

## ESTADOS ELECTRONICOS EN SISTEMAS AMORFOS \*

J.R. Martínez† y J. Urías‡

† Facultad de Ciencias  
 ‡ Instituto de Física "Manuel Sandoval Vallarta"  
 Universidad Autónoma de San Luis Potosí.  
 78000 San Luis Potosí, S.L.P.

Sistemas amorfos son modelados usando un hamiltoniano de amarre fuerte con desorden no-diagonal. Densidades de estados promedio son calculadas para integrales de traslape de corto y largo alcance en una, dos y tres dimensiones. La transición a delocalización total de los *eigenestados* en función de la densidad atómica  $n$  es discutida.

I. En el estudio de sistemas desordenados la mayor dificultad estriba en la imposibilidad de utilizar los métodos convencionales de la teoría del estado sólido. Hasta ahora siempre ha sido necesario utilizar aproximaciones o simulaciones del tipo Monte-Carlo para calcular las densidades de estados electrónicos [1] en sistemas amorfos y/o desordenados.

En este artículo estudiamos la densidad de estados electrónicos promedio de sistemas estructuralmente desordenados en una, dos y tres dimensiones usando un hamiltoniano modelo de amarre fuerte. Se consideran integrales de traslape de corto y largo alcance. El método de Matsubara y Toyozawa [2], en el que las funciones de Green son expresadas como expansiones formales en locatores, es utilizado para obtener una relación de consistencia exacta [3] entre los ele-

mentos diagonales y no-diagonales de la función de Green promedio. La relación de consistencia es utilizada para desarrollar dos aproximaciones válidas en los límites de alta y baja densidad.

El tipo de sistemas a considerar están formados por átomos idénticos de un solo orbital y distribuidos aleatoriamente en un espacio infinito  $m$ -dimensional ( $m = 1, 2, 3$ ) con una densidad homogénea promedio  $n$  de átomos. Los átomos están ubicados en posiciones aleatorias  $\mathbf{R}_i$  y el conjunto  $\{\mathbf{R}_i\}$  define una cierta configuración atómica de densidad  $n$ . La estructura electrónica del sistema es descrita por el hamiltoniano

$$H = \sum_{i,j} V_{ij} a_i^\dagger a_j \quad (1)$$

donde  $V_{ij}$  son las integrales de traslape entre orbitales localizados y dependen de la variable aleatoria  $r_{ij}$ , que es la distancia entre los sitios

\* Apoyado por la DGICySA (SEP, México).

$i$  y  $j$  :  $|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|$ . La densidad  $n$  se tomará como la función de distribución de los valores de  $r$ . Consideraremos en la  $Ec(1)$  integrales de traslape que decaen tanto exponencialmente así como inversamente proporcional a una potencia de la distancia  $r$ .

La densidad de estados promedio se calcula con un método general basado en una expansión en locadores [2] y consideramos dos casos límites: i) límite de acoplamiento débil (baja densidad) y ii) límite de acoplamiento fuerte (alta densidad) [3]. El primero de ellos es el más interesante ya que su situación corresponde a una configuración espacial pobremente intercomunicada, en la que existen solo pequeños cúmulos y la mayoría de los átomos están aislados [4]. En general, a densidades menores que la densidad crítica de Anderson  $n_A$  aparecen en el espectro únicamente estados localizados mientras que a densidades ligeramente mayores que  $n_A$  empiezan a aparecer estados extendidos alrededor de la energía  $\omega = 0$ ; este proceso es conocido como delocalización de Anderson [5]. En este punto, la densidad de estados muestra una porción formada por estados extendidos y otra(s) formada(s) por estados localizados, separadas por bordes de movilidad. El segundo caso, el de acoplamiento fuerte, corresponde a una configuración en la cual todos los átomos están muy bien intercomunicados y el espectro aparece como una sola banda de estados extendidos [2], [6]. Este caso lo ilustramos con una integral de traslape de largo alcance y oscilatoria del tipo RKKY [7].

La función de Green promedio  $\langle G_{ii} \rangle$  para un sistema estructuralmente desordenado descrito por la  $Ec(1)$  es calculada en los límites de densidad mencionados. Las aproximaciones usadas [3] retienen un conjunto infinito de términos en la expansión de locadores que son los más significativos, tanto para valores de la densidad muy pequeños, en un caso, y muy grandes, en el otro. Cualquiera que sea la densidad del sistema, los elementos diagonales de  $\langle G \rangle$  no son independientes de los elementos no-diagonales sino que existe una relación de consistencia entre ellos, que conduce a la ecuación [3]

$$\langle G_{ii} \rangle = g_0 + \langle G_{ii} \rangle^2 g_0 n \int d^m r V(r) J(r), \quad (2)$$

que debe cumplirse para cualquier valor de  $n$ . En la  $Ec(2)$ ,  $m$  es la dimensionalidad del sistema y  $J(r)$  es un término de acoplamiento renormalizado que incorpora la contribución de todas las combinaciones posibles, en la expansión en locadores, de diagramas que conectan los puntos  $i$  y  $j$ , pero no incluye las funciones de Green de los mismos sitios extremos,  $i$  y  $j$ .

Para poder calcular  $\langle G_{ii} \rangle$  con la  $Ec(2)$ , se requiere una ecuación para  $J_{ij}$ . En principio es imposible escribir una ecuación exacta sin introducir un número infinito de funciones de salto multi-línea, resultando un conjunto infinito de ecuaciones acopladas. Sin embargo, en los casos límites de interés es posible llegar a soluciones analíticamente sencillas.

En el límite de baja densidad, el acopla-

miento renormalizado  $J(r)$  recibe las mayores contribuciones de los diagramas que sólo tienen saltos entre pares de sitios. La suma de todos esos diagramas en  $J_{ij}$  está dada por la expresión:

$$J_{ij} = V_{ij} + g_o^2 V_{ij}^2 J_{ij}. \quad (3)$$

Contrariamente, para valores grandes de la densidad  $n$ , las contribuciones importantes para  $J_{ij}$  están dadas por la suma de todos los diagramas del tipo "cadena" [3], resultando una ecuación integral para  $J$ :

$$J_{ij} = V_{ij} + \langle G_{ii} \rangle n \int d^m r_j V(r_{ij}) J(r_{ji}). \quad (4)$$

**II.** Consideremos primero el límite de baja densidad. Sustituyendo (3) en (2) y resolviendo para  $\langle G_{ii} \rangle$  se obtiene

$$\langle G_{ii} \rangle = g_o (1 \pm [1 - 4f(\omega)]^{1/2}) / 2f(\omega), \quad (5)$$

donde

$$f(\omega) = n \int d^m r \frac{[g_o V(r)]^2}{1 - [g_o V(r)]^2}. \quad (6)$$

El comportamiento de  $\langle G_{ii} \rangle$  como una función de la energía  $\omega$ , depende de la función  $f(\omega)$  definida en (6). Para interacciones  $V(r)$  de largo alcance y/o baja dimensionalidad ( $m = 1$ ) la función  $f(\omega)$  diverge en las energías  $\omega = \pm 1$ . Para los valores de  $n$  en que esto sucede, la densidad de estados se extiende mas allá de  $\omega = \pm 1$ .

Para integrales de traslape de corto alcance o en sistemas de dimensionalidad mayor que uno la función  $f(\omega)$  puede ser finita en  $\omega = \pm 1$ . Entonces, solamente para valores de  $n$  mayores que un valor crítico  $n_c$ , se obtiene una completa delocalización de los estados electrónicos. Este valor crítico está dado por:

$$1 = 4n_c \int d^m r \frac{V(r)^2}{1 - V(r)^2}, \quad (7)$$

En sistemas de una dimensión,  $m = 1$ , la densidad crítica (a la cual el ancho de banda de la densidad de estados se comienza a extender) es  $n_c = 0$  y por lo tanto la densidad de estados se extiende siempre mas allá de los bordes  $\omega = \pm 1$ , no importa que tan diluido esté el sistema.

Para el caso de una integral de traslape de la forma:

$$V_{ij} = \frac{1}{(1+r)^\alpha} (1 - \delta_{ij}), \quad (8)$$

el espectro depende solo del cociente  $m/\alpha$  y para  $m/\alpha = 1$  la densidad critica es cero;  $n_c = 0$ . En la *Fig(1)* se muestran densidades de estados para valores positivos de la energía y diferentes valores de  $N = \Omega_m n$  ( $\Omega_m$  es el volumen de una esfera unitaria en  $m$  dimensiones y las densidades de estados son simétricas alrededor de  $\omega = 0$ ). Observese que siempre aparecen extensiones en la densidad de estados mas allá de los bordes en  $\omega = \pm 1$  y el ancho de banda de estas extensiones crece con  $N$ .

Para el caso de una integral de traslape de la forma:

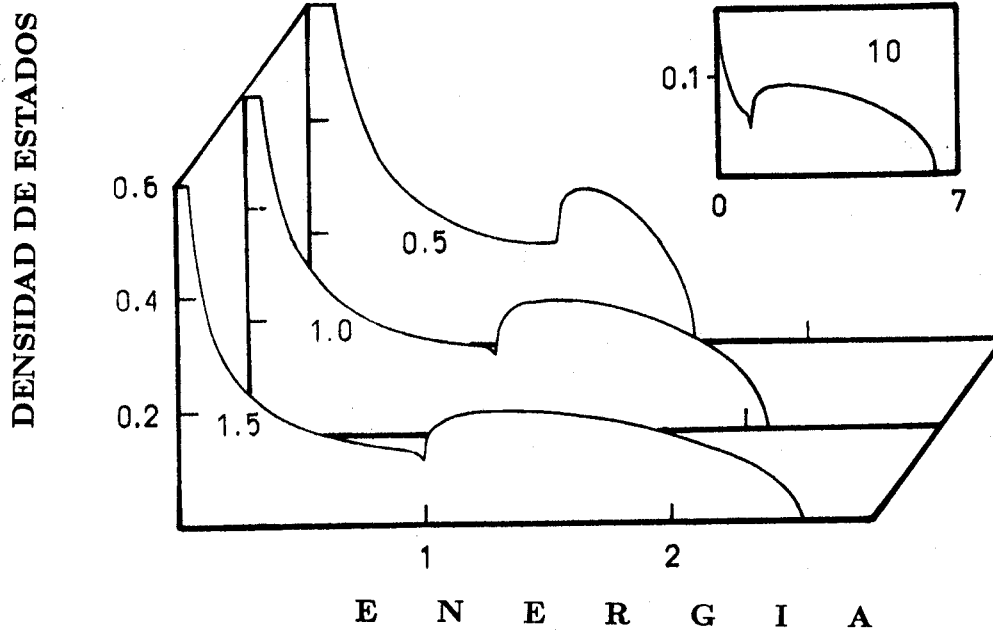


Fig. 1 Densidades de estados electrónicos para cuatro valores de  $N$  e integrales de traslape dadas por la Ec(8). La relación  $m/\alpha$  es uno.

$$V_{ij} = (1 - \delta_{ij})e^{-r}, \quad (9)$$

obtenemos una densidad crítica finita, excepto en sistemas de una dimensión. Las densidades críticas están dadas por

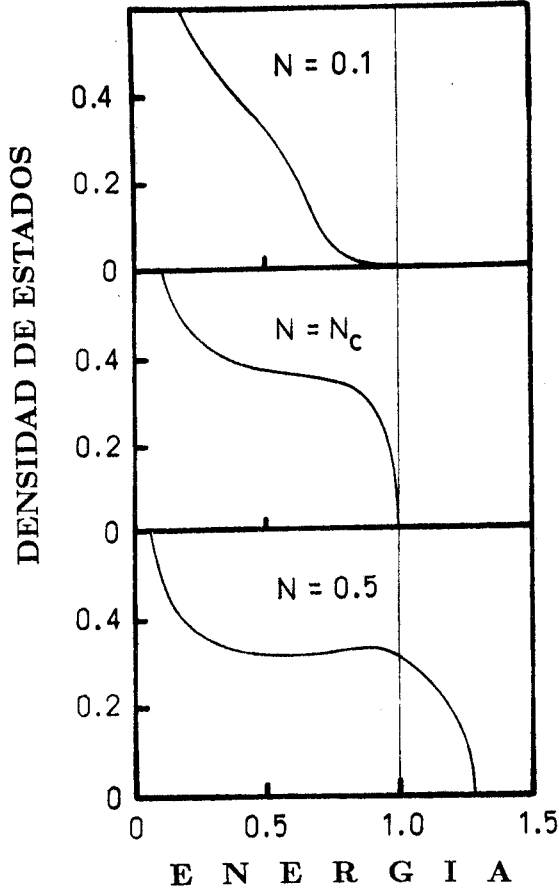
$$\Omega_m n_c = 1/[m\zeta(m)], \quad (10)$$

donde  $\zeta(m)$  es la función zeta de Riemann. Numéricamente,

$$n_c(2) = 0.0967; \quad n_c(3) = 0.0662. \quad (11)$$

En la Fig(2) mostramos una secuencia de densidades de estados para tres valores de la densidad  $N$ : menores, iguales y mayores que  $N_c = \Omega_m n_c$ ; respectivamente. Muy por abajo de  $N_c$  la densidad de estados se parece mucho a un promedio sobre estados de pares de ato-

mos [6]. A medida que se aumenta la densidad, la distancia promedio entre átomos se reduce aumentando así la interacción promedio entre pares, de tal forma que los estados cerca de  $\omega = 0$  son desplazados hacia los extremos de la banda [ $\omega_b = \pm 1$ ]. Cuando se alcanza el valor crítico  $N_c$  todos los *eigenestados* se delocalizan y al hacer  $N$  mayor que  $N_c$  aparece una densidad de estados finita mas allá de los bordes  $\omega_b = \pm 1$ ; i.e., el ancho de banda de la densidad de estados se empieza a ensanchar, Fig(2). Algunas de las densidades de transición de Anderson reportadas  $n_A$ , para un modelo tridimensional de amarre fuerte son  $5.83 \times 10^{-3}$ ,  $(5.1 \pm 1.7) \times 10^{-3}$ ,  $2.7 \times 10^{-3}$  y 0.0506 (tomadas de la referencia [5]). La comparación entre los valores  $n_A$  reportados y el  $n_c(3)$  de la Ec(11) indica que el



**Fig. 2** Densidad de estados para sistemas de tres dimensiones y para  $N = 0.1, N_c$  y  $0.5$ . A partir del valor crítico  $N_c = 4\pi n_c(3) = 0.2773$  todos los estados son extendidos.

primero es menor que este último en aproximadamente un orden de magnitud (observe que la aproximación de pares  $Ec(3)$  sobreestima  $n_c$ ).

**III.** En el límite de alta densidad recobramos la aproximación de Matsubara-Toyozawa [2]. En este límite, resolviendo las  $Ecs(2)$  y (4) para

$\langle G_{ii} \rangle$ , obtenemos

$$\langle G_{ii} \rangle^{-1} = g_o^{-1} + V(0) - \int \frac{d^m k}{(2\pi)^m} \frac{V(k)}{1 - n \langle G_{ii} \rangle V(k)}, \quad (12)$$

donde  $V(k)$  es la transformada de Fourier de  $V(r)$ . Este caso lo ilustramos con un potencial oscilatorio y de largo alcance del tipo RKKY [7] en dos dimensiones de la forma,

$$V_{i,j} = 2V_o \frac{J_1(q_o r)}{q_o r}, \quad (13)$$

donde  $q_o^{-1} = 2/\alpha_o$  ( $\alpha_o$  es el radio de Bohr) y  $J_1(x)$  es la función de Bessel de orden uno. Las correspondientes componentes de Fourier son:

$$V(k) = \frac{4\pi}{q_o^2} V_o \theta(q_o - k). \quad (14)$$

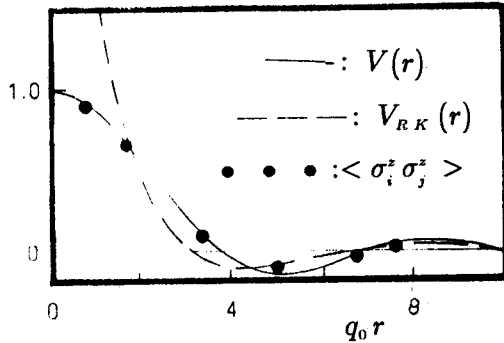
En la *Fig(3)* comparamos  $V_{i,j}$  con una adaptación a dos-dimensiones de un potencial RKKY (línea punteada). En la misma figura comparamos el potencial  $V_{i,j}$  *Ec(13)* con el correspondiente a la función de correlación espín-espín,  $\langle \sigma_i^z \sigma_j^z \rangle$ , entre dos impurezas magnéticas de Anderson calculadas por Hirsch y Fye [8] mediante un cálculo de Monte Carlo. En la *Fig(4)* se muestran las componentes de Fourier para  $V_{RK}$  y  $V_{i,j}$  en donde se observa que  $V_{RK}$  se extiende hasta valores grandes de  $k$ , reflejo de la divergencia de  $V_{RK}$  cuando  $r$  tiende a cero; a diferencia de  $V_{i,j}$  que tiene un buen comportamiento para toda  $r$ . Si tomamos el número total de estados contenidos en la zona  $|\mathbf{q}| < q_o$ , de interacción

$$N_{|q| < q_0} = \frac{q_0^2 \pi}{4\pi} \Omega, \quad (15)$$

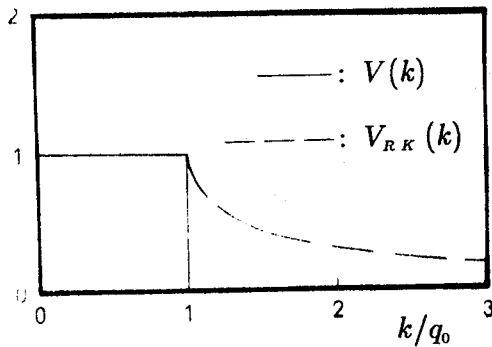
podemos definir una cantidad adimensional  $p$ ,

$$p = \frac{N_{\text{atomos}}}{N_{|q| < q_0}}, \quad (16)$$

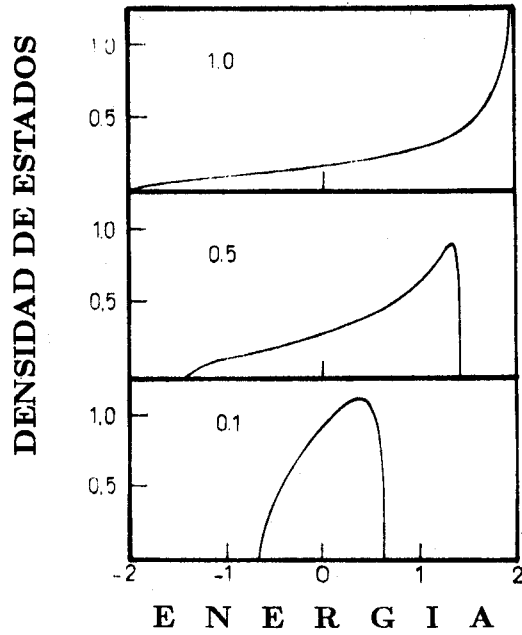
como una medida de la densidad del sistema.



**Fig. 3** (— — —): integral de traslape  $Ec(13)$ . (—): potencial RKKY. (•): correlación espín-espín de la Ref(8).



**Fig. 4** Componentes de Fourier de las integrales de traslape de la Fig(3). (—):  $V(k)$  y (— — —):  $V_{RK}(k)$ .



**Fig. 5** Densidades de estados electrónicos para  $p = 1.0, 0.5$  y  $0.1$  y una integral de traslape oscilatoria y de largo alcance [ $Ec(13)$ ].

En la Fig(5) se muestran las densidades de estados para valores de  $p = 0.1, 0.5$  y  $1.0$  calculadas en el límite de alta densidad. Notese que no existen estados localizados y las densidades de estado tienden a extenderse conforme  $p$  tiende a 1, produciéndose un gran ancho de banda  $\Delta = 4p^{1/2}$ . Para valores muy pequeños de  $p$  la densidad de estados tiene un ancho de banda muy pequeño, tendiendo a presentar simetría con respecto a  $\omega = 0$ .

En conclusión, la relación de consistencia  $Ec(2)$  nos permitió obtener aproximaciones para calcular la función de Green promedio de sistemas estructuralmente desordenados, de baja y alta densidad.,

## REFERENCIAS

- [1]. R.M. Stratt and Bing-Chang Xu, Phys.-Rev. Letters **62**, 1675 (1989).
- [2]. T. Matsubara and Y. Toyozawa, Progr.-Theor. Phys. **26**, 739 (1961).
- [3]. J.R. Martínez, G. Muñoz and J. Urías, Por publicarse en *Proceedings of the II International Workshop on the Magnetic Properties of Low-dimensional Systems*, Springer Verlag, Berlin (1989).
- [4]. I.M. Lifshitz, Usp. Fiz. Nauk **126**, 41 (1978).
- [5]. P.W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).
- [6]. M.K. Gibbons, D.E. Logan and P.A. Madden, Phys. Rev. **B38**, 7292 (1988).
- [7]. M.A. Ruderman and C. Kittel, Phys. Rev. **96**, 99 (1954).
- [8]. J.E. Hirsch and R.M. Fye, Phys. Rev. Letters **56**, 2521 (1986).