercano al que

calculamos de la otra forma. También comprobamos que en el caso de arreglos periódicos los tiempos disminuyen como es de esperar.

A continuación introdujimos desorden (estructural) en el sistema y comprobamos que el comportamiento difusivo del electrón depende fuertemente de su entorno más cercano (*short range order*), el cual puede ocasionalmente quedar suprimido y dar lugar a un comportamiento oscilatorio. Esta observación está en perfecto acuerdo con la teoría de percolación. Por ello decidimos continuar el estudio de sistemas desordenados a fin de poder caracterizarlos. Dos rasgos fundamentales que los caracterizan son la densidad de estados y el índice de localización de los autoestados. A partir de un criterio utilizado en la referencia [16] observamos que por debajo de cierta densidad todos los estados están localizados. Para densidades suficientemente grandes, los estados son prácticamente todos extendidos. En los sistemas con ordenamiento lineal, obtuvimos que la cantidad de estados extendidos disminuye a medida que aumenta la distancia media entre impurezas. Podemos concluir que en el caso unidimensional, según el criterio de la referencia [16], se observa una transición de un régimen metálico a uno aislante, tanto en el modelo de MT como en el caso exacto. La ventaja que presenta nuestro estudio del desorden es que no asumimos ningún modelo para el desorden. Es decir, los elementos no diagonales y los diagonales del Hamiltoniano no son absolutamente independiente entre sí, sino que están relacionados por la ubicación relativa de todas las impurezas.

Pasando a los sistemas bidimensionales consideramos el modelo de Matsubara Toyozawa. Su comparación con el modelo exacto (interacciones con todas las impurezas) demuestra que al menos cualitativamente los dos modelos coinciden, aunque en el modelo exacto la dispersión de energías es mayor. Encontramos resultados en correspondencia con los reportados en trabajos anteriores [17] de sistemas tridimensionales. Por un lado, el efecto principal y más notable del *overlap* es en la densidad de estados. Al considerarlo, la curva es también asimétrica, pero adquiere una cola en la región de energías altas y alrededor del cero la densidad es mayor. Los valores máximos de la densidad se encuentran del lado de energías negativas, mientras que en el caso sin *overlap* están del lado positivo.

Sólo para el modelo de MT, encontramos el Índice de Participación Inverso utilizado para medir la localización de un autoestado. Observamos que la cantidad de estados extendidos decrece a medida que la densidad de impurezas se hace menor, poniendo en evidencia la formación de mayor cantidad de estados localizados como es de esperar.

El concepto de tiempo de relajación debe ser estudiado en mayor detalle, en especial en sistemas desordenados. En un futuro, entonces, se debe encontrar una forma sistemática y útil en diferentes contextos de estimar este tiempo, que exprese la relación con la densidad y eventualmente con un parámetro que pondere el desorden. En particular, a medida que aumenta la densidad, el número de estados extendidos también crece. De manera que

si realizamos un promedio sobre ubicaciones iniciales y configuraciones, la dispersión del tiempo de vida medio debería ser menor que en el caso de densidades más chicas, donde hay mayor cantidad de estados localizados.

Una mayor comprensión del tiempo de relajación orbital en la banda de impurezas será un punto de partida más adecuado que el actual para encarar el estudio de la relajación de espín, que resulta de interés para futuras aplicaciones espintrónicas.

# Agradecimientos

Quiero agradecer en primer lugar al director de este trabajo, Pablo I. Tamborenea, que escucha mis inquietudes y opiniones (muchas veces equivocadas) y por su colaboración durante el desarrollo de la tesis. Y también agradecerle a Rodolfo Jalabert, colaborador del proyecto, que en su corta visita a Buenos Aires me dedicó su tiempo para discutir cuestiones relacionadas con este trabajo, además de proporcionarme muy útiles referencias.

Por otro lado no puedo dejar de agradecer a la Universidad Pública no sólo por educarme a mí sino también a mis padres, lo cual de alguna manera me permitió a mí llegar hasta aquí.

Dado que este trabajo también representa la culminación de una etapa, quiero agradecer a los que me acompañaron. Entre ellos, a mis padres por su apoyo en mi decisión de estudiar “esto” y por haberse preocupado por darme las herramientas para hacerlo. A mis dos hermanas, Poto y la Gorda, que me distrae cuando menos quiero pero más lo necesito (“Lass mich bitte in Ruhe”). Quiero agradecer también a todos mis amigos, los viejos, los nuevos, los de acá, los de allá... A Gri, por su apoyo en el último tramo. Y todos los que alguna vez me preguntaron “¿Che, cómo va la tesis?”.

# Bibliografía

- [1] J. M. Kikkawa and D. D. Awschalom, Phys. Rev. Lett. **80**, 19 (1998).
- [2] R. I. Dzhioev, K. V. Kavokin, V. L. Korenev, M. V. Lazarev, Y. Meltser, M. N. Stepanova, B. P. Zakharchenya, D. Gammon, and D. S. Katzer, Phys. Rev. B **66**, 245204 (2002).
- [3] B.I. Shklovskii, Phys. Rev. B **73**, 193201 (2006).
- [4] P. I. Tamborenea, D. Weinmann, and R. A. Jalabert, Phys. Rev. B **76**, 085209 (2007).
- [5] M. Reed, “Quantum Dots”, Scientific American, 117 (1993).
- [6] G.A. Thomas, M. Capizzi, F. DeRosa, R. N. Bhatt, and T.M. Rice, Phys. Rev. B **23**, 5472 (1981) .
- [7] “*Theory of Solids*”, J. M. Ziman (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).
- [8] “*Electronic Properties of Doped Semiconductors*”, B. I. Shklovskii, A. L. Elfros (Springer-Verlag, Berlin, 1984).
- [9] R. J. Elliot, Phys. Rev. **96**, 266 (1954).
- [10] I. Zutic, J. Fabian, and S. Das Sarma, Rev. Mod. Phys. **76**, 323 (2004).
- [11] T. Matsubara and Y. Toyozawa, Prog. Theor. Phys. **26**, 5 (1961).
- [12] E. O. Kane, J. Phys. Chem. Solids **1**, 249 (1957).
- [13] S. A. Crooker, D. D. Awschalom, and N. Samarth, IEEE J. of Selected Topics in Quantum Electronics **1**, 4 (1995).
- [14] “*Fundamentals of Semiconductors. Physics and Materials Properties*”, P. Y. Yu and M. Cardona (Springer-Verlag, Berlin, 1996), Cap. 4
- [15] W.Y. Ching and D.L Huber, Phys. Rev. B **25**, 2 (1982).

- [16] W.Y. Ching and D.L Huber, Phys. Rev. B **36**, 3 (1987).
- [17] W.Y. Ching and D.L Huber, Phys. Rev. B **26**, 10 (1982).
- [18] P. Löwdin, J. Chem. Phys. **18**, 3 (1949).
- [19] E. Artacho and L. Miláns, Phys. Rev. A **43**, 11, (1991).
- [20] L.E. Ballentine and M. Kolar, J. Phys. C **19**, 981-993 (1985).
- [21] “*Solid-State Physics*”, H. Ibach, H. Lüth (Springer, Berlin, 1995) Sec. 9.4.
- [22] L. Fonda, G.C. Ghirardi, and A. Rimini, Rep. Prog. Phys. **41**, 587 (1978).
- [23] “*Quantum Mechanics. A Modern Development*”, L. Ballentine ( World Scientific Publishing, Singapore, 2000).
- [24] K.M. Sluis and E.A. Gislason, Phys. Rev. A **43**, 9 (1991).
- [25] E.A. Gislason, N.H. Sabelli, and J. W. Wood, Phys. Rev. A **31**, 4 (1982).
- [26] “*Quantum Theory of Molecules and Solids*”, Vol. 1, J. C. Slater (McGraw-Hill, New York, 1963), Cap. 2.
- [27] E. Rufeil Fiori and H. M. Pastawski, Chem. Phys. Lett. **420**, 35-41 (2006).
- [28] D.A.Mirabella, C.M. Aldao, and R. R. Deza, Am. J. Phys. **62**, 162 (1993).
- [29] B.A. McKinnon and T.C. Choy, Phys. Rev. B **52**, 20 (1995).
- [30] B. T. Debney, J. Phys. C **10**, 4179 (1977).