



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO
FACOLTÀ DI SCIENZE MATEMATICHE,
FISICHE E NATURALI
CORSO DI LAUREA IN FISICA

**DENSITA' DEGLI STATI E LOCALIZZAZIONE DI PARTICELLE
IN POTENZIALE RANDOM**

Relatore: Prof. Luca Molinari

Tesi di Laurea di:
Ivano Morotti
Matr. 713264
Codici PACS: 71.23.An
02.10.Yn

ANNO ACCADEMICO 2009 - 2010

Indice

Introduzione	2
1 Variabili di Grassmann	8
1.1 Algebra di Grassmann	8
1.2 Derivazione nell'algebra di Grassmann	9
1.3 Integrazione nell'algebra di Grassmann	10
1.4 Integrale gaussiano	11
1.4.1 Integrale gaussiano complesso	11
1.4.2 Integrale gaussiano per variabili di Grassmann	12
2 Matrici random	14
2.1 Prodotto di matrici random	14
2.2 Conducibilità, la formula di Landauer	16
3 Risolvente	18
3.1 Definizione della Risolvente	18
3.2 Identità matriciale	19
4 Localizzazione di Anderson	20
4.1 Localizzazione di Anderson per dimensione generica	21
4.1.1 Matrice di trasferimento e spettro di Lyapunov	22
4.2 Modello di Lloyd	24
4.2.1 Densità degli stati dell'Hamiltoniana	26
4.2.2 Somma degli esponenti di Lyapunov	28
4.3 Conteggio degli esponenti di Lyapunov	30
4.3.1 Calcolo numerico dello spettro di Lyapunov	33
Appendice	36
Bibliografia	46

Introduzione

Nel 1958 Anderson, nell'articolo *'Absence of diffusion in certain random lattices'* per cui ricevette il Nobel, descrisse il fenomeno della localizzazione degli elettroni in funzione del disordine. Da allora la localizzazione di Anderson è stato un fenomeno molto studiato sia dal punto di vista teorico che sperimentale; in questa introduzione si cercherà di dare una panoramica dei fenomeni più importanti legati alla localizzazione, come la conduzione elettrica, le transizioni metallo isolante e l'effetto hall quantistico, concludendo con esperimenti recenti che hanno permesso l'osservazione della localizzazione.

Una spiegazione della conduzione può essere data attraverso il modello tight binding, dove il cristallo viene rappresentato da una struttura reticolare in cui gli ioni sono disposti in posizioni fissate, questi determinano quindi un potenziale di tipo periodico, formato da buche di potenziale con lo stesso minimo di energia. In questo modello gli elettroni si considerano fortemente legati agli atomi, ovvero si assumono trascurabili le interazioni ione-ione ed elettrone-elettrone. Queste approssimazioni si dicono adiabatica e di elettroni indipendenti. A basse temperature l'approssimazione adiabatica è buona perché le scale temporali di moto degli ioni sono molto maggiori di quelle degli elettroni, questo comporta che si possono considerare gli ioni come fissati, mentre gli elettroni come mobili e sottoposti ad un potenziale determinato dagli ioni. Per quanto riguarda l'approssimazione di elettroni non interagenti questa è invece abbastanza eccessiva, effetti dovuti all'interazione elettrone-elettrone possono infatti giocare un ruolo importante nei fenomeni di conduzione.

Nell'ambito del modello tight binding si può dare una spiegazione quantistica del fenomeno della conduzione, classicamente spiegato attraverso gli urti degli elettroni sugli ioni del reticolo. Se consideriamo un potenziale periodico, la soluzione dell'equazione di Schrodinger assume la forma di onda di Bloch, ovvero il prodotto di un'onda piana e di un termine periodico. In questo caso la legge di Ohm non è spiegata correttamente, infatti l'applicazione di un campo elettrico porterebbe a un'accelerazione degli elettroni e quindi ad una relazione non lineare fra differenza di potenziale applicato e corrente.

Per una corretta spiegazione della conduzione dobbiamo introdurre un leggero disordine nel potenziale del reticolo. Questo disordine è prodotto da imperfezioni nella struttura reticolare o da inserzioni di atomi di specie chimiche diverse da quelli che costituiscono la struttura periodica, ma anche da agitazioni termiche degli ioni, che a temperatura ambiente non sono trascurabili. Con l'in-

troduzione di un disordine debole otterremo quindi che il moto degli elettroni, sottoposti a campo elettrico, sarà ostacolato da processi di scattering nel reticolo dovuti alle impurità; il numero di elettroni che acquistano energia perché sottoposti al campo elettrico sarà compensato da quelli che la perdono a causa degli urti, quindi la velocità media si manterrà costante. Questo leggero disordine comunque non rompe la struttura di onda di Bloch dell'elettrone, nel processo di conduzione infatti gli elettroni hanno spettro continuo e la banda più energetica, quella appunto detta di conduzione, non è completamente piena, fatto che permette agli elettroni di muoversi nel reticolo.

Anderson dimostrò che, in un reticolo tridimensionale, esiste una soglia di disordine oltre la quale la funzione d'onda del singolo elettrone, sempre in approssimazione di elettroni non interagenti, perde la struttura di onda di Bloch e diventa localizzata, presenta quindi un massimo, ovvero una probabilità finita di trovarsi in una certa posizione, e decade esponenzialmente. Questo fenomeno di localizzazione porta alla modificazione la legge di Ohm; come mostrato da Landauer [1] nel 1970 la conduttanza presenta un decadimento esponenziale tramite la legge $G \sim e^{-2n/\xi_0}$, dove ξ_0 è la lunghezza di localizzazione.

Un altro fenomeno molto importante per cui la localizzazione di Anderson gioca un ruolo fondamentale è l'effetto Hall quantistico (QHE). L'effetto Hall quantistico è l'estensione, a basse temperature, dell'effetto Hall classico.

Consideriamo una piastra conduttrice a cui applichiamo una differenza di potenziale, ottenendo così un passaggio di corrente; se immergiamo la piastra in un campo magnetico B ortogonale alla sua superficie, otterremo che, per effetto della forza di Lorentz, gli elettroni tendono a portarsi verso un bordo della piastra, lasciando così un eccesso di lacune sul bordo opposto. Quando si raggiunge l'equilibrio fra forza di Lorentz e forza elettrostatica si ottiene una differenza di potenziale V_H , detto potenziale di Hall, fra i due bordi. La relazione fra V_H ed I è lineare, e dipende dal campo magnetico e dalla densità dei portatori di carica attraverso la costante di Hall $R_H = 1/ne$,

$$V_H = \left(\frac{R_H}{d} \right) BI$$

L'effetto Hall quantistico, osservato nel 1985 da Klaus von Klitzing, si ottiene quando si va a temperature prossime allo zero assoluto. Quando si raggiungono basse temperature la $\rho_{xy} = BR_H$, anziché essere lineare in B , diventa una funzione a gradino, in cui i livelli permessi sono quantizzati e sono multipli interi (nell'effetto Hall intero che qui consideriamo) di h/e^2 ; questo valore è indice dell'importanza del QHE, una misura precisa dell'energia dei plateaux può darci infatti un metodo per ricavare la costante di struttura fine. I livelli energetici permessi per ρ_{xy} detti plateaux si spiegano con i livelli di Landau; la formazione dei livelli di Landau è dovuta al fatto che in presenza di campo magnetico, la densità degli stati passa da funzione costante dell'energia a funzione con picchi sui livelli di Landau, separati dall'energia di ciclotrone. I livelli di Landau che si trovano al di sotto dell'energia di Fermi sono completamente riempiti, aumentando l'intensità del campo magnetico B otteniamo uno spostamento dei

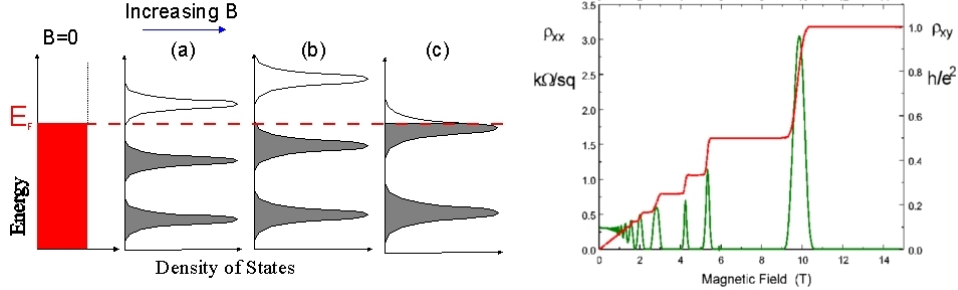


Figura 1: a, Si osserva lo spostamento dei livelli di Landau in funzione del campo magnetico, solo i livelli con energia minore dell'energia di Fermi sono riempiti. b, Nel grafico la linea rossa rappresenta la ρ_{xy} con il tipico andamento a gradino in funzione di B , mentre la verde è la conducibilità ρ_{xx} che è non nulla solo nelle regioni in cui un livello di Landau è centrato su E_f .

livelli di Landau che si separano a causa dell'aumento dell'energia di ciclotrone, questo fa sì che gli stati permessi per la conduzione diminuiscano bruscamente con il passaggio di un livello al di sopra dell'energia di Fermi E_f .

Per spiegare in modo completo i salti bisogna considerare che il conduttore in cui si verifica il QHE possiede un certo grado di disordine, che provocherà la localizzazione degli elettroni; questo si traduce in un allargamento dei livelli di Landau che, come si vedrà successivamente nello studio del modello di Lloyd, anziché essere delta di Dirac, saranno delle Lorentziane, queste avranno come valore medio il livello di Landau, e larghezza dipendente dal disordine. Questo allargamento implica che fra gli stati possibili ci sono anche stati localizzati che non contribuiscono al fenomeno della conduzione. Il salto avviene quindi se l'energia di Fermi si trova in corrispondenza del centro del livello, ovvero per quei pochi stati che sono delocalizzati, numero di stati che aumenta al crescere della temperatura, e che sono quindi gli unici in grado di permettere la conduzione ρ_{xx} o di contribuire al V_H .

Consideriamo ora alcuni risultati sperimentali importanti riguardanti la localizzazione di Anderson. Il fenomeno della localizzazione è stato di fondamentale importanza nello studio delle transizioni metallo isolante, che possono comunque avvenire anche per altre cause indipendenti dalla localizzazione dei portatori di carica. È interessante citare a proposito l'esperimento di Paalanen [17] sullo studio della transizione metallo isolante, in cui si misura la conducibilità elettrica di campioni di Si:P a bassa temperatura e sottoposti a compressione. Un cristallo di Silicio con impurezze di Fosforo viene compresso e si misura la conducibilità in funzione della forza applicata. Graficando i risultati si osserva una transizione da isolante a conduttore. Questo è dovuto al fatto che la compressione fa variare l'energia di Fermi, a causa della variazione della densità elettronica; la variazione della E_f provoca, oltre una certa soglia, la delocaliz-

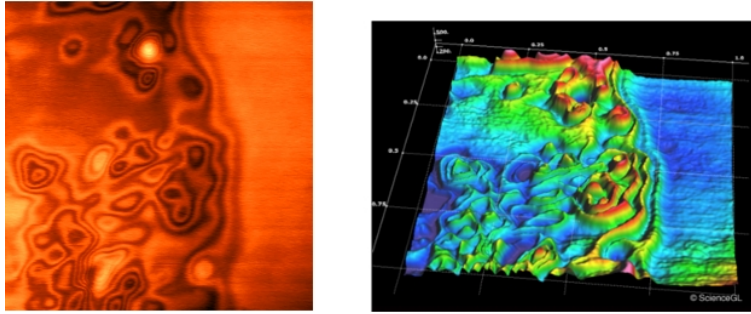


Figura 2: Immagini ottenute tramite microscopio a scansione di capacità (SCM) che mostrano la localizzazione degli elettroni nell'effetto Hall quantistico.

zazione di alcuni elettroni che rendono possibile la conduzione, questi stati sono noti come mobility edge.

Sebbene da quando fu predetta da Anderson ci siano state molte ricerche sperimentali per osservare la localizzazione, questa non è mai stata osservata direttamente in onde di materia nei solidi ed in particolare per elettroni in cristalli disordinati a causa delle interazioni elettrone-elettrone che spesso non sono trascurabili. Nel 2008 al LENS [15] sono stati fatti esperimenti che hanno permesso la diretta osservazione della localizzazione attraverso condensati di Bose-Einstein (BEC). Questi, confinati in una trappola ottica, vengono liberati in un reticolo unidimensionale; il reticolo è ottenuto dalla sovrapposizione di un laser di determinata lunghezza d'onda ad un altro di minore intensità e con diversa lunghezza d'onda. Una volta liberato si può osservare lo sparpagliamento del condensato nel reticolo, dopo un certo tempo si vedrà se si è localizzato o se si è delocalizzato. Il potenziale prodotto dalla sovrapposizione dei due laser è di tipo quasi-periodico e non realmente random, questo permette di osservare una transizione da stati liberi a localizzati, anche in una sola dimensione, semplicemente variando il disordine, che in questo caso corrisponde all'intensità del laser che perturba il reticolo principale. Altri esperimenti analoghi sono stati realizzati al CNRS di Parigi [16].

La localizzazione di Anderson è comunque un fenomeno molto generale che non coinvolge solo onde di materia ma che è stata osservata anche in microonde, luce e onde sonore.

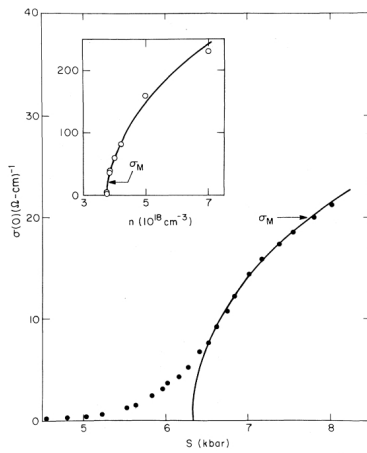


Figura 3: Transizioni metallo isolante. Valore della conducibilit  σ per la T vicina allo zero assoluto in funzione della compressione S longitudinale al campione. La linea   il fit secondo la relazione $\sigma \propto (S - S_c)^\nu$, da cui si ricava $\nu = 0.49$. In piccolo   rappresentato σ in funzione di n .

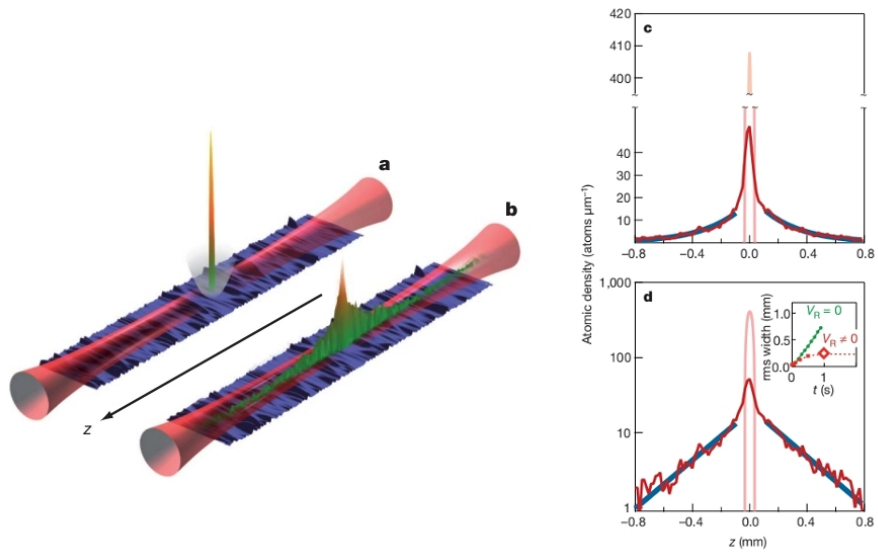


Figura 4: Localizzazione in condensati di Bose-Einstein. a, Un BEC è confinato in una trappola formata dal reticolo ottico orizzontale e da una trappola longitudinale. b, quando la trappola longitudinale viene spenta il BEC inizia a espandersi e si localizza a causa del disordine del reticolo. c,d, Il grafico della densità (rosso) del BEC localizzato a $t=1\text{s}$ dal rilascio, in coordinate lineari (c) e semi-logaritmiche (d). In piccolo nella d è rappresentato l'rms della larghezza del BEC al tempo t con disordine nullo e non nullo. Le linee blu corrispondono ai fit esponenziali mentre le rosa rappresentano il condensato prima del rilascio.

Capitolo 1

Variabili di Grassmann

In questo capitolo diamo una breve introduzione dei concetti di algebra di Grassmann e derivazione ed integrazione di funzioni di variabili anticommutanti. Le tecniche di calcolo che fanno uso delle variabili di Grassmann sono utilizzate in vari ambiti della fisica fra cui la teoria dei campi dove sono di grande importanza nella descrizione dei campi fermionici. Unendo le variabili di Grassmann alle variabili commutanti ϕ in un'unica variabile $\psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \theta \end{pmatrix}$ e utilizzando questa nei calcoli si definiscono le tecniche note come super-simmetriche. Per approfondimenti riguardo alle variabili di Grassmann vedere [2, 4, 5], mentre per una trattazione super-simmetrica del modello di Lloyd, vedere [3].

1.1 Algebra di Grassmann

Un'algebra di Grassmann \mathfrak{U} su \mathbb{R} o \mathbb{C} è un'algebra associativa generata dall'unità 1 e da un insieme di generatori θ_i che anticommutano fra loro

$$\{\theta_i, \theta_j\} = \theta_i\theta_j + \theta_j\theta_i = 0 \quad \forall i, j \quad (1.1)$$

Se il numero n dei generatori è finito, gli elementi dell'algebra formano uno spazio vettoriale di dimensione 2^n su \mathbb{R} o \mathbb{C} e gli elementi possono essere scritti come combinazione lineare di

$$1 \text{ e } \theta_{i_1}\theta_{i_2} \dots \theta_{i_p} \quad \text{con } i_1 < i_2 < \dots < i_p, \quad 1 \leq p \leq n \quad (1.2)$$

Gli elementi di \mathfrak{U} sono invertibili sse nella decomposizione come combinazione lineare su 1.2 il termine di grado zero è non nullo. Tutti gli elementi dell'algebra, considerati come funzioni del generatore θ_i sono polinomi di primo grado, infatti $\theta_i^2 = 0$.

Operatore di riflessione: Possiamo definire nell'algebra di Grassmann \mathfrak{U} un automorfismo P che effettua una riflessione sui generatori

$$P(\theta_i) = -\theta_i \quad P^2 = \mathbf{1} \quad (1.3)$$

che su un monomio di grado p agirà come

$$P(\theta_{i_1} \cdots \theta_{i_p}) = (-1)^p \theta_{i_1} \cdots \theta_{i_p} \quad (1.4)$$

Per una variabile di A abbiamo che

$$A\theta_i = \theta_i P(A) \quad (1.5)$$

Tramite l'operatore di riflessione si possono definire due sottospazi di \mathfrak{U} , \mathfrak{U}^+ ed \mathfrak{U}^- , infatti

$$P(\mathfrak{U}^\pm) = \pm \mathfrak{U}^\pm \quad (1.6)$$

e quindi \mathfrak{U}^+ sarà la sottoalgebra commutativa massimale di \mathfrak{U} , ed \mathfrak{U} sarà la somma dei due sottospazi.

Complesso coniugato: Se l'algebra di Grassmann \mathfrak{U} è definita su \mathbb{C} possiamo definire l'operazione di complesso coniugato. Suddividiamo i generatori in due sottoinsiemi $\{\theta_i\}$ e $\{\bar{\theta}_i\}$ con $i = 1, \dots, n$; si può così definire nell'algebra generata da $\{\theta_i, \bar{\theta}_i\}$ l'analogo del complesso coniugato semplicemente con

$$\theta_i^\dagger = \bar{\theta}_i, \quad \bar{\theta}_i^\dagger = \theta_i$$

e quindi di conseguenza

$$(aA + bB)^\dagger = a^* A^\dagger + b^* B^\dagger \quad \forall A, B \in \mathfrak{U}, \forall a, b \in \mathbb{C} \quad (1.7)$$

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger \quad \forall A, B \in \mathfrak{U} \quad (1.8)$$

1.2 Derivazione nell'algebra di Grassmann

Nell'algebra di Grassmann è possibile definire la derivazione; perchè la definizione sia in accordo con l'anticommutatività dell'algebra è necessario però che alcune proprietà differiscano da quelle dell'usuale derivata.

Se considerati funzione di un generatore θ_i dato, tutti gli elementi dell'algebra sono della forma

$$A = A_1 + \theta_i A_2$$

con A_1 ed A_2 indipendenti da θ_i . Definiamo allora la derivata sinistra

$$\frac{\partial A}{\partial \theta_i} = A_2 \quad (1.9)$$

L'operatore di derivazione così definito è nilpotente $(\partial/\partial \theta_i)^2 = 0$, la derivata seconda rispetto a θ_i e θ_j risulta quindi

$$\frac{\partial^2}{\partial \theta_i \partial \theta_j} = -\frac{\partial^2}{\partial \theta_j \partial \theta_i} \quad (1.10)$$

La derivata così definita porta a sinistra tutti i θ_i prima di eliminarli, si potrebbe definire anche la derivata destra che agisca con i θ_i a destra.

Derivata del prodotto: La derivata così definita non soddisfa alla solita regola di Leibnitz, si può vedere dalla 1.9 e dalla 1.5 che la regola sarà

$$\frac{\partial(AB)}{\partial\theta_i} = P(A)\frac{\partial B}{\partial\theta_i} + \frac{\partial A}{\partial\theta_i}B \quad (1.11)$$

Chain rule: La chain rule per l'algebra di Grassmann è

$$\frac{\partial}{\partial\theta}f(\sigma, x) = \frac{\partial\sigma}{\partial\theta}\frac{\partial f}{\partial\sigma} + \frac{\partial x}{\partial\theta}\frac{\partial f}{\partial x} \quad (1.12)$$

con $\sigma(\theta) \in \mathfrak{U}^-$ e $x(\theta) \in \mathfrak{U}^+$. La verifica è immediata se si considera che f è una funzione affine di σ e x e che queste sono funzioni affini di θ .

1.3 Integrazione nell'algebra di Grassmann

L'integrazione su variabili di Grassmann si definisce in modo identico alla derivazione

$$\int d\theta_i A \equiv \frac{\partial}{\partial\theta_i}A, \quad \forall A \in \mathfrak{U} \quad (1.13)$$

dove è importante capire che questa definizione è solo formale e non ha nulla a che vedere con la definizione di integrale di Riemann, non si deve quindi cercare di ricondurre questo integrale ad una somma. L'utilità di questa definizione di integrale formale sarà chiara quando si esaminerà successivamente l'integrale gaussiano.

Quello che si verifica perchè la definizione sia consistente con le proprietà che deve avere un buon operatore di integrazione è che:

1. Valga l'integrazione per parti
2. Dopo l'integrazione su una variabile la funzione non dipende più da questa
3. Un fattore in un prodotto che non dipende dalla variabile di integrazione può essere tolto dall'integrale

Dalla definizione e dalle richieste si ha che

$$\int d\theta_i = 0 \quad e \quad \int d\theta_i \theta_i = 1$$

Cambio di variabili: Dato l'integrale

$$\int d\theta f(\theta) \quad (1.14)$$

consideriamo il cambio di variabili che data la natura dell'algebra di Grassmann sarà necessariamente della forma

$$\theta = \theta' A + B \quad (1.15)$$

e chiediamo inoltre che ci sia conservazione della parità, cioè siccome vale 1.3 allora chiediamo che valga

$$P(\theta') = -\theta' \quad (1.16)$$

questa è rispettata sse $\theta' \in \mathfrak{U}^-$ e quindi avremo la condizione su A e B :

$$A \in \mathfrak{U}^+ \quad B \in \mathfrak{U}^- \quad (1.17)$$

inoltre A deve essere invertibile e quindi il suo termine di grado zero è non nullo.

Dalla definizione di integrale 1.13 avremo quindi che

$$\int d\theta f(\theta) = A^{-1} \int d\theta' f(\theta' A + B) = \left(\frac{\partial \theta}{\partial \theta'} \right)^{-1} \int d\theta' f(\theta(\theta')) \quad (1.18)$$

Questa forma è dovuta proprio all'identità fra integrazione e derivazione nell'algebra di Grassmann ed è importante osservare come il Jacobiano sia $J = \left(\frac{\partial \theta}{\partial \theta'} \right)^{-1}$ anziché $J = \frac{\partial \theta}{\partial \theta'}$ come invece sarebbe per il solito integrale.

Il discorso fatto può essere generalizzato al caso di n variabili di Grassmann con $\theta_i = \theta_i(\theta'_i)$ e $\theta'_i \in \mathfrak{U}^-$ ottenendo così che

$$d\theta_1 \cdots d\theta_n = d\theta'_1 \cdots d\theta'_n J(\theta') \quad (1.19)$$

con

$$J^{-1}(\theta') = \det \frac{\partial \theta_i}{\partial \theta'_j} \quad (1.20)$$

dove la matrice $\frac{\partial \theta_i}{\partial \theta'_j}$ deve essere invertibile.

1.4 Integrale gaussiano

In questa sezione si introduce brevemente l'integrale gaussiano per variabili complesse e per variabili di Grassmann, per una trattazione più approfondita dell'integrale gaussiano vedere [4].

1.4.1 Integrale gaussiano complesso

Iniziamo considerando il più semplice integrale gaussiano:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} dx dy \exp[-a(x^2 + y^2)/2] = \int \frac{dz d\bar{z}}{2\pi i} \exp[-a\bar{z}z] = \frac{1}{a} \quad (1.21)$$

dove a ha parte reale positiva, dove per passare dal piano \mathbb{R}^2 in coordinate x, y reali a \mathbb{C} si è usato il cambio di coordinate,

$$z = \frac{1}{\sqrt{2}}(x + iy) \quad (1.22)$$

che implica quindi che $dz d\bar{z} = i dx dy$.

Possiamo generalizzare al caso di n variabili complesse:

$$Z(A) = \int \left[\prod_{i=1}^n \frac{dz_i d\bar{z}_i}{2\pi i} \right] \exp \left[- \sum_{i,j} A_{ij} \bar{z}_i z_j \right] \quad (1.23)$$

dove consideriamo che il determinante della matrice A_{ij} sia non nullo. Vediamo che l'integrale è invariante sotto cambi di variabili del tipo:

$$z'_i = z_i e^{i\theta}, \quad \bar{z}'_i = \bar{z}_i e^{-i\theta} \quad (1.24)$$

Prendiamo ora il caso di A_{ij} matrice hermitiana positiva, sappiamo allora diagonalizzarla tramite una matrice unitaria:

$$A = UDU^\dagger$$

con D matrice diagonale formata dagli autovalori della A , con $a_i > 0 \quad \forall i$. Eseguiamo allora il cambio di variabili

$$z_i = \sum_j U_{ij} z'_j, \quad \bar{z}_i = \sum_j \bar{U}_{ij} \bar{z}'_j \quad (1.25)$$

questo ha il Jacobiano uguale a 1 e quindi usando la 1.21 possiamo calcolare il valore di Z :

$$Z(A) = \prod_{i=1}^n \int \frac{dz'_i d\bar{z}'_i}{2\pi i} \exp[-a_i \bar{z}'_i z'_i] = \prod_{i=1}^n \frac{1}{a_i} = \frac{1}{\det A} \quad (1.26)$$

Diamo infine un'espressione compatta che sarà quella che useremo nei calcoli:

$$\int \left(\prod_{i=1}^n \frac{dz_i^2}{\pi} \right) \exp \left[- \sum_{i,j} A_{ij} \bar{z}_i z_j \right] = \frac{1}{\det A} \quad (1.27)$$

dove $d^2 z = \frac{d\bar{z} dz}{2i}$.

1.4.2 Integrale gaussiano per variabili di Grassmann

Vogliamo vedere che per le variabili di Grassmann anticommutanti introdotte nel capitolo precedente vale:

$$\det A = \int \left(\prod_{i=1}^n d\eta_i d\bar{\eta}_i \right) \exp \left[- \sum_{i,j} A_{ij} \bar{\eta}_i \eta_j \right] \quad (1.28)$$

con $\eta \in \mathfrak{U}$ variabili anticommutanti.

Ci limiteremo qui a dare una semplice dimostrazione di questo nel caso di una matrice quadrata a di larghezza due, la dimostrazione generale è una semplice generalizzazione. Consideriamo quindi

$$D = \int d\eta_1 d\bar{\eta}_1 d\eta_2 d\bar{\eta}_2 \exp \left[- \sum_{i,j} A_{ij} \bar{\eta}_i \eta_j \right] \quad (1.29)$$

sviluppando in serie l'esponenziale i soli termini che daranno contributo non nullo nell'integrale saranno quelli di ordine 2, quelli superiori se ne vanno perchè ho prodotti del tipo $\eta_i \eta_i$ e $\bar{\eta}_i \bar{\eta}_i$ mentre quelli di ordine più basso danno zero sotto integrazione, quindi:

$$D = \int d\eta_1 d\bar{\eta}_1 d\eta_2 d\bar{\eta}_2 \frac{1}{2} \left(\sum_{i,j}^2 A_{ij} \eta_i \eta_j \right)^2 \quad (1.30)$$

quindi espandendo la sommatoria:

$$D = \int d\eta_1 d\bar{\eta}_1 d\eta_2 d\bar{\eta}_2 \frac{1}{2} (A_{12} \bar{\eta}_1 \eta_2 + A_{21} \bar{\eta}_2 \eta_1 + A_{11} \bar{\eta}_1 \eta_1 + A_{22} \bar{\eta}_2 \eta_2)^2$$

eleviamo al quadrato moltiplicando la parentesi per sè stessa e vediamo che i termini che sopravvivono sono solo:

$$A_{12} A_{21} \bar{\eta}_1 \eta_2 \bar{\eta}_2 \eta_1 + A_{12} A_{21} \bar{\eta}_2 \eta_1 \bar{\eta}_1 \eta_2 + A_{11} A_{22} \bar{\eta}_1 \eta_1 \bar{\eta}_2 \eta_2 + A_{11} A_{22} \bar{\eta}_2 \eta_2 \bar{\eta}_1 \eta_1$$

scrivendo tutti i termini in modo che risultino con le variabili anticommutanti in ordine inverso che i differenziali nell'integrale otteniamo:

$$D = \int d\eta_1 d\bar{\eta}_1 d\eta_2 d\bar{\eta}_2 (\bar{\eta}_2 \eta_2 \bar{\eta}_1 \eta_1) \frac{1}{2} (-2A_{12} A_{21} + 2A_{11} A_{22}) \quad (1.31)$$

integrando secondo la regola

$$\int \left(\prod_{i=1}^n d\eta_i d\bar{\eta}_i \right) (\bar{\eta}_n \eta_n \cdots \bar{\eta}_1 \eta_1) = 1 \quad (1.32)$$

si vede subito che:

$$D = A_{11} A_{22} - A_{12} A_{21} = \det A \quad (1.33)$$

Capitolo 2

Matrici random

Lo studio di matrici random, ovvero di matrici che presentino alcuni elementi random, variabili aleatorie associate ad una certa distribuzione di probabilità, è di grande importanza nella fisica per lo studio di sistemi con molti componenti e per lo studio di sistemi che presentino un certo grado di disordine, come nella localizzazione di Anderson.

Esistono tipicamente due tipi di problemi associati alle matrici random:

1. determinazione dello spettro di autovalori di matrici in cui gli elementi sono estratti secondo una certa distribuzione di probabilità
2. studio del prodotto di matrici random

Per quanto riguarda il primo punto qui accenniamo solo che è utile in vari ambiti: un esempio è la fisica nucleare per lo studio di nuclei pesanti in cui il numero di nucleoni è troppo grande per una risoluzione attraverso la meccanica quantistica ed inoltre lo spettro presenta irregolarità che hanno però ben definite proprietà statistiche. La risoluzione del problema delle fluttuazioni è stata ottenuta con l'ipotesi secondo cui lo spettro degli autovalori sia dovuto ad un'Hamiltoniana con elementi random e con una certa distribuzione. Grazie a questa ipotesi Wigner riuscì ad ottenere lo spettro in accordo con i risultati sperimentali.

In questa breve introduzione ci concentreremo sul secondo punto, ovvero sul prodotto di matrici random, che ci servirà per capire la teoria alla base del metodo della matrice di trasferimento usato nella descrizione della localizzazione di Anderson. Per approfondimenti riferirsi a [1]

2.1 Prodotto di matrici random

Il prodotto di matrici random è un campo che si è sviluppato a partire dagli anni '60 e che ha avuto grande rilevanza nello studio dei sistemi dinamici e nella fisica dei sistemi disordinati. Lo studio del prodotto di matrici random si concentra in particolare sull'estensione delle proprietà, di cui godono le random variabili commutanti, alle matrici che non commutano. I teoremi che qui citeremo sono

proprio estensioni della legge dei grandi numeri e del teorema del limite centrale al caso delle matrici.

Consideriamo il prodotto di n variabili indipendenti, identicamente distribuite e positive $X(i)$ e

$$P_N = \prod_{i=1}^N X(i) \quad (2.1)$$

la legge dei grandi numeri, che afferma che per N grande la media tende ad approssimare il valor medio della distribuzione di probabilità, ci assicura che vale

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left(|P_N|^{\frac{1}{N}} \right) = \exp [\langle \ln X \rangle] \quad (2.2)$$

dove la media è presa sulla distribuzione di probabilità di X . Il teorema del limite centrale dice invece che per grande N la distribuzione di $\ln P_N$ si approssima ad una gaussiana.

Il primo teorema che enunciamo è dovuto a Fustenberg e ci serve per introdurre il concetto di esponente di Lyapunov.

Teorema 1. (*Fustenberg*):

Si assuma che

$$\langle \ln^+ \|X\| \rangle < \infty \quad (2.3)$$

dove il $\ln^+ x = 0$ se $x \leq 1$ e $\ln^+ x = \ln x$ altrimenti, e la media è presa sulla distribuzione di probabilità di X . Allora il limite:

$$\gamma_1 = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \|P_N\| \quad (2.4)$$

esiste con probabilità 1 e γ_1 è chiamato massimo esponente di Lyapunov.

Si può vedere che il massimo esponente di Lyapunov non è una variabile random ma un numero indipendente dal disordine, infatti:

$$\gamma_1 = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \langle \ln \|P_N\| \rangle \quad (2.5)$$

dove il γ_1 della 2.5 è lo stesso della 2.4 ricavata dal teorema di Fustenberg. Questa proprietà è nota come *self-averaging* degli esponenti di Lyapunov, ovvero per quasi ogni sequenza di matrici scelta si ottiene lo stesso valore dell'esponente γ_1 se $N \rightarrow \infty$; detta altrimenti esiste un sottoinsieme di misura nulla in cui questo non avviene, ma vale che q.o. sull'insieme delle sequenze ω del prodotto di matrici:

$$\gamma_1 = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln |P_N z| \quad (2.6)$$

con z generico vettore che cresce secondo l'esponente di Lyapunov. Questa relazione di self-averaging garantisce proprio che non bisogna mediare sulla distribuzione di probabilità nel limite asintotico perchè questa media è incorporata nel limite stesso per quanto riguarda lo spettro di Lyapunov.

Il teorema di Fustenberg non tiene conto delle correzioni al tasso di crescita dovute agli autovalori di $(P_N^\dagger P_N)^{1/2}$ diversi dal massimo; un vettore ortogonale all'autovettore del γ_1 crescerà infatti con un'altra velocità data dal γ_2 . Il teorema di Oseledec ci mostra proprio che esiste lo spettro di Lyapunov e che non conta solo il primo esponente ma anche i successivi che sono minori del primo.

Teorema 2. (*Oseledec*):

Consideriamo una sequenza stazionaria di matrici quadrate di dimensione $m \times m$ con $\langle \ln \|X\| \rangle < \infty$, allora c'è un sottoinsieme, con complementare di misura nulla, dell'insieme delle sequenze Ω tale che

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left[P_N^\dagger(\omega) P_N(\omega) \right]^{\frac{1}{2N}} = V(\omega) \quad (2.7)$$

esiste. La matrice $V(\omega)$ ha m autovalori reali positivi $\exp(\gamma_i(\omega))$ ripetuti secondo la loro molteplicità. Gli esponenti sono chiamati esponenti di Lyapunov e vale $\gamma_1 \geq \gamma_2 \geq \dots \geq \gamma_m$.

Questo teorema è molto importante perchè ci dice che nel caso di matrici hermitiane si ottiene che, nel limite asintotico, gli esponenti di Lyapunov del prodotto si dispongono in modo tale che ci sia un massimo esponente che controlla il tasso di crescita per quasi ogni vettore.

Citiamo infine il teorema di Virster che sarà utilizzato nel capitolo sulla localizzazione di Anderson grazie al fatto che, per l'Hamiltoniana considerata, la matrice di trasferimento risulterà simplettica.

Teorema 3. (*Virster*):

Nel caso di matrici quadrate simplettiche di dimensione $2m$ lo spettro di Lyapunov è non degenere e si ottiene

$$\gamma_1 > \gamma_2 > \dots > \gamma_m > 0 \quad (2.8)$$

con $\gamma_{2m-i+1} = -\gamma_i$ siccome il prodotto di matrici simplettiche è anch'esso simplettico.

2.2 Conducibilità, la formula di Landauer

Presentiamo qui un esempio molto interessante di utilizzo delle matrici random per ricavare la formula di Landauer sulla conducibilità elettrica in presenza di disordine nel modello di Anderson uno-dimensionale.

Consideriamo una catena uno-dimensionale di lunghezza N accoppiata con due serbatoi di elettroni all'inizio e alla fine con una differenza di potenziale ΔV piccola. Allo zero assoluto solo gli elettroni all'energia di Fermi E_f possono muoversi e quindi contribuire alla conduzione. La differenza di potenziale causa una differenza $e\Delta V$ fra le energie di Fermi dei serbatoi di elettroni, con e la carica dell'elettrone, si avrà quindi una differenza di densità elettronica:

$$\Delta n = n(E_f + e\Delta V) - n(E_f) \simeq \left. \frac{\partial n}{\partial E} \right|_{E=E_f} e\Delta V \quad (2.9)$$

Dobbiamo adesso pensare che nel flusso di elettroni da un serbatoio all'altro, parte di questi saranno riflessi e parte trasmessi dalla catena, quindi, dalla relazione $\left. \frac{\partial n}{\partial E} \right|_{E=E_f} = \frac{1}{\pi \hbar v_f}$ e dalla 2.9, si ricava:

$$\Delta n = \frac{e\Delta V}{\pi \hbar v_f} \quad (2.10)$$

dato che la corrente che scorre nella catena è data dalla parte di flusso trasmesso avremo la formula di Landauer:

$$G = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \frac{T}{R} \quad (2.11)$$

La parte interessante del calcolo è ricavare i coefficienti di trasmissione e riflessione. Se consideriamo la catena da 0 ad N possiamo vedere i serbatoi come reticoli uno-dimensionali per $n = -1, -2, \dots$ e $n = N+1, N+2, \dots$. Nei serbatoi gli elettroni sono liberi $V = 0$, quindi hanno funzione d'onda:

$$\begin{aligned} \psi_n &= \exp(ikn) + r \exp(-ikn) & n = -1, -2, \dots \\ \psi_n &= t \exp(ikn) & n = N+1, N+2, \dots \end{aligned}$$

rispettivamente per il primo ed il secondo serbatoio e con $t, r \in \mathbb{C}$ coefficienti di trasmissione e riflessione e k soluzione dell'equazione di Schrodinger libera. Si avrà allora che $T = |t|^2$ e $R = |r|^2$.

Introducendo la matrice di trasferimento possiamo collegare le due funzioni d'onda dei serbatoi, avremo quindi che

$$z(N) = M(N-1) \cdots M(0)z(-1) = P_N z(-1) \quad (2.12)$$

con

$$z(N) = \begin{pmatrix} t \exp(ik(N+1)) \\ t \exp(ikN) \end{pmatrix}, \quad z(-1) = \begin{pmatrix} 1+r \\ \exp(-ik) + r \exp(ik) \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

Risolvendo la 2.12 si ottiene:

$$|t| = \frac{2 |\sin k|}{|(P_N)_{21} - (P_N)_{12} + (P_N)_{22} e^{ik} - (P_N)_{11} e^{-ik}|} \quad (2.14)$$

Usando ora i teoremi delle matrici random, supponendo che la matrice di trasferimento sia il prodotto di matrici indipendenti, si ottiene, per grandi N che G è una variabile con distribuzione lognormale e con valore di aspettazione:

$$G \sim |t|^2 \sim \exp(-2\gamma_1 N) \quad (2.15)$$

Questa formula influisce anche sulla legge delle resistenze in serie che non vanno più sommate ma moltiplicate, è inoltre legata alla localizzazione di Anderson dato che per la congettura di Borland si avrà che l'esponente di Lyapunov è l'inverso della lunghezza di localizzazione. Il senso fisico è ora immediato, infatti la resistività dipenderà esponenzialmente, per quanto riguarda gli elettroni localizzati a causa del disordine, dalla forza con cui questi sono localizzati, ovvero dal γ_1 .

Capitolo 3

Risolvente

Questo capitolo vuole dare una rapida introduzione per quanto riguarda la risolvente, per quello che sarà il nostro utilizzo nei calcoli del modello di Lloyd. Verrà inoltre dimostrata l'identità matriciale legata alla risolvente che ci permetterà di scriverne in forma integrale la traccia. Per approfondimenti vedere [2].

3.1 Definizione della Risolvente

Data un'Hamiltoniana H , definiamo la risolvente G :

$$G(z) = \frac{1}{n} (z - H)^{-1} \quad (3.1)$$

dove $z = E - i\epsilon$ ed n la dimensione di H , possiamo quindi scrivere G secondo la decomposizione sulla base degli autostati dell'Hamiltoniana $|E_\nu\rangle$ tale che

$$H |E_\nu\rangle = E_\nu |E_\nu\rangle$$

quindi risulta

$$G(z) = \frac{1}{n} \sum_\nu \frac{|E_\nu\rangle \langle E_\nu|}{(z - E_\nu)} \quad (3.2)$$

e la sua traccia sarà:

$$\text{tr } G(z) = \frac{1}{n} \sum_\nu \frac{1}{(z - E_\nu)} \quad (3.3)$$

Usiamo ora la formula di Sokhotsky che ci dice che

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x \pm i\epsilon} = \mathcal{P} \left(\frac{1}{x} \right) \mp i\pi\delta(x) \quad (3.4)$$

dove $\mathcal{P} \left(\frac{1}{x} \right)$ è da intendere nel senso delle distribuzioni e quindi sarà la parte principale dell'integrale su una certa distribuzione $\phi(x)$.

Otterremo quindi che:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} (\text{tr } G(z)) = \frac{1}{n} \sum_{\nu} \mathcal{P} \left(\frac{1}{E - E_{\nu}} \right) + i\pi \frac{1}{n} \sum_{\nu} \delta(E - E_{\nu}) \quad (3.5)$$

il passaggio al continuo ci permette di ricavare la relazione fra la densità degli stati dell'Hamiltoniana e la traccia della risolvente:

$$\rho(E) = \frac{1}{n} \sum_{\nu} \delta(E - E_{\nu}) \quad (3.6)$$

e quindi

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} (\text{tr } G(z)) = \mathcal{P} \int dE' \rho(E') \frac{1}{E - E'} + i\pi \rho(E) \quad (3.7)$$

da questa si ottiene immediatamente che la densità degli stati è:

$$\rho(E) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \text{Im} (\text{tr } G(E - i\epsilon)) \quad (3.8)$$

3.2 Identità matriciale

Enunciamo e diamo una veloce dimostrazione dell'identità matriciale che lega la traccia della risolvente al polinomio caratteristico dell'Hamiltoniana.

$$\text{tr} (z - H) = \frac{d}{dz'} \frac{\det(z' - H)}{\det(z - H)} \Big|_{z'=z} \quad (3.9)$$

Per ricavare questa identità ci basta considerare il determinante come prodotto degli autovalori di H e la traccia come somma, otteniamo quindi che:

$$\frac{d}{dz} \det(z - H) = \sum_{i=1}^n \prod_{j \neq i} (z - E_j) \quad (3.10)$$

basterà allora dividere per $\det(z - H)$ entrambi i membri e otterremo:

$$\frac{\frac{d}{dz} \det(z - H)}{\det(z - H)} = \frac{\sum_{i=1}^n \prod_{j \neq i} (z - E_j)}{\prod_{i=1}^n (z - E_i)} = \sum_{i=1}^n \frac{1}{z - E_i} \quad (3.11)$$

che ci dà quindi la 3.9.

Questa verrà utilizzata nella forma

$$\text{tr } G(z) = \frac{1}{n} \frac{d}{dz'} \frac{\det(z' - H)}{\det(z - H)} \Big|_{z'=z} \quad (3.12)$$

e ci permetterà di calcolare la traccia della risolvente tramite l'integrale gaussiano.

Capitolo 4

Localizzazione di Anderson

Nel 1958 Anderson dimostrò come, in un solido modellizzato tramite reticolo con elettroni sottoposti ad un potenziale random, si possa avere il fenomeno della localizzazione, in questo lavoro riuscì in particolare a prevedere il fenomeno della transizione che si verifica superata una soglia di disordine in un solido tridimensionale.

Il fenomeno di localizzazione della funzione d'onda elettronica che si verifica a temperature prossime allo zero assoluto in un solido con un certo grado di disordine si può descrivere sia con modelli continui che discreti. In generale l'Hamiltoniana che descrive il sistema coinvolgerà le varie interazioni ione-ione, ione-elettrone ed elettrone-elettrone. A temperature prossime allo zero assoluto diventa predominante il termine ione-elettrone, si considerano quindi valide l'approssimazione adiabatica e ad elettrone indipendente.

L'Hamiltoniana per il singolo elettrone sarà quindi descritta da un termine libero e un potenziale V

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V(x) \quad (4.1)$$

dove il termine di potenziale sarà statico, random e con una certa distribuzione di probabilità che sia invariante per traslazione, quindi con la distribuzione di probabilità indipendente da x . Il problema è quindi quello di determinare, fissata una distribuzione di probabilità, gli autostati dell'Hamiltoniana e stabilire se sono localizzati o estesi, o vedendo il problema in altri termini, si dovrà trovare la densità degli autovalori che dirà per quali valori dell'energia si presentino stati localizzati. Uno stato si può definire localizzato esponenzialmente se, dal suo punto di massimo, area in cui si troverà spazialmente localizzata la particella, presenta una caduta esponenziale; se ad esempio ho una $\psi(x)$ con valore massimo in $\psi(x_0)$ allora lo stato sarà localizzato se

$$|\psi(x)| \leq |\psi(x_0)| \exp(-k|x - x_0|) \quad (4.2)$$

con k costante corrispondente all'inverso della lunghezza di localizzazione.

4.1 Localizzazione di Anderson per dimensione generica

Dal lavoro di Anderson le tecniche per lo studio della localizzazione si sono modificate. Oggi vengono utilizzati per lo più reticoli discreti; grazie alle tecniche della matrice di trasferimento ed ai lavori teorici per ricavare gli esponenti di Lyapunov, fra cui vanno citati in particolare il lavoro di Thouless e quello di Lloyd, si ha la possibilità di effettuare anche una risoluzione analitica per i modelli più semplici. In questa sezione tratteremo quindi il modello con reticolo discreto definendo l'Hamiltoniana e utilizzando la tecnica della matrice di trasferimento, con particolare attenzione al caso quasi uno-dimensionale della striscia su cui faremo i calcoli più avanti.

Riferendoci alla 4.1, possiamo vedere come l'Hamiltoniana per un reticolo unidimensionale avrà forma

$$H = \begin{pmatrix} h_1 & k & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ k & h_2 & k & \ddots & & \vdots \\ 0 & k & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & k \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & k & h_n \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

in cui abbiamo considerato il caso più semplice in cui i termini di hopping k sono tutti uguali e fissati e dove resta random solo la parte diagonale formata da random variabili indipendenti h_i con fissata distribuzione di probabilità.

Osservazione 1. Va notato che in questa Hamiltoniana la catena viene presa aperta come si vede dai termini H_{1n} e H_{n1} , nei conti spesso useremo però la condizione al contorno di catena chiusa che è utile quando ad esempio si cercano gli autovalori di H .

Possiamo generalizzare al caso in dimensione generica riconducendoci al caso uno-dimensionale, ovvero considerando lo spazio fogliato in piani e ogni piano costituito da catene accostate, avremo così una generica Hamiltoniana della forma

$$H = \begin{pmatrix} H_1 & B & & & B \\ B & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & B \\ B & & & B & H_n \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

dove siamo sempre nel caso reale e quindi con matrice simmetrica, ma in cui sono stati aggiunti i termini di condizioni al contorno di chiusura. In questa

Hamiltoniana, se si descrive un sistema di dimensione N avremo che ogni matrice B descriverà i termini di hopping da un piano di dimensione $N - 1$ all'altro, mentre le matrici H_i saranno le Hamiltoniane del piano i -esimo.

Considerando il caso quasi uno-dimensionale su cui ci concentreremo vediamo che nel caso di m catene accostate di lunghezza n l'Hamiltoniana è proprio quella data da 4.4 con le matrici H_i di dimensione $m \times m$ esattamente della forma 4.3 dato che, nel caso quasi uno-dimensionale con $m \ll n$, non consideriamo il piano chiuso e quindi non mettiamo condizioni al contorno nelle H_i ; le B avranno invece tutte struttura diagonale definendo il passaggio da una sezione della catena all'altra.

4.1.1 Matrice di trasferimento e spettro di Lyapunov

Per poter definire la localizzazione degli autostati dell'Hamiltoniana senza ricavarne esplicitamente lo spettro si utilizza la matrice di trasferimento ed in particolare la nozione di spettro di Lyapunov.

Consideriamo ora un'Hamiltoniana H tridiagonale generica, non necessariamente reale

$$H = \begin{pmatrix} A_1 & B_1 & & & C_1 \\ C_2 & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & B_{n-1} \\ B_n & & & C_n & A_n \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

e scriviamo l'equazione agli autovalori di H

$$H\psi = E\psi \quad (4.6)$$

che in forma discretizzata sarà

$$H_{ij}\psi_j = A_i\psi_i + B_i\psi_{i+1} + C_i\psi_{i-1} = E\psi_i$$

dove ψ_i è un vettore di m elementi che definiscono la sezione della striscia di larghezza m .

Utilizzando l'equazione agli autovalori si ottiene quindi che

$$\begin{pmatrix} \psi_{i+1} \\ \psi_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_i^{-1}(E - A_i) & -B_i^{-1}C_i \\ I_m & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_i \\ \psi_{i-1} \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

che usata ricorsivamente ci da

$$\begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix} = T(E) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_0 \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

dove $T(E)$ è la matrice di trasferimento che lega i valori della sezione iniziale della striscia con quelli finali per uno stato di energia E

$$T(E) = \begin{pmatrix} B_n^{-1}(E - A_n) & -B_n^{-1}C_n \\ I_m & 0 \end{pmatrix} \dots \dots \begin{pmatrix} B_1^{-1}(E - A_1) & -B_1^{-1}C_1 \\ I_m & 0 \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

Osservazione 2. E' importante ricordare che la matrice di trasferimento non fornisce gli autostati di H , se quindi proviamo, fissate delle condizioni iniziali ψ_1 e ψ_0 , a integrare ricavando così tutti gli ψ_i otterremo in generale stati non normalizzati e che anzi divergono esponenzialmente, solo per energia E uguale agli autovalori dell'Hamiltoniana otterremo gli autostati.

La matrice di trasferimento è molto utilizzata nello studio della localizzazione per il legame che c'è fra lo spettro di Lyapunov, ovvero gli autovalori della matrice di trasferimento, e la lunghezza di localizzazione. Gli autovalori di $T(E)$ espressi nella forma $\beta_i = e^{\xi_i + i\varphi_i}$ sono funzioni di E , e gli esponenti di Lyapunov saranno

$$\gamma_i(E) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \langle \text{Re} \ln \beta_i(E) \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \langle \xi_i(E) \rangle \quad (4.10)$$

dove la media è intesa sulla distribuzione di probabilità; nel limite asintotico si può quindi far coincidere lo spettro di Lyapunov con quello della matrice di trasferimento. Questo fatto è importante nelle simulazioni numeriche in cui per $n \rightarrow \infty$, ovvero abbastanza grande, si può assumere che, anche senza mediare sul disordine, lo spettro della matrice di trasferimento approssimerà lo spettro di Lyapunov, questa proprietà è nota come *self-averaging* degli esponenti di Lyapunov.

La matrice di trasferimento si può trattare in base ai teoremi sul prodotto di matrici random che abbiamo introdotto nel precedente capitolo, in particolare nei molti casi in cui si ha una matrice di trasferimento simplettica; ovvero quando

$$B_i = C_i = I_m \quad \forall i$$

come si verifica immediatamente dalla definizione di simpletticità per matrici $2m \times 2m$

$$M^T \Omega M = \Omega \quad \Omega = \begin{pmatrix} & I_m \\ -I_m & \end{pmatrix}$$

e dalla definizione di $T(E)$ come prodotto di matrici 4.9. Per il teorema di Virster, Teorema 3 sulle matrici random si ha infatti che, per matrici simplettiche, lo spettro di Lyapunov è costituito da $\gamma_1 > \gamma_2 > \dots > \gamma_m > 0$ e dagli opposti di questi esponenti con $\gamma_{2m-i+1} = -\gamma_i$.

Un'aspetto fondamentale per l'uso della matrice di trasferimento nello studio della localizzazione è il legame fra lunghezza di localizzazione e minimo esponente di Lyapunov, questo risultato è noto come congettura di Borland

[1, 18]. Consideriamo per semplicità il caso uno-dimensionale con stato localizzato centrato in ψ_0 , avremo dalla definizione di stato localizzato 4.2 che $|\psi_n| \leq |\psi_0| \exp(-k|n|)$, e la lunghezza di localizzazione sarà definita

$$\xi_0^{-1} = - \lim_{|n| \rightarrow \infty} \frac{1}{|n|} \langle \ln |\psi_n| \rangle \quad (4.11)$$

dove si intende la media sulla distribuzione. Grazie alla congettura di Borland possiamo dire che $\gamma = \xi_0$.

Nel caso di matrici di trasferimento simpletiche, grazie al sopracitato teorema di Virster, sappiamo inoltre che gli esponenti di Lyapunov negativi che agiscono sugli stati localizzati sono l'inverso degli esponenti positivi, che agiscono sugli stati che non sono autostati dell'Hamiltoniana; questo fornisce un altro metodo per determinare la lunghezza di localizzazione che può essere sfruttato nella catena o nella striscia con due catene accoppiate, valutando per gli stati delocalizzati la divergenza esponenziale e ottenendo così il massimo esponente di Lyapunov positivo γ_1 , e quindi il minimo negativo, che può essere poi usato per determinare il più piccolo esponente γ_2 , che corrisponde all'inverso della lunghezza di localizzazione.

Un altro utilizzo della matrice di trasferimento che qui citeremo solo è quello che permette di ricavare la relazione di dualità

$$\det(T(E) - z) = (-z)^n \frac{\det(E - H(z))}{\det(B_1 \cdots B_n)} \quad (4.12)$$

che lega il polinomio caratteristico della matrice di trasferimento a quello dell'Hamiltoniana e che verrà utilizzata più avanti nei calcoli. Consideriamo qui un'Hamiltoniana della forma 4.5 ma con $C_{i+1} = B_i^\dagger$ in modo che sia hermitiana. Per ricavare questa relazione si pongono delle condizioni al contorno generalizzate imponendo che il vettore in ingresso alla matrice di trasferimento vari di un fattore z^n con $z \in \mathbb{C}$, quindi:

$$\begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix} = T(E) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_0 \end{pmatrix} = z^n \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_0 \end{pmatrix}$$

questo implica che l'Hamiltoniana ora perde la sua hermiticità, infatti $H_{1n} = z^{-n}C_1$ mentre $H_{n1} = z^n B_n$. Con queste condizioni lo spettro di H dipende da z e si ottiene la 4.12 che ci dice che E è autovalore di $H(z)$ sse z è autovalore di $T(E)$. Per approfondimenti sulla relazione di dualità vedere [6, 7, 8, 10].

4.2 Modello di Lloyd

In questa sezione vogliamo approfondire la localizzazione di Anderson per quanto riguarda il modello di Lloyd [12]. Questo modello è l'unico che permetta di fare alcuni calcoli analitici per poter ottenere formule senza approssimazioni degli esponenti di Lyapunov, ed è quindi ovvia la sua importanza. Nel seguito di questa tesi dunque, anche se non specificato, ci si riferirà sempre al modello di Lloyd sia per calcoli analitici che per simulazioni.

Nel modello di Lloyd si sceglie di trattare il disordine del reticolo come se fosse una distribuzione di Cauchy, o Lorentziana:

$$P(h) = \frac{1}{\pi} \frac{\delta}{(h - h_0)^2 + \delta^2} \quad (4.13)$$

dove h è una generica variabile random posta sulla diagonale dell'Hamiltoniana, h_0 il valore medio della distribuzione che si può semplicemente porre a zero considerando poi un ulteriore termine di potenziale costante in H , mentre δ è una misura del disordine, corrispondente alla larghezza della distribuzione.

L'Hamiltoniana che d'ora in avanti considereremo sarà quella di un modello a striscia di larghezza $m = 2$ e lunghezza n , risulterà quindi una matrice $2mn \times 2mn$ fatta da blocchetti 2×2 .

$$H = \begin{pmatrix} h_1^a & 1 & 1 & 0 & & & 1 & 0 \\ 1 & h_1^b & 0 & 1 & & & 0 & 1 \\ 1 & 0 & h_2^a & 1 & \ddots & & & \\ 0 & 1 & 1 & h_2^b & & \ddots & & \\ & & \ddots & & \ddots & & 1 & 0 \\ & & & \ddots & & \ddots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & & & 1 & 0 & h_n^a & 1 \\ 0 & 1 & & & 0 & 1 & 1 & h_n^b \end{pmatrix}$$

La risoluzione del modello di Lloyd uno-dimensionale può essere effettuata in vari modi, sia con la matrice di trasferimento che con il calcolo della densità degli stati. Il risultato che si ottiene per l'esponente di Lyapunov è:

$$\cosh \gamma(E) = \frac{1}{4} \left[\sqrt{(E+2)^2 + \delta^2} + \sqrt{(E-2)^2 + \delta^2} \right] \quad (4.14)$$

utilizzando i metodi matematici introdotti nei capitoli precedenti e questa formula ricaveremo la densità dello spettro dell'Hamiltoniana e da questa otterremo una formula analitica per la somma degli esponenti di Lyapunov.

Prima di spiegare i calcoli è interessante fare una piccola digressione sull'importanza della dimensione del reticolo: nel modello uno-dimensionale di cui abbiamo citato la formula, si può vedere come non ci sia una soglia di disordine δ per cui uno stato, autostato di H , passi da localizzato a delocalizzato, e questo vale anche nel modello quasi uno-dimensionale. Per quanto riguarda il caso tridimensionale invece questa soglia esiste, come fu dimostrato da Anderson nell'articolo del '58. Il modello bidimensionale è stato per molto tempo il più controverso, inizialmente si credeva che, sebbene tutti gli stati fossero localizzati, alcuni lo fossero debolmente, ovvero non esponenzialmente; oggi si è invece risolto questo problema dimostrando che tutti gli stati sono esponenzialmente localizzati indipendentemente da quanto piccolo sia di disordine, purché non nullo.

4.2.1 Densità degli stati dell'Hamiltoniana

Ci proponiamo qui di calcolare la densità degli autovalori per l'Hamiltoniana nel modello di Lloyd in una striscia di dimensione 2^*n con $n \rightarrow \infty$. Per procedere nel calcolo faremo uso delle tecniche supersimmetriche e dell'integrale gaussiano precedentemente introdotte, oltre che della risolvete.

Sappiamo dal Capitolo 3 che la densità degli stati è legata alla traccia della risolvete $G(z) = \frac{1}{2n} (z - H)^{-1}$, con $z = E - i\epsilon$, tramite la relazione

$$\rho(E) = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \text{Im} \langle \text{Tr} (G(z)) \rangle \quad (4.15)$$

dovremo quindi determinare la traccia della risolvete mediandola sul disordine.

Per determinare la traccia della risolvete utilizziamo un'importante proprietà che lega la traccia della risolvete al determinante di $z - H$

$$\text{Tr} (G(z)) = \frac{1}{2n} \frac{d}{dz'} \frac{\det(z' - H)}{\det(z - H)} \quad (4.16)$$

possiamo scrivere ora come integrali gaussiani i due determinanti, dove quello al numeratore è espresso come integrale di variabili di Grassmann

$$\text{Tr} (G(z)) = \frac{1}{2n} \frac{d}{dz'} \int \prod_{i=1}^{2n} [d^2 \phi_i d\bar{\eta}_i d\eta_i] \exp(i [\phi^* (H - z) \phi + \bar{\eta} (H - z') \eta]) \quad (4.17)$$

dove abbiamo estratto un fattore i da entrambi i determinanti della 4.16 in modo da garantire la convergenza dell'integrale in ϕ , dato che $\text{Im} z = -\epsilon$.

Possiamo scrivere $H = T + V$; per mediare sulla distribuzione di Cauchy dobbiamo quindi fare

$$\langle \text{Tr} (G(z)) \rangle = \int dh \text{Tr} (G(z)) \frac{1}{\pi} \frac{\delta}{h^2 + \delta^2}$$

dove abbiamo posto il valor medio della Lorentziana nullo, ottenendo quindi

$$\begin{aligned} \langle \text{Tr} (G(z)) \rangle &= \frac{1}{2n} \int \prod_{i=1}^{2n} [d^2 \phi_i d\bar{\eta}_i d\eta_i] dh (\bar{\eta} \cdot \eta) \frac{1}{\pi} \frac{\delta}{h^2 + \delta^2} \cdot \\ &\quad \cdot \exp(i [\phi^* (T + V - z) \phi + \bar{\eta} (T + V - z') \eta]) \end{aligned}$$

il termine V è l'unico che dipende dalla variabile random ed è $V = hI_{2n}$, possiamo quindi separare gli integrali ed integrare con il metodo dei residui

$$\begin{aligned} \langle \text{Tr} (G(z)) \rangle &= \frac{1}{2n} \int \cdots \int dh \exp(i [\phi^* (V) \phi + \bar{\eta} (V) \eta]) \frac{1}{\pi} \frac{\delta}{h^2 + \delta^2} \\ &= \frac{1}{2n} \int \cdots \int dh \exp(i [\phi^* (i\delta I_{2n}) \phi + \bar{\eta} (i\delta I_{2n}) \eta]) \end{aligned}$$

otteniamo così che

$$\langle \text{Tr} (G(z)) \rangle = \text{Tr} \left(\tilde{G}(z) \right) = \text{Tr} \left(\frac{1}{2n} (z - \tilde{H})^{-1} \right) \quad (4.18)$$

con $\tilde{H} = T + \tilde{V}$ e

$$\tilde{V} = \begin{pmatrix} i\delta & 0 & & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & & 0 & i\delta \end{pmatrix}$$

matrice quadrata di dimensione $2n$.

Abbiamo quindi trovato che per calcolare la densità degli stati ci basta calcolare la parte immaginaria della traccia della risolvente, con un potenziale non random \tilde{V} ; questa è la particolarità del modello di Lloyd che rende più facile fare calcoli analitici.

Osservazione 3. Saremmo potuti giungere a questo risultato anche senza le tecniche supersimmetriche, utilizzando il metodo delle repliche, che è tuttavia ormai meno usato grazie alla semplicità dell'integrale gaussiano applicato alle variabili di Grassmann.

Possiamo adesso calcolare esplicitamente la densità degli stati trovando gli autovalori di \tilde{H} , che è una semplice matrice tridiagonale a blocchi, e combinando la 4.15 con la 4.18. Ci limitiamo qui a calcolare un'espressione della densità che ci permetta di fare alcune considerazioni.

Iniziamo con l'osservare che la 4.18 ci dice che il termine $-i\delta$ può anche essere riassorbito dalla z . È immediato quindi vedere che, dalla definizione di traccia della risolvente scritta decomposta sugli autovalori, si ha:

$$\text{Tr} (G(z - i\delta)) = \frac{1}{2n} \sum_{\nu}^{2n} \frac{1}{z - i\delta - E_{\nu}} \quad (4.19)$$

dove gli E_{ν} saranno gli autovalori dell'Hamiltoniana libera tridiagonale contenente solo i termini cinetici. Facciamo direttamente il limite per $\epsilon \rightarrow 0$, cioè eliminiamo ϵ dato che ora abbiamo un termine immaginario $i\delta$ che stiamo considerando non nullo, e ciò rende ϵ ininfluenza. Riscriviamo ora la 4.19 mettendone in risalto la parte immaginaria

$$\text{Tr} (G(E - i\delta)) = \frac{1}{2n} \sum_{\nu}^{2n} \left[\frac{E - E_{\nu}}{(E - E_{\nu})^2 + \delta^2} + i \frac{\delta}{(E - E_{\nu})^2 + \delta^2} \right]$$

usando adesso la 4.15 ricaviamo l'espressione della densità degli stati

$$\rho(E) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{2n} \sum_{\nu}^{2n} \frac{\delta}{(E - E_{\nu})^2 + \delta^2} \quad (4.20)$$

Dall'espressione appena ricavata possiamo vedere che la densità dello spettro dell'Hamiltoniana nel modello di Lloyd è formata da una somma di Lorentziane. Ci basta confrontare la 4.13 con la nostra 4.20 per vedere che le Lorentziane ottenute sono centrate sugli autovalori del modello senza disordine ed hanno larghezza δ uguale a quella della distribuzione di partenza. Questo fatto spiega ad esempio l'allargamento dei livelli di Landau visti nell'introduzione parlando dell'effetto Hall quantistico.

4.2.2 Somma degli esponenti di Lyapunov

Utilizzando i risultati raggiunti vogliamo ora calcolare la somma dei due esponenti di Lyapunov per la striscia 2^*n .

Il calcolo della somma degli esponenti di Lyapunov è possibile grazie al risultato noto come formula di Thouless che, nella sua prima versione, dovuta a Thouless, permetteva il calcolo nel modello uno-dimensionale dell'unico esponente di Lyapunov e che è stata poi generalizzata [13, 14, 2]. Qui la scriviamo per il modello quasi uno-dimensionale di larghezza m generica

$$\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \gamma_i(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE' \rho(E') \ln |E - E'| \quad (4.21)$$

Va comunque notato che la risoluzione esplicita dell'integrale per $m > 1$ può essere molto complessa, anzichè risolverlo esplicitamente ci ricondurremo quindi al caso $m = 1$ di cui conosciamo la soluzione. Per fare questo utilizziamo la definizione della densità espressa come somma di delta di Dirac

$$\rho(E) = \frac{1}{2n} \sum_{\nu} \delta(E - E_{\nu}) \quad (4.22)$$

con E_{ν} autovalori di H , avendo però trovato che per il modello di Lloyd vale la 4.18, sappiamo che possiamo calcolare gli autovalori di \tilde{H} , che hanno la semplice espressione

$$E_{\nu} = i\delta + 2 \cos\left(\frac{2\pi}{n}\nu\right) \pm 1 \quad (4.23)$$

sostituendo questa nella 4.22, otteniamo

$$\rho(E) = \frac{1}{2n} \sum_{\nu} \left[\delta\left(E - i\delta - 2 \cos\left(\frac{2\pi}{n}\nu\right) + 1\right) + \delta\left(E - i\delta - 2 \cos\left(\frac{2\pi}{n}\nu\right) - 1\right) \right]$$

usando ora la definizione di delta di Dirac otteniamo

$$\rho(E) = \frac{1}{2n} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \sum_{\nu} \left[\exp\left(ik \left[(E+1) - i\delta - 2 \cos\left(\frac{2\pi}{n}\nu\right) \right]\right) + \exp\left(ik \left[(E-1) - i\delta - 2 \cos\left(\frac{2\pi}{n}\nu\right) \right]\right) \right] \quad (4.24)$$

e passando al continuo per ν :

$$\rho(E) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{dx}{2\pi} [\exp(ik[(E+1) - i\delta - 2\cos(x)]) + \dots]$$

Svolgiamo l'integrale in x , questo è un integrale ellittico il cui risultato è la funzione di Bessel $J_0(2k)$ che è una funzione pari, spezzando adesso i due integrali in k abbiamo

$$\begin{aligned} \rho(E) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \exp(ik[(E+1) - i\delta]) J_0(2k) + \\ + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \exp(ik[(E-1) - i\delta]) J_0(2k) \end{aligned} \quad (4.25)$$

è immediato ora vedere che, se avessimo fatto lo stesso procedimento in una dimensione per la catena, avremmo ottenuto

$$\rho_{1D}(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \exp(ik[E - i\delta]) J_0(2k) \quad (4.26)$$

combinando le due otteniamo allora la relazione che lega la densità per la striscia con quella della catena

$$\rho(E) = \frac{1}{2} \rho_{1D}(E+1) + \frac{1}{2} \rho_{1D}(E-1) \quad (4.27)$$

Utilizzando la formula di Thouless 4.21 scriviamo esplicitamente la somma degli esponenti e inseriamo la 4.27:

$$\frac{1}{2} [\gamma_1 + \gamma_2] = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dE' (\rho_{1D}(E'+1) + \rho_{1D}(E'-1)) \ln |E - E'|$$

e quindi

$$\gamma_1 + \gamma_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dE' \rho_{1D}(E'+1) \ln |E - E'| + \int_{-\infty}^{+\infty} dE' \rho_{1D}(E'-1) \ln |E - E'| \quad (4.28)$$

dato che la 4.21 per una catena ha la forma

$$\gamma_{1D}(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE' \rho(E') \ln |E - E'|$$

con γ_{1D} l'esponente di Lyapunov per la catena uno-dimensionale; con un semplice cambio di variabile si vede che

$$\gamma_{1D}(E+a) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE' \rho(E'+a) \ln |E - E'| \quad (4.29)$$

arriviamo così al risultato che lega la somma degli esponenti nel caso della striscia a quelli della catena:

$$(\gamma_1 + \gamma_2)(E) = \gamma_{1D}(E+1) + \gamma_{1D}(E-1) \quad (4.30)$$

Ora che abbiamo dimostrato la relazione 4.30 possiamo utilizzare la 4.14 per ottenere una formula analitica della somma; iniziamo con ricavare dalla 4.14 il valore di $y = \exp(\gamma_{1D})$, chiamando k il secondo membro della 4.14

$$k(E) = \frac{1}{4} \left[\sqrt{(E+2)^2 + \delta^2} + \sqrt{(E-2)^2 + \delta^2} \right]$$

avremo che, risolvendo la $y^2 - 2ky + 1 = 0$, con y funzione di E otterremo

$$y(E) = k(E) + \sqrt{k(E)^2 - 1}$$

Se cerchiamo quindi $s = \exp(\gamma_1 + \gamma_2)$ usando la 4.30, otteniamo

$$s(E) = \left[k(E+1) + \sqrt{k(E+1)^2 - 1} \right] \left[k(E-1) + \sqrt{k(E-1)^2 - 1} \right] \quad (4.31)$$

che si vede essere pari nello scambio $E \rightarrow -E$ e la somma sarà quindi

$$(\gamma_1 + \gamma_2)(E) = \ln(s(E)) \quad (4.32)$$

4.3 Conteggio degli esponenti di Lyapunov

Per uno studio più accurato della localizzazione di Anderson nel modello di Lloyd, ovvero per la determinazione dei due esponenti di Lyapunov, dobbiamo procedere per via computazionale.

Per ricavare per via numerica gli esponenti di Lyapunov si potrebbe procedere in vari modi, ad esempio facendo un prodotto esplicito delle matrici di trasferimento dopo aver generato il disordine. Qui ricaveremo invece una formula che permetta il conteggio degli esponenti di Lyapunov minori di un certo valore. Per fare questo partiamo da un teorema dell'analisi complessa, l'Argument Principle di Cauchy.

Teorema 4. *Argument Principle*

Sia $f(x)$ una funzione meromorfa e C un cammino chiuso, semplice ed orientato in senso antiorario, con f senza zeri o poli appartenenti a C , allora vale:

$$\oint_C \frac{f'(z)}{f(z)} dz = 2\pi i (N - P)$$

con N e P rispettivamente il numero degli zeri e dei poli di f contenuti in C , contati ognuno secondo la propria molteplicità.

Consideriamo quindi la striscia, che avrà Hamiltoniana tridiagonale a blocchi

$$H(z) = \begin{pmatrix} A_1 & B_1 & & & C_1/z \\ C_2 & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & B_{n-1} \\ zB_n & & & C_n & A_n \end{pmatrix}$$

dove i termini di hopping fra le varie sezioni della striscia descritti da B_i e C_i saranno considerati matrici identità.

I blocchi interessanti di quest'Hamiltoniana sono H_{1n} e H_{n1} questi sono i termini di condizioni al contorno sulla striscia; in questo caso, introducendo il numero $z \in \mathbb{C}$, l'Hamiltoniana risulta essere non hermitiana, questo consente di determinare la relazione fra lo spettro dell'Hamiltoniana con le condizioni al contorno generalizzate e lo spettro della matrice di trasferimento, attraverso la relazione di dualità vista precedentemente e che riportiamo per maggiore leggibilità:

$$\det(T(E) - z) = (-z)^m \frac{\det(E - H(z))}{\det(B_1 \cdots B_n)}$$

Considerando ora che il polinomio caratteristico del prodotto di matrici di trasferimento è una funzione analitica, e che gli zeri per una fissata E sono gli esponenti di Lyapunov che cerchiamo, possiamo utilizzare l'Argument Principle per contare quanti esponenti sono minori di ξ

$$\mathcal{N}(\xi) = \oint_{|w|=e^{n\xi}} \frac{dw}{2\pi i} \frac{f'(w)}{f(w)} \quad (4.33)$$

con $f(w) = \det(T(E) - w)$ con $z = w^{\frac{1}{n}}$.

Utilizzando ora la relazione di dualità possiamo esprimere la f in termini di H , derivando otteniamo quindi

$$\mathcal{N}(\xi) = \oint_{|w|=e^{n\xi}} \frac{dw}{2\pi i} \frac{m}{w} + \oint_{|w|=e^{n\xi}} \frac{dw}{2\pi i} \frac{\frac{d}{dw} \det(E - H(w))}{\det(E - H(w))} \quad (4.34)$$

e calcoliamo il primo integrale con il teorema dei residui esprimendo poi il secondo come un integrale di linea.

Considerando $w = e^{n\xi + in\varphi}$ l'espressione diventa

$$\mathcal{N}(\xi) = m + \frac{1}{n} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi i} \frac{\frac{d}{d\varphi} \det(E - H(w))}{\det(E - H(w))} \quad (4.35)$$

dove abbiamo diviso per $1/n$ per avere l'integrale esteso da 0 a 2π .

Con questo passaggio abbiamo esplicitato la derivata rispetto a φ , variabile reale e questo permette di utilizzare una nota relazione fra determinante e traccia

di una matrice

$$\frac{d}{dx} \det(M(x)) = \det(M(x)) \operatorname{tr} \left[M(x)^{-1} \frac{d}{dx} M(x) \right] \quad (4.36)$$

con $x \in \mathbb{R}$. Ricaviamo quindi

$$\mathcal{N}(\xi) = m + \frac{1}{n} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \operatorname{tr} \left[iG(E, w) \frac{d}{d\varphi} (-H(w)) \right] \quad (4.37)$$

dove abbiamo portato la i al denominatore nella traccia e usato la definizione di risolvente $G(E, w) = (H(w) - E)^{-1}$.

Derivando l'Hamiltoniana rispetto a φ i termini che sopravvivono dal prodotto con G sono solo $G(E, w)_{1n}$ e $G(E, w)_{n1}$ dato che H dipende da φ solo nei termini al contorno.

$$\mathcal{N}(\xi) = m + \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \operatorname{tr} \left[wG(E, w)_{1n} B_n - \frac{1}{w} G(E, w)_{n1} C_1 \right] \quad (4.38)$$

dove $1/n$ si è cancellato con n proveniente dalla derivata di H , e B_n e C_1 sono i blocchi dell'Hamiltoniana che esprimono le condizioni al contorno.

Per ottenere una formula più comoda da usare numericamente passiamo dalla matrice H alla matrice bilanciata H^B e quindi anche da G a G^B . La convenienza di fare questo è che ora la dipendenza da z sarà su tutta la matrice e non si avranno più termini del tipo z^n che sono troppo grandi per essere trattati numericamente. La relazione fra H ed H^B è

$$H(z^n) = S(z) H^B(z) S(z)^{-1} \quad (4.39)$$

con $S(z)$ matrice con blocchi $S(z)_{ab} = \delta_{ab} z^a I_m$

$$H^B(z) = \begin{pmatrix} A_1 & zB_1 & & & C_1/z \\ C_2/z & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & zB_{n-1} \\ zB_n & & & C_n/z & A_n \end{pmatrix}$$

Per G si ottiene quindi $G(E, z^n)_{ab} = z^{a-b} G^B(E, z)_{ab}$ e dato che $w = z^n$ la formula per il conteggio degli esponenti minori di ξ è

$$\mathcal{N}(\xi) = m + \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \operatorname{tr} \left[zG^B(E, z)_{1n} B_n - \frac{1}{z} G^B(E, z)_{n1} C_1 \right] \quad (4.40)$$

Siccome il risultato della formula per il conteggio degli zeri deve essere reale, sappiamo che la parte immaginaria della traccia dovrà dare zero quando integrata; per semplificare la formula prenderemo allora la sola parte reale e dividendo per $1/2m$ otteniamo poi la formula normalizzata

$$\mathcal{N}(\xi) = \frac{1}{2} + \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \operatorname{Re} \frac{1}{2m} \operatorname{tr} \left[z G^B(E, z)_{1n} B_n - \frac{1}{z} G^B(E, z)_{n1} C_1 \right] \quad (4.41)$$

con $z = e^{\xi+i\varphi}$. Per una più approfondita discussione di questa formula vedi [11].

4.3.1 Calcolo numerico dello spettro di Lyapunov

Di seguito presentiamo i metodi ed i risultati della simulazione per ricavare i due esponenti di Lyapunov nella striscia di larghezza 2.

Questo metodo è generalizzabile per qualsiasi striscia bidimensionale o blocco tridimensionale in cui una dimensione sia molto maggiore delle altre, questo perchè altrimenti si è troppo lontani dal limite asintotico; inoltre aumentando la larghezza m si dovrà necessariamente ridurre la lunghezza n , altrimenti il programma richiede troppe risorse, dovendo invertire un buon numero di matrici quadrate di dimensione mn .

La formula per il conteggio uasta nel programma è una variante della 4.41:

$$\mathcal{N}(\xi) = m + n \int_0^{\frac{2\pi}{n}} \frac{d\varphi}{2\pi} \operatorname{Re} \operatorname{tr} \left[z G^B(E, z)_{1n} B_n - \frac{1}{z} G^B(E, z)_{n1} C_1 \right] \quad (4.42)$$

la scelta di usare la formula non normalizzata è ininfluenza; più importante è invece l'aver integrato da 0 a $\frac{2\pi}{n}$ anziché su tutto l'angolo giro. Questa scelta degli estremi di integrazione è dovuta alla particolare simmetria che presenta l'Hamiltoniana H^B . Per come è stata costruita attraverso la 4.39, per la H^B vale la seguente

$$H^B(z e^{i2\pi/n}) = S(e^{i2\pi/n}) H^B(z) S(e^{i2\pi/n})^{-1}$$

Dato che per integrare numericamente si è scelto un metodo che prenda un certo numero di punti, cioè di valori di φ a distanza fissa anziché casuale, con l'integrazione fra 0 e 2π si è riscontrato il problema che, nel caso in cui il numero p di punti su cui viene valutata l'integranda non è coprimo ad n , cioè $\operatorname{MCD}(n, p) \neq 1$ avremo alcuni valori dell'integranda uguali, se poi p è sottomultiplo di n allora l'integranda sarà valutata come funzione costante. Tutto questo si risolve integrando solo nell'intervallo $[0, \frac{2\pi}{n}]$.

Il programma è stato realizzato in C sfruttando le librerie di Octave per le operazioni con le matrici complesse, vedi Appendice. Inizialmente si genera il disordine Lorentziano fissata la δ , la matrice diagonale random così generata viene quindi salvata. Si decidono poi i valori di ξ iniziale e finale ed un passo di incremento. Per ottenere dei buoni grafici si è aumentato il numero di punti considerati nell'area in cui la funzione $\mathcal{N}(\xi)$ salta, il valore di ξ per cui si ha il salto è l'esponente di Lyapunov.

Nella zona dei salti si possono notare dei picchi, in negativo prima del salto e in positivo subito dopo, queste divergenze sono dovute alle approssimazioni

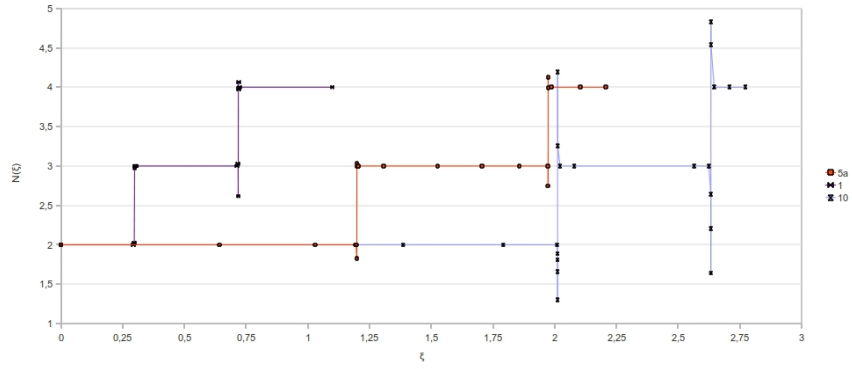


Figura 4.1: Il grafico mostra $\mathcal{N}(\xi)$ in funzione di ξ per disordine $\delta = 1, 5$ e 10 . Aumentando il disordine aumentano gli esponenti di Lyapunov.

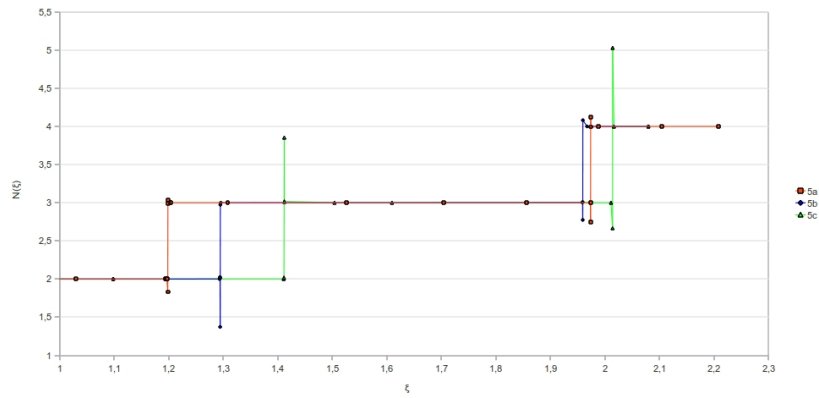


Figura 4.2: Il grafico mostra $\mathcal{N}(\xi)$ in funzione di ξ per disordine $\delta = 5$, con potenziale random generato tre volte.

Distribuzione	ξ_1	ξ_2
5a	1.198	1.973
5b	1.294	1.959
5c	1.412	2.014
Medio	1.301	1.982

Tabella 4.1: Esponenti di Lyapunov ricavati dal grafico per $\delta = 5$ e calcolo dei valori medi.

numeriche nell'inversione delle matrici G^B : avvicinandosi all'esponente di Lyapunov infatti la G diventa non invertibile, come si vede subito dalla relazione di dualità 4.12 per $E = 0$, e quindi la funzione di inversione smette di funzionare nel salto. Una valutazione base della bontà dell'inversione è stata realizzata nel programma moltiplicando l'inversa della matrice per la matrice stessa e valutando se gli elementi si discostano da quelli dell'identità per più di una certa soglia.

Nella Figura 1.1 si vedono i grafici per tre distribuzioni con disordine delta diverso $\delta = \{1; 5; 10\}$; da questa si può notare che per disordine maggiore entrambi gli esponenti tendono a spostarsi verso destra, quindi la somma aumenta all'aumentare del disordine.

Più interessante è il secondo grafico (Figura 1.2) in cui si osserva il comportamento a disordine fissato $\delta = 5$ e generando tre diversi potenziali random. Grazie a questo grafico possiamo vedere che per le catene trattate $2*500$ si è ancora lontani dal limite asintotico per cui vale il self-averaging degli esponenti di Lyapunov ed in cui i salti dovrebbero avvenire nello statto punto; possiamo però non limitarci a questo e dare una rapida stima dell'errore commesso nella determinazione dell'esponente di Lyapunov e valutare se, entro l'errore, la somma degli esponenti medi è in accordo con la formula analitica ottenuta precedentemente.

Dalla Tabella 1.1 possiamo ricavare la somma dei valori medi di $(\xi_1 + \xi_2)_{GR} = 3.28 \pm 0.15$ con l'errore stimato sull'esponente minore che è quello che presenta maggiore incertezza. Otteniamo quindi che la somma ricavata dal grafico è in accordo entro l'errore con la somma ottenuta analiticamente $(\xi_1 + \xi_2)_{AN} = 3.32$.

Appendice

Viene presentato qui il codice sorgente in C con utilizzo delle librerie Octave usato per l'integrazione della formula 4.42.

```
#include<iostream>

//possibili problemi di octave se si usa
//using namespace std, ridefinisco operatori
//input e output per comodita'
#define CIN std::cin
#define COUT std::cout
#define CERR std::cerr
#define ENDL std::endl

#include<fstream>

#define OFSTREAM std::ofstream
#define IFSTREAM std::ifstream

#include<cmath>

//librerie octave
#include<octave/oct.h>
#include<octave/oct-rand.h>

//DIMENSIONE
//M è la dim dei blocchetti, N il numero nei blocchetti della matrice
#define N 500
#define M 2

//numero massimo di punti ottenibili, serve solo per
//dichiarare lunghezza array
#define MAXPASSI 1000

//passo di integrazione della formula
#define INTEGRAZIONE 10
```

```

//*****
//DICHIARAZIONE FUNZIONI
//*****

Complex polare_def(double modulo, double argomento);
double uniform_to_cauchy(double medio, double delta);
Matrix diagonale_cauchy(int dim, double medio, double delta);
ComplexMatrix genera_matrice_trid(int dim_a, int dim_b);
ComplexMatrix genera_matrice_zeta(int dim_a, int dim_b, Complex z);
double Re_traccia(ComplexMatrix G, int dim_a, int dim_b, Complex z);
double integranda(ComplexMatrix Block_diagonal, int dim_a, int dim_b,
Complex z);
double integra(double (*funzione)(ComplexMatrix , int , int , Complex),
double xmin, double xmax, int npassi, ComplexMatrix Bd, int dim_a,
int dim_b, double csi);
double modulo( double num);
int controlla_inversa(ComplexMatrix A, ComplexMatrix B, int dim);
void salvataggio (Matrix Random, int dim);
bool caricamento (double array[], int dim);

int main()
{

double start;
double stop;
double n1;

CERR << "generare e salvare disordine, digita s per si";
CERR << " o n per no, per scegliere no devi ";
CERR << "avere già un file random.txt contenete ";
CERR << "il disordine" << ENDL;
char scegli;
CIN >> scegli;

Matrix V_random = identity_matrix(N*M, N*M);

if(scegli == 's')
{
V_random = diagonale_cauchy(N*M, 0., 10.);
salvataggio(V_random, N*M);
}
}

```

```

if(scegli == 'n')
{
double random_array[2000]; //dimensione massima disordine
if(caricamento(random_array, N*M))
    COUT << "ERRORE: caricamento" << ENDL;

for(int i=0; i< N*M ; i++)
    V_random(i,i) = random_array[i];
}

ComplexMatrix Block_diagonal = V_random
    + genera_matrice_trid(N,M);

CERR << "Inserisci xi iniziale e finale e ";
CERR << "numero punti intemedi" << ENDL;
CIN >> start >> stop >> n1;

double passo1 = (stop - start) / n1;

double csi[MAXPASSI];
double enne_di_csi[MAXPASSI];

int c1 = 0;
for(c1 =0; c1 < n1; c1++)
{
csi[c1] = start + c1 * passo1;
enne_di_csi [c1] = (1./2.) + (1./(2.*M_PI)) * (1./(2.*M)) * N
    * integra( integranda, 0., 2.*M_PI / N, INTEGRAZIONE,
        Block_diagonal, N, M, csi[c1]);

//stampa nello standard error i risultati
CERR << csi[c1] << "\t" << enne_di_csi[c1]*(2.*M) << ENDL;
}

return 0;
}

```

```

//*****
//FUNZIONI
//*****

Complex polare_def(double modulo, double argomento)
{
//restituisce un numero complesso dato modulo e argomento

    if(modulo < 0.)
        exit(1);

    return Complex(modulo * cos(argomento), modulo * sin(argomento));
}

double uniform_to_cauchy(double uniforme, double medio, double delta)
{
//genera la distribuzione di cauchy prendendo in input
//un numero con distribuzione uniforme fra zero e uno

    return medio + delta * tan(M_PI*(uniforme-0.5));
}

Matrix diagonale_cauchy(int dim, double medio, double delta)
{
//genera una matrice reale diagonale random con elementi
//distribuiti secondo cauchy e indipendenti, con varore
//e disordine in input

    Matrix mat;
    octave_rand::distribution("uniform");
    mat = octave_rand::matrix(dim,dim);
    mat = product(mat, identity_matrix(dim,dim));
    for(int i =0; i<dim; i++)
        mat(i,i) = uniform_to_cauchy(mat(i,i), medio, delta);

    return mat;
}

```



```

ComplexMatrix genera_matrice_trid(int dim_a, int dim_b)
{
//genera la parte non diagonale dei blocchi
//diagonali A_i
//dim_a -> numero blocchi
//dim_b -> dimensione blocchi

    int dim = dim_a * dim_b;
    ComplexMatrix mat;
    mat = ComplexMatrix(dim, dim);

    for(int i=0; i<dim_a; i++)
        for(int j=0; j<dim_b-1; j++)
            {
                //elementi vicini a diagonale, non eccede la
                //dimensione della matrice perche j < dim_b-1
                mat(i*dim_b + j+ 1, i*dim_b + j)=1.;
                mat(i*dim_b + j, i*dim_b + j + 1)=1.;
            }

    return mat;
}

```

```

ComplexMatrix genera_matrice_zeta(int dim_a, int dim_b, Complex z)
{
//genera la parte di blocchi non diagonali della
//matrice tridiagonale a blocchi H_bilanciata
//dim_a -> numero blocchi
//dim_b -> dimensione blocchi
//z -> numero complesso exp( xi + i phi)

    int dim = dim_a * dim_b;
    ComplexMatrix mat;
    mat = ComplexMatrix(dim, dim);

    for(int i=0; i<dim_a-1; i++)
        for(int j=0; j<dim_b; j++)
            {
                //matrici identità per z
                mat(i*dim_b + j + dim_b, i*dim_b + j)=1./z;//basse C2/z ... Cn/z
                mat(i*dim_b + j, i*dim_b + j+ dim_b)=z; //alte B1*z ... Bn-1 *z

            }

//matrici

    for(int j=0; j<dim_b; j++)
        {
            //matrici identità per z estremi
            mat((dim_a-1)*dim_b + j, j)=z; //bassa sx Bn*z
            mat(j, (dim_a-1)*dim_b + j)=1./z; //alta dx C1/z

        }

    return mat;
}

```

```

double Re_traccia(ComplexMatrix G, int dim_a, int dim_b, Complex z)
{
//restituisce la parte reale traccia che
//compare nell'integranda
//G -> matrice risolvente
//dim_a -> numero blocchi
//dim_b -> dimensione blocchi
//z -> numero complesso exp( xi + i phi)

    int n = dim_a;
    int m = dim_b;

    ComplexMatrix G_uno_n = G.extract_n(0,m*(n-1),m,m); //alto dx
    ComplexMatrix G_n_uno = G.extract_n(m*(n-1),0,m,m); //basso sx
    ComplexMatrix mat = z * G_uno_n - G_n_uno / z;

    Complex traccia = Complex(0.,0.);
    for(int i=0; i<m; i++)
        traccia += mat(i,i);

    double y = traccia.real();

    return y;
}

double integranda(ComplexMatrix Block_diagonal, int dim_a, int dim_b,
    Complex z)
{
//restituisce la parte reale della traccia dopo aver generato
//la matrice H che dipende da z e averne calcolato la traccia
//la matrice Block_diagonal contiene i blocchi diagonali già pronti

    ComplexMatrix Hamilton = Block_diagonal
+ genera_matrice_zeta(dim_a, dim_b, z);
    ComplexMatrix Green = Hamilton.inverse(); //E=0

    //stima della qualità dell'inversa
    if( int control = controlla_inversa(Hamilton, Green, dim_a*dim_b))
    {
        COU<< "ERRORE INVERSA " << control << ENDL;
        //exit(2);
    }
    double tmp = Re_traccia(Green, dim_a, dim_b, z);

    return tmp;
}

```

```

double integra(double (*funzione)(ComplexMatrix , int , int , Complex),
  double xmin, double xmax, int npassi, ComplexMatrix Bd, int dim_a,
  int dim_b, double csi)
{
//funzione di integrazione don il metodo di Simpson
//accetta come argomento l'integranda ed i suoi parametri

  if(npassi%2) //se dispari
    npassi++; //incremento

  double integrale=0;
  double h=(xmax-xmin)/npassi;
  integrale = (1/3.)*h*(funzione)(Bd,dim_a,dim_b,polare_def(csi,xmin))
  +(1/3.)*h*(funzione)(Bd,dim_a,dim_b,polare_def(csi,xmax));

  for ( int i=1; i<npassi; i++ ) {
    double x = xmin + i*h;

    if(i%2)
      integrale+=(4./3.)*h*(funzione)(Bd,dim_a,dim_b,polare_def(csi,x));
    else
      integrale+=(2./3.)*h*(funzione)(Bd,dim_a,dim_b,polare_def(csi,x));
  }

  return integrale;
}

double modulo( double num)
{
//modulo di un numero reale

  if( num >= 0. )
    return num;
  if( num < 0. )
    return -num;
}

```

```

int controlla_inversa(ComplexMatrix A, ComplexMatrix B, int dim)
{
//esegue un controllo sull'inversione della matrice
//prende come argomenti la matrice A e l'inversa B
//le moltiplica e valuta se gli elementi sono diversi
//da quelli dell'identità a meno di una tolleranza
//i problemi di divergenza si hanno nelle
//vicinanze degli esponenti di Lyapunov

    ComplexMatrix P = A*B;

    double zero= 0.0001;
    for(int i=0; i<dim; i++)
        for(int j=0; j<dim; j++)
            {
            if( i == j)
                if(modulo(P(i,j).real()-1.) >zero || modulo(P(i,j).imag()) >zero)
                    return 1;
            if( i != j)
                if(modulo(P(i,j).real()) >zero || modulo(P(i,j).imag()) >zero)
                    return 2;
            }

    return 0;
}

void salvataggio (Matrix Random, int dim)
{
//salva nel file    random.txt
//il disordine, in ingresso prende
//la matrice diagonale reale

    OFSTREAM salva("random.txt");
    if(!salva)
    {
        COUT << "Ops: impossibile creare il file" << ENDL;
        return;
    }
    salva << dim << '\t';
    for (int i=0; i<dim; i++)
        salva << Random(i,i) << '\t';
    salva.close();
}

```

```

bool caricamento (double array[], int dim)
{
//carica il disordine dal file random.txt
//se non è presente o se il numero di valori
//presenti nel file è diverso da quelli richiesti
//con dim restituisce 1
//se va tutto bene restituisce 0

    IFSTREAM salva("random.txt");
    if(!salva)
    {
        COUT << "Ops: impossibile caricare il file" << ENDL;
        return 1;
    }
    int dim_caricata;
    salva >> dim_caricata;

    if(dim != dim_caricata)
        return 1;

    for (int i=0; i<dim_caricata; i++)
        salva >> array[i];

    salva.close();

    return 0;
}

```

Osservazione 4. Il codice è stato scritto su sistema operativo Linux e fa uso di librerie di Octave che deve quindi essere installato a parte, inoltre sono stati ridefiniti *cin*, *cout*, *cerr* ed *endl* per possibili problemi di conflitto con le librerie Octave nel caso di utilizzo di *using namespace std*.

Per compilare il codice utilizzare il seguente makefile:

```

%.o: %.cpp
    g++ -c -I octave $<

lyapunov: lyapunov.o
    mkoctfile --link-stand-alone -o $@ $^

```

dove il codice sorgente deve essere inserito in un file di nome *lyapunov.cpp*

Osservazione 5. Le spaziature nel makefile sono tabulazioni

Bibliografia

- [1] A. Crisanti, G. Paladin, A. Vulpiani, *Products of Random Matrices*, Springer, Berlin (1993)
- [2] F. Haake, *Quantum Signatures of Chaos*, Springer (2001)
- [3] C. Efetov, *Supersymmetry in Disorder and Chaos*, Cambridge University Press (1997)
- [4] Z. Justin, *Path Integrals in Quantum Mechanics*, Oxford University Press (2005)
- [5] M. Le Bellac, *Quantum and Statistical Field Theory*, Oxford : Clarendon Press (1991)
- [6] L.G. Molinari, *Transfer matrices and tridiagonal-block hamiltonian with periodic and scattering boundary conditions*, J. Phys. A, 30:983-997 (1997)
- [7] L.G. Molinari, *Transfer matrices, non-hermitian hamiltonian and resolvents: Some spectral identities*, J. Phys. A, 31:8553-8562 (1998)
- [8] L.G. Molinari, *Spectral duality and distribution of exponents for transfer matrices of block-tridiagonal hamiltonian*, J. Phys. A, 36:4081-4090 (2003)
- [9] L.G. Molinari, *Determinants of block tridiagonal matrices*, Linear Algebra and its Applications 429, 2221-2226 (2008)
- [10] L.G. Molinari, *Non-Hermitian spectra and Anderson localization*, J. Phys. A: Gen. Theor. 42 (2009) 265204
- [11] L.G. Molinari, G. Lacagnina, *Counting the exponents of single transfer matrices*, arXiv:1102.1641 [math-ph]
- [12] P. Lloyd, *Exactly solvable model of electronic states in a three-dimensional disordered hamiltonian: non-existence of localized states*, J. Phys. C, 2:1717-1725 (1969)
- [13] D.J. Thouless, *A relation between the density of states and range of localization for one dimensional random system*, J. Phys. C, 5:77-88 (1972)

- [14] J. Lacroix, *Computations of the sum of positive Lyapunov exponents for the Lloyd model in a strip*, in Lyapunov Exponents, Lect. Notes in Mathematics 1186, Springer-Verlag (1984)
- [15] G. Roati, C. D'Errico, L. Fallani, M. Fattori, C. Fort, M. Zaccanti, G. Modugno, M. Modugno & M. Inguscio, *Anderson localization of a non-interacting Bose-Einstein condensate*, Nature 453, 895-898 (2008)
- [16] J. Billy, V. Josse, Z. Zuo, A. Bernard, B. Hambrecht, P. Lugan, D. Clément, L. Sanchez-Palencia, P. Bouyer & A. Aspect, *Direct observation of Anderson localization of matter waves in a controlled disorder*, Nature 453, 891-894 (2008)
- [17] M. A. Paalanen, T. F. Rosenbaum, G. A. Thomas, and R. N. Bhatt, *Stress Tuning of the Metal-Insulator Transition at Millikelvin Temperatures*, Phys. Rev. Lett. 48, 1284-1287 (1982)
- [18] R. E. Borland, *The Nature of the Electronic States in Disordered One-Dimensional Systems*, Proc. R. Soc. Lond. A (1963) 274, 529-545