



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO  
FACOLTÀ DI SCIENZE MATEMATICHE,  
FISICHE E NATURALI

CORSO DI LAUREA IN FISICA

ELABORATO FINALE

---

**Localizzazione di Anderson e  
prodotto di matrici random**

---

*Relatore:*  
Prof. Luca MOLINARI

PACS:  
71.23.An, 02.10.Yn

Simone SALA  
Matr. 757394

Anno Accademico 2011-2012

# Indice

<b>1</b>	<b>Introduzione</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Definire la localizzazione di Anderson</b>	<b>10</b>
	Inverse Participation Number . . . . .	10
	Definizione Formale . . . . .	11
	Esponenti di Lyapunov . . . . .	12
<b>3</b>	<b>Localizzazione e prodotto di matrici random</b>	<b>12</b>
	Il modello di Anderson . . . . .	12
	Matrice di trasferimento . . . . .	17
	Teoremi di Furstenberg e Oseledec . . . . .	18
	Localizzazione nel modello unidimensionale . . . . .	21
	Formula di Thouless . . . . .	22
<b>4</b>	<b>Prodotto esterno in <math>\mathbb{R}^n</math></b>	<b>25</b>
<b>5</b>	<b>Algoritmi per il calcolo dello spettro di Lyapunov</b>	<b>28</b>
	Matrice di trasferimento . . . . .	28
	Formula di Thouless . . . . .	30
<b>6</b>	<b>Modello di Lloyd</b>	<b>31</b>
	Soluzione analitica . . . . .	31
	Verifica numerica . . . . .	35
<b>7</b>	<b>Applicazione al modello di Anderson</b>	<b>41</b>
	1D . . . . .	41
	2D . . . . .	45
	3D . . . . .	52
	<b>Appendice</b>	<b>55</b>

# 1 Introduzione

La localizzazione di Anderson, dal nome del fisico P.W. Anderson, fu introdotta per la prima volta in un articolo del 1958 [1] intitolato *Absence of Diffusion in Certain Random Lattices*, nel quale viene proposto il seguente modello per il moto di una particella vincolata su reticolo

$$i\hbar\dot{a}_j = E_j a_j + \sum_{k \neq j} V_{jk} a_k$$

dove la derivata temporale dell' ampiezza di probabilità al j-esimo sito dipende dall'energia di sito e a un potenziale di *hopping* a primi vicini. Quest'ultimo è considerato una random variabile con una certa distribuzione, per modellizzare la presenza di impurità nel reticolo cristallino. Anderson conclude che al di sopra di un certo disordine critico e per basse temperature non c'è trasporto e le autofunzioni possono risultare *localizzate* esponenzialmente in regioni finite dello spazio secondo una lunghezza caratteristica  $\xi$ .

$$|\psi(\mathbf{x})| \leq e^{-\frac{1}{\xi}|\mathbf{x}-\mathbf{x}_0|} \quad (1)$$

Fisicamente un sistema che può essere descritto da questo modello è ad esempio un semiconduttore estrinseco, e per questo motivo gran parte dei risultati sperimentali che mettono in evidenza la presenza di fenomeni di localizzazione fa riferimento alle proprietà di questo tipo di materiali: lo studio della transizione metallo-isolante e l'effetto hall quantistico.

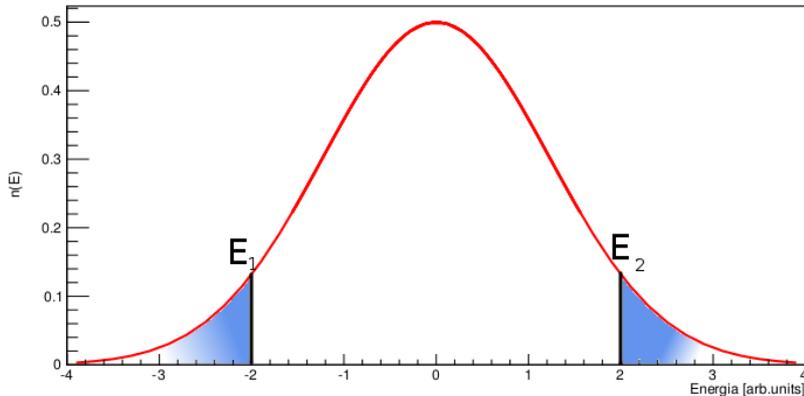


Figura 1: Se la funzione rappresenta la densità di stati  $n(E)$  in una certa banda di energia, in un solido disordinato gli stati estesi al centro della banda siano separati da un certo valore critico di energia da quelli localizzati agli estremi.

La ragione per cui la localizzazione di Anderson risulti rilevante per descrivere la conduzione elettrica nei solidi cristallini, può essere compresa analizzando la densità degli stati [2], che ha qualitativamente la struttura mostrata in fig.1. Studi successivi al primo articolo di Anderson [2] mostrarono che in presenza di disordine gli stati estesi, che possono effettivamente contribuire alla conduzione, sono collocati solo al centro della banda di energia, mentre agli estremi della

stessa si trovano soltanto stati localizzati. Il valori di energia che separano le tre regioni ( $E_1$   $E_2$  nell'immagine) sono detti *mobility edges*, perciò si può dire che la transizione metallo-isolante avviene quando l'energia dell'ultimo stato elettronico occupato (energia di Fermi  $E_F$ ) si trova nell'intorno di un punto critico del tipo  $E_1, E_2$ . Va sottolineato che tale transizione risulta osservabile solo a bassissime temperature, in quanto per  $K_b T \sim \text{meV}$  i meccanismi di eccitazione termica sono dominanti [2].

$$\sigma \sim \frac{q_e^2 \tau N_c}{m_e V}$$

$$N_c \sim e^{-\Delta E/2K_b T} T^{3/2}$$

La conducibilità termica è proporzionale alla densità di elettroni in banda di conduzione  $N_c$ , il cui andamento nel modello a elettroni liberi è governato da un fattore di Boltzmann  $e^{-\beta \Delta E}$  che tiene conto del gap in energia tra i livelli di conduzione e di valenza.

Risultati più precisi furono ottenuti successivamente, a partire da un articolo di Abrahams e collaboratori tra cui lo stesso Anderson [3] nel quale il problema viene affrontato con un approccio diverso basato sulla teoria dello scaling, assumendo l'ipotesi che nei pressi del punto critico e nel limite termodinamico di sample infinitamente esteso esista una sola grandezza rilevante per di descrivere l'andamento della conducibilità, o piuttosto della conduttività macroscopica, che è la vera grandezza sperimentalmente accessibile. Se si considera un cubo  $d$ -dimensionale di lato  $L$  e volume  $L^d$  e la sua conduttanza  $g(L)$ , si può introdurre la seguente quantità, che si *assume* dipendere solo da  $g(L)$  e non del particolare sistema considerato o di  $L$  separatamente.

$$\beta = \frac{\partial \ln g}{\partial \ln L} = \beta(g)$$

L'andamento qualitativo di questa funzione fu ottenuto interpolando il comportamento agli estremi sotto l'ipotesi di continuità della funzione  $\beta(g)$ , ad esempio i tre valori limite per alti  $g$  si ottengono pensando semplicemente alla relazione di Ohm  $R = (L/A)\rho$  tenendo conto che la sezione trasversale in  $d$  dimensioni varia come  $A \sim L^{d-1}$ , perciò ci si aspetta  $g \sim L^{d-2}$ , da cui si può comprendere intuitivamente perché  $d=2$  sia un valore critico.

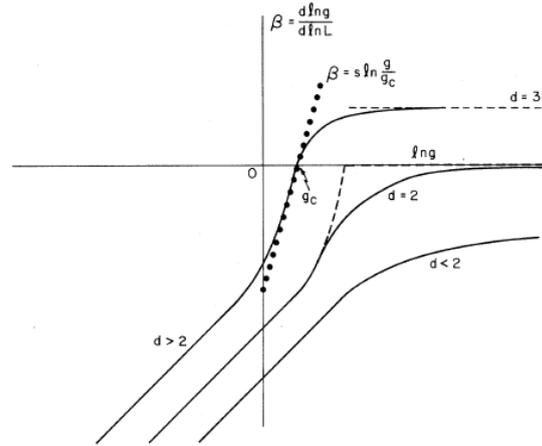


Figura 2: Andamento della funzione  $\beta(g)$  come ricavato in [3], solo in dimensione  $d = 3$  si può osservare una transizione tra il regime isolante ( $\beta < 0$ ) e metallico.

Secondo questa trattazione la transizione metallo-isolante avviene quando  $\beta = 0$ , perciò è evidente che il fenomeno può avvenire soltanto in tre dimensioni, mentre a dimensionalità inferiore si presenta solo il regime di isolante.

Un'altro aspetto importante di questo tipo di analisi è la possibilità di prevedere il comportamento delle grandezze fisiche nell'intorno del punto critico  $E_c = E_1, E_2$ , formulando leggi del tipo

$$\sigma_{dc} \sim (E - E_c)^\nu$$

$$\lambda \sim (E_c - E)^{-\nu}$$

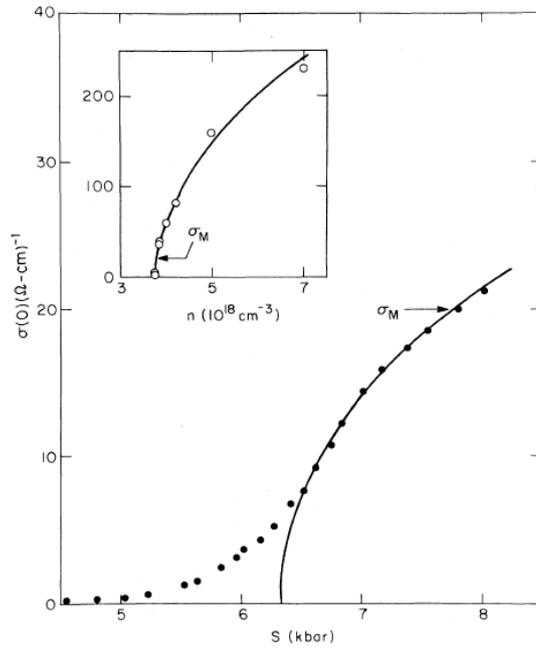


Figura 3: Conducibilità elettrica a bassa temperatura in funzione della pressione  $S$  applicata al campione, l'energia di Fermi è legata alla densità  $\rho$  dalla relazione  $E_F = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2 \rho)^{2/3}$ , perciò questa tecnica permette di esplorare sperimentalmente il comportamento del campione al variare di  $E_F$

Per la conducibilità elettrica e per la lunghezza di localizzazione rispettivamente, il cui comportamento è stato studiato in diversi esperimenti, i quali suggeriscono che diversi materiali ricadano in due classi distinte:  $\nu = \frac{1}{2}$  (Si:P) oppure  $\nu = 1$  (GaAs). In fig.3 è mostrato il risultato ottenuto da Paalanen nel 1982 [4], sottoponendo campioni di Si:P a uno stress meccanico esterno, operazione che ha effetto di spostare l'energia di fermi variando la densità di elettroni.

L'effetto Hall *quantistico* differisce in maniera significativa dal suo analogo classico, il quale si osserva in una lastra di materiale conduttore percorsa da una corrente  $I$ , generata da un campo elettrico  $\mathbf{E}$  costante, in una regione in cui è presente un campo magnetico uniforme  $\mathbf{B}$  orientato in direzione perpendicolare ad  $\mathbf{E}$ . La forza di Lorentz subita dalle cariche in moto produce un'eccesso di carica su uno dei bordi del conduttore determinando ai suoi capi una differenza di potenziale in direzione trasversa alla corrente, detta potenziale Hall.

$$V_H = \frac{I|\mathbf{B}|}{n_e q_e d}$$

Dove  $n_e$  è la densità di portatori di carica e  $d$  lo spessore della lastra come indicato in fig.4. Interpretando il prodotto  $n_e d$  come la densità bidimensionale di elettroni nella lastra  $n_e(2D) = dn_e := n_e$ , si definisce la resistenza Hall come

$$R_H = \frac{|\mathbf{B}|}{n_e q_e}$$

Classicamente quindi la resistenza Hall è lineare nel campo magnetico esterno.

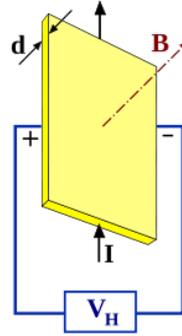


Figura 4: Effetto hall classico

Per lo studio dell'effetto hall quantistico si utilizzano invece transistor MosFet o altre strutture più complesse (*GaAs heterostructures*), in cui sia possibile realizzare un *gas bidimensionale* di elettroni, vale a dire confinare gli elettroni di conduzione nell'intorno di una superficie; L'effetto fu scoperto sperimentalmente da Klaus Von Klitzing [5]; esso consiste nella quantizzazione della resistenza hall al variare del campo magnetico in valori

$$R_H = \frac{h}{e^2 \nu} \quad (2)$$

con  $\nu$  intero, e in un andamento della resistenza longitudinale caratterizzato da picchi nelle regioni di transizione tra i plateau di  $R_H$ , del tipo mostrato in fig.6. Per giustificare questi risultati occorre fare riferimento alla quantizzazione del moto di elettroni in presenza di un campo magnetico esterno nei cosiddetti *livelli di Landau*, le cui proprietà fondamentali si possono ricavare agevolmente se si trascurano i gradi di libertà di spin [6, 7] considerando l'hamiltoniana di singola particella in campo magnetico esterno.

$$H = \frac{1}{2m_e} (\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{q}))^2 \quad (3)$$

Sia  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ , e si scelga il gauge di Landau per il potenziale vettore  $\mathbf{A} = B(-y, 0, 0)$ , allora è immediato che l'hamiltoniana non dipenda esplicitamente dalle coordinate  $x$  e  $z$ , perciò

$$\begin{aligned} [H, \mathbf{p}_x] &= 0 \\ [H, \mathbf{p}_z] &= 0 \end{aligned}$$

Si possono quindi cercare le soluzioni tra gli autostati simultanei di  $H, \mathbf{p}_x, \mathbf{p}_z$ , nella forma  $\psi(\mathbf{x}) = e^{i(k_x x + k_z z)} \phi(y)$ . Con questo ansatz si ottiene che  $H$  può essere riscritta a meno di una costante additiva come l'hamiltoniana di un oscillatore armonico unidimensionale nella coordinata  $y$ , traslata di una costante  $y_0$  e di frequenza  $\omega$

$$\begin{aligned} H &= \frac{p_y^2}{2m_e} + \frac{m_e \omega^2}{2} (y - y_0)^2 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e} \\ y_0 &= \frac{\hbar c k_x}{eB} \quad \omega = \frac{eB}{m_e c} \end{aligned}$$

i cui livelli energetici sono semplicemente  $\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ , ma la costante  $y_0$  può variare liberamente introducendo una degenerazione. Se si assume che il moto nella direzione  $x$  sia sottoposto a condizioni al contorno periodiche su una lunghezza  $L$ , allora  $k_x = \frac{2\pi}{L}m$ , con  $m \in \mathbb{Z}$ , ma la definizione di  $y_0$  impone un vincolo ulteriore se la dimensione del sistema è finita anche in direzione  $y$ , in quando il centro dell'orbita dovrà necessariamente trovarsi al suo interno, ossia

$$\begin{aligned} y_0 &\leq L \\ \frac{\hbar c k_x}{eB} &\leq L \\ m &\leq \frac{L^2 eB}{\hbar c} \end{aligned} \quad (4)$$

Cioè l'intero  $m$  può assumere tutti i valori minori di  $\frac{L^2 eB}{\hbar c}$ , da cui si osserva che la degenerazione dei livelli di Landau aumenta linearmente con il campo magnetico, perciò aumentando questa quantità si esplora un regime in cui via via meno livelli risultano occupati. Tuttavia in un sistema reale per effetto delle impurità la degenerazione viene parzialmente rimossa e i livelli di Landau si allargano in una serie di picchi intorno ai valori quantizzati in unità  $\hbar\omega$ , come mostrato in fig.7. Senza entrare nei dettagli, si può dimostrare [7] che ogni livello di Landau contribuisce alla conducibilità totale con un *quanto*  $G_n = \frac{e^2}{h}$ , sommando su tutti i livelli occupati e invertendo, si ricava che la resistenza è in effetti quantizzata come in (2).

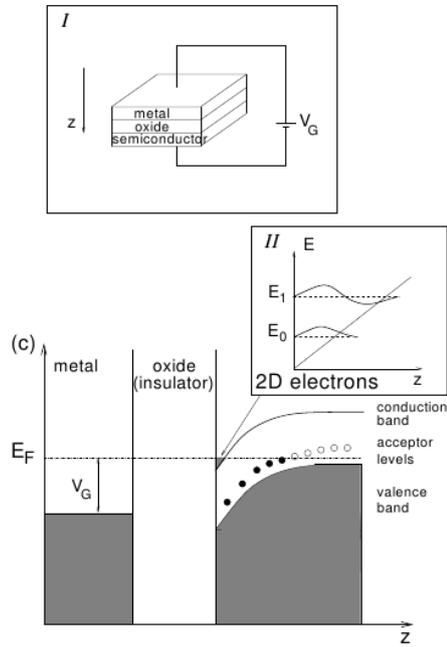


Figura 5: Rappresentazione schematica di come sia possibile confinare gli elettroni in banda di conduzione su una regione quasi-2D dello spazio variando la tensione di controllo di un MOSFET. Al variare di  $V_g$  le bande si deformano, e oltre un certo valore è possibile portare il livello di conduzione al di sotto dell'energia di Fermi, in corrispondenza dell'interfaccia semiconduttore-isolante.

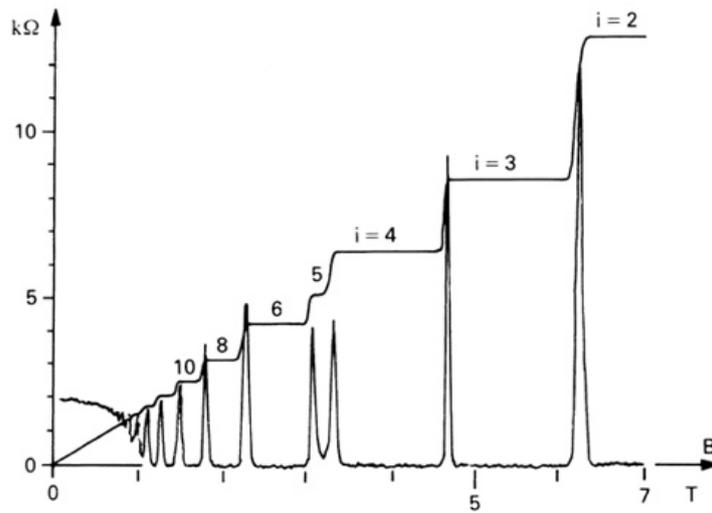


Figura 6: Andamento qualitativo della resistenza Hall e longitudinale in funzione del campo magnetico esterno

La localizzazione di Anderson permette di spiegare la presenza dei plateau a resistenza costante al crescere di  $|\mathbf{B}|$ : se si assume che solo gli stati in una regione piuttosto ristretta al centro dei livelli di Landau, distanti  $\Delta E = \hbar\omega$  possono contribuire alla conduzione elettrica, è chiaro allora che per tutto l'intervallo di valori di  $B$  tali per cui

$$n\hbar\omega \leq E_F(B) \leq (n+1)\hbar\omega$$

cioè l'energia di Fermi si trova approssimativamente tra i due picchi di densità di stati, allora non si osserverà alcuna variazione di resistività in quanto gli stati che vengono via via occupati ( o lasciati vacanti ) non contribuiscono alla conduzione elettrica.

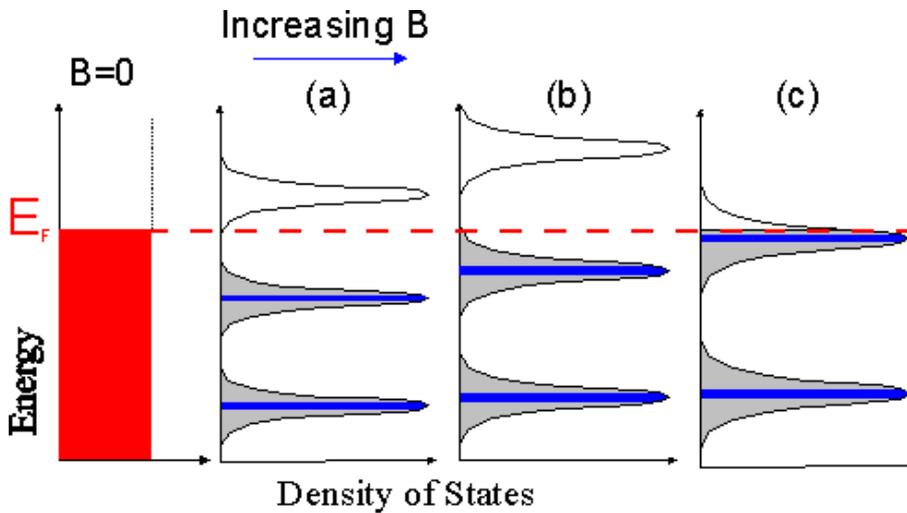


Figura 7: I livelli di Landau risultano allargati in un sistema non ideale, secondo la (4) la degenerazione aumenta linearmente in  $B$ , perciò all'aumentare del campo magnetico via via meno livelli vengono occupati. In analogia a fig.1 solo gli stati al centro di banda, in blu, sono estesi possono condurre corrente.

Un'area di ricerca più recente [8] riguarda la localizzazione di onde di materia nei condensati di Bose-Einstein: per mezzo di trappole ottiche è possibile confinare, a bassissima temperatura, alcuni atomi in un potenziale ottico *quasi-periodico* di geometria monodimensionale, realizzato facendo interferire radiazione di due frequenze non multiple fra loro. Per questo tipo di potenziali, contrariamente al caso precedentemente analizzato è possibile una transizione tra regime di stati localizzati ed estesi anche in 1D, fig.8 la presenza di localizzazione viene stimata studiando l'evoluzione temporale della densità spaziale di atomi del condensato.

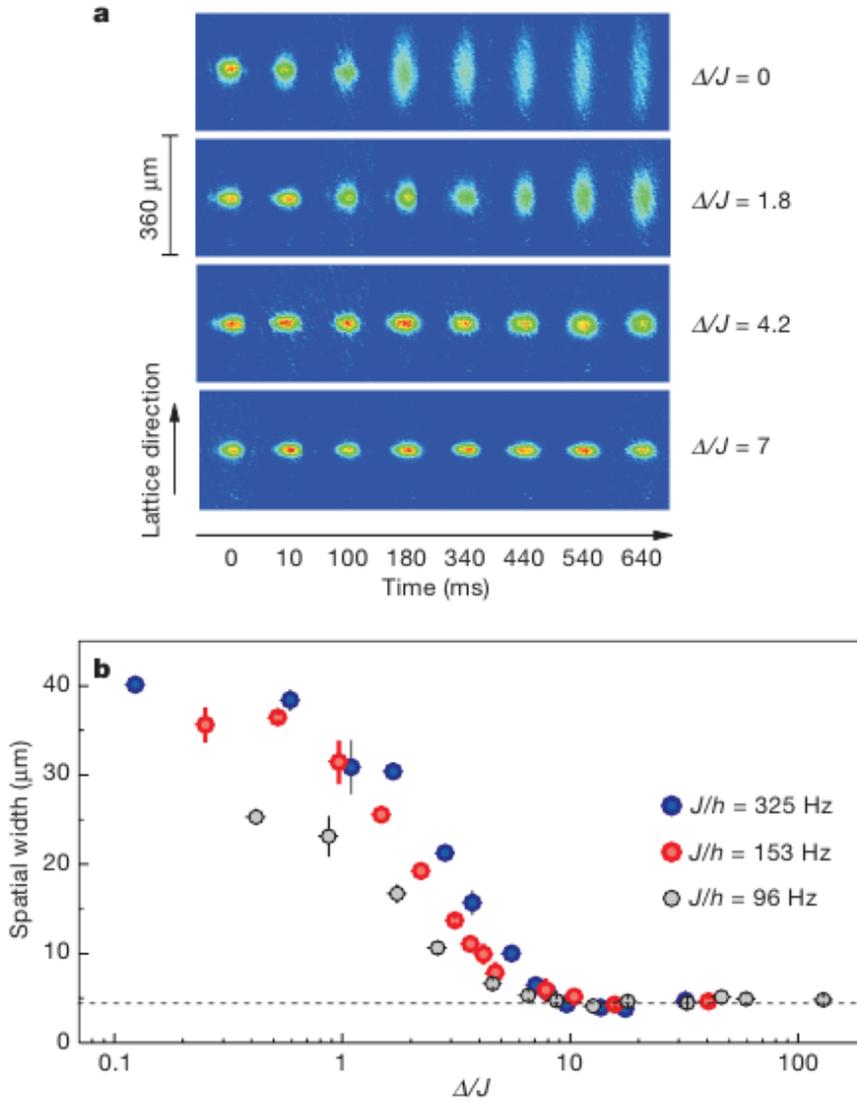


Figura 8: Nella prima immagine è mostrato come evolve la densità una volta rimosso il potenziale di confinamento: in assenza di disordine ( $\Delta/J = 0$ ) il condensato si espande spazialmente, via via che il disordine aumenta la velocità di espansione diminuisce fino ad annullarsi oltre un certo valore critico di *disordine*. Ciò è chiaramente visibile nel grafico sottostante che mostra l'andamento della deviazione standard della distribuzione spaziale dopo un tempo di evoluzione di 750 ms in funzione del disordine. Oltre un certo valore i dati sperimentali tendono asintoticamente verso la retta tratteggiata che indica la dimensione iniziale per  $t=0$ .

## 2 Definire la localizzazione di Anderson

### Inverse Participation Number

L'equazione (1) definisce uno stato localizzato soltanto in base all'andamento dell'autofunzione per  $\mathbf{x} \gg \mathbf{x}_0$  e non tiene conto dell'evoluzione temporale, nè caratterizza la capacità di uno stato localizzato di contribuire al trasporto di elettroni.

Un criterio spesso utilizzato [9], di più facile applicabilità a livello numerico rispetto a (1), sfrutta la quantità

$$P^{-1} = \sum_{\mathbf{x}} |\psi(\mathbf{x})|^4, \quad \|\psi\| = 1 \quad (5)$$

detta *inverse participation number*, che rappresenta una stima della regione di spazio in cui l'ampiezza della funzione d'onda differisce fortemente da zero, ossia una sorta di *diametro*  $R$ , attraverso  $R = P^{1/d}$ , in  $d$  dimensioni. Ad esempio per un'onda piana confinata in una regione quadrata di volume  $L^d$

$$\psi(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}$$

evidentemente si ha  $P = L^d = V$ , che diverge nel limite di volume infinito, perciò si potrebbe assumere questo comportamento come caratterizzante per gli stati estesi. Si può mostrare inoltre che esiste un legame tra  $P^{-1}$  e la *probabilità di ritorno* media di uno stato; in generale la probabilità di transizione tra due siti  $P_{\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}'}$  si può esprimere in termini dell'operatore evoluzione temporale  $U(t) = e^{-iHt}$  come segue

$$P_{\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}'} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T |\langle \mathbf{r} | U(t) | \mathbf{r}' \rangle|^2 dt \quad (6)$$

da cui si desume immediatamente la probabilità di ritorno  $P_{\mathbf{r}} = P_{\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}}$ . Se si sceglie una base di autostati dell'hamiltoniana  $H|E_\alpha\rangle = E_\alpha|E_\alpha\rangle$ , e si introducono due decomposizioni dell'identità nella (6) si ottiene

$$P_{\mathbf{r}} = \sum_{\alpha, \beta} |\langle \mathbf{r} | E_\alpha \rangle|^2 |\langle \mathbf{r} | E_\beta \rangle|^2 \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T e^{-it(E_\alpha - E_\beta)} dt$$

svolvendo esplicitamente l'integrale si ricava la seguente uguaglianza

$$P_{\mathbf{r}} = \sum_{\alpha, \beta} |\langle \mathbf{r} | E_\alpha \rangle|^2 |\langle \mathbf{r} | E_\beta \rangle|^2 \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{e^{-iT(E_\alpha - E_\beta)} - 1}{-iT(E_\alpha - E_\beta)} = \sum_{\alpha, \beta} |\langle \mathbf{r} | E_\alpha \rangle|^2 |\langle \mathbf{r} | E_\beta \rangle|^2 \delta_{\alpha, \beta}$$

Identificando  $\langle \mathbf{r} | E_\alpha \rangle$  con l'autofunzione di  $|E_\alpha\rangle$  in rappresentazione delle coordinate  $\psi_\alpha(\mathbf{r})$  e facendo agire la  $\delta_{\alpha, \beta}$

$$P_{\mathbf{r}} = \sum_{\alpha} |\psi_\alpha(\mathbf{r})|^4 \quad (7)$$

Definendo l' *inverse participation number* medio a partire da quello calcolato sul singolo autostato  $\langle P^{-1} \rangle = \sum_{\alpha} P_{\alpha}^{-1}$  e sommando la (7) su tutti i siti del reticolo si ottiene

$$\langle P^{-1} \rangle = \langle P_{\mathbf{r}} \rangle \quad (8)$$

Che stabilisce un legame tra la probabilità di ritorno e  $P^{-1}$ : per uno stato esteso, la probabilità di ritorno media tenderà a zero, perciò  $P \rightarrow \infty$ , in accordo con l'interpretazione più intuitiva  $R = P^{1/d}$ .

Un altro modo per definire la localizzazione consiste nel valutare la risposta delle autofunzioni a un cambiamento di condizioni al contorno, in quanto è ragionevole che uno stato localizzato debba risentirne in misura minore rispetto ad uno esteso; inoltre Thouless ha ricavato un'espressione che mette direttamente in relazione lo shift in energia  $\delta E$  in seguito ad cambiamento di condizioni al contorno da periodiche ad antiperiodiche [2] con la conducibilità elettrica associata allo stato

$$\sigma L^{d-2} = \frac{e^2}{h} f \frac{\delta E}{\Delta E}$$

Dove  $f$  è un fattore numerico dipendente dal modello usato, e  $\Delta E$  è la separazione media degli autovalori dell'energia.

## Definizione formale

Si possono inoltre fornire alcune definizioni più formali [10, 11]: se l'hamiltoniana  $H$  è un operatore autoaggiunto su un certo spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$ , quest'ultimo può essere decomposto in modo unico in sottospazi invarianti

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_p \oplus \mathcal{H}_{sc} \oplus \mathcal{H}_{ac} \quad (9)$$

corrispondenti rispettivamente allo spettro puntuale, singolare e assolutamente continuo di  $H$ . Gli stati di  $\mathcal{H}_p$ , intuitivamente, coincidono con gli stati *normalizzabili* della meccanica quantistica, e sono associati allo spettro discreto di  $H$  cioè agli autovalori secondo la definizione usuale; più precisamente vale il seguente teorema

**Teorema 1 (RAGE).** *Sia  $H$  operatore autoaggiunto su uno spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$*

$$\begin{aligned} \psi \in \mathcal{H}_p &\iff \lim_{R \rightarrow \infty} \sup_{t \in \mathbb{R}} \|\chi(|\mathbf{x}| \geq R) e^{-itH} \psi\|^2 = 0 \\ \psi \in \mathcal{H}_{sc} \oplus \mathcal{H}_{ac} &\iff \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T \|\chi(|\mathbf{x}| \leq R) e^{-itH} \psi\|^2 dt = 0 \quad \forall R \end{aligned}$$

Dove  $\chi(|\mathbf{x}| \geq R)$  è la funzione caratteristica della bolla di raggio  $R$  nell'origine. Il significato della prima affermazione è molto semplice e in accordo con l'intuizione: uno stato  $\psi \in \mathcal{H}_p$  non può abbandonare una certa regione finita dello spazio anche se sottoposto all'evoluzione temporale indotta da  $H$ .

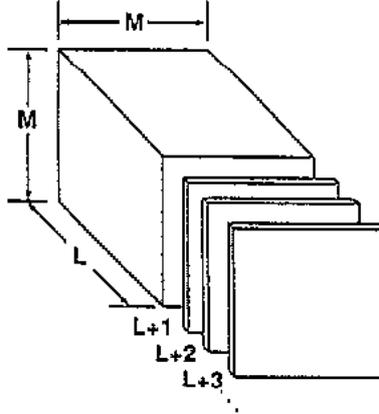


Figura 9: Rappresentazione schematica di un sistema *quasi-1D*, di dimensione  $L \times M \times M$ : esso è caratterizzato da una dimensione privilegiata  $L \geq M$ , e i sottosistemi di dimensione  $M \times M$  hanno un'interazione a primi vicini.

## Esponenti di Lyapunov

Per sistemi unidimensionali o *quasi-1D* la lunghezza di localizzazione esponenziale  $\lambda$  della (1) può essere anche messa in relazione con i cosiddetti *esponenti di Lyapunov*, legati alle proprietà del prodotto di matrici random.

## 3 Localizzazione e prodotto di matrici random

### Il modello di Anderson

Le proprietà del prodotto di matrici random risultano rilevanti per lo studio del *modello di Anderson*, detto anche approssimazione di *tight binding*, usato per descrivere il moto di un elettrone su di un reticolo cristallino in presenza di impurità. Il disordine viene riprodotto aggiungendo al termine cinetico dell'hamiltoniana  $H$  un potenziale casuale che rispetti determinate proprietà. In generale  $H = H(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N)$  è una funzione a  $N$ -corpi e tiene conto sia della repulsione elettrone-elettrone sia del potenziale esterno generato dagli ioni del reticolo, tuttavia in questo caso si fanno alcune ipotesi semplificative

- Si assumono gli atomi del reticolo cristallino collocati in posizioni fissate dello spazio secondo una certa geometria
- Nell'approssimazione a *elettroni indipendenti* la repulsione tra gli elettroni viene trascurata.

la prima va sotto il nome di approssimazione *adiabatica*, e si introduce perché essendo la massa degli elettroni di diversi ordini di grandezza inferiore rispetto

ai nuclei, ci si aspetta che il moto di questi ultimi avvenga scale di tempi molto più lunghe, perciò è ragionevole considerare il reticolo cristallino statico.

Il problema a N corpi si riduce quindi ad un hamiltoniana del tipo

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 + V(\mathbf{x}) \quad (10)$$

Dove  $V(\mathbf{x})$  è un certo *potenziale random*, che nel modello di Anderson è un set di random variabili <sup>1</sup> *indipendenti* e *uniformemente distribuite*, convenzionalmente entro un certo intervallo  $[-W/2, W/2] \subset \mathbb{R}$ , in modo che il parametro W fornisca una misura del grado di disordine.

La presenza di  $V(\mathbf{x})$  rende l'hamiltoniana stessa una random variabile, e il sistema da essa descritto un ensemble statistico, per il quale le quantità fisicamente rilevanti sono soltanto i valori medi su tutti i microstati accessibili, vale a dire in questo caso su tutte le possibili realizzazioni del disordine.

Formalmente si definisce lo spazio di probabilità  $(\Omega, F, \mu(\omega))$ , indicando con  $\Omega$  l'insieme di tutte le realizzazioni possibili del disordine  $\omega \in \Omega$ , sul quale siano definite una  $\sigma$ -algebra  $F$  e una misura di probabilità  $\mu(\omega)$  definita su  $(\Omega, F)$  a valori reali. Fisicamente considerare una singola istanza del disordine non significa altro che studiare i risultati sperimentali su un singolo campione, mentre studiare il comportamento medio di un sistema significa fissare una distribuzione di probabilità per  $V(\mathbf{x})$ , caratterizzata da determinati parametri sperimentalmente accessibili (e.g. la concentrazione di impurità), e calcolare valori medi definiti semplicemente come l'integrale rispetto a tale misura di probabilità

$$\mathbb{E}(f(\omega)) = \int f(\omega) d\mu(\omega)$$

In questo contesto è possibile dimostrare [12] che se si assumono opportune ipotesi, nel limite termodinamico questo tipo di sistemi mostra proprietà di *self-averaging*, cioè per il volume  $V \rightarrow \infty$ , o il numero di particelle  $N \rightarrow \infty$ , certe grandezze fisiche dipendenti dalla realizzazione  $\omega \in \Omega$  tendono in probabilità ad un limite indipendente da  $\omega$  cioè a una quantità non-random.

$$\lim_{V \rightarrow \infty} f(\omega) = f \quad (11)$$

La prima proprietà da richiedere su  $V(\mathbf{x})$  perché valga la (11) è l'isotropia spaziale: su scala sufficientemente ampia il sistema pur in presenza di disordine deve essere *mediamente* invariante per traslazioni, il che si può formalizzare richiedendo che i valori di aspettazione del tipo

---

<sup>1</sup>Una per ogni sito del reticolo, questo sarà più chiaro quando si passerà esplicitamente al caso discreto.

$$\mathbb{E}(V(\mathbf{x}_1)V(\mathbf{x}_2)\cdots V(\mathbf{x}_n)) \quad \forall n$$

siano invarianti per traslazioni di tutti gli  $\mathbf{x}_i$  per uno stesso vettore  $\mathbf{a}$ .

$$\mathbb{E}(V(\mathbf{x}_1)V(\mathbf{x}_2)\cdots V(\mathbf{x}_n)) = \mathbb{E}(V(\mathbf{x}_1 + \mathbf{a})V(\mathbf{x}_2 + \mathbf{a})\cdots V(\mathbf{x}_n + \mathbf{a})) \quad \forall n, \mathbf{a} \quad (12)$$

In secondo luogo si richiede che non ci sia correlazione statistica tra punti infinitamente distanti nello spazio, ossia che i valori medi

$$\mathbb{E}(V(\mathbf{x}_1 + \mathbf{a})\cdots V(\mathbf{x}_n + \mathbf{a})V(\mathbf{x}'_1)\cdots V(\mathbf{x}'_m))$$

si possano fattorizzare per  $|\mathbf{a}| \rightarrow \infty$

$$\mathbb{E}(V(\mathbf{x}_1 + \mathbf{a})\cdots V(\mathbf{x}_n + \mathbf{a})) \cdot \mathbb{E}(V(\mathbf{x}'_1)\cdots V(\mathbf{x}'_m))$$

e usando l'invarianza per traslazioni enunciata in (12)

$$\mathbb{E}(V(\mathbf{x}_1)\cdots V(\mathbf{x}_n)) \cdot \mathbb{E}(V(\mathbf{x}'_1)\cdots V(\mathbf{x}'_m)) \quad (13)$$

Queste richieste sono banalmente verificate per il modello di Anderson, in quanto le  $V(\mathbf{x})$  sono random variabili indipendenti  $\forall \mathbf{x}$ , tuttavia sono rilevanti in quanto assieme a quella che segue, costituiscono sostanzialmente la definizione di *ergodicità* della misura di probabilità, ipotesi che sarà necessaria in seguito per enunciare i teoremi di Furstenberg e di Oseledec.

Se si introduce su  $\Omega$ , un operatore di *shift* così definito [11, 12]

$$\hat{\mathbf{T}}_{\mathbf{a}}V(\mathbf{x}) = V(\mathbf{x} + \mathbf{a})$$

e deotando con  $\Omega' \subset \Omega$  il sottoinsieme invariante sotto l'azione di  $\hat{\mathbf{T}}_{\mathbf{a}}$

$$\hat{\mathbf{T}}_{\mathbf{a}}\omega \in \Omega' \quad \forall \omega \in \Omega' \quad \forall \mathbf{a} \quad (14)$$

Si vuole calcolare la *probabilità*  $p$  del sottoinsieme  $\Omega'$ , cioè intuitivamente quale frazione di  $\Omega$  sia costituita da  $\Omega'$

$$p(\Omega' \subset \Omega) = \frac{\mu(\Omega')}{\mu(\Omega)}$$

La misura dello spazio di probabilità si assume unitaria, appunto perché valga questa identificazione diretta con una probabilità, perciò siccome  $\mu(\Omega) = 1$

$$p(\Omega' \subset \Omega) = \mu(\Omega') = \int \chi_{\Omega'}(\omega) d\mu(\omega)$$

Dalla proprietà di invarianza che definisce  $\Omega'$  segue subito che

$$p(\Omega') = p(\Omega') \cap p(\hat{\mathbf{T}}_{\mathbf{a}}\Omega') \quad \forall \mathbf{a} \quad (15)$$

Data l'arbitrarietà di  $\mathbf{a}$  e l'assenza di correlazioni per  $|\mathbf{a}|$  sufficientemente grande, la probabilità dell'intersezione sarà data dal prodotto delle probabilità dei

due sottoinsiemi, ma per la proprietà di isotropia spaziale del sistema queste risultano uguali, perciò

$$p = p^2$$

da cui segue ovviamente che  $p$  possa essere soltanto 0 o 1, ossia *in un sistema infinitamente esteso*, come è importante evidenziare dal momento che questa richiesta è necessaria ogniqualvolta si sia fatto ricorso all'arbitrarietà di  $\mathbf{a}$  nelle dimostrazioni e definizioni precedenti,  $\Omega'$  coincide con  $\Omega$ , a meno di insiemi di misura nulla, il che in questo caso significa che l'insieme  $\Omega'$  delle configurazioni *tipiche* ha misura, e quindi probabilità unitaria.

La densità di stati specifica  $\rho_v(E)$  è una delle quantità che presenta proprietà di self-averaging [12], ed è così definita

$$\rho_v(E) = V^{-1} \text{Tr} \delta(E - H) \quad (16)$$

vale a dire, in una base di autostati di  $H$

$$\rho_v(E) = V^{-1} \sum_{\alpha} \delta(E - E_{\alpha})$$

Ma può anche essere calcolata a partire dalla funzione di Green

$$G(E - i\eta) = \frac{1}{(E - H) - i\eta}$$

ricordando la formula di Sokhotski–Plemelj

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{(E - E_{\alpha}) - i\eta} = i\pi \delta(E - E_{\alpha}) + P.V. \frac{1}{E - E_{\alpha}} \quad (17)$$

e sostituendo la (17) nella (16)

$$\rho_v(E) = \frac{1}{V\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0} \text{Im}(\text{Tr} \ G(E - i\eta))$$

Il problema agli autovalori associato ad  $H$  (10)

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}) + V(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}) = \epsilon\psi(\mathbf{x}) \quad (18)$$

risulta di difficile risoluzione analitica se si cercano autofunzioni in  $L^2(\mathbb{R}^D)$ , perciò si passa ad una formulazione discreta del problema, mandando le autofunzioni e gli operatori nel rispettivo analogo definito su di un reticolo regolare, i cui punti siano indicizzati con  $n \in \mathbb{Z}^D$

$$\begin{aligned} L^2(\mathbb{R}^D) &\rightarrow \ell_2(\mathbb{Z}^D) \\ \psi(\mathbf{x}) &\rightarrow \psi(\mathbf{x}(n)) := \psi_n \\ V(\mathbf{x}) &\rightarrow V(\mathbf{x}(n)) := V_n \\ \nabla_{\mathbf{x}}^2 &\rightarrow \nabla_d^2 \end{aligned} \quad (19)$$



L'equivalente della (20) si scrive

$$\mathbb{I}_m \psi_{n-1} + (\mathbf{D} + \mathbf{V}_n) \psi_n + \mathbb{I}_m \psi_{n+1} = E \psi_n \quad n = 1, \dots, N \quad (22)$$

Dove  $\mathbf{D} + \mathbf{V}_n := \mathbf{D}_n$  è appunto la somma tra la matrice di adiacenza, indipendente dall'indice  $n$  che scorre sulla direzione longitudinale, e un potenziale random diagonale. L'hamiltoniana totale si scrive, a blocchi, come segue

$$H = \begin{pmatrix} \mathbf{D}_1 & \mathbb{I}_m & & \mathbb{I}_m \\ \mathbb{I}_m & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \mathbb{I}_m \\ \mathbb{I}_m & & \mathbb{I}_m & \mathbf{D}_N \end{pmatrix}$$

Si può verificare che agendo su di un vettore  $\psi \in \mathbb{R}^{mN}$  opportunamente costruito l'equazione  $H\psi = E\psi$  è equivalente al set di  $N$  equazioni dato dalla (22).

### Matrice di trasferimento

Il collegamento tra il problema agli autovalori e il prodotto di matrici random si trova riscrivendo la (20)<sup>2</sup> con l'ausilio di una *matrice di trasferimento*: introducendo la funzione a valori vettoriali

$$\mathbf{z}(n) = \begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix}$$

la (20) è equivalente all'equazione matriciale

$$\mathbf{z}(n+1) = \mathbf{A}_n \mathbf{z}(n) \quad (23)$$

$$\begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E - V_n & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_n(E - V_n) - \psi_{n-1} \\ \psi_n \end{pmatrix} \quad (24)$$

Data una condizione iniziale  $\mathbf{z}_0$  e fissato un valore di energia  $E$ , è possibile applicare questo procedimento in maniera iterativa per ottenere  $\mathbf{z}_n$

$$\mathbf{z}(n) = \left( \prod_{i=0}^{n-1} \mathbf{A}_i \right) \mathbf{z}(0) = \mathbf{P}_n \mathbf{z}(0) \quad (25)$$

Le  $\mathbf{A}_i$  contengono il potenziale casuale  $V_n$ , perciò sono random variabili, nel caso del modello di Anderson indipendenti e identicamente distribuite, per le quali restano nella sostanza ancora valide le considerazioni fatte in precedenza per le variabili  $V(\mathbf{x})$ .

Si consideri una sequenza di  $N$  matrici random di dimensione  $D \times D$

$$\omega_N = \mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_N$$

e il loro prodotto così definito

---

<sup>2</sup>Lo stesso può essere fatto con la (22), ma per ora si farà riferimento al caso unidimensionale.

$$\mathbf{P}_N = \prod_{i=1}^N \mathbf{A}_i \quad (26)$$

Si assuma inoltre che la distribuzione di probabilità delle  $\{\mathbf{A}_i\}$  sia ergodica nel senso discusso in precedenza e che valga la condizione

$$\mathbb{E}(\ln^+ \|\mathbf{A}\|) < \infty$$

dove  $\ln^+$  denota la parte positiva del logaritmo, e il valore di aspettazione si intende calcolato rispetto alla distribuzione di probabilità delle  $\mathbf{A}$

$$\mathbb{E}(f(\omega_N)) = \int f(\omega_N) d\mu[\omega_N] = \int f(\omega_N) \prod_{i=1}^N d\mu[\mathbf{A}_i]$$

la misura di probabilità assume questa forma fattorizzata in virtù dell' indipendenza delle  $\mathbf{A}_i$  come random-variabili.

Sotto queste ipotesi vale il seguente teorema.

## Teoremi di Furstenberg e Oseledec

**Teorema 2** (Furstenberg-Kesten [11, 14]). *Per  $\mu[\omega]$ -quasi ogni sequenza  $\omega \in \Omega$  esiste finito il seguente limite*

$$\lambda_1 = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \|\mathbf{P}_N\| \quad (27)$$

Il teorema afferma in sostanza che esiste un particolare sottoinsieme dello spazio delle sequenze  $\Omega^* \subseteq \Omega$ , di misura unitaria, all'interno del quale la norma operatoriale del prodotto di matrici random, ha per grande N un andamento del tipo

$$\|\mathbf{P}_N\| \sim e^{N\lambda_1}$$

per una certa costante  $\lambda_1$  indipendente dalla particolare realizzazione  $\omega \in \Omega^*$ . Essa prende il nome di *massimo esponente di Lyapunov*. Questo risultato garantisce in pratica una proprietà di *self-averaging* analoga a quanto discusso per la densità di stati, in quanto l'enunciato del teorema è proprio nella forma

$$\lim_{N \rightarrow \infty} f(\omega) = f$$

Alcuni casi interessanti sono stati analizzati in maggior dettaglio, ad esempio per distribuzioni che verifichino le ipotesi

$$\exists C \quad \begin{cases} \mathbf{A}_{ij} > 0 \quad \forall i, j \\ 1 \leq \frac{\max(\mathbf{A}_{ij})}{\min(\mathbf{A}_{ij})} \leq C \end{cases}$$

allora è possibile dimostrare [14] che tutti gli ingressi di matrice di  $\mathbf{P}_N$  hanno lo stesso tasso di crescita

$$\lambda_1 = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln(\mathbf{P}_N)_{ij} \quad \forall i, j$$

Il teorema 2 fornisce un risultato limitato al massimo esponente di Lyapunov. Più in generale per un prodotto di matrici random  $\mathbf{P}_N$  si può parlare di uno spettro di esponenti di Lyapunov  $\lambda_i$  legati agli autovalori della matrice

$$[\mathbf{P}_N^\dagger \mathbf{P}_N]^{\frac{1}{2}} = \mathbf{V}(\omega) \quad (28)$$

la cui importanza è chiara se si pensa ad un'applicazione alla matrice di trasferimento nel modello di Anderson, che è per costruzione un prodotto di matrici random, e per la quale gli autovalori della (28) sono evidentemente in relazione diretta con il tasso di crescita dei vettori da essa generati

$$\mathbf{P}_N \mathbf{u}_0 = \mathbf{u}_N$$

ma allora se si è interessati alla norma del vettore ottenuto facendo evolvere condizioni iniziali con la matrice di trasferimento

$$|\mathbf{u}_N|^2 = |\mathbf{P}_N \mathbf{u}_0|^2 = \langle u_0 | \mathbf{P}_N^\dagger \mathbf{P}_N | u_0 \rangle \quad (29)$$

Se il vettore di partenza ha norma unitaria ed è un autovettore di  $\mathbf{P}_N^\dagger \mathbf{P}_N$

$$\mathbf{P}_N^\dagger \mathbf{P}_N | u_0 \rangle = \eta | u_0 \rangle$$

allora

$$|\mathbf{u}_N| = \eta^{\frac{1}{2}}$$

Il seguente teorema dovuto a Oseledec formalizza alcune proprietà dello spettro di Lyapunov

**Teorema 3** (Oseledec [11, 14]). *Si consideri una sequenza  $\omega$  di matrici random  $\{\mathbf{A}_i\}$  di dimensione  $D \times D$ , tali che  $\mathbb{E}(\ln^+ \|\mathbf{A}_i\|) < \infty$ , allora per  $\mu[\omega]$ -quasi ogni  $\omega \in \Omega$  esiste il limite*

$$\lim_{N \rightarrow \infty} [\mathbf{P}_N^\dagger \mathbf{P}_N]^{1/2N} = \mathbf{V}(\omega) \quad (30)$$

la matrice  $\mathbf{V}(\omega)$  ha in generale  $D$  autovalori positivi  $e^{\lambda_i(\omega)}$ ; Inoltre se la misura di probabilità è ergodica, gli esponenti  $\lambda_1 \geq \lambda_2 \cdots \geq \lambda_D$  sono indipendenti da  $\omega$ .

L'importanza di questo enunciato è evidente, in quanto non solo garantisce l'esistenza dello spettro di Lyapunov, ma soprattutto la sua indipendenza dalla realizzazione, caratterizzandolo come proprietà globale del prodotto  $\mathbf{P}_N$ . Applicando le considerazioni che portano alla (29), e sfruttando il fatto che per costruzione  $\mathbf{V}(\omega)$  è hermitiana, si può enunciare il seguente corollario

**Corollario 1.** *Siano valide le ipotesi del teorema 3, allora esiste un set ortonormale di vettori  $\mathbf{u}_i(\omega)$  ( Base di Lyapunov ) tale che*

$$\lambda_i = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln |\mathbf{P}_N \mathbf{u}_i(\omega)| \quad (31)$$

Va sottolineato che, in virtù della (29), i vettori  $\mathbf{u}_i(\omega)$  sono gli autovettori di  $\mathbf{P}_N^\dagger \mathbf{P}_N$  e non semplicemente di  $\mathbf{P}_N$ . Inoltre è importante notare come lo spettro di Lyapunov sia indipendente dalla realizzazione, mentre non lo è la base di autovettori corrispondente, in quanto se lo spettro di  $\mathbf{V}(\omega)$  è degenere, ci saranno diverse scelte possibili per gli autovettori di base relativi agli autovalori degeneri, i quali possono dipendere dalla particolare sequenza random.

Una matrice  $\mathbf{A}$  di dimensione  $2D \times 2D$  si definisce simplettica se rispetta la seguente condizione

$$\mathbf{A}^t \boldsymbol{\Omega} \mathbf{A} = \boldsymbol{\Omega} \quad \text{con} \quad \boldsymbol{\Omega} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I}_D \\ -\mathbb{I}_D & 0 \end{pmatrix} \quad (32)$$

Si verifica immediatamente che la singola matrice di trasferimento  $\mathbf{A}_i$  come definita dalla (24) gode di questa proprietà, e la definizione (53) implica, sfruttando le proprietà della trasposizione del prodotto di matrici

$$\mathbf{P}_N^t \boldsymbol{\Omega} \mathbf{P}_N = \mathbf{A}_1^t \mathbf{A}_2^t \cdots (\mathbf{A}_N^t \boldsymbol{\Omega} \mathbf{A}_N) \cdots \mathbf{A}_1$$

Da cui applicando iterativamente la proprietà (32) a partire dai termini in parentesi, si ricava subito che anche la matrice di trasferimento a  $N$  passi è una matrice simplettica. Perciò si può enunciare il seguente teorema.

**Teorema 4** (Virster [14]). *Per una sequenza di matrici random simplettiche, indipendenti e identicamente distribuite, gli esponenti di Lyapunov del loro prodotto sono nondegeneri,*

$$\lambda_1 > \lambda_2 > \cdots > \lambda_D > 0 \quad (33)$$

e inoltre

$$\lambda_{2D-i+1} = -\lambda_i \quad (34)$$

Il legame tra le proprietà dello spettro di Lyapunov e la localizzazione di Anderson nasce dall'identificazione degli esponenti  $\lambda_i$  con l'inverso della lunghezza di localizzazione  $\xi_0$  degli autostati del sistema, definita in analogia con la (1) come

$$\xi_0^{-1} = - \lim_{|n| \rightarrow \infty} \frac{1}{|n|} \ln |\psi_n|$$

Va sottolineato che la matrice di trasferimento  $\mathbf{P}_N$ , anche se per semplicità di notazione non è indicato, dipende esplicitamente dall'energia  $E$ . Perciò di norma andando a costruire formalmente uno stato partendo dalle condizioni iniziali  $\mathbf{z}_0$  e applicando  $\mathbf{P}_N(E)$ , non è detto che il risultato sia un autostato, se non per quei particolari valori  $E_i$  che siano autovalori dell'hamiltoniana. In generale sarà soltanto vero che la soluzione avrà un andamento asintotico per grande  $N$  di tipo esponenziale controllato dagli esponenti di Lyapunov, per quanto dimostrato

con i precedenti teoremi. Queste considerazioni si possono formalizzare nella cosiddetta *Congettura di Borland* [14], che afferma

Il minimo esponente di Lyapunov  $\lambda_1$  della matrice di trasferimento  $\mathbf{P}_N(E)$  è pari all'inverso della massima lunghezza di localizzazione  $\xi_0$  degli autostati del sistema a energia  $E$ , *se esistono*.

## Localizzazione nel modello unidimensionale

Riguardo la localizzazione esponenziale delle autofunzioni nel modello di Anderson *unidimensionale* si possono citare alcuni risultati analitici che dimostrano che sotto opportune condizioni sull'operatore hamiltoniano random  $H(\omega)$  lo spettro del sistema è puramente discreto. Denotando per un operatore  $\hat{A}$  su  $\ell_2(\mathbb{Z}^D)$  con

$$\hat{A}(n, m) = \langle \delta_n | A | \delta_m \rangle$$

gli elementi di matrice, con  $\delta_k(i) = 1$  se  $k = i$  e  $\delta_k(i) = 0$  altrimenti; Si può introdurre la quantità

$$a(n, m) = \mathbb{E} \left( \sup_t |e^{-itH(\omega)}(n, m)| \right)$$

Ossia il massimo su tutti i tempi dell'elemento di matrice  $(n, m)$  dell'operatore evoluzione temporale mediato sulle realizzazioni del disordine; allora si afferma che gli stati dell'operatore  $H(\omega)$  sono *localizzati* se vale la condizione

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} |a(n, m)| < \infty \quad \text{per } m = 0, 1 \quad (35)$$

Assunto questo criterio per la localizzazione *fisica* delle autofunzioni, vale il seguente

**Teorema 5** (Kunz-Souillard [11]). *La condizione (35) implica  $\sigma_c(H(\omega)) = \emptyset$ , quasi certamente in  $\mu(\omega)$ .*

Cioè l'operatore  $H(\omega)$  per realizzazioni tipiche non ammette spettro continuo. Si può mostrare come questa condizione implichi anche il decadimento esponenziale delle autofunzioni.

**Teorema 6.** *Se, per  $m = 0, 1$ ,*

$$|a(n, m)| \leq C e^{-D|n|} \quad (36)$$

*allora  $\mu(\omega)$ -quasi certamente tutte le autofunzioni di  $H(\omega)$ ,  $\psi(n)$  soddisfano*

$$|\psi(n)| \leq C_{\omega, \epsilon} e^{-(D-\epsilon)|n|} \quad \forall \epsilon > 0$$

Se vale un vincolo di decadimento esponenziale su  $a(n, m)$  allora si può concludere lo stesso per le autofunzioni. Si dimostra che per il modello di Anderson esiste una stima del tipo (36), perciò si può enunciare il seguente teorema valido nel caso unidimensionale

**Teorema 7** (Kunz-Suillard [11]). *Se  $V_n$  sono random variabili indipendenti, con una densità di probabilità  $\mu(\omega) := f(x)$   $x \in \mathbb{R}$ , e inoltre  $f \in L^\infty$  ed è a supporto compatto, allora l'operatore*

$$H(\omega)\psi_n = \psi_{n+1} + \psi_{n-1} + V_n\psi_n \quad (37)$$

*ha per  $\mu(\omega)$ -quasi ogni realizzazione spettro puntuale e le autofunzioni di  $H(\omega)$  sono esponenzialmente localizzate.*

Il teorema conferma che per un modello unidimensionale ( di lunghezza infinita ) sotto opportune ipotesi sulla natura del disordine, soddisfatte dal modello di Anderson in quanto le  $V_n$  sono variabili random uniformemente distribuite su un intervallo chiuso, tutti gli stati sono localizzati nel senso della definizione (1), in accordo con i risultati citati nell'introduzione [3].

## Formula di Thouless

Un altro importante risultato analitico è la cosiddetta formula di Thouless [14, 11], che mette in relazione la densità di stati  $\rho(E)$  con gli esponenti di Lyapunov. La enunciamo con una traccia di dimostrazione per il caso unidimensionale.

Dalla definizione mediante matrice di trasferimento, è immediato che, fissate le condizioni iniziali  $\psi_0$  e  $\psi_1$ , l'autofunzione al sito  $N$  può essere vista come un polinomio di grado  $N$  nella variabile  $E$ .

$$\psi_N(E) = A \prod_{n=1}^{N-1} (E_n - E) \quad (38)$$

Cioè la scrittura più generale per un polinomio di grado  $N$  in  $E$  mettendo in evidenza gli zeri  $E_n$  e un fattore di normalizzazione  $A$ . La quantità  $E_n - E$  non ha segno definito, e in generale può essere riscritta usando

$$(E_n - E) = |E_n - E|e^{i\phi_n}, \quad \phi_n = \pi\theta(E - E_n)$$

La funzione a gradino  $\theta$  fa sì che il fattore complesso assuma semplicemente valori  $\pm 1$ . Sostituendo nella (38) ed estraendo il logaritmo di entrambi i membri, si ottiene

$$\frac{1}{N} \ln \psi_N(E) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N-1} \ln |E_n - E| + \frac{i\pi}{N} \sum_{n=1}^{N-1} \theta(E - E_n) + \frac{1}{N} \ln A \quad (39)$$

Da cui sostituendo, nel limite di  $N \rightarrow \infty$  le somme con degli integrali sulla densità di stati  $\rho(E)$  si ricava

$$\lambda(E) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \psi_N(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE' \rho(E') \ln |E - E'| + i\pi \int_{-\infty}^E dE' \rho(E') \quad (40)$$

La parte reale è l'inverso della lunghezza di localizzazione, mentre la parte immaginaria fornisce la *densità di stati integrata* all'energia  $E$ .

$$\xi^{-1} = \lambda_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} dE' \rho(E') \ln |E - E'| \quad (41)$$

$$\eta(E) = \int_{-\infty}^E dE' \rho(E') \quad (42)$$

La prima di queste equazioni è detta formula di Herbert-Jones-Thouless ed è stata generalizzata per dimensioni superiori.

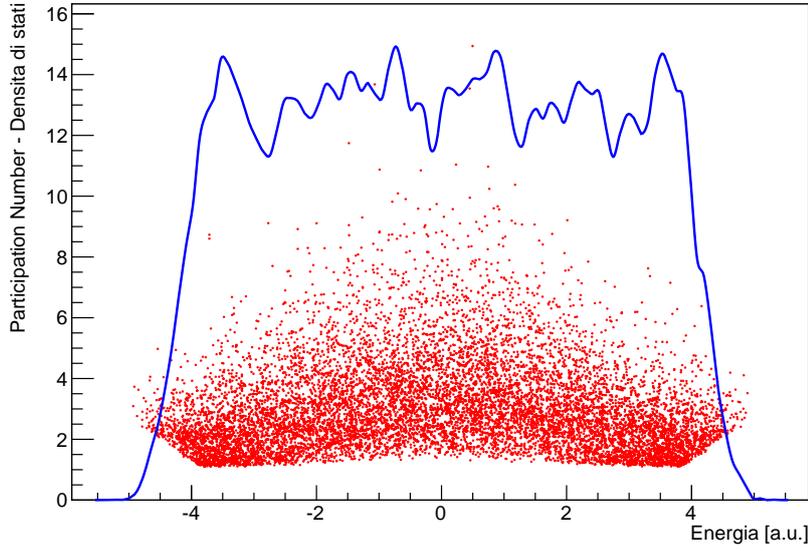


Figura 10: L'istogramma mostra la densità di stati per un modello di Anderson unidimensionale,  $N=1000$ ,  $W=7$ . In rosso la localizzazione degli stati stimata come *raggio medio* usando il criterio (5). La densità di stati è stata normalizzata arbitrariamente.

In fig.10 è mostrato l'esito di una simulazione numerica per il modello di Anderson unidimensionale, la densità di stati ha supporto  $[-5.5, 5.5]$  come atteso per il parametro di disordine scelto; Infatti una soluzione dell'equazione del modello libero

$$\psi_{n-1} + \psi_{n+1} = E\psi_n$$

è data da  $\psi_n = e^{ikn}$  ed  $E = 2 \cos(k)$ , se si impongono condizioni al contorno periodiche su una catena di lunghezza  $L$   $\psi_0 = \psi_L$ , i valori di  $k$  risultano quantizzati

$$k = \frac{2\pi}{L} m \quad m \in \mathbb{Z}$$

Perciò l'ampiezza di banda introducendo una perturbazione diagonale con supporto  $[-W/2, W/2]$  sarà semplicemente  $[(-2 - W/2), (2 + W/2)]$

Per dare una stima del grado di localizzazione degli stati è stato usato il criterio (5), in effetti gli stati più localizzati, quindi con *raggio* minore si concentrano agli estremi della banda. Questo non è in contrasto con il risultato teorico di fig.2, che è valido nel limite termodinamico, per un campione di dimensione finita come in questo caso è possibile osservare un regime di transizione anche in una dimensione.

Nelle seguenti fig.re 11 e 12 è mostrato un'esempio di autostati calcolati diagonalizzando numericamente l'hamiltoniana di Anderson monodimensionale. In accordo con quanto appena osservato il secondo stato, con energia al centro della banda, differisce significativamente da zero in una regione molto più estesa rispetto al primo, ed è caratterizzato da una lunghezza di localizzazione  $\xi_0$  maggiore, se si vuole fare riferimento a questo criterio.

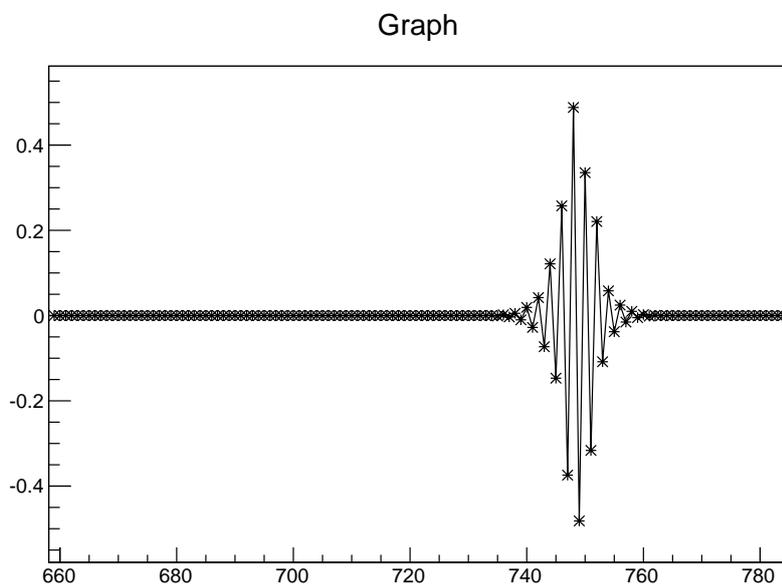


Figura 11: Ampiezza di un autostato del modello di Anderson,  $N=800$ ,  $W=7$ , estratto a un estremo della banda.

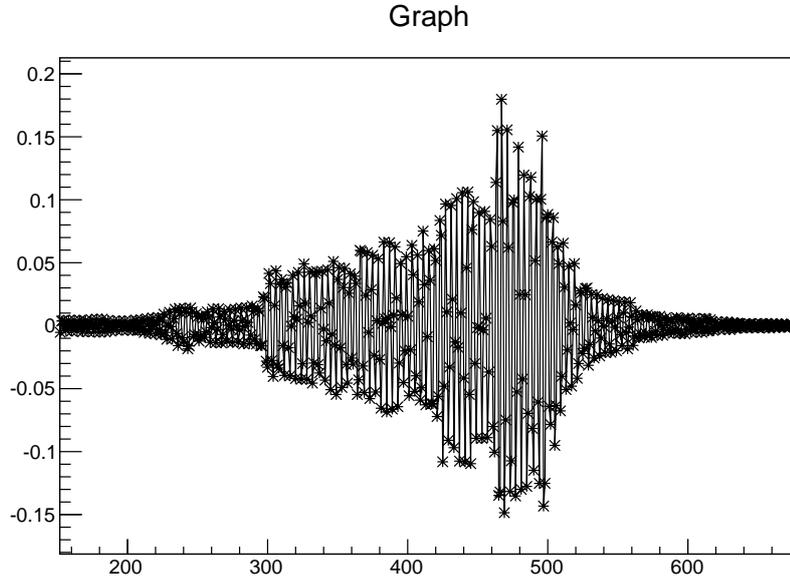


Figura 12: Ampiezza di un autostato del modello di Anderson,  $N=800$ ,  $W=7$ , con energia al centro della banda.

## 4 Prodotto esterno in $\mathbb{R}^n$

Con lo scopo di studiare lo spettro di Lyapunov per questi modelli può essere utile introdurre alcune proprietà del prodotto esterno di spazi vettoriali. [15] Per prima cosa, dati due spazi vettoriali  $V$  e  $W$  su un campo  $\mathbb{K}$ , si può definire il prodotto tensoriale di  $V$  e  $W$ , indicato con la scrittura  $V \otimes W$ . Esso è lo spazio costituito da tutti gli oggetti del tipo

$$\mathbf{v}_1 \otimes \mathbf{w}_1 + \cdots + \mathbf{v}_n \otimes \mathbf{w}_n, \quad \mathbf{v}_i \in V \quad \mathbf{w}_i \in W \quad \forall i = 1 \cdots n$$

cioè combinazioni lineari di *coppie ordinate* di vettori provenienti dai due spazi. Il simbolo  $\otimes$  è definito richiedendo che siano valide le seguenti proprietà formali  $\forall \lambda, \mathbf{v}_{1,2}, \mathbf{w}_{1,2}, \mathbf{v}, \mathbf{w}$

$$\begin{aligned} \lambda(\mathbf{v} \otimes \mathbf{w}) &= (\lambda\mathbf{v}) \otimes \mathbf{w} = \mathbf{v} \otimes \lambda(\mathbf{w}) \\ (\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2) \otimes \mathbf{w} &= \mathbf{v}_1 \otimes \mathbf{w} + \mathbf{v}_2 \otimes \mathbf{w} \\ \mathbf{v} \otimes (\mathbf{w}_1 + \mathbf{w}_2) &= \mathbf{v} \otimes \mathbf{w}_1 + \mathbf{v} \otimes \mathbf{w}_2 \end{aligned} \tag{43}$$

Il prodotto tensoriale di due vettori è quindi lineare in entrambi gli argomenti e l'insieme dei  $\mathbf{v} \otimes \mathbf{w} \in V \otimes W$  così definiti ha ancora le proprietà di uno spazio vettoriale. Si può estendere in maniera del tutto analoga questa costruzione al prodotto di più spazi vettoriali  $\{V_i\} \quad i = 1, \cdots, m$  formando tensori di rango superiore a due

$$V_1 \otimes \cdots \otimes V_m$$

sarà lo spazio delle combinazioni lineari

$$\mathbf{v}_{1_1} \otimes \cdots \otimes \mathbf{v}_{m_1} + \cdots + \mathbf{v}_{1_m} \otimes \cdots \otimes \mathbf{v}_{m_m}$$

$$\mathbf{v}_{j_i} \in V_j \quad \forall i = 1, \dots, m$$

In  $\mathbb{R}^3$  è definito il prodotto vettoriale  $\mathbf{a} \times \mathbf{b}$ , un operatore antisimmetrico e bilineare, al quale può essere dato un significato geometrico come *superficie* orientata del parallelogramma generato dai vettori  $\mathbf{a}$  e  $\mathbf{b}$ , cioè un vettore  $\mathbf{c} = \mathbf{a} \times \mathbf{b}$  il cui modulo sia pari all'area di tale superficie. Questo si vede banalmente usando  $|\mathbf{c}| = |\mathbf{a}||\mathbf{b}|\sin(\alpha)$  cioè l'area del parallelogramma  $P(\mathbf{a}, \mathbf{b})$  in geometria euclidea.

Il prodotto esterno generalizza un oggetto di questo tipo a dimensioni superiori, è denotato con  $\mathbf{a} \wedge \mathbf{b}$ , e così definito; Dato uno spazio vettoriale  $V$ , lo spazio prodotto esterno (o prodotto wedge)  $V \wedge V$  è il sottospazio lineare di  $V \otimes V$  costituito da tutti i tensori antisimmetrici della forma

$$\mathbf{v}_1 \otimes \mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_2 \otimes \mathbf{v}_1 \quad \mathbf{v}_{1,2} \in V$$

è immediato verificare che il prodotto wedge così definito è bilineare e antisimmetrico

$$\mathbf{v} \wedge \mathbf{w} = -\mathbf{w} \wedge \mathbf{v}$$

$$(\lambda \mathbf{v}) \wedge \mathbf{w} = \lambda(\mathbf{v} \wedge \mathbf{w})$$

$$(\mathbf{v} + \mathbf{w}) \wedge \mathbf{a} = \mathbf{v} \wedge \mathbf{a} + \mathbf{w} \wedge \mathbf{a}$$

In generale si può definire il prodotto esterno di  $V$  con sè stesso  $k$  volte, indicato con  $\wedge^k V$  e definito come l'azione dell'operatore di antisimmetrizzazione  $\mathcal{A}$  sugli elementi dello spazio prodotto tensoriale  $\underbrace{V \otimes \cdots \otimes V}_k$  volte

$$\mathbf{v}_1 \wedge \cdots \wedge \mathbf{v}_k = \mathcal{A}(\mathbf{v}_1 \otimes \cdots \otimes \mathbf{v}_k) \quad (44)$$

$$\mathcal{A}(\mathbf{v}_1 \otimes \cdots \otimes \mathbf{v}_k) = \sum_{\hat{P} \in S_k} \text{sign}(\hat{P})(\mathbf{v}_{\hat{P}(1)} \otimes \cdots \otimes \mathbf{v}_{\hat{P}(k)})$$

L'operatore  $\mathcal{A}$  una somma su tutte le  $k!$  permutazioni di  $k$  indici tenendo conto della loro parità, perciò per costruzione il prodotto wedge così definito è completamente antisimmetrico nello scambio di coppie di vettori

$$\mathbf{v}_1 \wedge \cdots \wedge \mathbf{v}_i \cdots \wedge \mathbf{v}_j \wedge \mathbf{v}_k = -(\mathbf{v}_1 \wedge \cdots \wedge \mathbf{v}_j \cdots \wedge \mathbf{v}_i \wedge \mathbf{v}_k)$$

e la multilinearità segue anch'essa immediatamente dalle proprietà del prodotto tensoriale di più spazi vettoriali. Si può dimostrare che fissato uno spazio vettoriale  $V$  di dimensione  $N$ , un insieme  $\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k\}$  è un set di vettori linearmente indipendenti se e soltanto se  $\mathbf{v}_1 \wedge \cdots \wedge \mathbf{v}_k \neq 0$ , dove  $0$  è il tensore nullo su  $\wedge^k V$ . Dall'algebra lineare è noto che in uno spazio vettoriale di dimensione  $N$  non può

esistere un set di  $k$  vettori linearmente indipendenti per  $k > N$ , e questo unito al risultato precedente implica che se  $\dim(V) = N$

$$\mathbf{v}_1 \wedge \cdots \wedge \mathbf{v}_k = 0 \quad \forall k > N$$

Fissata una base di  $V$ :  $\{\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_N\}$ , una base dello spazio prodotto esterno di ordine  $k \leq N$  è data da tutti gli elementi del tipo

$$\{\mathbf{e}_{i_1} \wedge \mathbf{e}_{i_2} \wedge \cdots \wedge \mathbf{e}_{i_k} \quad 1 \leq i_1 < i_2 < \cdots < i_k \leq N\}$$

Individuata una base, la dimensione dello spazio è il numero di vettori che la compongono, in questo caso

$$\dim(\wedge^k V) = \binom{N}{k} \quad (45)$$

cioè tutti i modi possibile di scegliere  $k$  vettori diversi tra gli  $N$  di base, tenendo conto che tutte le scelte che differiscono per una permutazione sono equivalenti (vale a dire linearmente dipendenti tra loro) date le proprietà di antisimmetria del prodotto wedge.

$$\mathbf{e}_{i_1} \wedge \mathbf{e}_{i_2} \wedge \cdots \wedge \mathbf{e}_{i_k} = \text{sign}(\hat{P})(\mathbf{e}_{\hat{P}(i_1)} \wedge \mathbf{e}_{\hat{P}(i_2)} \wedge \cdots \wedge \mathbf{e}_{\hat{P}(i_k)})$$

Sullo spazio  $\wedge^k V$  si può definire un prodotto interno come segue

$$\langle \mathbf{v}_1 \wedge \cdots \wedge \mathbf{v}_k, \mathbf{w}_1 \wedge \cdots \wedge \mathbf{w}_k \rangle = \det(\langle \mathbf{v}_i, \mathbf{w}_j \rangle) \quad (46)$$

la matrice  $\mathbf{G}$  con ingressi  $G_{i,j} = \langle \mathbf{v}_i, \mathbf{w}_j \rangle$ , dove  $\langle \bullet, \bullet \rangle$  è il prodotto interno su  $V$  è detta matrice Gramiana. Questa struttura permette di esplicitare l'interpretazione geometrica del prodotto esterno di  $k$  vettori, infatti introducendo una norma indotta dal prodotto interno come usuale

$$\|\mathbf{v}_1 \wedge \cdots \wedge \mathbf{v}_k\|^2 = \langle \mathbf{v}_1 \wedge \cdots \wedge \mathbf{v}_k, \mathbf{v}_1 \wedge \cdots \wedge \mathbf{v}_k \rangle$$

Il volume del parallelepipedo generato dai vettori  $\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k\}$  è dato da

$$\text{Vol}(\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k\}) = \|\mathbf{v}_1 \wedge \cdots \wedge \mathbf{v}_k\| = \sqrt{\det(\mathbf{G})} \quad (47)$$

La proprietà più significativa per l'applicazione ai prodotti di matrici random è la seguente caratterizzazione del determinante di un operatore lineare su  $V$ . Sia  $\mathbf{A} : V \rightarrow V$   $\mathbf{A} \in L(V, V)$ , pensato in una realizzazione di  $L(V, V)$  sullo spazio delle matrici di ordine  $\dim(V) = N$  su campo  $\mathbb{K}$ :  $M_{N \times N}(\mathbb{K})$  si dice determinante dell'operatore  $\mathbf{A}$  l'unica funzione  $D$

$$\begin{aligned} D : M_{N \times N}(\mathbb{K}) &\rightarrow \mathbb{K} \\ \mathbf{A} &\rightarrow \det(\mathbf{A}) \end{aligned}$$

che sia *multilineare* nelle colonne di  $\mathbf{A} : \{\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_N\}$  e *alternante* ossia cambi di segno sotto lo scambio di due colonne.

$$\begin{aligned} \det(\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_j + \lambda \mathbf{b}, \dots, \mathbf{a}_N) &= \det(\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_j, \dots, \mathbf{a}_N) + \lambda \det(\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{b}, \dots, \mathbf{a}_N) \quad \forall j \\ \det(\mathbf{a}_{\hat{P}(1)}, \dots, \mathbf{a}_{\hat{P}(N)}) &= \text{sign}(\hat{P}) \cdot \det(\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_N) \end{aligned} \quad (48)$$

Per definire il determinante in termini del prodotto esterno, occorre estendere l'azione dell'operatore  $\mathbf{A}$  su  $\wedge^k V$

$$\begin{aligned} (\wedge^k \mathbf{A}) : \wedge^k V &\rightarrow \wedge^k V \\ \mathbf{v}_1 \wedge \cdots \wedge \mathbf{v}_k &\rightarrow \mathbf{A}\mathbf{v}_1 \wedge \cdots \wedge \mathbf{A}\mathbf{v}_k \end{aligned}$$

considerando in particolare il caso  $k = N$ , lo spazio  $\wedge^N V$  ha dimensione uno, secondo la (45), perciò l'azione di  $\mathbf{A}$  può essere semplicemente una moltiplicazione per una certa costante  $\lambda \in \mathbb{K}$  e si può identificare questa costante con il determinante di  $\mathbf{A}$ , rispettando le proprietà richieste (48), per la multilinearità e antisimmetria di scambio del prodotto esterno.

$$(\wedge^N \mathbf{A})(\mathbf{v}_1 \wedge \cdots \wedge \mathbf{v}_N) = \det(\mathbf{A}) \cdot \mathbf{v}_1 \wedge \cdots \wedge \mathbf{v}_N \quad (49)$$

Considerando le potenze di ordine inferiore  $\wedge^k V$  si caratterizzano invece i minori di ordine  $k$  della matrice  $\mathbf{A}$ .

## 5 Algoritmi per il calcolo dello spettro di Lyapunov

### Matrice di trasferimento

La connessione tra le proprietà sopra enunciate e lo spettro di Lyapunov di matrici random emerge se si considerano le equazioni (49) e (47), calcolando infatti la norma della (49)

$$|\det(\mathbf{A})| \|\mathbf{v}_1 \wedge \cdots \wedge \mathbf{v}_N\| = \|\mathbf{A}\mathbf{v}_1 \wedge \cdots \wedge \mathbf{A}\mathbf{v}_N\| \quad (50)$$

perciò dalla (47) segue immediatamente

$$\text{Vol}(\{\mathbf{A}\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{A}\mathbf{v}_N\}) = |\det(\mathbf{A})| \cdot \text{Vol}(\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_N\}) \quad (51)$$

Cioè dato un set di  $N$  vettori, il volume del parallelepipedo da essi generato scala sotto l'azione dell'operatore  $\mathbf{A}$  con il modulo del determinante. Applichiamo queste relazioni alla matrice di trasferimento del modello di Anderson

$$\mathbf{z}(n+1) = \mathbf{A}_n \mathbf{z}(n) \quad \mathbf{z}(i) \in \mathbb{R}^{2m} \quad \forall i \quad (52)$$

$$\mathbf{z}(n) = \left( \prod_{i=0}^{n-1} \mathbf{A}_i \right) \mathbf{z}(0) = \mathbf{P}_n \mathbf{z}(0) \quad (53)$$

Si scelga in maniera casuale un set di vettori iniziali  $\{\mathbf{z}^{(j)}(0)\} \quad j = 1, \dots, 2m$ , e senza perdita di generalità si può porre il volume del parallelepipedo da essi generato  $\text{Vol}(\{\mathbf{z}^{(1)}(0), \dots, \mathbf{z}^{(2m)}(0)\})$  unitario, ad esempio con un procedimento di ortonormalizzazione di Gram-Schmidt. Allora la (54) implica che sotto l'azione della matrice di trasferimento a  $n$  step  $\mathbf{P}_n$

$$\text{Vol}(\{\mathbf{P}_n \mathbf{z}^{(1)}(0), \dots, \mathbf{P}_n \mathbf{z}^{(2m)}(0)\}) = |\det(\mathbf{P}_n)| \quad (54)$$

$$\det(\mathbf{P}_n) = \prod_{i=1}^{2m} \gamma_i \sim \prod_{i=1}^{2m} e^{n\lambda_i} = e^{n(\lambda_1 + \dots + \lambda_{2m})}$$

Questo è valido se si considera il tasso di crescita del volume del parallelepipedo di dimensione massima, in generale si può dimostrare formalmente [14] che il teorema di Oseledec implica

$$\sum_{i=1}^p \lambda_i = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln \text{Vol} \left( \left\{ \mathbf{P}_n \mathbf{z}^{(1)}(0), \dots, \mathbf{P}_n \mathbf{z}^{(p)}(0) \right\} \right) \quad \forall p \leq 2m \quad (55)$$

Nell'implementare un algoritmo di calcolo numerico basato sulla (55) sussistono due problemi, in primo luogo i prodotti del tipo  $\mathbf{P}_n \mathbf{z}^{(i)}(0)$  divergono esponenzialmente in n, perciò molto rapidamente vengono raggiunti i limiti delle capacità del calcolatore, inoltre asintoticamente la direzione dei vettori su cui agisce  $\mathbf{P}_n$  è il sottospazio relativo all'autovalore con il massimo esponente  $\lambda_1$ , perciò due vettori che inizialmente formano un certo angolo  $\alpha$  lo vedranno diminuire con un andamento del tipo  $\alpha(n) \sim e^{-n(\lambda_1 - \lambda_2)}$ , che può essere problematico data la precisione finita del calcolatore.

Una soluzione può essere strutturare l'algoritmo in questo modo [14], dopo aver scelto un set ortonormale di vettori  $\mathbf{z}^{(i)}(0)$ , e avendo fissato a n il numero di matrici random da generare, cioè la lunghezza del campione per un modello unidimensionale :

- Si scelgono due interi k e s tali che n=ks
- Si fanno agire sui vettori di partenza i prodotti delle prime k matrici, indicato con  $\mathbf{P}_k^{(1)}$
- Si calcola  $\ln \left[ \text{Vol} \left( \left\{ \mathbf{P}_k^{(1)} \mathbf{z}^{(1)}(0), \dots, \mathbf{P}_k^{(1)} \mathbf{z}^{(p)}(0) \right\} \right) \right]$   $\forall p \leq 2m$  accumulando il risultato in opportune variabili  $V_p \quad p = 1, \dots, 2m$
- Si applica l'ortonormalizzazione di Gram-Schmidt ai vettori  $\mathbf{P}_k^{(1)} \mathbf{z}^{(i)}(0)$
- Si fa agire su di essi il prodotto delle successive k matrici,  $\mathbf{P}_k^{(2)}$ , e si iterano tutti i passi precedenti per s volte.

Al termine delle sk=n iterazioni si ottengono le somme dei primi p esponenti di Lyapunov normalizzando opportunamente le variabili  $V_p$ , in accordo con l'equazione (55)

$$\lambda_1 + \dots + \lambda_p = \frac{1}{sk} V_p = \frac{1}{n} V_p = V_p' \quad (56)$$

A questo punto si ottiene lo spettro di Lyapunov semplicemente da  $\lambda_1 = V_1'$  e  $\lambda_i = V_i' - V_{i-1}' \quad i = 2, \dots, 2m$ . Occorre scegliere opportunamente gli interi k e s, in quanto k determina la distanza tra l'ortonormalizzazione dei vettori, e va quindi scelto sufficientemente piccolo da non causare problemi di overflow.

## Formula di Thouless

Un'altra possibile tecnica per il calcolo numerico dello spettro di Lyapunov sfrutta la formula di Thouless (42). Il problema agli autovalori per l'hamiltoniana totale come già osservato si può scrivere in questa forma a blocchi per un sistema quasi-1D

$$\begin{pmatrix} \mathbf{D}_1 & \mathbb{I}_m & & \mathbb{I}_m \\ \mathbb{I}_m & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \mathbb{I}_m \\ \mathbb{I}_m & & \mathbb{I}_m & \mathbf{D}_N \end{pmatrix} \psi = E\psi$$

risolvendolo per diverse realizzazioni del disordine si può costruire un istogramma con gli autovalori  $E_i$  che rappresenta una stima della funzione densità di stati  $\rho(E)$ ; in realtà questa quantità è self-averaging [12] e per un sistema di dimensione sufficientemente estesa ( $\sim 10^3$  siti) è necessaria una sola iterazione per ottenere risultati significativi.

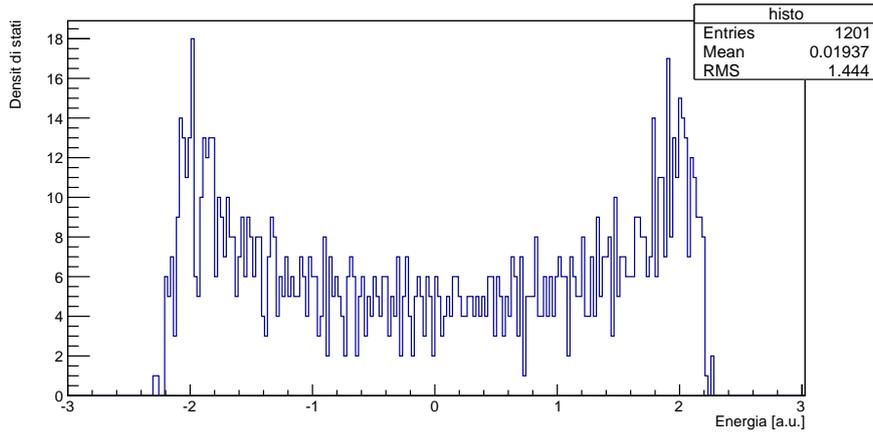


Figura 13: Densità di stati ottenuta con un istogramma per un modello di Anderson unidimensionale con 1200 siti.

Per poter applicare la formula di Thouless al caso discreto, conviene non effettuare la sostituzione

$$\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \rightarrow \int dE' \rho(E')$$

usata per passare dalla (39) alla (40) nella traccia di dimostrazione proposta, e identificare la parte reale della (39) come un'approssimazione per N finito della lunghezza di localizzazione, senza passare formalmente al limite.

$$\xi^{-1}(E) = \lambda_1(E) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \ln |E_n - E| \quad (57)$$

L'istogramma sarà composto da un certo numero  $N_b$  di bins, generalmente diverso da  $N$ , perciò l'intervallo di energie risulterà suddiviso in intervalli di ampiezza  $\Delta E$ :  $[E_i, E_i + \Delta E) \quad \forall i = 1, \dots, N_b$ . Con  $E_1 = a$  ed  $E_{N_b} + \Delta E = b$  scelti in modo tale che l'intervallo  $[a, b]$  contenga il supporto di  $\rho(E)$ .

Se definiamo  $C_i \quad i = 1, \dots, N_b$  il contenuto di ciascun bin, cioè sostanzialmente la densità di stati  $C_i \sim \rho(E)|_{E=E_i}$  allora la somma (57) assume la forma

$$N = \sum_{i=1}^{N_b} C_i \quad (58)$$

$$\lambda_1(E) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N_b} C_n \ln |(E_n + \Delta/2) - E| \quad (59)$$

Una media della quantità  $\ln |E_i - E|$  pesata per la densità di stati approssimata  $C_i$ , in analogia con l'espressione integrale. Il termine costante nella (39) non è rigorosamente nullo se non si passa al limite  $N \rightarrow \infty$ , ma il suo contributo è stato trascurato.

## 6 Modello di Lloyd

### Soluzione analitica

Il modello di Lloyd, proposto nel 1969 [16] è del tutto analogo al modello di anderson

$$\frac{k}{2}(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) + V_n \psi_n = E \psi_n \quad n = 1, \dots, N \quad (60)$$

ma il potenziale  $V_n$  è distribuito secondo una Lorentziana a mediana nulla.

$$p(V_n = x) = \frac{1}{\pi(1 + x^2)}$$

Per questa particolare scelta sul disordine si possono ricavare alcuni risultati analitici [17], in particolare un'espressione esplicita per l'esponente di Lyapunov  $\lambda(E)$  nel caso unidimensionale.

$$\cosh(\lambda(E)) = \frac{1}{2k} \left( \sqrt{(E - k)^2 + 1} + \sqrt{(E + k)^2 + 1} \right) \quad (61)$$

La precedente implica tra l'altro  $\gamma(E) > 0 \quad \forall E$ , quindi tutti gli stati sono localizzati, nel limite  $N \rightarrow \infty$  nel quale è stata ricavata la formula. Per dimostrare la (61) occorre derivare alcune identità che generalizzano il calcolo di integrali gaussiani multidimensionali

$$\int \prod_{i=1}^N dX_i e^{-\sum_{ij} A_{ij} X_i X_j} = \pi^{N/2} (\det \mathbf{A})^{-1/2}$$

al caso

$$I_{p,q} = \int \left( \prod_{i=1}^N dX_i \right) X_p X_q e^{-\sum_{ij}^N A_{ij} X_i X_j} \quad \forall p, q = 1, \dots, N$$

Immediatamente si verifica, sostituendo  $\left( \prod_{i=1}^N dX_i \right) \rightarrow d^n X$  per semplificare la notazione

$$\begin{aligned} I_{p,q} &= -\frac{\partial}{\partial A_{pq}} \int d^n X e^{-\sum_{ij}^N A_{ij} X_i X_j} = -\frac{\partial}{\partial A_{pq}} \left( \pi^{N/2} \det \mathbf{A}^{-1/2} \right) \\ I_{p,q} &= \left( \frac{\pi^{N/2}}{2} \det \mathbf{A}^{-3/2} \right) \frac{\partial}{\partial A_{pq}} \det \mathbf{A} \end{aligned} \quad (62)$$

A questo punto è utile introdurre una rappresentazione della matrice inversa  $\mathbf{A}^{-1}$ , che altro non è che la usuale definizione operativa degli elementi di matrice in funzione dei determinanti delle sottomatrici di  $\mathbf{A}$  ottenute rimuovendo la  $i$ -esima riga e la  $j$ -esima colonna, denotati con  $\det_{ij} \mathbf{A}$

$$A_{ij}^{-1} = (-1)^{i-j} \frac{\det_{ij} \mathbf{A}}{\det \mathbf{A}} \quad (63)$$

In generale per una matrice i cui ingressi dipendono da una variabile  $t$ ,  $A_{ij} = A_{ij}(t)$ , indicando con  $\det_k \mathbf{A}$  il determinante della matrice di elementi  $A_{ij}^*$  così costruita

$$\begin{aligned} A_{ij}^* &= A_{ij} \quad i \neq k \\ A_{ij}^* &= \frac{\partial A_{ij}(t)}{\partial t} \quad i = k \end{aligned}$$

Cioè la matrice ottenuta derivando la  $k$ -esima riga rispetto alla variabile  $t$ , allora la derivata del determinante rispetto a  $t$  vale

$$\frac{\partial}{\partial t} \det \mathbf{A} = \sum_{k=1}^N \det_k \mathbf{A} \quad (64)$$

Nel caso in esame, un solo ingresso dipende da una variabile, mentre tutti gli altri sono costanti, identificando  $t := A_{pq}$  per uniformare la notazione con le equazioni precedenti, le matrici  $\mathbf{A}^*$  coincidono con la matrice di partenza tranne che per una riga, sulla quale gli elementi vengono derivati; essendo tutti gli elementi costanti tranne uno,  $N - 1$  termini della somma (64) saranno nulli in quanto determinanti di matrici con una riga di zeri, mentre sopravvive solo il termine

$$\det_p \mathbf{A} = \det \begin{vmatrix} A_{1,1} & \cdots & A_{1,q} & \cdots & A_{1,N} \\ & \ddots & & \ddots & \\ 0 & \cdots & 1 & \cdots & 0 \\ & \ddots & & \ddots & \\ A_{N,1} & \cdots & A_{N,q} & \cdots & A_{N,N} \end{vmatrix}$$

ma usando lo sviluppo di laplace,  $\det_p \mathbf{A} = \det_{pq} \mathbf{A} (-1)^{p-q}$ , e quindi inserendo il risultato nella (64) e successivamente nella (62)

$$I_{p,q} = \left( \frac{\pi^{N/2}}{2} \det \mathbf{A}^{-3/2} \right) \frac{\partial}{\partial A_{pq}} \det \mathbf{A} = \left( \frac{\pi^{N/2}}{2} \det \mathbf{A}^{-3/2} \right) \det_{pq} \mathbf{A} (-1)^{p-q}$$

Dall'ultima espressione si conclude il risultato finale usando la (63)

$$I_{p,q} = \left( \frac{\pi^{N/2}}{2} \det \mathbf{A}^{-1/2} \right) (-1)^{2(p-q)} A_{pq}^{-1} = \left( \frac{\pi^N}{\det \mathbf{A}} \right)^{1/2} \left( \frac{1}{2\mathbf{A}} \right)_{pq} \quad (65)$$

si consideri la già citata formula di Thouless, e in particolare la sua derivata rispetto all'energia  $E$

$$\lambda(E) = \int \rho(x) \ln |E - x| dx \rightarrow \lambda'(E) = \text{P.V.} \int \frac{\rho(x)}{E - x} dx$$

e la rappresentazione della traccia della funzione di Green

$$\text{Tr}[G(E \pm i0^+)] = \int \frac{\rho(x)}{E - x \pm i0^+} = \text{P.V.} \int \frac{\rho(x)}{E - x} dx \mp i\pi\rho(E)$$

Per confronto delle ultime due espressioni si può affermare la seguente, valida per una singola realizzazione del disordine

$$\lambda'(E) = \text{Re} \{ \text{Tr}[G(E \pm i0^+)] \} \quad (66)$$

il risultato generale si ricava estraendo il valore di aspettazione rispetto alla misura di probabilità Lorentziana, denotato con  $\langle \bullet \rangle$

$$\langle f(\mathbf{V}) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_m \left( dV_m \frac{1}{\pi(1+V_m^2)} \right) f(\mathbf{V}) \quad (67)$$

Per calcolare il valor medio si utilizza [17] una tecnica nota come *metodo delle repliche*, che sfrutta l'equazione (65) appena dimostrata per dare una rappresentazione degli ingressi della funzione di Green come inverso della matrice

$$(E - H + i0^+)_{ij} = E\delta_{i,j} + V_i\delta_{i,j} + \frac{k}{2}(\delta_{i,j+1} + \delta_{i,j-1}) + i0^+\delta_{i,j}$$

$$\begin{aligned} & \left( \prod_{i=1}^N \prod_{\alpha=1}^n \int_{-\infty}^{+\infty} dX_i^\alpha \right) X_p^1 X_q^1 e^{-i \sum_{ij\alpha} (E-H+i0^+)_{ij} X_i^\alpha X_j^\alpha} \\ &= \frac{N}{2} G_{pq}(E - i0^+) \left[ \frac{\pi^N}{\det(E - H + i0^+)} \right]^{n/2} \end{aligned} \quad (68)$$

Il risultato utile per proseguire nella dimostrazione si ottiene mandando l'ultima espressione al limite  $n \rightarrow 0$

$$N G_{pq}(E - i0^+) = \lim_{n \rightarrow 0} 2 \left( \prod_{i=1}^N \prod_{\alpha=1}^n \int_{-\infty}^{+\infty} dX_i^\alpha \right) X_p^1 X_q^1 e^{-i \sum_{ij\alpha} (E-H+i0^+)_{ij} X_i^\alpha X_j^\alpha}$$

A questo punto la dipendenza dalle random variabili  $V_n$ , che appaiono in forma diagonale nella  $H_{ij}$ , può essere fattorizzata in un solo termine, e solo su di esso agisce l'integrale in  $dV_m$  quando si calcola il valor medio

$$\langle e^{i \sum_j V_j (X_j^\alpha)^2} \rangle = \prod_m \int_{-\infty}^{+\infty} dV_m \frac{1}{\pi(1+V_m^2)} e^{iV_m (X_m^\alpha)^2}$$

Ciascun integrale del prodotto è una trasformata di Fourier della Lorentziana nella nuova variabile  $(X_m^\alpha)^2$ , sempre positiva, perciò

$$\langle e^{i \sum_j V_j (X_j^\alpha)^2} \rangle = \prod_m e^{-|(X_m^\alpha)^2|} = e^{-\sum_m (X_m^\alpha)^2} \quad (69)$$

Il risultato è particolarmente interessante, ed è di fatto quello che permette di risolvere esattamente il modello con questa particolare distribuzione di probabilità, in quanto è facile osservare che la funzione di Green mediata ha ancora la stessa rappresentazione, ma con l'hamiltoniana tridiagonale

$$H = V_i \delta_{i,j} + \frac{k}{2} (\delta_{i,j+1} + \delta_{i,j-1})$$

sostituita da

$$\tilde{H} = i \delta_{i,j} + \frac{k}{2} (\delta_{i,j+1} + \delta_{i,j-1})$$

Cioè mandando  $V_m \rightarrow i \quad \forall m$ . Usando la (63) e alla luce delle ultime considerazioni la traccia della funzione di Green mediata si scrive

$$\text{Tr}[\langle NG \rangle] = \sum_m \frac{\det_{mm}(E - \tilde{H})}{\det(E - \tilde{H})} = \frac{\partial}{\partial E} \ln \det(E - \tilde{H}) \quad (70)$$

nell'ultimo passaggio si è sfruttata la definizione di derivata del determinante (64) unitamente al fatto che la variabile  $E$  compare solo sugli elementi diagonali. Va ora calcolato il determinante della matrice tridiagonale  $N \times N$  ( $E - \tilde{H}$ ), il che si effettua ricorsivamente a partire dalla *matrice*  $1 \times 1$

$$\begin{aligned} \det_1 &= \det(E - i) = (E - i) \\ \det_2 &= \det \begin{pmatrix} E - i & -\frac{k}{2} \\ -\frac{k}{2} & E - i \end{pmatrix} = (E - i)^2 - \frac{k^2}{4} \\ \det_3 &= \det \begin{pmatrix} E - i & -\frac{k}{2} & 0 \\ -\frac{k}{2} & E - i & -\frac{k}{2} \\ 0 & -\frac{k}{2} & E - i \end{pmatrix} = (E - i) \cdot \det_2 - \frac{k^2}{4} \cdot \det_1 \\ \det_n &= (E - i) \cdot \det_{n-1} - \frac{k^2}{4} \cdot \det_{n-2} \end{aligned} \quad (71)$$

La ricorsione si può risolvere con l'ansatz  $\det_n = x^n$ , che introdotta nella (71) dà un'equazione di secondo grado con due soluzioni

$$x_{\pm} = \frac{1}{2} \left( E - i \pm \sqrt{(E - i)^2 - k^2} \right) \quad (72)$$

Vanno rispettate le condizioni al contorno  $\det_0 = 1$  e  $\det_1 = (E - i)$  perciò

$$\det(E - \tilde{H}) = \frac{x_+^{N+1} + x_-^{N+1}}{x_+ - x_-}$$

allora inserendo il risultato nella (70), dividendo per  $N$  ed estraendo la parte reale si ricava

$$\langle \lambda'(E) \rangle = \frac{\partial}{\partial E} \ln |x_+|$$

da cui integrando rispetto ad  $E$  e rielaborando algebricamente il risultato si ottiene il risultato cercato

$$\lambda(E) = \cosh^{-1} \left[ \frac{1}{2k} \left( \sqrt{(E-k)^2 + 1} + \sqrt{(E+k)^2 + 1} \right) \right] \quad (73)$$

## Verifica numerica

A titolo di verifica della bontà degli algoritmi di calcolo numerico proposti è utile confermare questo risultato analitico. Per comodità il parametro  $k$  del modello è stato fissato a 2, in modo che il problema agli autovalori assuma la forma

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} + V_n \psi_n = E \psi_n \quad n = 1, \dots, N \quad (74)$$

Per generare numeri casuali con distribuzione di Cauchy si sfrutta la proprietà secondo cui data una certa distribuzione di probabilità  $p(x)$  definita su tutto l'asse reale, la sua sua cumulante

$$F(t) = \int_{-\infty}^t p(x) dx$$

è una random variabile distribuita uniformemente nel compatto  $[0, 1]$ , perciò nel caso della distribuzione per il modello di Lloyd, integrando ed invertendo posto  $p(x) = \frac{1}{\pi(1+x^2)}$  si ottiene immediatamente

$$\tan \left( \pi F(t) - \frac{\pi}{2} \right) = t$$

Dove la variabile  $t$  è, per come è definita, distribuita secondo  $p(x)$ , perciò per generare numeri casuali secondo una distribuzione di Lorentz è sufficiente calcolare la tangente di valori estratti uniformemente in  $[-\pi/2, \pi/2]$ .

Con i  $V_n$  così ricavati si costruisce la matrice hamiltoniana del tipo (5), dalla quale i due algoritmi calcolano gli esponenti di Lyapunov in maniera completamente indipendente, in quanto nell'approccio basato sulla matrice di trasferimento non è necessario diagonalizzare la matrice completa, operazione che diventa piuttosto complessa a livello computazionale già per matrici quadrate di dimensione  $\sim 10^3 \times 10^3$ ; per un sistema quasi-1D di lunghezza  $N$  e sezione trasversale descritta da una matrice di adiacenza  $M \times M$  l'hamiltoniana completa ha dimensione  $MN \times MN$  [13], mentre la matrice di trasferimento è soltanto  $2M \times 2M$ , perciò generalmente più semplice da trattare. La qualità del risultato

ottenuto sfruttando la formula di Thouless dipende dalla scelta della dimensione dei bins dell'istogramma, cioè sostanzialmente dal passo di integrazione numerica della funzione

$$\ln |E - x| \rho(x) \quad (75)$$

nota solo su un set discreto di punti; si può ovviare a questo problema anche iterando molte volte la diagonalizzazione dell'hamiltoniana con gli stessi parametri di disordine per accumulare più statistica. Il parametro più sensibile invece se si utilizza la matrice di trasferimento è il numero di iterazioni che separano l'ortogonalizzazione dei vettori.

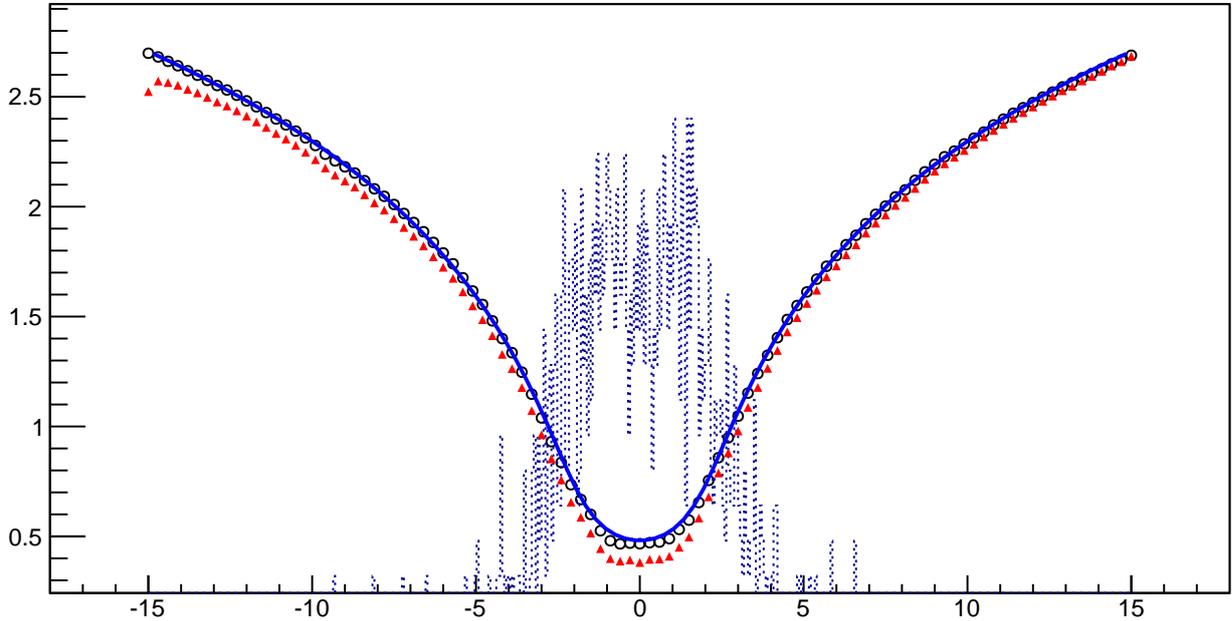


Figura 14: Sullo sfondo la densità degli stati, arbitrariamente riscalata, la linea blu continua è il risultato analitico (61) per gli esponenti di Lyapunov  $\lambda(E)$ , in rosso la stima numerica effettuata mediante la formula di Thouless, in nero l'algoritmo basato sul tasso di crescita del volume. Calcolo effettuato per un modello di Lloyd di lunghezza 1200 siti, con parametro  $k=2$ , con una sola iterazione.

In fig.14 e 15 si evidenzia una maggior accuratezza del risultato ottenuto mediante matrice di trasferimento, inoltre è stata analizzata in maniera qualitativa come i due algoritmi scalano rispettivamente con il passo di ortonormalizzazione e il numero di bins dell'istogramma, calcolando la deviazione standard totale di tutti i punti calcolati rispetto alla curva teorica. Esiste una regione molto ampia in cui i due parametri possono variare influenzando piuttosto debolmente il risultato. Date le proprietà di self-averaging della densità di stati e dello spettro

di Lyapunov per  $N \rightarrow \infty$  si osserva una convergenza del risultato al valore teorico molto più rapida e con minori fluttuazioni al crescere della dimensione del sample analizzato (fig.16 e 17). Va tenuto conto che in questo caso la densità di stati non ha supporto compatto, pertanto anche se è stato scelto un intervallo di energia piuttosto ampio rispetto alla regione in cui  $\rho(E)$  è significativamente positiva, l'analisi basata sulla formula di Thouless può risentire in maniera particolare di questa scelta.

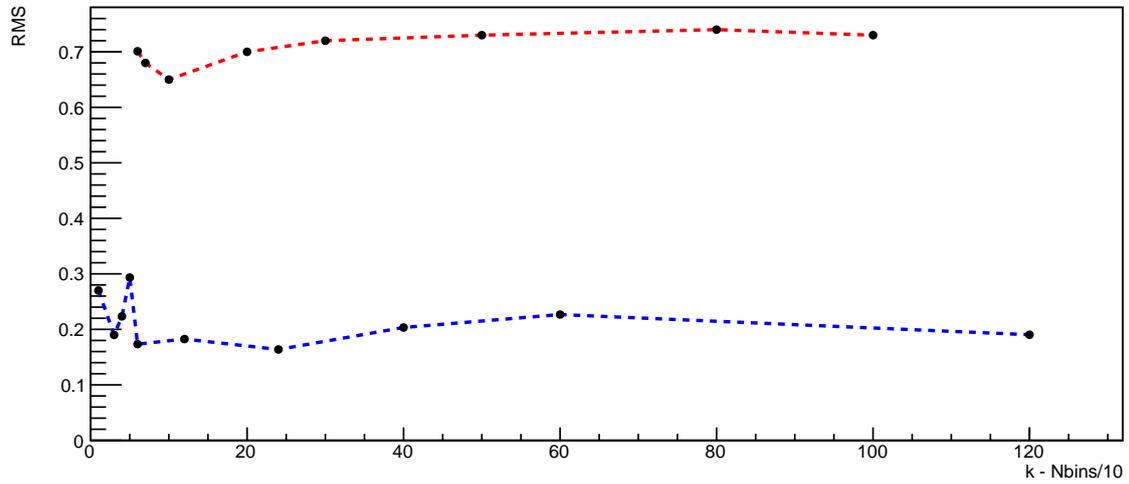


Figura 15: RMS in funzione di  $m$  per il calcolo via matrice di trasferimento (TM) e del numero di bins per la formula di Thouless; su una catena unidimensionale  $N=1200$ . Ogni punto è la media di 3 iterazioni nelle stesse condizioni. Per  $s > 120$  e per  $N_b < 50$  si verificano errori di calcolo, nella regione in cui non ve ne sono, l'accuratezza di entrambi gli algoritmi non dipende fortemente dal rispettivo parametro.

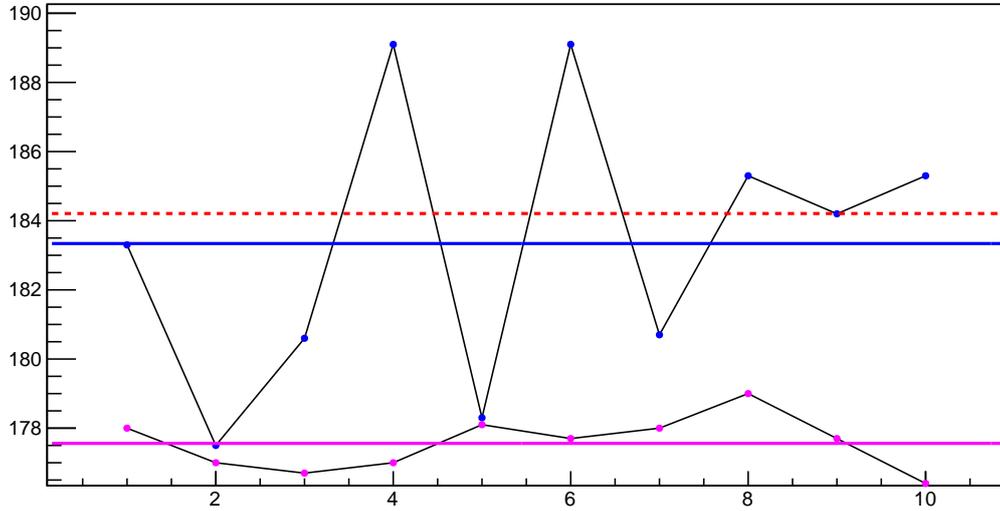


Figura 16: Come quantità rilevante è stata scelta la somma di tutti gli esponenti di Lyapunov nell'intervallo di energia considerato  $([-15, 15])$ , in figura il risultato di 10 iterazioni su una catena di 120 siti. Come già si poteva concludere da fig.14 la matrice di trasferimento (in blu) dà un risultato più accurato rispetto all'altro algoritmo (in viola) se confrontato con il valore teorico (tratteggiato).

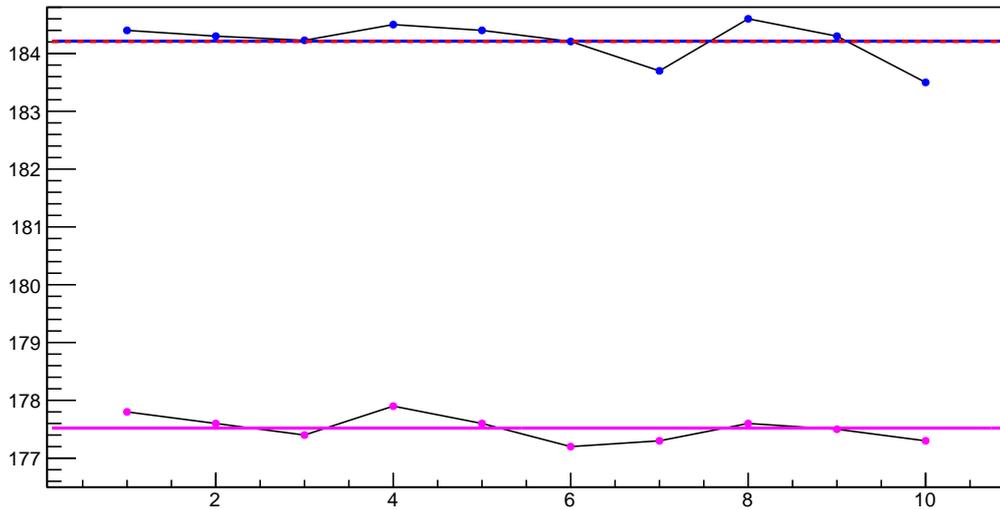


Figura 17: Con 1200 siti si osservano fluttuazioni dalla media molto minori, ed essa coincide sostanzialmente con il valore teorico almeno per l'algoritmo più accurato tra i due.

Come già accennato la diagonalizzazione dell'hamiltoniana è un'operazione piuttosto dispendiosa a livello computazionale, perciò se si vogliono simulare sistemi di dimensioni maggiori è più efficiente utilizzare soltanto la matrice di trasferimento. Inoltre nei programmi usati per ottenere i risultati finora proposti, il disordine è stato estratto una sola volta all'inizio dell'esecuzione e si è costruita e memorizzata la matrice hamiltoniana per poterla diagonalizzare; in secondo luogo si è calcolato lo spettro di Lyapunov sul range di energia voluto iterando lo stesso algoritmo su set di matrici di trasferimento variando l'energia

$$\mathbf{A}_i(E_i, \omega) \quad i = 1, \dots, N$$

variando il parametro  $E_i$  a passi discreti, ma *non la realizzazione del disordine*  $\omega$ , che è stata mantenuta identica per ogni valore dell'energia, dal momento che era già stata utilizzata per l'hamiltoniana totale, e da un certo punto di vista mantenere fissato il disordine sembrerebbe descrivere più realisticamente il sistema fisico; tuttavia segue immediatamente dall'enunciato dei teoremi di Furstenberg e Oseledec che gli esponenti di Lyapunov di una matrice di trasferimento siano quantità indipendenti dalla particolare realizzazione del problema, almeno per sistemi sufficientemente estesi

$$\lambda(E, \omega) \rightarrow \lambda(E) \quad \forall E \tag{76}$$

Perciò è lecito implementare l'algoritmo nella sua forma più efficiente, estraendo valori del potenziale random indipendenti ad ogni step di energia.

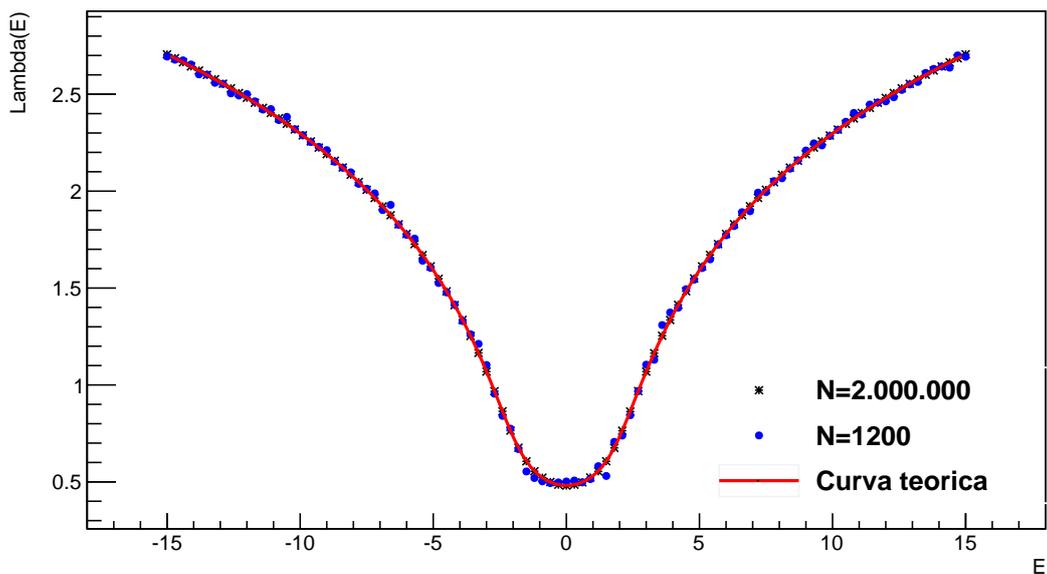


Figura 18: Da un confronto grafico con la 14 in cui si era utilizzato per  $N=1200$  lo stesso disordine per ogni energia, si osservano in questo caso maggiori fluttuazioni dalla curva teorica. Tuttavia la maggiore efficienza dell'algoritmo permette di simulare senza difficoltà una catena più lunga, in questo caso  $N=2 \cdot 10^6$ , per la quale i risultati sono sostanzialmente indistinguibili dal valore teorico, come ci si aspetta dal momento che sia l'affermazione 76 sia la soluzione esatta del modello di Lloyd sono valide per  $N \rightarrow \infty$

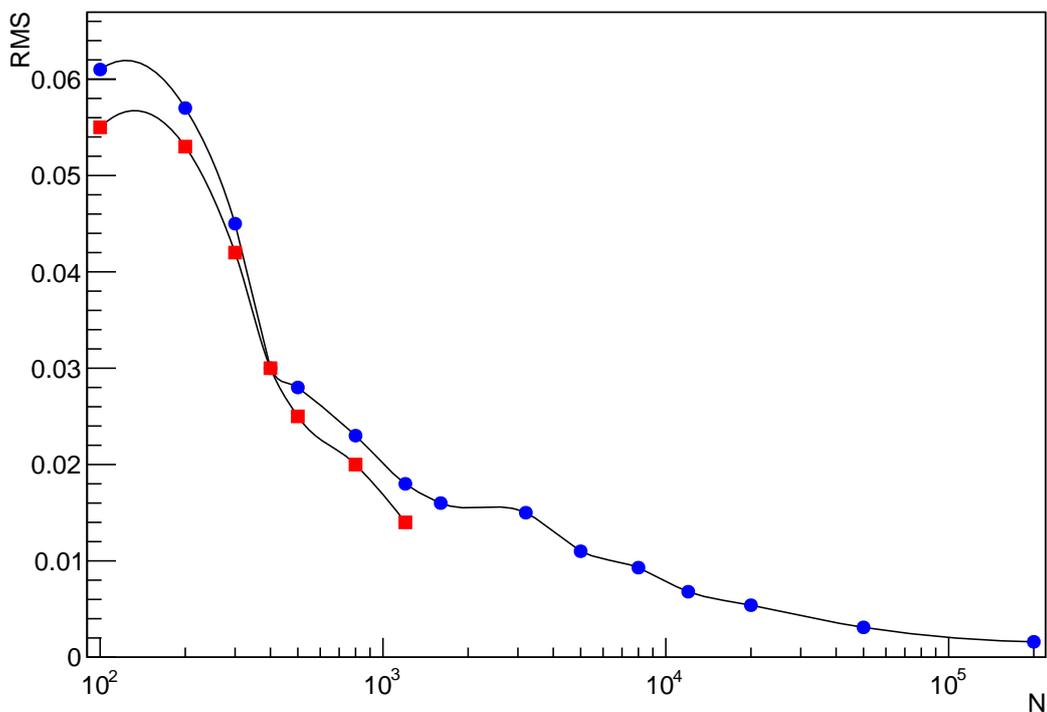


Figura 19: Da un punto di vista più quantitativo si osserva calcolando la deviazione standard media rispetto al valore atteso, che il comportamento delle due soluzioni è confrontabile per valori di  $N$  accessibile ad entrambe, e per  $N=2 \cdot 10^6$  si ha mediamente un accordo con il valore teorico fino alla quarta cifra significativa ( $RMS \approx 0.0005$ ).

## 7 Applicazione al modello di Anderson

### 1D

Con gli algoritmi proposti si può calcolare lo spettro di Lyapunov anche per il modello di Anderson, è utile per verificare la bontà del risultato ricavare un risultato esatto per tale modello in assenza di disordine. Una soluzione dell'equazione

$$u_{m-1} + u_{m+1} = Eu_m$$

si verifica immediatamente essere  $u_n = e^{ikn}$ , dalla quale sostituendo

$$E(k) = 2 \cos(k) \tag{77}$$

dalle condizioni al contorno periodiche su una catena di lunghezza  $N$ , si ottengono i valori discreti di accettabili del parametro  $k$

$$e^{ikN} = 1 \quad \Rightarrow \quad k = \frac{2\pi}{N}m \quad m = -N/2, \dots, N/2$$

La densità di stati  $\rho(E)$ , in generale per qualsiasi dimensione, si può calcolare formalmente dalla relazione di dispersione (77) mediante l'integrale

$$\rho(E) = \int \delta(E - E(\mathbf{k})) d^3\mathbf{k}$$

il quale può essere riarrangiato [18] scrivendo l'elemento di volume nello spazio  $\mathbf{k}$  come il prodotto di un elemento di superficie a energia costante  $dS(E)$  e un incremento ortogonale ad essa  $\frac{dE}{|\nabla_{\mathbf{k}}E(\mathbf{k})|}$ , quindi

$$\rho(E) = \int \frac{dS(E)}{|\nabla_{\mathbf{k}}E(\mathbf{k})|}$$

Il termine a denominatore implica che per i valori di  $\mathbf{k}$  per cui il gradiente si annulla, la densità di stati (o la sua derivata prima) può presentare delle singolarità, dette *singolarità di Van Hove* [19]. In questo caso semplice si può ricavare l'espressione esatta della densità

$$\begin{aligned} \rho(E) &= \int \delta(E - 2 \cos(k)) dk = \int \frac{\delta(k - k_0)}{|2 \sin(k_0)|} dk \\ &= \frac{1}{\sqrt{4 - E^2}}, \quad k_0 = \cos^{-1}\left(\frac{E}{2}\right) \end{aligned} \tag{78}$$

Il risultato si può confrontare con quanto ottenuto numericamente, mostrato in fig.20

Anche l'esponente di Lyapunov ha una singolarità agli estremi della banda, se si interpolano i punti calcolati numericamente con una funzione del tipo  $\theta(E-a)|E-a|^b$  si ottiene in particolare  $a = 2.002 \pm 0.008$ ,  $b = 0.51 \pm 0.18$ ; è possibile ricavare l'esponente  $b$  anche per via analitica usando la formula di Thouless con la densità di stati a  $W=0$  già ricavata, opportunamente normalizzata e riscalata sull'intervallo  $[-1,1]$  per semplificare il calcolo.

$$\begin{aligned}\lambda(E) &= \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{\ln|E-x|}{\sqrt{1-x^2}} dx, \quad x = \cos(y) \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \ln(E - \cos(y)) dy, \quad \text{se } E > 1\end{aligned}$$

Ridefinendo  $E = \cosh(x)$  si può usare la formula [20]

$$\ln(\cosh(x) - \cos(y)) = |x| - \ln(2) - 2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\cos(ky)}{k} e^{-k|x|} \quad (79)$$

per semplificare l'integrale

$$\begin{aligned}\lambda(E) &= |\cosh^{-1}(E)| - \ln(2) - \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{e^{-k|x|}}{k} \int_0^\pi \cos(ky) dy \\ &= |\cosh^{-1}(E)| - \ln(2) - \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{e^{-k|x|}}{k^2} \sin(k\pi)\end{aligned}$$

gli addendi della serie sono tutti nulli, valutando il comportamento nell'intorno di  $E = 1$  mediante la sostituzione  $E = 1 + \epsilon$ ,  $\epsilon \rightarrow 0$

$$\lambda(1 + \epsilon) \approx \cosh^{-1}(1 + \epsilon) = \sqrt{2}\epsilon^{1/2} - \frac{\epsilon^{3/2}}{6\sqrt{2}} + \dots \quad (80)$$

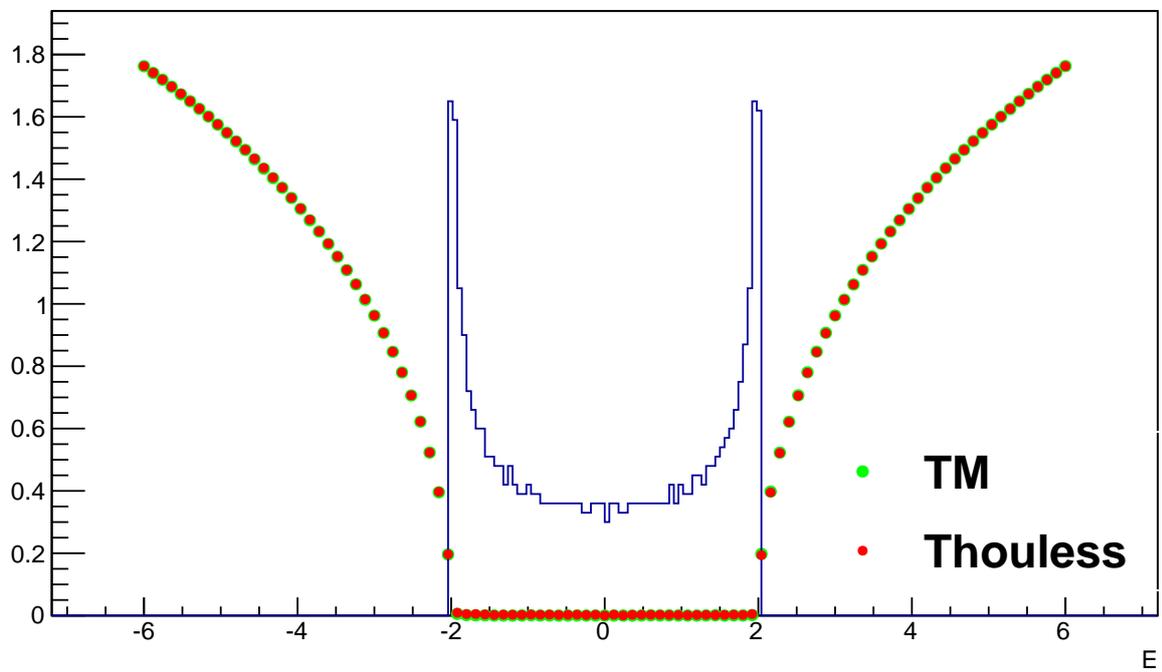


Figura 20: Densità di stati ed esponente di Lyapunov calcolati per rumore molto piccolo ( $W=0.1$ ), la densità di stati ha un andamento del tipo ricavato in (78) ed è singolare in  $\pm 2$ . Su tutta la banda occupata  $\lambda(E)$  è sostanzialmente nullo, quindi con questo grado di disordine e lunghezza del campione  $N=1200$  tutti gli stati sono estesi.

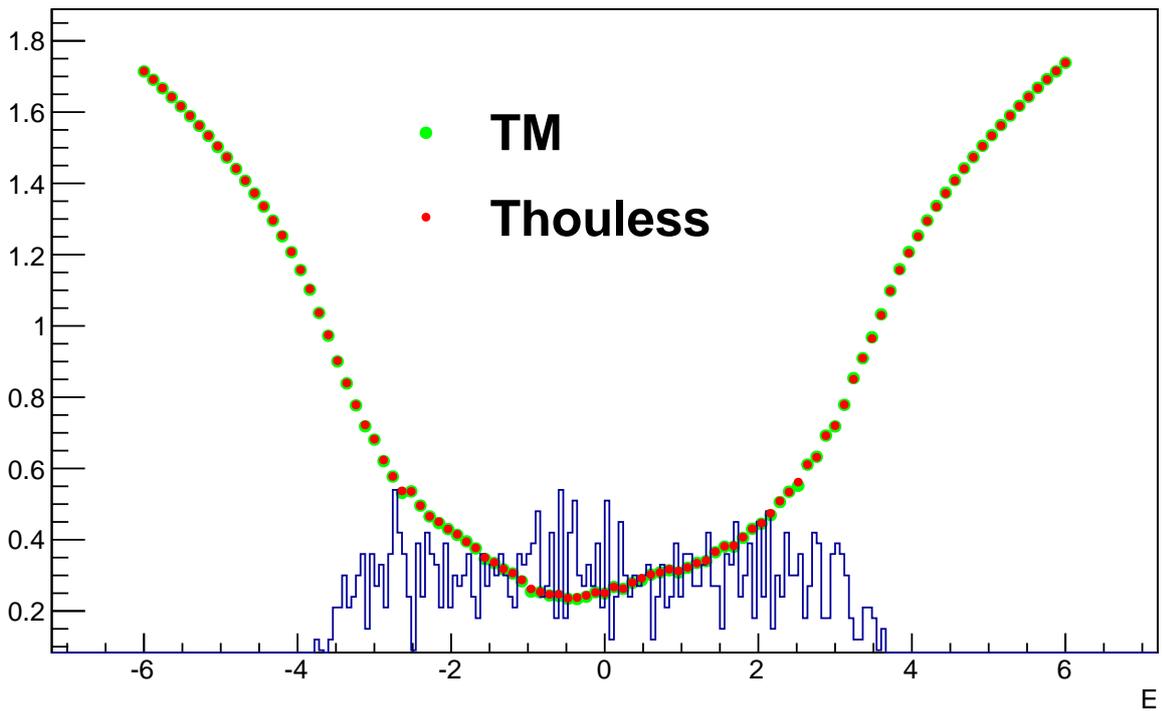


Figura 21:  $W=5$ , le singolarità di  $\rho(E)$  vengono rimosse dal disordine, tutti gli stati sono localizzati, infatti se si assume la lunghezza di localizzazione  $\xi = \lambda^{-1}$  in modo che  $u_n \sim e^{-\frac{n}{\xi}}$ , il massimo valore si ha a centro di banda pari a circa  $\xi \approx \frac{1}{0.2} = 5$ , che è evidentemente molto minore della lunghezza del campione  $N=1200$ .

I teoremi citati nella sezione 3 mostrano che lo spettro dell' hamiltoniana di Anderson è puramente discreto con stati localizzati per qualsiasi livello di disordine  $W > 0$ , tuttavia questi risultati sono validi solo nel limite termodinamico di  $N \rightarrow \infty$ . Calcolare anche la densità di stati richiede di diagonalizzare numericamente la matrice di Anderson, operazione molto dispendiosa a livello computazionale già per  $N \approx 1000$ , perciò per studiare sistemi più estesi conviene fare uso soltanto della matrice di trasferimento. Inoltre per meglio mettere in evidenza la localizzazione si può considerare il rapporto tra la lunghezza di localizzazione  $\xi(E) = \lambda(E)^{-1}$  e la dimensione del campione  $N$

$$R(E) = \frac{N}{\xi} = N\lambda(E)$$

Dal momento che per valori non molto elevati del disordine  $\lambda(E)$  nella banda  $[-2,2]$  rimane sostanzialmente costante come in fig.20, per associare a tutto lo spettro un solo valore significativo si può considerare la media di  $\lambda(E)$  su tale intervallo e studiare il comportamento di questo parametro al variare di  $N$  e  $W$ .

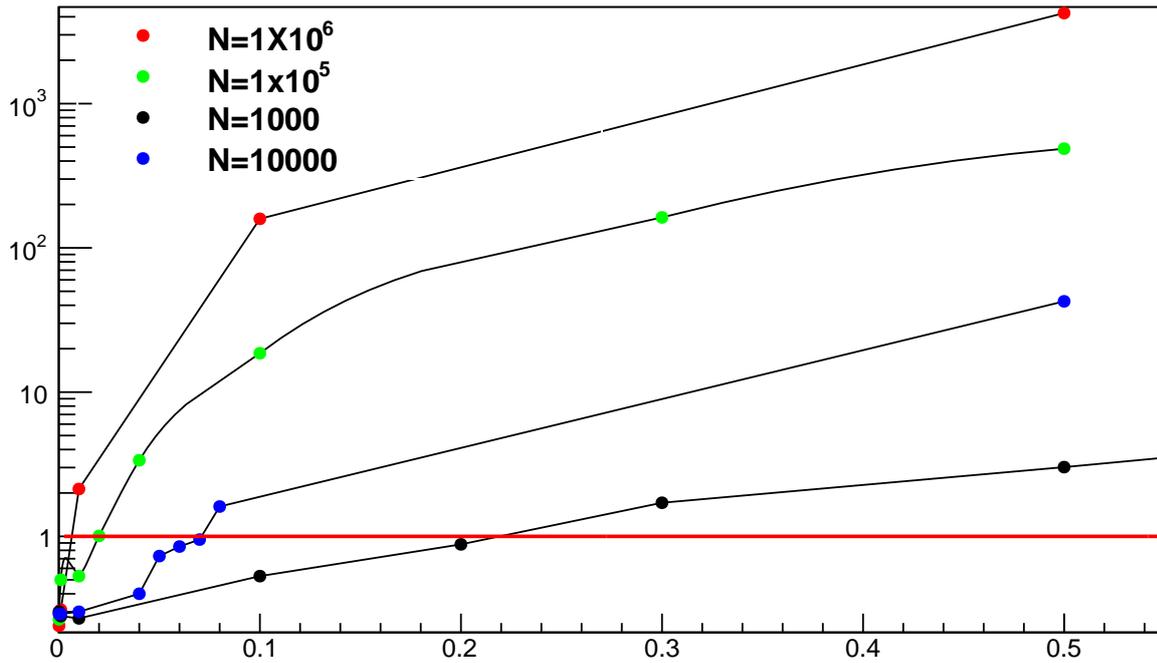


Figura 22: Se  $R > 1$  allora lo stato è localizzato; Si osserva che in accordo con quanto previsto teoricamente, più il sistema è esteso più il valore critico di  $W$  per la avere localizzazione di tutti gli stati occupati tende a zero, inoltre a disordine fissato,  $R$  ha un andamento crescente in  $N$ .

## 2D

In questo contesto per modello bidimensionale si intende un reticolo di dimensione  $m \times n$ , con ad esempio  $n \gg m$ ; come già discusso in precedenza la matrice hamiltoniana assume la forma seguente

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 & \mathbb{I}_m & & \mathbb{I}_m \\ \mathbb{I}_m & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \mathbb{I}_m \\ \mathbb{I}_m & & \mathbb{I}_m & \mathbf{A}_N \end{pmatrix} \psi = E\psi \quad (81)$$

ciascun blocco  $m \times m$  fisicamente fa riferimento ad una delle  $n$  sezioni trasversali in cui il sistema si pensa suddiviso (fig.9), perciò le identità di dimensione  $m \times m$  adiacenti alla diagonale principale realizzano un accoppiamento a primi vicini tra tali sezioni, e sulla diagonale gli  $\mathbf{A}_k$  vanno pensati come il laplaciano discretizzato della sezione a cui si aggiunge il termine diagonale di disordine  $\mathbf{D}_k$ , le identità agli estremi della matrice impongono condizioni al contorno periodiche sulla catena

$$\mathbf{A}_k = \nabla_d + \mathbf{D}_k$$

Il laplaciano discretizzato si può costruire a partire dalla *matrice di adiacenza* delle sezioni, ad esempio indicizzando in questo modo i siti del reticolo, con  $m=4$



Si costruisce la matrice  $\nabla_d$  di elementi

$$(\nabla_d)_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{se c'è interazione} \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad \forall i \neq j$$

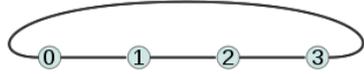
$$(\nabla_d)_{ii} = -\sum_{k \neq i} (\nabla_d)_{ik}$$

per un reticolo semplice di 4 siti come mostrato in figura

$$\nabla_d = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

I termini in diagonale fanno sì che la somma delle righe sia nulla, una proprietà da richiedere all'operatore laplaciano, essi non sono tutti uguali, il che discende dal fatto che non tutti i siti interagiscono con lo stesso numero di primi vicini; questo non rappresenta una situazione fisicamente significativa se si vuole studiare un campione esteso, che contiene nell'ordine di  $\approx 10^{23}$  atomi, in cui si può considerare lo spazio circostante ogni sito completamente isotropo se non in una regione di volume trascurabile nei pressi della superficie.

Perciò generalmente, per meglio rappresentare il limite termodinamico, si introducono condizioni al contorno che impongano lo stesso numero interazioni per ogni sito; a questo punto i termini sulla diagonale di  $\nabla_d$  sono tutti uguali e possono essere posti a zero senza alcuna perdita di generalità.



$$\implies \nabla_d = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

La matrice di trasferimento sarà di dimensione  $2m \times 2m$ , ci saranno perciò  $m$  esponenti di Lyapunov positivi ad essa associati, che possono essere calcolati numericamente con i metodi proposti, tuttavia la formula di Thouless per dimensioni superiori assume una forma differente [13]

$$\frac{\lambda_1 + \dots + \lambda_m}{m} = \int dx \rho(x) \ln |E - x| \quad (82)$$

il secondo algoritmo fornisce quindi in questo caso meno informazioni perchè si potrà ottenere solo la media degli esponenti positivi ( si ricorda che per il teorema di Virster  $\lambda_{m+k} = -\lambda_m$  ). In quanto segue se si è voluto verificare l'accordo tra i due diversi metodi numerici ed è stata quindi ricavata la media degli  $m$  esponenti calcolati con la matrice di trasferimento.

Analogamente a quanto fatto in una dimensione ricaviamo il comportamento per la densità di stati nel modello libero. Poichè in un reticolo regolare di dimensione  $M \times N$  le due direzioni spaziali sono indipendenti la soluzione dell'equazione agli autovalori ha la forma fattorizzata

$$u_{m,n} = e^{ik_1 m + ik_2 n} \quad (83)$$

con i valori di  $k_i$  opportunamente discretizzati

$$k_1 = \frac{2\pi}{M} l \quad l = -M/2, \dots, M/2$$

$$k_2 = \frac{2\pi}{N} j \quad j = -N/2, \dots, N/2$$

con energie date da

$$E(k_1, k_2) = 2 \cos(k_1) + 2 \cos(k_2) \quad (84)$$

La densità di stati si può sempre calcolare a partire da quest' ultima relazione tramite la (78), tuttavia in 1D la lunghezza della catena era sufficiente a considerare i valori di  $k$  permessi un continuo, in questo caso verranno simulati reticoli con estensione molto minore in una delle due direzioni, ad esempio sia  $M \ll N$  con  $M \approx 10^1$  e  $N \approx 10^2$ , allora si sostituisce l'integrale in  $dk_1$  con una somma discreta sui valori permessi di  $k$ .

$$\rho_2(E) = \sum_{k_1} \int \delta(E - 2 \cos(k_1) + 2 \cos(k_2)) dk_2 \quad (85)$$

se si definisce la densità di stati del problema monodimensionale

$$\rho_1(\epsilon) = \int \delta(\epsilon - 2 \cos(k)) dk$$

allora si può riscrivere la (86) come una sovrapposizione di M termini  $\rho_1$  con una traslazione di variabile.

$$\rho_2(E) = \sum_{k_1} \rho_1(E - 2 \cos(k_1)) \quad (86)$$

Lo spettro di Lyapunov come mostrato in fig.23 permette di discutere la localizzazione degli autostati analogamente a quanto fatto in 1D.

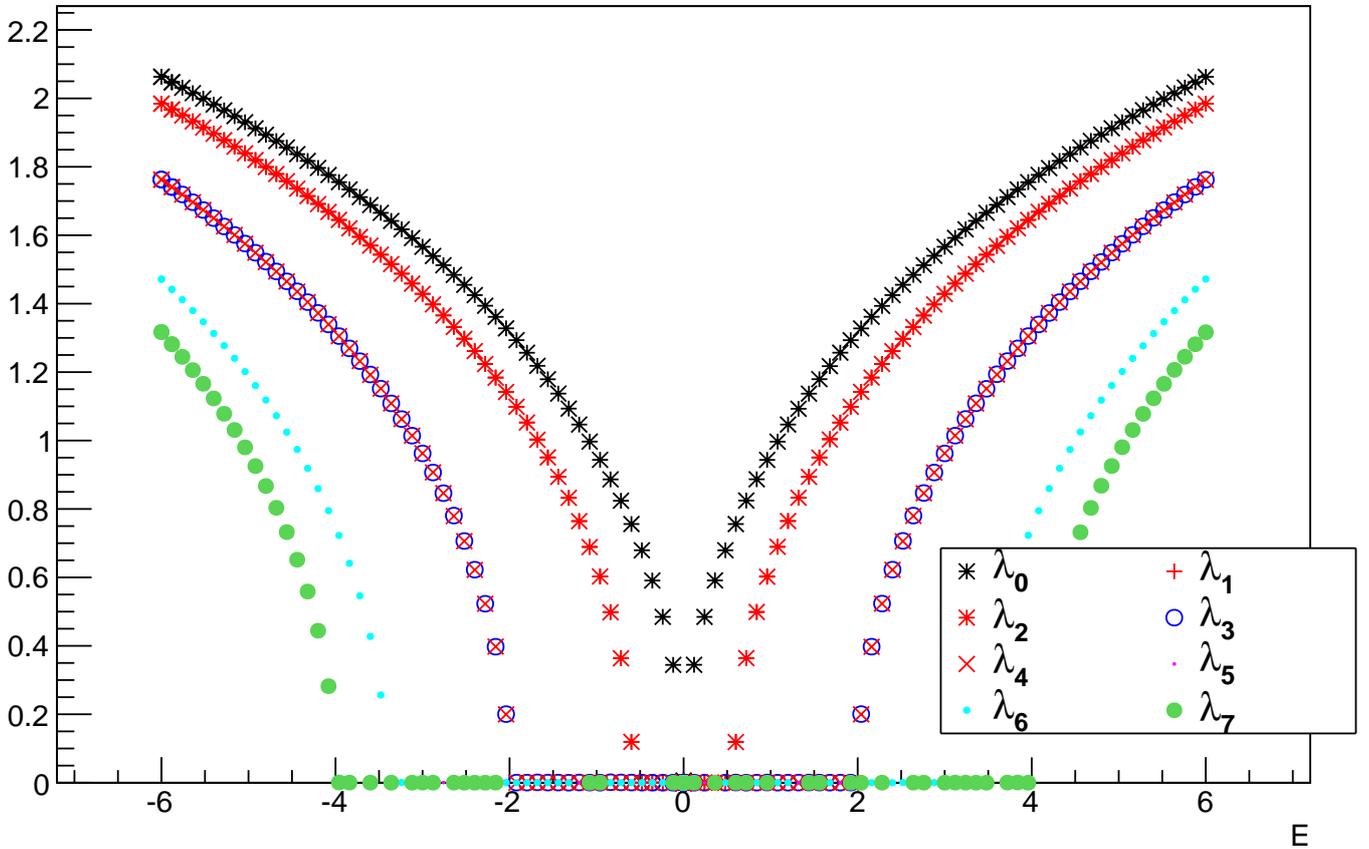


Figura 23: Spettro di Lyapunov per un sistema  $8 \times 4000$  e  $W=0.01$ , l'esponente minimo  $\lambda_7$ , che è quello rilevante per la localizzazione degli stati ha un comportamento simile a quanto mostrato in fig.20.

In fig.23 si osserva che il minimo esponente di Lyapunov è sostanzialmente costante nell'intervallo  $[-4,4]$ , la banda occupata a  $W=0$ , perciò per caratterizzare la funzione  $\lambda(E)$  con un solo dato significativo per la localizzazione degli stati si può tentare di utilizzare la media del parametro  $R$  su tale regione

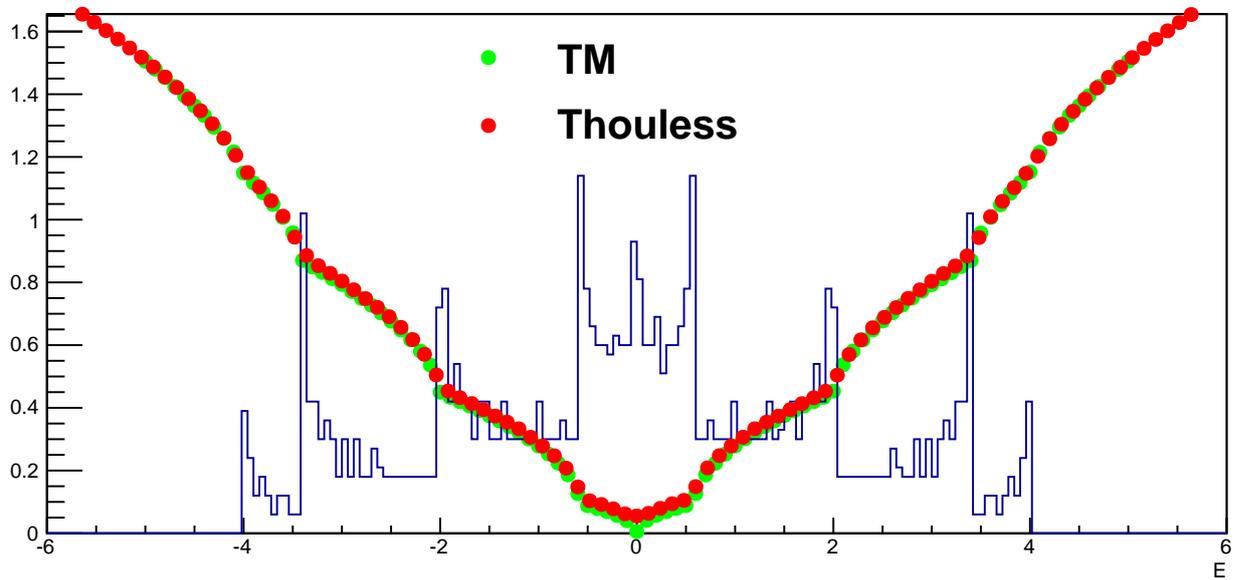


Figura 24: Media degli esponenti di Lyapunov positivi calcolata con i due algoritmi su un sistema  $8 \times 200$  con  $W=0.01$ , la densità di stati ha la forma ricavata in (86).

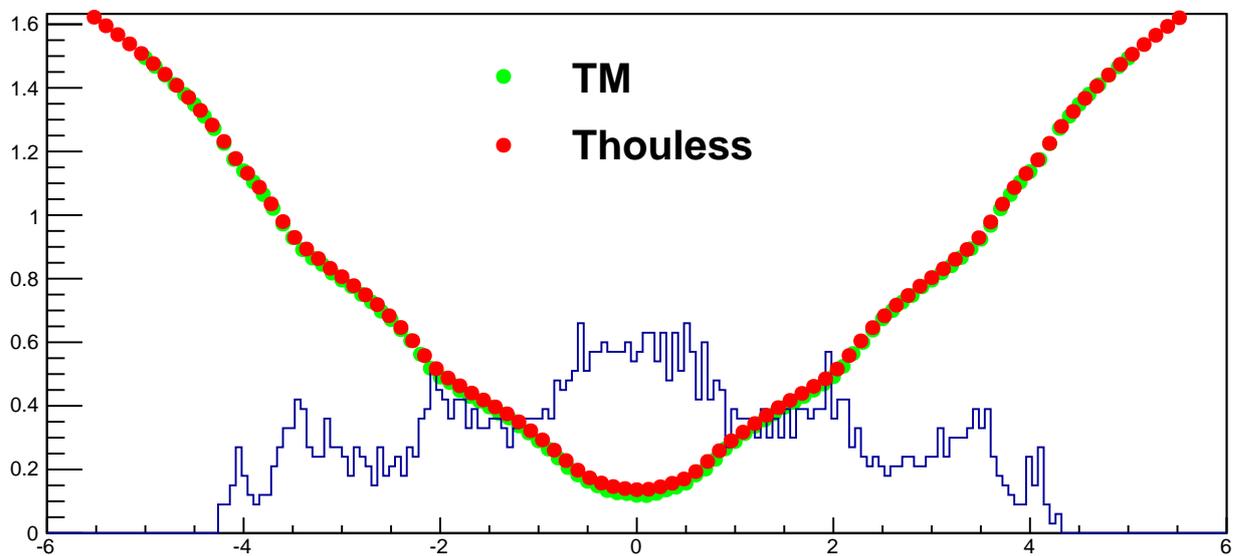


Figura 25: Aumentando il parametro di disordine  $W=2$   $\rho(E)$  non mostra più singolarità, i due metodi di calcolo sono in buon accordo e la formula analitica (82) risulta verificata.

$$R(E) = \frac{N}{\xi} = N\lambda(E)$$

e valutare il suo comportamento al variare di  $W$ ,  $N$  ed  $M$ . Ci si aspetta anche in due dimensioni che, nel limite  $N \rightarrow \infty$  tutti gli stati siano localizzati, vale a dire  $R > 1$  secondo questo criterio per qualsiasi  $W \neq 0$ . Anche nel caso di  $W \gg 0$  in cui la banda di energia si allarga, la media su  $[-4,4]$  costituisce ugualmente una valida indicazione, in quanto nella regione esterna  $\lambda(E)$  cresce.

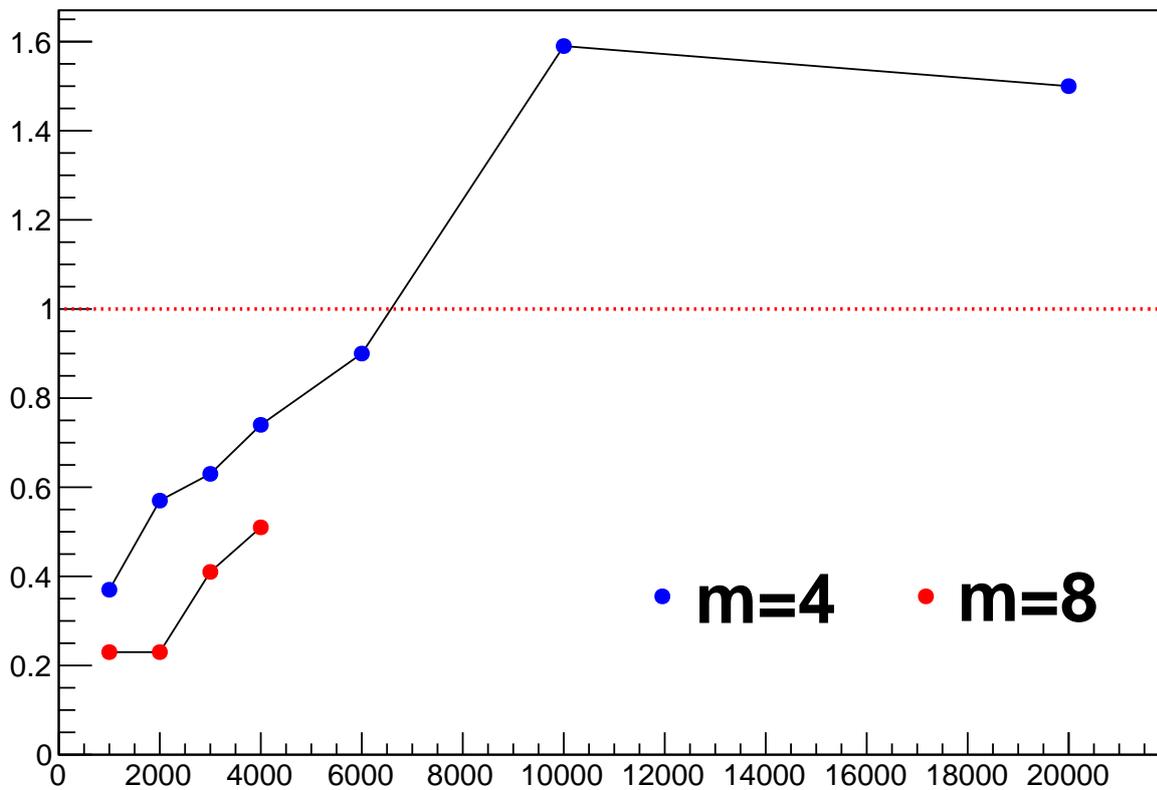


Figura 26: Media di  $R(E)$  al variare di  $N$ , con  $W=0.1$ . La dimensione della matrice di trasferimento è proporzionale a  $m$ , perciò con  $m=8$  non è stato possibile simulare una catena altrettanto estesa in  $N$ . Il comportamento rispecchia quanto atteso, più il sistema è esteso, più lo stesso livello di disordine produce localizzazione esponenziale.

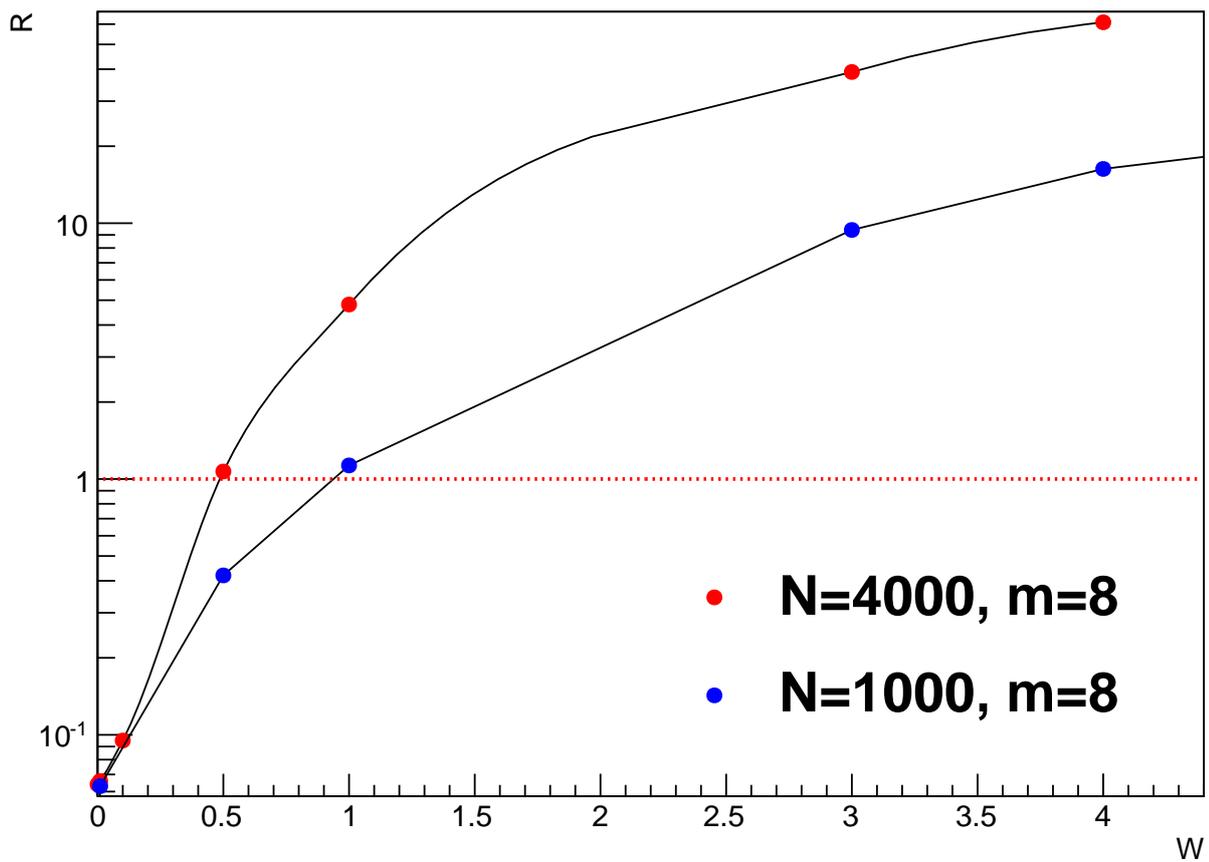


Figura 27: Media di  $R(E)$  in funzione del disordine, al di sopra di un certo valore critico tutti gli stati si localizzano. Tale valore dovrebbe essere  $W = 0$ , probabilmente la deviazione dall'idealità è dovuta alle dimensioni finite del sistema, infatti il caso  $N=4000$  si avvicina maggiormente al comportamento limite.

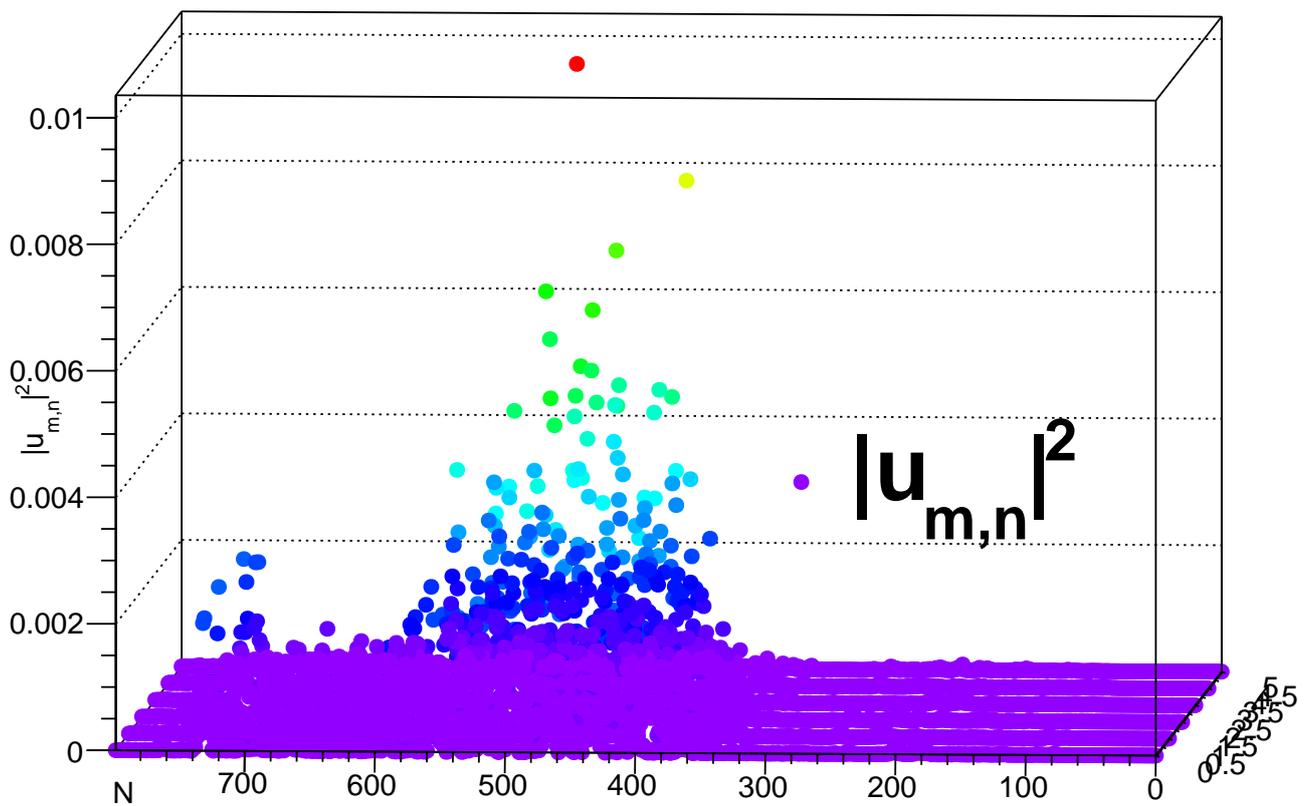
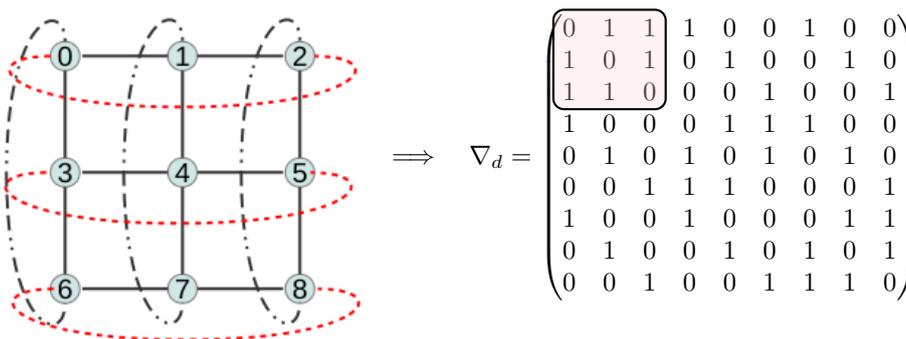


Figura 28: Anche in due dimensioni si possono rappresentare in maniera esplicita gli autostati calcolati numericamente, nell'immagine il modulo quadro di un autostato con  $E$  approssimativamente all'estremo della banda occupata, in un sistema  $800 \times 6$ .

### 3D

La descrizione di un reticolo tridimensionale è completamente analoga al caso 2D salvo sostituire opportunamente la matrice laplaciana della sezione trasversale con l'opportuna matrice di dimensione  $m$ , tanti quanti sono i siti che la compongono.



Nell'esempio per un reticolo regolare  $3 \times 3$  si riconosce la struttura a blocchi della matrice  $\nabla_d$ , la quale costituisce a sua volta il blocco sulla diagonale nell'hamiltoniana  $9N \times 9N$  di un sistema di lunghezza  $N$ , costruita sempre secondo lo schema (81). Per quanto riguarda la densità di stati si può ottenere, con le considerazioni già viste, una forma

$$\rho_3(E) = \sum_{k_1, k_2} \rho_1(E - 2 \cos(k_1) - 2 \cos(k_2)) \quad (87)$$

Data l'analogia con il caso bidimensionale appare chiaro che per un sistema a sezione quadrata di  $m$  siti, è sempre possibile trattare il problema in termini di matrice di trasferimento, tuttavia questo significa già per un reticolo  $4 \times 4$  dover trattare matrici di trasferimento  $32 \times 32$  e calcolare lo spettro di Lyapunov risulta possibile (esempio in fig.30) ma dispendioso a livello computazionale, perciò è piuttosto difficile simulare sistemi di dimensione tale da mostrare un comportamento particolarmente interessante.

Alcuni risultati che si possono ottenere applicando la stessa trattazione della sezione precedente in fig.31 e mostrano un comportamento simile al reticolo 2D, con una tendenza al crescere della dimensione del sistema ad avere una transizione tra stati estesi e localizzati - secondo il criterio utilizzato - per valori sempre più piccoli del parametro di disordine.

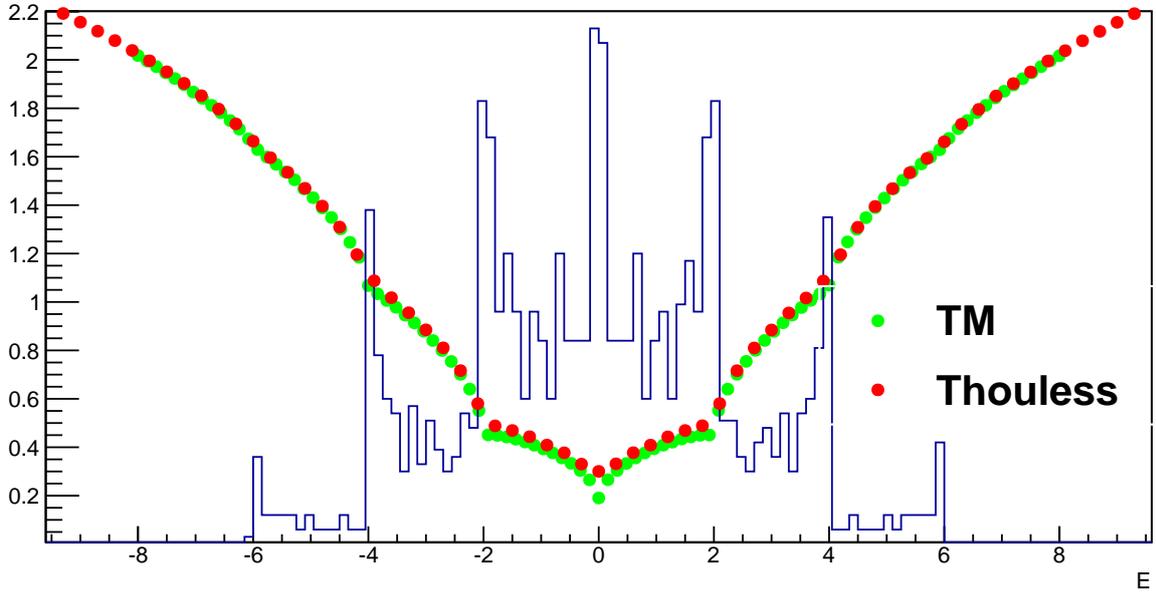


Figura 29: Calcolo della densità di stati e della media degli esponenti di Lyapunov per un reticolo  $(4 \times 4) \times 1000$ , che possiamo indicare secondo la notazione fin qui utilizzata con  $m=16, N=1000$ .  $\rho(E)$  è del tipo (87) con  $W=0.1$ .

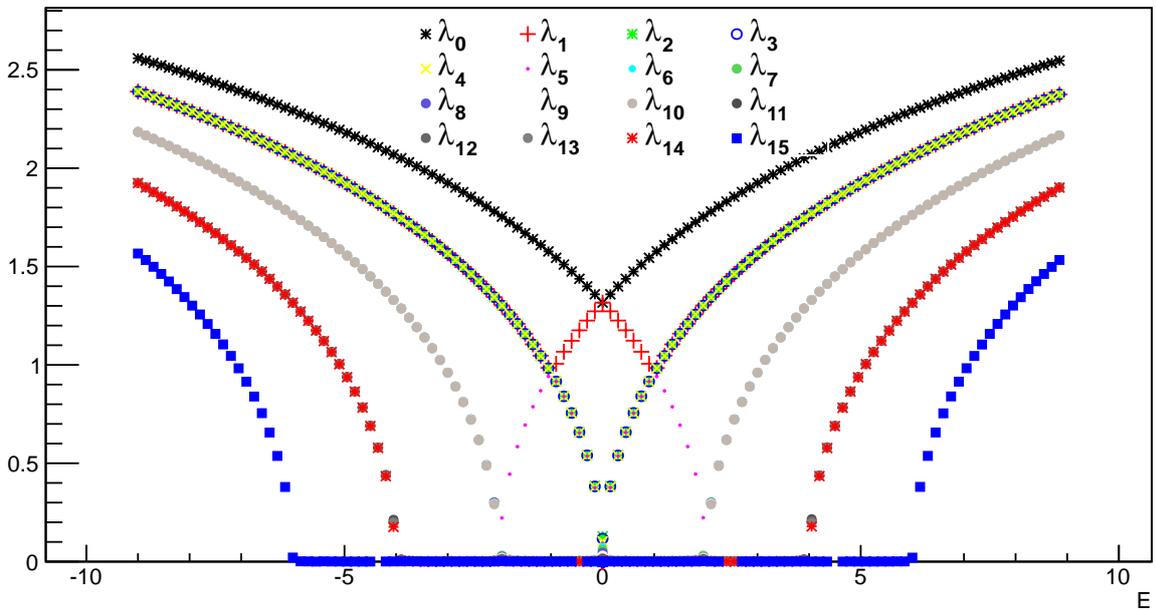


Figura 30: Spettro di Lyapunov per un sistema  $m=16, N=1000$  e  $W=0.5$ .

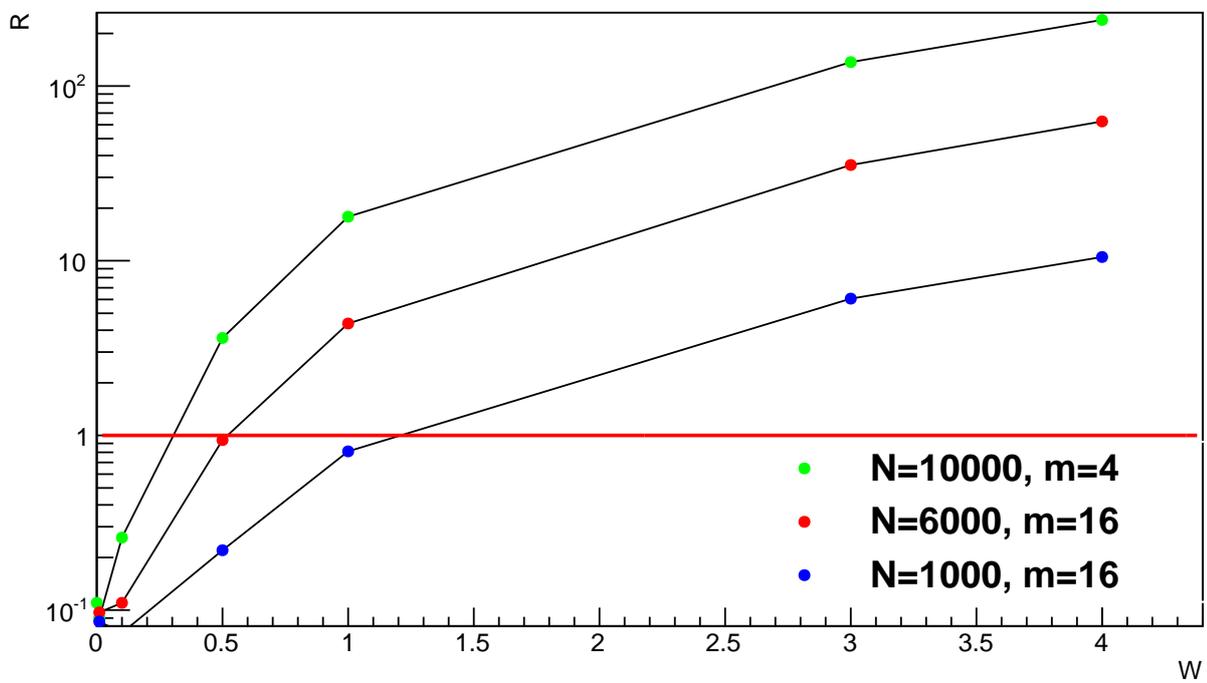


Figura 31: Andamento del parametro  $R$  in funzione del disordine  $W$ .

## Appendice

Gli algoritmi discussi nell'elaborato sono stati implementati nel linguaggio C++, utilizzando una libreria di algebra lineare [26] disponibile gratuitamente online "<http://arma.sourceforge.net/>". Per brevità non sono riportati integralmente tutti i programmi realizzati, quello che segue calcola gli esponenti di Lyapunov per il prodotto di matrici random 10x10 con distribuzione normale, per i quali esiste un risultato analitico [14]

$$\lambda_i = \frac{1}{2} \left( \ln 2 + \psi \left( \frac{10 - i + 1}{2} \right) \right) \quad (88)$$

dove  $\psi(x) = \frac{d \ln \Gamma(x)}{dx}$  è la funzione digamma. Il programma si può applicare al calcolo dello spettro di Lyapunov della matrice di trasferimento nel modello di Anderson. Per realizzare i grafici sono state utilizzate le librerie ROOT, disponibili a questo indirizzo "<http://root.cern.ch/drupal/>".

```
1 #include <iostream>
2 #include <cstdlib>
3 #include <cmath>
4 #include <fstream>
5 #include <time.h>
6 #include "armadillo"
7 #include <boost/math/special_functions/digamma.hpp>
8
9 using namespace arma;
10 using namespace std;
11 using namespace boost::math;
12
13
14 //Proiezione del vettore "in" sul vettore "sub"
15 vec proj(vec in, vec sub){
16
17     int size=in.size();
18     vec p=vec(size);
19     p=((dot(sub,in))/(dot(sub,sub)))*sub;
20     return p;
21 }
22
23 //Volume del parallelepipedo con determinante Gramiano
24
25 double vol(mat in,int dim){
26
27     mat A=zeros<mat>(dim,dim);
28     for(int i=0;i<dim;i++){
29         for(int j=0;j<dim;j++){
30             A(i,j)=dot(in.col(i),in.col(j));
31         }
32     }
33     return sqrt(abs(det(A)));
34 }
35
36 //Ortogonalizzazione di Gram-Schmidt
```

```

37 mat ortho(mat in){
38
39     double norm;
40     int size=sqrt(in.size());
41     mat B=zeros<mat>(size,size);
42     B.col(0)=in.col(0);
43     vec tot=zeros<vec>(size);
44
45
46     for(int i=1;i<size;i++){
47         for(int j=0;j<i;j++) tot+=proj(in.col(i),B.col(j));
48         B.col(i)=in.col(i)-tot;
49         tot=zeros<vec>(size);
50     }
51
52
53
54     for(int q=0;q<size;q++){
55         norm=sqrt(dot(B.col(q),B.col(q)));
56         B.col(q)=(1./norm)*B.col(q);
57     }
58
59     return B;
60 }
61
62
63 //Main
64
65
66 int main(int argc,char** argv){
67
68     fstream file,file2;
69     file.open("out.dat",fstream::in | fstream::out | fstream::↔
70         app);
71     file2.open("histo.dat",fstream::in | fstream::out | ↔
72         fstream::app);
73     int size=10;
74     mat A=randu<mat>(size,size)-0.5; //Viene riempita la ↔
75         matrice con i vettori di base del parallelogramma
76     A=ortho(A);
77
78     srand (time(NULL));
79
80     mat P=mat(size,size);
81
82     int N=50000;
83     int m=atoi(argv[1]);
84     vec v=zeros<vec>(size);
85
86     for(int i=0;i<N;i++){
87         for(int j=0;j<m;j++){ //Ogni m iterazioni viene eseguita↔

```

```

    l'ortonormalizzazione
88     P=randn<mat>(size,size); //La matrice P viene riempita ←
    con elementi casuali estratti secondo una gaussiana ←
    normale
89     for(int y=0;y<size;y++) A.col(y)=P*A.col(y);
90 }
91
92     for(int p=0;p<size;p++)v(p)+=log(vol(A,p+1)); //
93
94
95
96
97     A=ortho(A);
98
99 }
100
101     v=(1./((N*m)+1))*v;
102     cout<<"l_ "<<1<<"= " <<v(0) <<" Expected = " << (0.5)*(log←
    (2)+digamma((0.5)*(size)))<<endl;
103     for(int i=1;i<size;i++) cout<<"l_ "<<i+1<<"= " <<v(i)-v(i←
    -1) <<" Expected = " << (0.5)*(log(2)+digamma((0.5)*(←
    size-i)))<<endl;
104
105     return 0;
106 }

```

## Riferimenti bibliografici

- [1] P. W. Anderson. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys. Rev.*, 109:1492–1505, Mar 1958.
- [2] N.Mott. *Metal-Insulator Transitions*. Taylor & Francis, 1990.
- [3] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan. Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 42:673–676, Mar 1979.
- [4] 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.
- [5] K.Von Kitzling. From nobel lectures, physics 1981-1990, editor-in-charge tore frängsmyr, editor gösta ekspång, world scientific publishing co., singapore, 1993.
- [6] Capri A.Z. *Nonrelativistic Quantum Mechanics*. Benjamin Cummings, 1985.
- [7] M.Goerbig. Quantum hall effects. *arXiv:0909.1998v2*, 2009.
- [8] G.Roati et al. Anderson localization of a non-interacting bose-einstein condensate. *Nature*, 2008.
- [9] B.Kramer and A.MacKinnon. Localization:theory and experiment. *Rep.Prog.Phys*, 56:1469–1564, Jun 1993.
- [10] Dirk Hundertmark. A short introduction to anderson localization, 2007.
- [11] H.L.Cycon, R.G.Froese, W.Kirsch, and B.Simon. *Schroedinger Operators*. Springer Verlag, 1987.
- [12] I.Lifshits, S.Gredeskul, and L.Pastur. *Introduction to the theory of disordered systems*. Wiley, 1988.
- [13] Luca G Molinari. Non-hermitian spectra and anderson localization. . *Phys. A: Math. Theor.*, 42, 2009.
- [14] A.Crisanti, G.Paladin, and A.Vulpani. *Products of Random Matrices in Statistical Physics*. Springer Verlag, 1993.
- [15] Sergei Winitzki. Linear algebra via exterior products.
- [16] P.Lloyd. Exactly solvable model of eletronic states in a three-dimensional disordered hamiltonian: non-existence of localized states. *J.Phys.C:Solid State Phys.*, 2:1717, 1969.
- [17] F.Haake. *Quantum Signatures of Chaos*. Springer, 2000.
- [18] J.Callaway. *Quantum theory of the solid state*. Academic Press, 1991.
- [19] L.Van Hove. The occurrence of singularities in the elastic frequency distribution of a crystal. *Phys.Review*, 89:1189–1193, 1953.

- [20] I.M. Ryzhik I.S. Gradshteyn. *Table of Integrals, Series and Products*. Academic Press, 1980.
- [21] R.Bhatia. *Matrix Analysis*. Springer, 1997.
- [22] P.Bougerol and J.Lacroix. *Products of Random Matrices with Applications to Schrödinger Operators*. Birkhäuser Boston, 1985.
- [23] E.Abrahams, editor. *50 years of Anderson Localization*. World Scientific, 2010.
- [24] Kazushige Ishii. Localization of eigenstates and transport phenomena in the one-dimensional disordered system. *Progress of Theoretical Physics Supplement*, 53:77–138, 1973.
- [25] A.Crisanti, C.Flesia, A.Pasquarello, and A.Vulpani. One-dimensional random potentials allowing for extended states. *J.Phys.:Condensed Matter*, 1:9509–9512, 1989.
- [26] Conrad Sanderson. Armadillo: An open source c++ linear algebra library for fast prototyping and computationally intensive experiments. *Technical Report, NICTA*, 2010.