

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

Facoltà di Scienze e Tecnologie Laurea triennale in Fisica

Proprietà di localizzazione in matrici a banda e modelli di trasporto con disordine

Relatore: **Prof. Luca Guido Molinari**

> Elaborato finale di: **Tommaso Parolini** Matricola 776088

> > PACS: 02.30.Tb 02.50.Cw 75.15.Rn

Anno accademico 2012–2013

Indice

1	Intr	oduzione	3
2	Teo	remi di localizzazione	5
	2.1	Inverse di matrici a banda	5
	2.2	Matrici casuali	13
		2.2.1 Richiami di teoria della probabilità	13
		2.2.2 Il teorema di Oseledets: due formulazioni	14
	2.3	Matrici di trasferimento	16
3	Har	niltoniani tridiagonali	22
	3.1	Operatore di Laplace discreto e matrici di Toeplitz positive	22
		3.1.1 Caso unidimensionale	23
		3.1.2 Caso bidimensionale e tridimensionale	25
	3.2	Matrici di Anderson	28
	3.3	Localizzazione in matrici casuali non hermitiane	31
4	Il m	nodello di Anderson	35
	4.1	Definizione dell'Hamiltoniano	35
		4.1.1 Hamiltoniano libero	35
		4.1.2 Disordine	36
		4.1.3 Proprietà spettrali e spettro dell'Hamiltoniano	38
	4.2	Localizzazione degli autostati	39
		4.2.1 Localizzazione spettrale e dinamica	39
		4.2.2 Teoremi di localizzazione per il modello di Anderson	40
		4.2.3 Cenno ai modelli a volume finito	41
	4.3	Transizione metallo–isolante	42
5	Con	nclusioni	43

Capitolo 1 Introduzione

Il problema di caratterizzare l'inversa di una matrice a banda è stato oggetto di un gran numero di studi, i primi dei quali risalgono alla fine degli anni 1950, ed è stato affrontato da svariate angolazioni. La maggior parte dei risultati noti è riassunta in Meurant [22] e in Nabben [25].

Nel presente lavoro, l'attenzione verrà rivolta in particolar modo a un risultato relativamente recente ottenuto da Demko, Moss e Smith [14]; essi studiano il problema di stimare la velocità con cui gli elementi dell'inversa di una generica matrice a banda decadono a zero allontanandosi dalla diagonale principale. Il loro originale approccio costituisce un elemento di novità nel panorama in questione, e fornisce risultati che hanno il pregio di valere tanto per le matrici di rango finito quanto per quelle "infinite" — con ciò intendendo endomorfismi limitati di uno spazio di Hilbert separabile. L'idea di Demko, Moss e Smith è che un operatore a banda elevato a una potenza naturale è ancora a banda (anche se la banda in generale si allarga con l'aumentare della potenza), e pertanto i suoi elementi di matrice saranno nulli lontano dalla diagonale. Questa semplice osservazione viene combinata con la teoria spettrale degli operatori autoaggiunti e con un risultato noto sull'approssimazione uniforme della funzione $x \mapsto 1/x$ tramite polinomi per arrivare a una maggiorazione sul generico elemento della matrice inversa. Benché questo risultato valga solo per operatori il cui spettro sia interamente contenuto nel semiasse reale positivo (zero escluso), esso viene esteso a qualunque operatore a banda invertibile grazie all'identità $A^{-1} = A^* (AA^*)^{-1}$ (se A è invertibile, AA^* è sempre positivo nel senso di cui sopra).

Le matrici a banda costituiscono un argomento d'interesse non soltanto in matematica pura, ma anche e soprattutto in fisica, dove trovano applicazioni in svariati campi; in particolare, un sistema Hamiltoniano discreto con interazione a primi vicini è descritto in modo naturale da un operatore tridiagonale (o tridiagonale a blocchi), e più in generale un'interazione a k-esimi vicini è codificata da un operatore (2k + 1)-diagonale. L'inversione di matrici di questo tipo riveste pertanto un ruolo fondamentale nell'ambito di questi sistemi, ogniqualvolta si renda necessario calcolare il risolvente dell'Hamiltoniano.

Un esempio di grande importanza in questo senso è costituito dal modello di P.W. Anderson [10], che nella sua semplicità è in grado di spiegare la transizione metallo \rightarrow isolante osservata in svariati materiali — in particolare semiconduttori drogati, cfr. [19]. Nel suo articolo, Anderson fece uso di un Hamiltoniano tridiagonale costruito sommando all'Hamiltoniano libero un potenziale casuale per modellizzare un sistema discreto con *hopping* a primi vicini — ad esempio un cristallo o una catena infiniti — in cui è presente un certo grado di "disordine" casuale, e mostrò tramite argomenti non rigorosi come un livello sufficiente di disordine sia in

grado di localizzare completamente gli autostati (normalmente diffusivi) dell'Hamiltoniano. Il modello può essere affrontato sia analiticamente sia numericamente dal punto di vista teorico, ed è stato estensivamente studiato fino ai giorni nostri anche dal punto di vista sperimentale [21].

Nel caso unidimensionale, in particolare, è possibile affrontare il modello in modo completamente analitico con svariate tecniche; alcune di esse fanno uso di risultati riportati nel capitolo 2 — in particolare, la tecnica della matrice di trasferimento e il teorema di Furstenberg, di cui viene presentata un'estensione dovuta a Oseledets.

Una matrice a banda, ad esempio tridiagonale, codifica un sistema di equazioni lineari che possono essere poste nella forma di una singola equazione lineare ricorsiva per le componenti del vettore soluzione, con l'aggiunta di opportune condizioni al contorno; questa può essere risolta introducendo un'idonea matrice di trasferimento, la cui dimensione coincide con la semiampiezza di banda più uno, costruita moltiplicando un numero di matrici pari alla dimensione della matrice di partenza; la tecnica si generalizza immediatamente al caso di matrici tridiagonali a blocchi. Nell'ultima sezione del capitolo 2 viene mostrato il procedimento generale per ottenere la matrice di trasferimento per un sistema tridiagonale a blocchi, e si espone un teorema che rende esplicita la relazione di dualità che sussiste tra il polinomio caratteristico della matrice tridiagonale — l'"Hamiltoniano" del sistema, i cui autovalori forniscono i livelli energetici — e quello della relativa matrice di trasferimento, i cui autovalori sintetizzano le condizioni al contorno imposte al problema.

Nel capitolo 3 viene studiato il problema dell'inversione di alcune matrici a banda che occorrono in fisica. Viene dapprima invertita la matrice di Laplace, ottenuta discretizzando in modo naturale l'operatore di Laplace in modo da "trasferirlo" da $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^m)$ a \mathbb{R}^{mn} . Questo è un esempio di matrice tridiagonale *di Toeplitz*, cioè con valori costanti su ciascuna diagonale; per matrici di questo tipo è possibile scrivere formule chiuse per gli elementi dell'inversa, il che permette un paragone diretto con i limiti superiori di Demko, Moss e Smith. In seguito, si effettua lo stesso tipo di paragone su matrici ottenute sommando al laplaciano discreto potenziali diagonali a valore casuale, e si mostra come in questo caso il vincolo DMS sia decisamente pessimistico. Infine, si applica il teorema di dualità per la matrice di trasferimento a un modello di Hamiltoniano tridiagonale casuale non hermitiano, dipendente da un parametro complesso z di "asimmetria", per mostrare come la localizzazione degli autovettori sia strettamente controllata dal valore di |z|. La transizione degli autostati da un regime localizzato a uno esteso al variare di un parametro fisico — un concetto di basilare importanza nel modello di Anderson — risulta in questo esempio particolarmente manifesta.

Il capitolo 4 è dedicato alla definizione formale del modello di Anderson sopra citato, con la presentazione di alcuni risultati rigorosi noti che vengono enunciati senza dimostrazione. Si commenta qualitativamente il modello con accenno alle congetture ancora aperte e agli esperimenti rilevanti.

Infine, nel capitolo 5 si commenta un problema presentato dai teoremi di localizzazione esponenziale presentati nel capitolo 2, che non sono in grado di stimare in generale l'andamento dei parametri di localizzazione in funzione di n; sarebbe di grande interesse indagare in questa direzione per assicurare che, almeno sotto opportune ipotesi, i vincoli si mantengano genuinamente esponenziali a qualunque valore di n.

Capitolo 2

Teoremi di localizzazione

In questo capitolo vengono discusse dapprima le proprietà delle matrici a banda. Si sfrutta in particolare un'elegante combinazione di teoria dell'approssimazione e analisi funzionale per dimostrare che gli elementi dell'inversa di una matrice a banda sono vincolati a decadere esponenzialmente lontano dalla diagonale principale, ridimostrando un teorema dovuto a Demko, Moss e Smith.

Vengono in seguito studiate le proprietà di matrici ottenute dal prodotto di un gran numero di *matrici casuali*, per le quali, sotto opportune ipotesi, valgono proprietà che non dipendono dalla realizzazione esplicita del prodotto, essendo invece quasi certamente deterministiche. Questo è un fatto di primaria importanza nei contesti in cui il modello adoperato presenta per sua natura elementi stocastici incontrollabili, in quanto permette di studiare le caratteristiche medie del sistema senza doversi interessare al dettaglio dei "microstati". Esempi di questi modelli si trovano in meccanica statistica e nello studio dei cristalli. L'ipotesi più rilevante che viene supposta è quella di *ergodicità*, benché sia possibile enunciare alcuni risultati anche per sistemi non ergodici.

Nell'ultima sezione si mettono in relazione i due argomenti mostrando come ciascuna matrice a banda — che in questo constesto possiamo interpretare come Hamiltoniano di un sistema discreto — genera in modo naturale una matrice di trasferimento, che non è altro che un prodotto di molte matrici. In diversi casi, quest'ultima può essere trattata con i teoremi ergodici accennati nella sezione precedente. È anche possibile caratterizzare i valori singolari di una *singola* matrice di trasferimento sfruttando una relazione di dualità che lega quest'ultima alla matrice a banda da cui deriva.

2.1 Inverse di matrici a banda

L'insieme di tutte le matrici $m \times n$ sul campo \mathbb{K} viene denominato $\mathcal{M}(m, n, \mathbb{K})$, con l'abbreviazione $\mathcal{M}(n, \mathbb{K}) = \mathcal{M}(n, n, \mathbb{K})$ per le matrici quadrate. Una matrice $A \in \mathcal{M}(n, \mathbb{K})$ è detta *a* banda se esistono due numeri interi l, k tali che

$$\forall i \in \{1, \dots, n\}, \ j \notin [i-l, i-l+k] \cap \mathbb{N} \implies A(i,j) = 0.$$

$$(2.1)$$

Se vale la formula di cui sopra, si dice in particolare che A è k-banded. Se k è pari e il numero l può essere scelto uguale a k/2, si dice che A è centrata. Per una matrice centrata, l'equazione (2.1) equivale a

$$\forall i, j \in \{1, \dots, n\}, \ |i - j| > \frac{k}{2} \implies A(i, j) = 0.$$
 (2.2)

Ad esempio, la seguente matrice:

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 2 \end{pmatrix}$$
(2.3)

è centrata e 2-banded (si dice anche che è tridiagonale).

Ci interessa caratterizzare gli elementi dell'inversa di una matrice a banda. Il risultato principale esposto in questa sezione, dovuto a Demko, Moss e Smith, fa uso di un risultato originariamente ottenuto da Chebyshev per l'approssimazione uniforme su un intervallo compatto della funzione $(x - a)^{-1}$ mediante polinomi.

Di seguito, s'indica con \mathbb{P}_n l'insieme dei polinomi¹ di grado non superiore a n, e con $\mathcal{C}(I)$ lo spazio delle funzioni continue sull'intervallo $I \subset \mathbb{R}$. Il simbolo $\|\cdot\|_{\infty}^{I}$ denota la norma uniforme su $\mathcal{C}(I)$, definita per ogni funzione f appartenente a questo spazio da

$$||f||_{\infty}^{I} = \sup_{x \in I} |f(x)|.$$

Lemma 2.1.1. Si pongano f(x) = 1/x (x > 0) $e \ 0 < a < b$, e si chiami r = b/a. Allora, per ogni $n \in \mathbb{N}$ esiste uno e un solo $p_n \in \mathbb{P}_n$ tale che

$$e_n(f) \equiv \inf_{p \in \mathcal{P}_n} \|f - p\|_{\infty}^{[a,b]} = \|f - p_n\|_{\infty}^{[a,b]},$$
(2.4)

e si ha

$$e_n(f) = Cq^{n+1} \tag{2.5}$$

$$C = \frac{(\sqrt{r}+1)^2}{2b}, \quad q = \frac{\sqrt{r}-1}{\sqrt{r}+1}.$$
 (2.6)

Dimostrazione. Cfr. [5], p. 33, come cit. in [14].

Questo risultato fornisce due informazioni: innanzitutto, che il miglior polinomio approssimante per f esiste ed è unico; e inoltre che l'approssimazione uniforme diventa esponenzialmente migliore con il grado del polinomio approssimante.

In quanto segue, s'indica con $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ l'insieme di tutti gli endomorfismi limitati sullo spazio di Hilbert complesso $(\mathcal{H}, \langle, \rangle)$ e con $\|\cdot\|_2$ la norma hilbertiana definita su \mathcal{H} da $\|x\|_2 = \langle x, x \rangle^{1/2}$. Si denota con $\|\cdot\|_{\mathcal{B}}$ la norma operatoriale uniforme sullo spazio $\mathcal{B}(\mathcal{H})$:

$$||A||_{\mathcal{B}} = \sup_{x \in \mathcal{H}_o} \frac{||Ax||_2}{||x||_2},$$

dove o è il vettore nullo di \mathcal{H} e si è posto $\mathcal{H}_o = \mathcal{H} \setminus \{o\}$.

Lo spettro dell'operatore A viene denotato da $\sigma(A)$. Se A è un elemento di $\mathcal{B}(\mathcal{H})$, si dice che A è definito positivo se

$$\sigma(A) \subset [m, M] \qquad 0 < m \le M. \tag{2.7}$$

¹Definiti su un'algebra generica; nel nostro caso, siamo interessati ai polinomi a valori reali (o complessi) e a quelli a valori di operatore (*vedi sotto*).

Si usa $\ell^2(S)$ per indicare lo spazio di Hilbert di tutte le successioni $(u_n)_{n \in S}$ a valori complessi definite sull'insieme S e tali che esista finito il numero

$$\sum_{n \in S} |u_n|^2.$$

Per $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ e \mathcal{H} separabile, inoltre, si definisce l'*elemento di matrice* (i, j) di A rispetto a una qualunque fissata base $\{e_i\}$ dello spazio di Hilbert come il numero

$$A(i,j) = \langle e_i, Ae_j \rangle.$$

Se $\mathcal{H} = \{1, \ldots, N\}$ per qualche $N \in \mathbb{N}$, la matrice $(A(i, j)) \in \mathcal{M}(N, \mathbb{K})$ viene detta matrice rappresentativa dell'operatore A rispetto alla base prescelta; questa nomenclatura si estende inoltre al caso in cui \mathcal{H} sia infinito-dimensionale (purché separabile). La matrice (A(i, j)) e l'operatore A sono legati da un isomorfismo e potranno pertanto essere confusi l'uno con l'altro.

In questo spirito, una naturale estensione della formula (2.1) permette di definire la nozione di matrice (operatore) a banda anche nel caso infinito-dimensionale: diciamo che un operatore $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ (\mathcal{H} separabile) è *a banda* se esiste una base $\{e_i\}$ di \mathcal{H} tale che

$$\forall i, j \notin [i-l, i-l+k] \cap \mathbb{N} \implies A(i,j) = 0 \tag{2.8}$$

per qualche $l, k \in \mathbb{Z}$. Tutte le altre definizioni si estendono in modo altrettanto naturale.

L'idea dietro al teorema di Demko, Moss e Smith è combinare il lemma 2.1.1 con la teoria spettrale degli operatori limitati per ottenere limiti superiori che vincolino in valore assoluto gli elementi dell'inverso di un operatore a banda.

Prima di poter enunciare il teorema è necessario disporre di alcuni risultati di teoria spettrale.

Lemma 2.1.2. Se $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ è definito positivo nel senso di formula (2.7), allora è anche autoaggiunto, invertibile e si ha $A^{-1} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$.

Dimostrazione. Per l'autoaggiuntezza, vedi [6], p. 195. Per l'invertibilità, cfr. [2], p. 4. La limitatezza di A^{-1} è assicurata da un corollario del teorema della funzione aperta, noto come teorema dell'inverso limitato: se A è un operatore lineare limitato e iniettivo tra spazi di Banach, allora A^{-1} è limitato (cfr. [7], p. 49).

Lemma 2.1.3. Se $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ è autoaggiunto e p è un polinomio, si ha

$$||p(A)||_{\mathcal{B}} = \sup_{\lambda \in \sigma(A)} |p(\lambda)|;$$

in particolare,

$$||A||_{\mathcal{B}} = \sup_{\lambda \in \sigma(A)} |\lambda|.$$

Dimostrazione. Vedi [6], pp. 192 e 223.

Osservazione 2.1.1. Nel lemma di cui sopra, p(A) è l'operatore ottenuto sostituendo, nel polinomio p(x), a ogni potenza x^n il corrispettivo prodotto tra operatori $A^n = AA \cdots A$ (n volte). È possibile definire un calcolo funzionale più generale che rende ben definite espressioni come f(A), dove f è una funzione sufficientemente regolare: nel nostro caso, è sufficiente

limitarsi agli operatori limitati e autoaggiunti, il cui spettro è contenuto in un intervallo compatto $[a, b] \subset \mathbb{R}$. Ogni funzione $f : [a, b] \to \mathbb{C}$ che sia continua sul suo dominio può essere approssimata uniformemente da una successione di polinomi (teorema di approssimazione di Stone-Weierstrass, vedi [8], p. 159). Dal momento che sappiamo costruire polinomi a valore di operatore, siamo in grado di dare un senso alla scrittura f(A) definendola come limite uniforme della successione $(p_n(A))_n$, dove $(p_n)_n$ è una qualunque successione che approssima f uniformemente su [a, b]; si dimostra che f(A) è ben definita e indipendente dalla scelta di $(p_n)_n$.

Un risultato di fondamentale importanza, che generalizza il lemma precedente, è il seguente.

Lemma 2.1.4. Se $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ è autoaggiunto e se $f : \sigma(A) \to \mathbb{C}$ è una funzione continua, allora

$$||f(A)||_{\mathcal{B}} = \sup_{\lambda \in \sigma(A)} |f(\lambda)|$$

Dimostrazione. Vedi [6], p. 222.

Corollario 2.1.5. Se $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ è definito positivo come in formula (2.7), si ha

$$||A^{-1}||_{\mathcal{B}} = \sup_{\lambda \in \sigma(A)} \left|\frac{1}{\lambda}\right|.$$

Dimostrazione. Il membro sinistre esiste in virtù del lemma 2.1.2. La funzione f(x) = 1/x è continua su $\sigma(A) \not\supseteq 0$; applicando il lemma 2.1.4 si ha la tesi.

È ora possibile enunciare il risultato principale di questa sezione.

Teorema 2.1.6. (di Demko–Moss–Smith) Sia $A \in \mathcal{B}(\ell^2(S))$ con $S \subseteq \mathbb{Z}$, A definito positivo come in formula (2.7). Sia inoltre A k-banded. Allora, se $a = \min \sigma(A)$ e $b = \max \sigma(A)$ (segue dalle ipotesi che $0 < a \le b < +\infty$), si ha

$$|A^{-1}(i,j)| \le \begin{cases} C\lambda^{|i-j|} & \text{se } i \neq j \\ 1/a & \text{se } i = j \end{cases}$$
(2.9)

dove $\lambda = q^{2/k}$, $r = \frac{b}{a} \ e \ C, q \ sono \ definiti \ dalle \ formule \ (2.6).$

Dimostrazione. La dimostrazione segue [14]. Essendo definito positivo, A è autoaggiunto (e in particolare simmetrico) per il lemma 2.1.2; quindi A, oltre a essere a banda, è centrato (cfr. formula (2.2)). È inoltre invertibile e il suo inverso è limitato. Se A è k-banded, A^r è rk-banded per ogni $r = 0, 1, \ldots$, e lo stesso vale per $p_r(A)$ se $p_r \in \mathbf{P}_r$. Pertanto, $p_r(A)(i, j) = 0$ ogni volta che

$$|i-j| > \frac{rk}{2}.$$
 (2.10)

Sfruttando questo, fissiamo (i, j) con $i \neq j$ e prendiamo

$$r = \left\lceil \frac{2|i-j|}{k} \right\rceil - 1,$$

cioè il più grande intero che verifichi la condizione (2.10) (notiamo che $r \ge 0$). A questo punto possiamo usare il fatto che $p_r(A)(i,j) = 0$ per scrivere

$$|A^{-1}(i,j)| = |A^{-1}(i,j) - p_r(A)(i,j)| \le ||A^{-1} - p_r(A)||_{\mathcal{B}} = \sup_{x \in \sigma(A)} \left|\frac{1}{x} - p_r(x)\right|$$

(per l'ultimo passaggio, si vedano i lemmi 2.1.3, 2.1.4 e 2.1.5). Dal momento che l'estremo superiore preso su $\sigma(A)$ è minore o uguale a quello preso su $[a, b] \supset \sigma(A)$, è possibile maggiorare il membro più a destra con $e_n(f)$ (cfr. (2.4) e (2.5)) scegliendo come p_r il polinomio in P_r che meglio approssima la funzione 1/x su [a, b] (che esiste ed è unico per il lemma 2.1.1). Con questo accorgimento, e sfruttando il fatto che $r + 1 \ge 2|i - j|/k \in q < 1$, si ottiene

$$|A^{-1}(i,j)| \le Cq^{r+1} \le Cq^{2|i-j|/k}$$

che è la tesi. La dimostrazione si completa nel caso i = j osservando che

$$A^{-1}(i,i) \Big| \le \|A^{-1}\|_{\mathcal{B}} = \frac{1}{a}.$$

Il teorema può essere enunciato più in generale per operatori *a blocchi* definiti positivi, senza modifiche essenziali alle ipotesi o all'enunciato.

È possibile inoltre estendere il teorema rinunciando all'ipotesi A > 0. Questo è possibile osservando che

$$A^{-1} = A^* \left(A A^* \right)^{-1}. \tag{2.11}$$

Qui, come in seguito, A^* denota il coniugato hermitiano di A. Non si richiede neanche che A sia centrato, ma ulteriori proprietà sono disponibili qualora sia almeno *quasi centrato*, cioè qualora la diagonale principale sia contenuta nelle bande non banali (una di queste generalizzazioni è esposta nel teorema 2.1.8).

Il seguente teorema fornisce un'estensione analoga specializzata al caso di operatori tridiagonali *a blocchi*, cioè del tipo

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & & & \\ A_{21} & A_{22} & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & A_{n-1,n} & \\ & & A_{n,n-1} & A_{nn} & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix},$$
(2.12)

dove $A_{i,j} \in \mathcal{M}(m, \mathbb{C})$ $(m \in \mathbb{N})$ per ogni i, j (la definizione di operatori a banda a blocchi si ottiene da formula (2.8) rimpiazzando A(i, j) = 0 con $A_{ij} = \mathbb{O}$).

Teorema 2.1.7. Sia $A \in \mathcal{B}(\ell^2(S))$ con $S \subseteq \mathbb{Z}$, A tridiagonale a blocchi come in (2.12) e invertibile. Allora, se $a = \min \sigma(A^*A)$ e $b = \max \sigma(A^*A)$ ($0 < a \le b < +\infty$), e indicando con $A^{-1}[i, j]$ l'elemento più grande in valore assoluto del blocco A_{ij} , con $i \ne j$, si ha

$$\left|A^{-1}[i,j]\right| \le C_i \, q^{|i-j|/2} \tag{2.13}$$

$$C_{i} = \frac{C}{\sqrt{q}} \sqrt{m} \left(\|A_{i-1,i}\|_{\mathcal{B}} + \|A_{ii}\|_{\mathcal{B}} + \|A_{i+1,i}\|_{\mathcal{B}} \right),$$
(2.14)

dove $q \in C$ sono definiti dalle formule (2.6) (ma con a e b definiti come in questo teorema), e ponendo $A_{ij} = \mathbb{O}$ nel caso in cui risulti mal definita (ad esempio $A_{01} \in A_{n+1,n}$ nel caso mn-dimensionale).

Dimostrazione. Dimostriamo il teorema in una forma più generale, considerando A un operatore centrato k-banded a blocchi.

Chiamiamo per semplicità $AA^* = B$ (che è 2k-banded) e consideriamo il suo blocco B_{ij} . Questa è una matrice $m \times m$ di cui possiamo maggiorare la norma: se v è un vettore unitario in $\ell^2(S)$ di componenti $(v_y)_{y \in S}$, vale che (si omette il pedice \mathcal{B} alle norme)

$$||B_{ij}v||^2 = \sum_x \left|\sum_y B(x,y)v_y\right|^2 = (*),$$

dove x corre tra m(i-1) + 1 e mi, mentre y tra m(j-1) + 1 e mj; ricordando che B soddisfa le ipotesi del teorema 2.1.6, cosicché

$$|B(x,y)| \le |B[i,j]| \le C\lambda^{|i-j|}$$

(e si tenga presente che C e q sono definite rispetto alla matrice AA^* , e che essendo questa 2k-banded λ vale $q^{1/k}$), si ottiene

$$(*) \le \sum_{x} C^{2} \lambda^{2|i-j|} \underbrace{\sum_{y}}_{y} |v_{y}|^{2} = m C^{2} q^{2|i-j|/k}$$

che implica $||B_{ij}|| \leq \sqrt{m}Cq^{|i-j|/k}$. A questo punto, dal momento che la struttura a banda fa sì che

$$A_{ij}^{-1} = \sum_{r=-k/2}^{k/2} \left(A_{i,i+r}^* B_{i+r,j} \right)$$

(con la convenzione che $A_{ij} = B_{ij} = \mathbb{O}$ ogniqual
volta risultino mal definite), si ottiene

$$\begin{aligned} \left\|A_{ij}^{-1}\right\| &\leq \sum_{r=-k/2}^{k/2} \left(\|A_{i+r,i}\| \|B_{i+r,j}\|\right) \leq \sqrt{m}C \sum_{r=-k/2}^{k/2} \left(\|A_{i+r,i}\| q^{|i-j+r|/k}\right) \leq \\ &\leq \sqrt{m} \frac{C}{\sqrt{q}} \left(\sum_{r=-k/2}^{k/2} \|A_{i+r,i}\|\right) q^{|i-j|/k}, \end{aligned}$$

dove l'ultima maggiorazione, che sfrutta $|i - j + r| \ge |i - j| - |r| \ge |i - j| - k/2$, vale solo se $|i - j| \ge k/2$. Ponendo k = 2 (caso tridiagonale a blocchi) si ha la tesi, dal momento che $|A^{-1}[i, j]| \le |A^{-1}_{ij}||$.

Osservazione 2.1.2. In effetti, un ragionamento analogo a quello svolto nella dimostrazione permette di concludere che se A è un operatore k-banded a blocchi quasi centrato, con $l \in k$ come nella definizione (2.8) (con $l \in k - l$ entrambi non negativi essendo A quasi centrato), allora

$$||A_{ij}^{-1}|| \le \sqrt{m}C(1+k)q^{-M/k}||A||q^{|i-j|/k} \qquad |i-j| \ge M,$$

dove m è la dimensione di ciascun blocco, C, q come nel teorema e $M = \max\{l, k - l\}$. Nella formula di cui sopra, s'è compiuta l'ulteriore maggiorazione

$$\sum_{r=-l}^{k-l} \|A_{i-r,i}\| \le (1+k) \|A\|,$$

dovuta al fatto che ciascuna sottomatrice ha norma non superiore a quella dell'operatore completo².

Si possono enunciare questi risultati ricorrendo al numero di condizionamento, definito da

$$\operatorname{cond}(A) = \|A\|_{\mathcal{B}} \|A^{-1}\|_{\mathcal{B}}$$
 (2.15)

(qui A è un operatore limitato e con inverso limitato; cfr. [2], p. 232).

Dal momento che nello spazio $\mathcal{B}(\ell^2(S))$ vale $||AA^*||_{\mathcal{B}} = ||A||_{\mathcal{B}}^2$ (proprietà di C^{*}-algebra), si ha che

$$\operatorname{cond}(AA^*) = \left(\operatorname{cond}(A)\right)^2$$

Questo permette di formulare in modo leggermente diverso il teorema 2.1.6; ne approfittiamo per enunciare anche un'estensione del teorema al caso in cui non valga A > 0, fornita sempre da Demko, Moss e Smith in [14].

Teorema 2.1.8. Sia A un operatore in $\mathcal{B}(\ell^2(S)), S \subseteq \mathbb{Z}$, k-banded e con inverso limitato. Allora, se A è definito positivo si ha, per $i \neq j$:

$$|A^{-1}(i,j)| \le C\lambda^{|i-j|}$$

con

$$\lambda = \left(\frac{\sqrt{\operatorname{cond}(A)} - 1}{\sqrt{\operatorname{cond}(A)} + 1}\right)^{\frac{2}{k}} \qquad \qquad C = \frac{\left(\sqrt{\operatorname{cond}(A)} + 1\right)^2}{2\|A\|}.$$

Se viene a mancare la positività, allora

$$|A^{-1}(i,j)| \le C_1 \lambda_1^{|i-j|}$$

con

$$\lambda_1 = \left(\frac{\operatorname{cond}(A) - 1}{\operatorname{cond}(A) + 1}\right)^{\frac{1}{k}}$$

per qualche costante C_1 , che può essere scelta pari a

$$C_1 = (1+k)\lambda_1^{-k} \frac{(\text{cond}(A)+1)^2}{2\|A\|}$$

nel caso in cui A sia quasi-centrato.

Osservazione 2.1.3. Di fatto, qualunque operatore a banda può essere reso quasi-centrato tramite una reindicizzazione degli elementi di base. Inoltre, la richiesta d'invertibilità per A implica che A è necessariamente quasi-centrato se $S = \{1, ..., N\}$ o $S = \mathbb{Z}^+$.

$$A_{ij} = Q_{(i)}AQ_{(j)},$$

²Questo può essere dimostrato sfruttando il fatto che

dove $Q_{(i)}$ è il proiettore a blocchi che ha tutti i blocchi nulli tranne l'(i, i)-esimo, che è l'identità; essendo la norma uniforme di $Q_{(i)}$ e $Q_{(j)}$ pari a 1, per la proprietà sub-moltiplicativa si ottiene $||A_{ij}|| \leq ||A||$.

Naturalmente, il numero di condizionamento coincide con quello che prima avevamo chiamato r. Questa forma, tuttavia, permette di apprezzare più chiaramente il legame tra il caso definito positivo e quello più generale; inoltre, permette di confrontare questo risultato con altri teoremi noti: si definisca il numero di condizionamento relativo alla norma p come

$$\operatorname{cond}_p(A) = \|A\|_p \|A^{-1}\|_p$$

dove con $\|\cdot\|_p$ si intende la norma su $\mathcal{B}(\ell^p(S))$ indotta da $\ell^p(S)$, ossia

$$||A||_p = \sup_{||x||_p = 1} ||Ax||_p$$

dove $||x||_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p\right)^{1/p}$. Demko [13] ha dimostrato che un operatore a banda che sia limitato, invertibile e con inverso limitato su un $\ell^p(S)$ (per qualche $1 \le p \le +\infty$) è necessariamente limitato, invertibile e con inverso limitato su ciascun $\ell^p(S)$; de Boor [12] ha successivamente dimostrato che un tale operatore soddisfa per ogni $1 \le p \le +\infty$

$$|A^{-1}(i,j)| \le C\lambda_p^{|i-j|}$$

con

$$\lambda_p = \left(\frac{(\operatorname{cond}_p(A))^p - 1}{(\operatorname{cond}_p(A))^p + 1}\right)^{\frac{1}{kp}},$$

dove C è una costante che dipende solo da $||A||_p$, $||A^{-1}||_p$ e k. Naturalmente, per ottenere la migliore maggiorazione possibile si dovrebbe prendere il minimo sui λ_p , ma non è chiaro come questo possa essere effettuato in generale. È interessante notare come le formule del teorema 2.1.8 richiamino quella di de Boor. Se il numero di condizionamento non dipende da p (cosa che è stata dimostrata vera per le matrici di Toeplitz totalmente positive³), il valore di λ_p risulta minimo per p = 1; con l'ipotesi aggiuntiva di positività dell'operatore, il teorema 2.1.8 migliora la stima fornendo il valore formale "p = 1/2".

Concludiamo la sezione con un teorema che generalizza i risultati esposti finora al caso più generale di matrici sparse; queste sono informalmente definite come matrici i cui elementi sono "in gran parte" nulli. A tale scopo, definiamo per ogni operatore $A \in \ell^2(S), S \subseteq \mathbb{Z}$, la famiglia di insiemi supporto

$$\mathcal{S}_n(A) = \bigcup_{k=0}^n \{(i,j) \mid A^k(i,j) \neq 0\} \subset S \times S,$$

e a partire da questa la famiglia insiemi di decadimento

$$\mathcal{D}_n(A) = (S \times S) \setminus \mathcal{S}_n(A).$$

L'insieme $\mathcal{D}_n = \mathcal{D}_n(A)$ contiene tutti i siti su cui si annulla sia A sia le sue potenze fino a A^n (compresa l'identità). Pertanto, la successione di insiemi $(\mathcal{D}_n)_n$ caratterizza in modo dettagliato il modo in cui gli elementi non nulli di A si "spargono" a forza di moltiplicare Aper sé stessa. Demko, Moss e Smith forniscono il seguente teorema:

³Una matrice è detta *totalmente positiva* se tutti i suoi minori di qualunque ordine sono non negativi.

Teorema 2.1.9. Sia A > 0 un operatore su $\mathcal{B}(\ell^2(S)), S \subseteq \mathbb{Z}$. Allora si ha

$$\sup_{(i,j)\in\mathcal{D}_n(A)}|A^{-1}(i,j)|\leq Cq^{n+1},$$

dove C, q sono definiti in (2.6).

Dimostrazione. Sia $(i, j) \in \mathcal{D}_n(A)$; allora segue dalla definizione di $\mathcal{D}_n(A)$ che $p_n(A)(i, j) = 0$ ogniqualvolta $p_n \in \mathcal{P}_n$. Scegliamo come p_n il polinomio approssimante 1/x su [a, b] (con $0 < a \leq b < +\infty$ come nel teorema 2.1.6). Un ragionamento identico a quello svolto nella dimostrazione del teorema 2.1.6 porta alla tesi (si noti che necessariamente $i \neq j$, visto che le coppie del tipo (i, i) non appartengono ad alcun insieme di decadimento). \Box

Questo risultato è in grado di fornire vincoli più accurati sugli elementi dell'operatore inverso, anche se al prezzo di un'implementazione più difficile. Ad esempio, è in grado di prevedere l'andamento non monotono degli elementi dell'inverso di un operatore k-banded a blocchi (cfr. Figura 3); inoltre, è applicabile a matrici (finite) tridiagonali cicliche, che possiedono cioè elementi non nulli sugli angoli (1, m) e (m, 1) (dove m è la dimensione della matrice).

2.2 Matrici casuali

Prima di affrontare questa sezione, è opportuno richiamare alcune definizioni fondamentali di teoria della probabilità (seguendo il cosiddetto "modello di Kolmogorov", [1]).

2.2.1 Richiami di teoria della probabilità

Uno spazio di probabilità è definito come una terna $(\Omega, \mathscr{E}, \mathbb{P})$, dove Ω è un insieme non vuoto detto spazio campionario, \mathscr{E} una σ -algebra su Ω detta spazio degli eventi e \mathbb{P} una funzione di misura su \mathscr{E} , detta misura di probabilità, tale che $\mathbb{P}(\Omega) = 1$.

Una variabile casuale a valori in uno spazio misurabile (Ω', \mathscr{F}) è una qualunque mappa misurabile $f : \Omega \to \Omega'$. Se f è a valori reali (o complessi), e se inoltre è \mathbb{P} -integrabile su Ω , si definisce il suo valore atteso come

$$\mathbb{E}[f] = \int_{\Omega} f \, \mathrm{d}\mathbb{P}.$$
(2.16)

Osserviamo che, poiché la composizione di due funzioni misurabili è ancora misurabile, se g è una funzione misurabile da (Ω', \mathscr{F}) in (Ω'', \mathscr{G}) , allora $g \circ f$ è una variabile casuale $(\Omega, \mathscr{E}, \mathbb{P}) \to (\Omega'', \mathscr{G})$.

La distribuzione di probabilità di una variabile casuale f sullo spazio di arrivo Ω' è per definizione la misura⁴ $f_*\mathbb{P} = \mathbb{P} \circ f^{-1}$, definita su \mathscr{F} e chiamata il pushforward di \mathbb{P} tramite f.

Le variabili casuali $(f_{\alpha})_{\alpha \in A}$ (con $f_{\alpha} : \Omega \to \Omega'$ per ogni α) sono dette *identicamente di*stribuite se ogni singola variabile f_{α} possiede la medesima distribuzione di probabilità, cioè se

$$(f_{\alpha})_{\star} \mathbb{P} = (f_{\beta})_{\star} \mathbb{P} \qquad \forall \alpha, \beta \in A.$$

Sono dette *indipendenti* se

$$\mathbb{P}\left(\bigcap_{\alpha\in A} f_{\alpha}^{-1}(E_{\alpha})\right) = \prod_{\alpha\in A} \left((f_{\alpha})_{\star} \mathbb{P} \right)(E_{\alpha}) \qquad \{E_{\alpha}\}_{\alpha} \subset \mathscr{F}.$$
(2.17)

⁴Si può mostrare che questa è effettivamente una misura se f è misurabile.

Nel caso in cui Ω' sia uno spazio di matrici — diciamo $M(m, \mathbb{C})$ — allora f(x) $(x \in \Omega)$ è chiamata una matrice casuale (random matrix o RM).

Siamo interessati a matrici costruite moltiplicando un grande numero di matrici casuali. In effetti, è possibile enunciare con minime ipotesi un risultato di fondamentale importanza riguardo ai prodotti, noto come *teorema ergodico moltiplicativo* o *teorema di Oseledets* (anche scritto *Oseledec*). Il teorema verrà di seguito enunciato nella sua versione a "tempo discreto".

2.2.2 Il teorema di Oseledets: due formulazioni

Per non appesantire l'enunciato, premettiamo la notazione impiegata nel teorema. Si dice che una funzione misurabile $\varphi : \Omega \to \Omega$ preserva la misura se $\varphi_{\star}\mathbb{P} = \mathbb{P}$, ossia se vale

$$\mathbb{P}(\varphi^{-1}(\delta)) = \mathbb{P}(\delta) \qquad \forall \delta \in \mathscr{E}$$

 $\dot{\mathbf{E}}$ inoltre detta *ergodica* se

$$\varphi^{-1}(\delta) = \delta \implies \mathbb{P}(\delta) \in \{0, 1\}.$$

Ai nostri scopi, considereremo come spazio campionario una varietà differenziabile \mathcal{M} , dotata di una qualunque σ -algebra \mathscr{E} (ad esempio la sua σ -algebra di Borel) e di una qualunque misura di probabilità \mathbb{P} .

Teorema 2.2.1. (ergodico moltiplicativo di Oseledets) Sia $(\mathcal{M}, \mathscr{E}, \mathbb{P})$ uno spazio di probabilità come sopra, e $t : \mathcal{M} \to \mathcal{M}(m, \mathbb{R})$ una variabile casuale a valore di matrice. Sia inoltre $\varphi : \mathcal{M} \to \mathcal{M}$ una mappa che preserva la misura. Allora, se la trasformazione⁵

$$x \mapsto \log^+ \|t_x\| \tag{2.18}$$

 $\hat{e} \mathbb{P}$ -sommabile su \mathcal{M} , e posto

$$T_x^n = t_{\varphi^{n-1}(x)} \cdots t_{\varphi(x)} t_x$$

esiste un insieme t-invariante $\Gamma \subseteq \mathcal{M}$ con $\mathbb{P}(\Gamma) = 1$ tale che, per ogni $x \in \Gamma$, valgono i seguenti risultati:

i) Il limite (uniforme)

$$\Lambda_x = \lim_{n \to \infty} \left((T_x^n)^* T_x^n \right)^{1/2} \tag{2.19}$$

esiste.

- ii) Λ_x has = s(x) autovalori positivi distinti $e^{\lambda_x^{(1)}} < \cdots < e^{\lambda_x^{(s)}}$ $(1 \le s \le m)$, dove $\lambda_x^{(1)}$ potrebbe essere $-\infty$, di molteplicità $m_x^{(1)}, \ldots, m_x^{(s)}$, rispettivamente; gli autovalori e le molteplicità sono costanti sulle orbite (in avanti) di φ , ossia non cambiano scegliendo al posto di x un suo trasformato $\varphi(x), \varphi^2(x), \ldots$
- iii) Siano $U_x^{(1)}, \ldots, U_x^{(s)}$ gli autospazi relativi a $\lambda_x^{(1)}, \ldots, \lambda_x^{(s)}$, rispettivamente; indicando con $V_x^{(r)} = U_x^{(1)} \oplus \cdots \oplus U_x^{(r)}$ $(1 \le r \le s)$ e posto $V_x^{(0)} = \{0\}$, per ogni $u \in V_x^{(r)} \setminus V_x^{(r-1)}$ vale

$$\lim_{n \to \infty} \frac{1}{n} \log |T_x^n u| = \lambda_x^{(r)} \qquad r = 1, \dots, s.$$
 (2.20)

⁵Con log⁺ s'intende la *parte positiva* della funzione, definita per ogni funzione f da $f^+(x) = \max\{f(x), 0\}$ per ogni x nel dominio di f.

Se inoltre φ è ergodica, il numero s(x) di autovalori e l'insieme degli stessi autovalori $\{e^{\lambda_x^{(r)}}\}_{r=1}^{s(x)}$ sono costanti su \mathbb{P} -quasi tutta \mathcal{M} .

Osservazione 2.2.1. La norma impiegata in (2.18) può essere qualunque norma matriciale che soddisfi $||AB|| \leq ||A|| ||B||$ per ogni $A, B \in \mathcal{M}(m, \mathbb{R})$, e il valore degli esponenti non dipende dalla scelta di tale norma; ai nostri fini, verrà inteso che si sta usando la norma uniforme. Il modulo $|\cdot|$ usato in (2.20) rappresenta la norma euclidea su \mathbb{R}^m .

Osservazione 2.2.2. La condizione (2.18) equivale alla richiesta

$$\mathbb{E}[\log^+ \|t\|] < \infty$$

(cfr. formula (2.16)).

Il teorema di Oseledets stabilisce che un prodotto di matrici casuali, sotto opportune ipotesi sulla loro distribuzione (la richiesta (2.18)), agisce su un generico vettore in modo tale da "contrarlo" o "dilatarlo" di un fattore che è asintoticamente esponenziale con il numero di fattori. Inoltre, specifica che questo andamento è dato da un esponente che, assumendo l'ergodicità, è *indipendente* dalla scelta particolare della successione di matrici, dipendendo soltanto dalla loro distribuzione.

L'esponente in questione può assumere al più m valori diversi. In effetti, scomponendo il generico vettore $u \in \mathbb{R}^m$ nelle sue componenti lungo i diversi autospazi $U^{(r)}$, si vede che il tasso di crescita della sua norma dipende dal massimo autovalore sul cui autospazio il vettore abbia proiezione non nulla, e questo, se la distribuzione è ergodica, è quasi certamente⁶ $e^{\lambda^{(s)}}$.

Il teorema può anche essere visto da un'angolazione diversa, in qualche modo più esplicitamente "geometrica".

Si definisce lo spazio delle p-forme su \mathbb{R}^n come

$$\bigwedge^{p} \mathbb{R}^{n} = \operatorname{span} \left\{ e_{i_{1}} \wedge \dots \wedge e_{i_{p}} \mid 1 \leq i_{1} < \dots < i_{p} \leq n \right\}$$

dove $\{e_i\}_{i=1}^n$ è la base canonica di $\mathbb{R}^n \in \wedge : \wedge^{p-1} \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \to \wedge^p \mathbb{R}^n$ il prodotto esterno definito sull'algebra $\wedge \mathbb{R}^n = \mathbb{R} \oplus \mathbb{R}^n \oplus \wedge^2 \mathbb{R}^n \oplus \cdots \oplus \wedge^n \mathbb{R}^n$ (algebra di Grassmann).

Si può dotare $\wedge^p \mathbb{R}^n$ di un prodotto scalare nel seguente modo:

$$\langle e_{i_1} \wedge \dots \wedge e_{i_p}, e_{j_1} \wedge \dots \wedge e_{j_p} \rangle = \det \left(\langle e_{i_\alpha}, e_{j_\beta} \rangle \right)$$

mutuandolo da quello (euclideo) definito su \mathbb{R}^n . La norma costruita a partire da questo prodotto scalare, denotata da $\|\cdot\|_{\wedge}$, ha una semplice interpretazione geometrica: $\|u_1 \wedge \cdots \wedge u_p\|_{\wedge}$ è il volume *p*-dimensionale del parallelogrammo in \mathbb{R}^n i cui lati sono u_1, \ldots, u_p .

Se A è una matrice invertibile $n \times n$, si definisce l'automorfismo

$$\wedge^p A : e_{i_1} \wedge \cdots \wedge e_{i_n} \mapsto A e_{i_1} \wedge \cdots \wedge A e_{i_n},$$

che estende l'azione di A allo spazio $\bigwedge^{p} \mathbb{R}^{n}$. A questo punto è possibile definire la norma operatoriale su Aut ($\bigwedge^{p} \mathbb{R}^{n}$) nel modo abituale:

$$\|\wedge^{p}A\| = \sup_{\|x\|_{\wedge}=1} \|(\wedge^{p}A)x\|_{\wedge},$$

e si può dimostrare che $\|\wedge^p A\| = a_1(M) \cdots a_p(M)$, dove $\{a_i(M)\}_i$ è l'insieme degli autovalori di $\sqrt{A^*A}$ (questi sono anche chiamati valori singolari di A).

Vale il seguente risultato ([3], pp. 60–63):

 $^{^6 {\}rm La}$ misura di ciascun autospazi
o $U^{(r)}$ conr < s è 0.

Teorema 2.2.2. Sia $(t_k)_k$ una successione di matrici casuali indipendenti e identicamente distribuite, con

$$\mathbb{E}[\log^+ \|t_1\|] < +\infty,$$

e si chiami $T_n = t_n \cdots t_1$. Allora si ha

$$\sum_{i=1}^{p} \gamma_i = \lim_{n \to \infty} \frac{1}{n} \mathbb{E}[\log \| \wedge^p T_n \|],$$

dove $\gamma_i \in {\lambda^{(r)}}_{r=1}^s \forall i = 1, ..., n \ (i \ \lambda^{(r)} \ sono \ gli \ esponenti \ di \ Lyapunov \ relativi \ alla \ successione \ (t_k)_k \ definiti \ nel \ teorema \ 2.2.1) \ e \ \gamma_1 \ge \gamma_2 \ge \cdots \ge \gamma_n.$

Inoltre, se t_1 è invertibile, si ha \mathbb{P} -quasi certamente

$$\sum_{i=1}^{p} \gamma_i = \lim_{n \to \infty} \frac{1}{n} \log \|\wedge^p T_n\|.$$

Si può anche dimostrare che se le t_k sono matrici simplettiche⁷, con n = 2m, allora $\gamma_i = -\gamma_{m+i}$ $\forall i = 1, \ldots, m$, cosicché esattamente metà degli esponenti di Lyapunov sono non negativi, e gli altri non positivi.

2.3 Matrici di trasferimento

Consideriamo una matrice tridiagonale a blocchi A come in (2.12), e supponiamo A invertibile; sia inoltre m il rango di ciascun blocco di A, e mn quello dell'intera matrice. Un problema di primaria importanza in fisica consiste nel risolvere l'equazione agli autovalori per A:

$$Au = \lambda u. \tag{2.21}$$

Nell'equazione di cui sopra, u è un vettore di \mathbb{R}^{mn} (o \mathbb{C}^{mn}) diverso dal vettore nullo, della forma

$$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix},$$

dove ciascuno degli u_i (i = 1, ..., n) è a sua volta un vettore di *m* componenti $(u_{i1}, u_{i2}, ..., u_{im})^*$.

Con questa notazione, l'equazione (2.21) si riscrive nella forma

$$A_{k,k+1}u_{k+1} + A_{kk}u_k + A_{k,k-1}u_{k-1} = \lambda u_k \qquad k = 1, \dots, n,$$

avendo cura di porre $A_{10} \equiv A_{1,n+1} \equiv \mathbb{I}_m$ e $u_0 \equiv u_{n+1} \equiv o$ (il vettore nullo). Questo sistema di *n* equazioni può essere posto in forma matriciale, ottenendo l'equazione ricorsiva:

$$\begin{cases} \begin{pmatrix} u_{k+1} \\ u_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{k,k+1}^{-1} \left(\lambda \mathbb{I} - A_{kk}\right) & -A_{k,k+1}^{-1} A_{k,k-1} \\ \mathbb{I} & \mathbb{O} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_k \\ u_{k-1} \end{pmatrix}$$

$$u_0 = u_{n+1} = o.$$

$$(2.22)$$

⁷Una matrice $M \in \mathcal{M}(2m, \mathbb{C})$ è detta *simplettica* se soddisfa $M^T J M = J$, dove $J = \begin{pmatrix} \mathbb{I}_m \\ -\mathbb{I}_m \end{pmatrix}$.

La soluzione viene costruita per iterazione:

$$\begin{pmatrix} u_{k+1} \\ u_k \end{pmatrix} = \prod_{j=1}^k \begin{pmatrix} A_{j,j+1}^{-1} \left(\lambda \mathbb{I} - A_{jj}\right) & -A_{j,j+1}^{-1} A_{j,j-1} \\ \mathbb{I} & \mathbb{O} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ o \end{pmatrix} \equiv \prod_{j=1}^k t_j \begin{pmatrix} u_1 \\ o \end{pmatrix} \equiv T_k \begin{pmatrix} u_1 \\ o \end{pmatrix}.$$
(2.23)

La matrice $T_k = T_k(\lambda)$ viene chiamata matrice di k-trasferimento associata al problema (2.21).

Notiamo che la (2.23) codifica solo una delle due condizioni al contorno del problema: la seconda viene soddisfatta imponendo che

$$T_n\begin{pmatrix}u_1\\o\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}o\\u_n\end{pmatrix}.$$

Da questa costruzione è evidente che vale la seguente

Proposizione 2.3.1. Il vettore $u \neq o$ è un autovettore di A associato all'autovalore λ se e solo se risolve il sistema ricorsivo (2.22), ossia se e solo se le sue componenti soddisfano le condizioni

$$\begin{cases} \begin{pmatrix} u_{k+1} \\ u_k \end{pmatrix} = T_k \begin{pmatrix} u_1 \\ u_0 \end{pmatrix} \qquad k = 1, \dots, n \tag{2.24a}$$

dove T_k è definita dalla (2.23).

La proposizione rimane vera per qualunque scelta di condizioni al contorno, una volta modificata l'equazione (2.24b) per tenerne conto.

Il sistema (2.22) è caratterizzato dalla condizione di Dirichlet di annullamento sul contorno. Un'alternativa d'ancor maggiore interesse, in fisica, è l'imposizione di condizioni periodiche al contorno; a questo scopo, chiediamo alla soluzione di soddisfare le equazioni

$$\begin{cases} u_{n+1} = zu_1 \\ u_0 = \frac{1}{z}u_n \end{cases} \qquad z \in \mathbb{C}, \tag{2.25}$$

che esprimono le richieste condizioni di Bloch di un reticolo periodico di estensione infinita una volta posto $z = e^{i\varphi}$. Sfruttando la (2.24a) di Proposizione 2.3.1, le equazioni sopra scritte equivalgono a

$$T_n\begin{pmatrix}u_1\\u_0\end{pmatrix}=z\begin{pmatrix}u_1\\u_0\end{pmatrix},$$

che è un'equazione agli autovalori per la matrice di *n*-trasferimento.

Abbiamo mostrato come ogni matrice tridiagonale $mn \times mn$ sia legata in modo naturale a una matrice di trasferimento $2m \times 2m$, ottenuta come prodotto di n fattori⁸. In effetti, le condizioni di Bloch generalizzate⁹ (2.25) sono codificate dalla matrice tridiagonale ciclica

$$A(z) = \begin{pmatrix} A_1 & B_1 & C_1/z \\ C_2 & A_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & B_{n-1} \\ zB_n & & C_n & A_n \end{pmatrix}$$
(2.26)

⁸Più in generale, si può capire che una matrice k-banded a blocchi genera una matrice di trasferimento di dimensione km.

⁹Malgrado il nome, le condizioni (2.25) non includono come caso particolare le condizioni di annullamento viste prima, dato che dev'essere $z \neq 0$.

(dove si è posto per semplicità $A_{ii} = A_i, A_{i,i-1} = C_i \in A_{i,i+1} = B_i$).

Il legame tra una matrice tridiagonale a blocchi e la sua matrice di trasferimento si traduce in particolare in una relazione tra i loro determinanti. La proposizione 2.3.1 afferma che un vettore u risolve il problema agli autovalori per A(z), con autovalore λ , se e solo se risolve allo stesso tempo quello per $T_n = T_n(\lambda)$ con autovalore z. Questo significa che i polinomi caratteristici di A(z) e $T_n(\lambda)$ possiedono gli stessi zeri sul piano complesso, e quindi sono multipli.

Il seguente teorema rende esplicita la dualità delle due descrizioni — in termini di matrice tridiagonale e di matrice di trasferimento — fornendo anche la costante di proporzionalità che lega i due determinanti.

Teorema 2.3.2. (di dualità) Se A(z) è come in (2.26) e $T_n(\lambda)$ è la sua matrice di trasferimento completa, si ha

$$\det \left[z \mathbb{I}_{2m} - T_n(\lambda) \right] = (-z)^m \frac{\det \left[\lambda \mathbb{I}_{mn} - A(z) \right]}{\det \left[B_1 B_2 \cdots B_n \right]}.$$

Dimostrazione. Vedi [23], p. 7.

Un'analoga relazione di dualità sussiste per la matrice del reticolo aperto, che per evitare confusione verrà chiamata A^o [23]:

Teorema 2.3.3. (di dualità, catena aperta) Se $A^o(z)$ è come in (2.26) ma con $B_n = C_1 = \mathbb{O}$, e se $T_n^o(\lambda)$ è la sua matrice di trasferimento completa, si ha

$$\det \left[T_n^o(\lambda)_{11}\right] = \frac{\det \left[\lambda \mathbb{I}_{mn} - A^o(z)\right]}{\det \left[B_1 \cdots B_{n-1}\right]}.$$

È possibile legare la matrice di trasferimento completa del problema periodico alla matrice risolvente $g(\lambda) = (A^o - \lambda \mathbb{I}_{mn})^{-1}$ del problema aperto; chiamiamo infatti g_{ij} la matrice complessa $m \times m$ che costituisce il blocco (i, j) di g $(1 \le i \le n, 1 \le j \le n)$. Vale il seguente risultato.

Lemma 2.3.4.

$$T_n(\lambda) = \begin{pmatrix} -B_n^{-1}(g_{1n})^{-1} & -B_n^{-1}(g_{1n})^{-1}g_{11}C_1\\ g_{nn}(g_{1n})^{-1} & g_{nn}(g_{1n})^{-1}g_{11}C_1 - g_{n1}C_1 \end{pmatrix}.$$

Dimostrazione. Per definizione, $g(\lambda) (A^o - \lambda \mathbb{I}_{mn}) = \mathbb{I}_{mn}$. Questa relazione può essere esplicitata per i singoli blocchi, portanto alla ricorsione

$$C_i g_{i-1,j} + (A_i^o - \lambda \mathbb{I}_m) g_{ij} + B_i g_{i+1,j} = 0$$

che presa per $j \in \{1, n\}$ e $i \in \{2, \dots, n-1\}$ conduce a

$$\begin{pmatrix} g_{n1} & g_{nn} \\ g_{n-1,1} & g_{n-1,n} \end{pmatrix} = t_{n-1} \cdots t_2 \begin{pmatrix} g_{21} & g_{2n} \\ g_{11} & g_{1n} \end{pmatrix}$$

dove s'è indicato con $t_k = t_k(\lambda)$ il k-esimo fattore che entra nella definizione di T_n (cfr. (2.23)). Moltiplicando a sinistra per t_n , il membro sinistro diventa

$$\begin{pmatrix} -B_n^{-1}(A_n^o - \lambda \mathbb{I}_m)g_{n1} - B_n^{-1}C_ng_{n-1,n} & -B_n^{-1}(A_n^o - \lambda \mathbb{I}_m)g_{nn} - B_n^{-1}C_ng_{n-1,n} \\ g_{n1} & g_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{O} & -B_n^{-1} \\ g_{n1} & g_{nn} \end{pmatrix}$$

dove s'è usata l'identità $C_n g_{n-1,j} + (A_n^o - \lambda \mathbb{I}_m) g_{nj} = \delta_{nj} \mathbb{I}_m$ (δ_{nj} è il delta di Kronecker), valida per $j \in \{1, n\}$. Inserendo ora $t_1 t_1^{-1}$ dopo t_2 nel membro destro, e usando l'identità $B_1 g_{2j} + (A_1^o - \lambda \mathbb{I}_m) g_{1j} = \delta_{1j} \mathbb{I}_m$, valida per $j \in \{1, n\}$, ciò che si ottiene è

$$\begin{pmatrix} \mathbb{O} & -B_n^{-1} \\ g_{n1} & g_{nn} \end{pmatrix} = T_n(\lambda) \begin{pmatrix} g_{11} & g_{1n} \\ -C_1^{-1} & \mathbb{O} \end{pmatrix},$$

e dal momento che

$$\begin{pmatrix} g_{11} & g_{1n} \\ -C_1^{-1} & \mathbb{O} \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbb{O} & -C_1 \\ (g_{1n})^{-1} & (g_{1n})^{-1}g_{11}C_1 \end{pmatrix}$$

si ottiene

$$T_{n}(\lambda) = \begin{pmatrix} \mathbb{O} & -B_{n}^{-1} \\ g_{n1} & g_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{O} & -C_{1} \\ (g_{1n})^{-1} & (g_{1n})^{-1}g_{11}C_{1} \end{pmatrix} = \\ = \begin{pmatrix} -B_{n}^{-1}(g_{1n})^{-1} & -B_{n}^{-1}(g_{1n})^{-1}g_{11}C_{1} \\ g_{nn}(g_{1n})^{-1} & -g_{n1}C_{1} + g_{nn}(g_{1n})^{-1}g_{11}C_{1} \end{pmatrix}.$$

Osservazione 2.3.1. Notiamo che nell'enunciato del teorema 2.3.4 λ non può essere un autovalore di A^o , poiché in quel caso g non risulterebbe definito.

Possiamo a questo punto applicare il teorema 2.1.7 alla matrice risolvente g.

Lemma 2.3.5. Sia g[i, j] l'elemento con il valore assoluto maggiore nel blocco g_{ij} . Allora

$$|g[1,n]| \le C \left(\|A_1^o - \lambda \mathbb{I}_m\|_{\mathcal{B}} + \|B_1\|_{\mathcal{B}} \right) q^{(n-2)/2}$$
(2.27a)

$$|g[n,1]| \le C \left(\|A_n^o - \lambda \mathbb{I}_m\|_{\mathcal{B}} + \|C_n\|_{\mathcal{B}} \right) q^{(n-2)/2},$$
 (2.27b)

dove

$$q = \frac{\operatorname{cond}(A^o - \lambda \mathbb{I}_{mn}) - 1}{\operatorname{cond}(A^o - \lambda \mathbb{I}_{mn}) + 1}, \qquad C = \frac{\left(\operatorname{cond}(A^o - \lambda \mathbb{I}_{mn}) + 1\right)^2}{2 \left\|A^o - \lambda \mathbb{I}_{mn}\right\|_{\mathcal{B}}^2}.$$

Dimostrazione. È sufficiente notare che $(A^o - \lambda \mathbb{I}_{mn})$ soddisfa le ipotesi del teorema 2.1.7. \Box

Lemma 2.3.6. Siano $\{\vartheta_i\}_{i=1}^m$ i valori singolari della matrice $T_{11} = (T_n)_{11}$. Allora esiste una costante K > 0 tale che vale

$$\vartheta_k > Kq^{-n/2} \qquad \forall k = 1, \dots, m_k$$

dove come sopra

$$q = \frac{\operatorname{cond}(A^o - \lambda \mathbb{I}_{mn}) - 1}{\operatorname{cond}(A^o - \lambda \mathbb{I}_{mn}) + 1} \in [0, 1).$$

Dimostrazione. Dal momento che $(T_{11})^{-1} = -g_{1n}B_n$, e usando il lemma precedente, si ha che

$$\operatorname{Tr}\left[\left(T_{11}^{*}T_{11}\right)^{-1}\right] = \operatorname{Tr}\left(g_{1n}B_{n}B_{n}^{*}g_{1n}^{*}\right) = \operatorname{Tr}\left(B_{n}B_{n}^{*}g_{1n}^{*}g_{1n}\right) \le m \|B_{n}\|_{\mathcal{B}}^{2} \|g_{1n}\|_{\mathcal{B}}^{2}$$
$$\le m^{2} \|B_{n}\|_{\mathcal{B}}^{2} C^{2}\left(\|A_{1}^{o}-\lambda\mathbb{I}_{m}\|_{\mathcal{B}}+\|B_{1}\|_{\mathcal{B}}\right)^{2} q^{n-2} \equiv K^{-2}q^{n}.$$

D'altra parte, si ha

$$\operatorname{Tr}\left[(T_{11}^* T_{11})^{-1} \right] = \sum_{k=1}^m \frac{1}{\vartheta_k^2},$$

e visto che ciascun addendo è strettamente positivo dev'essere

$$\frac{1}{\vartheta_k^2} < K^{-2} q^n \qquad \forall k = 1, \dots, m.$$

Prima di arrivare al risultato principale premettiamo altri due lemmi: il primo mostra che l'inversa di una matrice di trasferimento è simile alla matrice di trasferimento del "reticolo invertito"; il secondo stabilisce una proprietà d'"intreccio" che mette in relazioni i valori singolari di una matrice a quelli di una sua qualunque sottomatrice.

Lemma 2.3.7. Si ponga

$$\pi = \begin{pmatrix} \mathbb{I}_m \\ \mathbb{I}_m \end{pmatrix}, \qquad \qquad J = \begin{pmatrix} & \mathbb{I}_m \\ & \mathbb{I}_m \\ & \ddots & \\ \mathbb{I}_m & & \end{pmatrix}$$

(dove $J \in mn \times mn$). Allora, posta $T = T_n$ come in (2.23) e detta T^J la matrice di trasferimento abbinata a $A^J = JAJ$ (il reticolo invertito), si ha che

$$T^{-1} = \pi T^J \pi.$$

Dimostrazione. Un semplice calcolo delineato in [23].

Lemma 2.3.8. Sia $A \in M(m, n, \mathbb{R})$ $e \ B \in M(p, q, \mathbb{R})$, B sottomatrice di A. Allora, se $\sigma_1 \geq \cdots \geq \sigma_{\min\{m,n\}}$ sono i valori singolari di $A \ e \ \vartheta_1 \geq \cdots \geq \vartheta_{\min\{p,q\}}$ sono quelli di B, vale

$$\sigma_i \ge \vartheta_i \qquad i = 1, \dots, \min\{p, q\}$$

$$\vartheta_i \ge \sigma_{i+m-p+n-q} \qquad i = 1, \dots, \min\{p+q-m, p+q-n\}.$$

Dimostrazione. Vedi [27], pp. 3–5.

Siamo ora in grado di stimare il comportamento asintotico dei valori singolari di T_n .

Teorema 2.3.9. (valori singolari di una matrice di trasferimento) Siano $\{\sigma_k\}_{k=1}^{2m}$ i valori singolari della matrice di trasferimento completa T_n ; allora esistono due costanti K, K' > 0 tali che

$$\sigma_k > Kq^{-n/2} \qquad \qquad k = 1, \dots, m$$

$$\sigma_k < q^{n/2}/K' \qquad \qquad k = m+1, \dots, 2m,$$

dove q è definito nel lemma 2.3.6.

20

Dimostrazione. Siano $\vartheta_1 \geq \cdots \geq \vartheta_m$ i valori singolari di T_{11} , e $\sigma_1 \geq \cdots \geq \sigma_{2m}$ quelli di $T = T_n$. Per il lemma 2.3.8, si ha che

$$\vartheta_k \le \sigma_k \qquad \qquad k = 1, \dots, m,$$

cosicché almeno m dei valori singolari di T sono minorati da $Kq^{-n/2}$ per via del lemma 2.3.6. Dal momento che T^{-1} è simile a una matrice di trasferimento (lemma 2.3.7), si possono trarre per essa le stesse conclusioni; poiché i valori singolari di T^{-1} coincidono con i reciproci¹⁰ dei valori singolari di T, necessariamente m di questi dovranno essere maggiorati da $q^{n/2}/K'$ per qualche K' > 0.

Quindi, metà dei valori singolari di una matrice di trasferimento generica (per un problema tridiagonale periodico del tipo (2.26)) è esponenzialmente grande con n, l'altra metà esponenzialmente piccola. Mettiamo in evidenza che questo risultato, a differenza del teorema di Oseledets, non è un risultato valido "quasi certamente", bensì una proprietà soddisfatta da *ogni* matrice $2m \times 2m$ che sia la matrice di trasferimento di una tridiagonale a blocchi invertibile $mn \times mn$.

Concludiamo con una formula che mette in relazione questa sezione con la precedente, fornendo un metodo per calcolare analiticamente il massimo esponente di Lyapunov di un prodotto di matrici di trasferimento a partire dalla distribuzione media degli autovalori della matrice tridiagonale associata.

Teorema 2.3.10. (formula di Herbert–Jones–Thouless) Sia $\gamma = \gamma(\lambda)$ il massimo esponente di Lyapunov della matrice di trasferimento $T(\lambda)$ definita nella (2.23) e relativa alla matrice A definita nella (2.12), dove gli elementi di matrice $A_i \in B_i = C_i^*$ sono variabili casuali indipendenti, identicamente distribuite e tali da soddisfare l'ipotesi del teorema 2.2.2. Sia inoltre $\rho : \mathbb{R} \to [0, +\infty)$ il valore atteso della densità spettrale¹¹ di A. Allora

$$\gamma_1 = \gamma_1(E) = \int \rho(E') \ln |E - E'| dE'.$$
 (2.28)

É possibile generalizzare questa formula al caso m > 1, rimpiazzando la (2.28) con [20]

$$\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\gamma_i = \int \rho(E')\ln\left|E - E'\right| dE'$$

(dove, ricordiamo, $\gamma_1 \geq \cdots \geq \gamma_m$).

Si può in effetti dimostrare che per n sufficientemente grande, ρ è *self-averaging*: la densità spettrale di ciascuna singola matrice A tende alla densità media.

$$\int_{B} \rho(E') \mathrm{d}E' = \# \left(\sigma(A) \cap B \right)$$

per ogni sottinsieme misurabile B di \mathbb{R} (o di \mathbb{C} , nel caso generale).

¹⁰Per dimostrarlo è sufficiente notare che i valori singolari di T^{-1} sono gli autovalori di $(TT^*)^{-1}$ (che esiste perché T è invertibile e quindi det $(TT^*) \neq 0$), e che per ogni matrice invertibile A vale det $(A - \lambda \mathbb{I}) = 0 \iff \det(A^{-1} - \lambda^{-1}\mathbb{I}) = 0$.

¹¹Questa si definisce come quella distribuzione tale che

Capitolo 3 Hamiltoniani tridiagonali

Le matrici a banda sono utilizzate in fisica sia nella trattazione di modelli con interazione a primi vicini, dove svolgono il ruolo di Hamiltoniano del sistema, sia per la soluzione numerica di equazioni differenziali alle derivate parziali — prima tra tutte l'equazione di Poisson, che ricorre negli ambiti più disparati. Modelli statistici notevoli di questo tipo includono il modello di Ising con accoppiamento casuale a primi vicini e il modello di Anderson (che sarà oggetto del capitolo 4).

In questo capitolo, ci si concentra dapprima sul problema dell'inversione di una classe di matrici a banda molto particolare, che include in particolare le matrici di Laplace. Matrici di questo tipo possono essere invertite analiticamente grazie alla loro struttura particolarmente simmetrica; viene effettuata l'inversione e si confrontano i risultati esatti con le stime DMS ottenute nel capitolo 2.

Successivamente, si considerano matrici ottenute sommando alla matrice di Laplace una matrice casuale diagonale, e si analizza il comportamento delle loro inverse. Questa classe di matrici costituisce il prototipo dell'Hamiltoniano di Anderson.

Infine, si studia una classe di matrici tridiagonali casuali controllate da un parametro complesso $z \neq 0$; queste matrici, in generale non hermitiane, presentano proprietà spettrali davvero notevoli, e permettono di vedere esplicitamente come la localizzazione degli autostati possa dipendere in modo critico dal valore di un parametro fisico.

3.1 Operatore di Laplace discreto e matrici di Toeplitz positive

Consideriamo l'operatore laplaciano Δ sullo spazio delle funzioni $\mathcal{C}^2(I)$, dove $I \subseteq \mathbb{R}^d$ è, per semplicità, un aperto connesso ottenuto facendo il prodotto cartesiano di *d* intervalli reali. L'azione dell'operatore su un elemento *f* di $\mathcal{C}^2(I)$ è data da

$$\Delta f = \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} + \dots + \frac{\partial^2 f}{\partial x_d^2}.$$
(3.1)

È possibile definire un analogo dell'operatore di Laplace su spazi discreti del tipo $\ell^2(S)$, dove S è isomorfo a $\{1, 2, ..., n\}$ o a \mathbb{Z} .

A questo scopo, consideriamo dapprima il caso unidimensionale.

3.1.1 Caso d = 1

L'azione dell'operatore di Laplace è semplicemente $\Delta f = f''$ (dove f' indica la funzione derivata di f), ossia:

$$\Delta f(x) = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{f'(x+\varepsilon) - f'(x)}{\varepsilon} = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{f(x+\varepsilon) - 2f(x) + f(x-\varepsilon)}{\varepsilon^2}, \quad (3.2)$$

 $\operatorname{con} x \pm \varepsilon \in I.$

Se f è definita su uno spazio discreto, viene naturale sostituire la derivata con il rapporto incrementale

$$\frac{f(x+\delta) - f(x)}{\delta}$$

 $(x \in S, \delta \in \mathbb{R})$; la derivata seconda viene quindi rimpiazzata dal rapporto incrementale reiterato due volte, e centrato in x:

$$\frac{f(x+\delta)-2f(x)+f(x-\delta)}{\delta^2}$$

Scegliendo un passo unitario ($\delta = 1$), ed effettuando la sostituzione $f(x) \hookrightarrow u_i$ per evidenziare la natura discreta dello spazio in considerazione, otteniamo l'azione del laplaciano — che indichiamo¹ con $-h_0$ — su questo spazio:

$$(-h_0 u)_i = u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i.$$
(3.3)

Se lo spazio cui appartiene $u \in \mathbb{R}^n$, la matrice rappresentativa dell'operatore h_0 rispetto alla base canonica è quella rappresentata nella formula (2.3). Le matrici di questo tipo, in cui gli elementi su ciascuna diagonale sono costanti, sono dette *matrici di Toeplitz*. Occasionalmente, adotteremo per matrici di questo tipo la scrittura veloce $h_0 = \text{Toepl}(-1, 2, -1)_n$.

L'inverso di una matrice di Toeplitz tridiagonale può essere dato in forma esplicita. Una strategia consiste nel risolvere il problema agli autovalori

$$h_0 u = \epsilon u, \tag{3.4}$$

il che permette di scrivere la decomposizione spettrale dell'operatore, ossia

$$h_0 = \sum_{m=1}^{n} \epsilon_m u^{(m)} \otimes u^{(m)}, \tag{3.5}$$

dove $\{\epsilon_m\}_{m=1}^n \subset \mathbb{R}$ è l'insieme degli autovalori (si può dimostrare che sono non degeneri) e $u^{(m)} \in \mathbb{R}^n$ è l'unico autovettore di norma unitaria relativo all'autovalore ϵ_m . Il simbolo \otimes denota il *prodotto esterno* tra due vettori di \mathbb{R}^n , definito nel seguente modo:

$$\otimes : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \to \mathcal{M}(n, \mathbb{R})$$
$$(u, v) \mapsto \begin{pmatrix} u_1 v_1 & u_1 v_2 & \cdots & u_1 v_n \\ u_2 v_1 & u_2 v_2 & \cdots & u_2 v_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_n v_1 & u_n v_2 & \cdots & u_n v_n \end{pmatrix},$$

¹L'operatore laplaciano è definito *negativo*; per comodità, studiamo le proprietà del suo opposto, h_0 , che è quindi definito positivo.

che non è altro che il prodotto riga-colonna uv^* (gli elementi di \mathbb{R}^n sono pensati come vettori colonna).

Benché questo metodo abbia il pregio di fornire esplicitamente lo spettro dell'inverso, non è quello più veloce. Nel caso delle matrici di Toeplitz, infatti, risulta più conveniente sfruttare la formula esplicita per l'elemento della matrice inversa:

$$(h_0^{-1})_{pq} = \frac{\operatorname{cof}_{pq} h_0}{\det h_0},\tag{3.6}$$

dove $cof_{pq}h_0$ denota il complemento algebrico (p,q) di h_0 , ossia il determinante della matrice ottenuta rimuovendo da h_0 la riga p e la colonna q, moltiplicato per $(-1)^{p+q}$.

Il determinante di una matrice di Toeplitz può essere calcolato con semplici tecniche algebriche perché soddisfa una particolare relazione di ricorsione. Più precisamente, considerando la matrice $M_n = \text{Toepl}(-1, D, -1)_n$ e applicando la formula di Laplace per il determinante, si nota facilmente che

$$\det M_n = D \det M_{n-1} - \det M_{n-2} \qquad n > 2.$$
(3.7)

Posto $d_n \equiv \det M_n \in x_n = \begin{pmatrix} d_n \\ d_{n-1} \end{pmatrix}$, l'equazione (3.7) si riscrive

$$\begin{cases} x_{n+1} = t^n x_1 \\ x_1 = \begin{pmatrix} D \\ 1 \end{pmatrix}, \end{cases}$$
(3.8)

dove è stata introdotta la matrice di trasferimento $t = \begin{pmatrix} D & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$. La soluzione di (3.8) ha una forma diversa a seconda che sia $D \leq -2, -2 < D < 2$ o $D \geq 2$. Dato che saremo interessati a porre $M_n = h_0$, per cui D = 2, poniamoci fin da subito nel caso $D \geq 2$.

In questo caso, gli autovalori di t sono

$$\lambda_{\pm} = \frac{D}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{D}{2}\right)^2 - 1},$$

e sono l'uno reciproco dell'altro; poniamo perciò $\lambda_+ = \lambda$ e $\lambda_- = \lambda^{-1}$. Dato che $D \ge 2$, possiamo sempre porre $D = 2 \cosh \xi$ per qualche $\xi \in \mathbb{R}$. Inoltre si ha

$$\ln \lambda = \ln \left(\frac{D}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{D}{2}\right)^2 - 1} \right) = \operatorname{arcosh} \frac{D}{2} = \xi$$

Pertanto, gli autovalori di t sono $\{e^{\xi}, e^{-\xi}\}$. Si noti in particolare che $D = e^{\xi} + e^{-\xi}$.

Gli autovettori, che si trovano imponendo $T_n v^{\pm} = e^{\pm \xi} v^{\pm}$, sono i multipli di $\begin{pmatrix} e^{\pm \xi} \\ 1 \end{pmatrix}$. A questo punto, dal momento che t^n ha gli stessi autovettori di t e autovalori $\{e^{n\xi}, e^{-n\xi}\}$, è nota l'azione esplicita di t^n su qualunque vettore; scomponiamo x_1 sulla base spettrale di t^n :

$$x_1 = \begin{pmatrix} D\\1 \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} e^{\xi}\\1 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} e^{-\xi}\\1 \end{pmatrix},$$

dove

$$\begin{cases} \alpha = \frac{e^{\xi}}{2\sinh\xi} \\ \beta = -\frac{e^{-\xi}}{2\sinh\xi} \end{cases}$$

Si trova quindi

$$\begin{pmatrix} d_n \\ d_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^{n-1} \begin{pmatrix} D \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^{n-1} \left\{ \alpha \begin{pmatrix} e^{\xi} \\ 1 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} e^{-\xi} \\ 1 \end{pmatrix} \right\} \implies$$
$$\implies d_n = e^{(n-1)\xi} \alpha e^{\xi} + e^{-(n-1)\xi} \beta e^{-\xi} = \frac{\sinh\left[(n+1)\xi\right]}{\sinh\xi}.$$

I complementi algebrici possono anch'essi essere calcolati ricorsivamente. Si può dimostrare [17] che hanno la forma

$$\operatorname{cof}_{pq} M_n = d_{p-1} d_{n-q} \qquad p < q;$$

in questo modo, è possibile scrivere in forma chiusa gli elementi dell'inversa, sfruttando la (3.6):

$$(M_n^{-1})_{pq} = \begin{cases} \frac{\cosh\left[(n+1-|q-p|)\xi\right]-\cosh\left[(n+1-q-p)\xi\right]}{2\sinh\xi\sinh\left[(n+1)\xi\right]} & D>2\\ \frac{(q+p-|q-p|)(2n+2-|q-p|-q-p)}{4(n+1)} & D=2. \end{cases}$$
(3.9)

dove si è sfruttata l'identità $2\sinh x \sinh y = \cosh(x+y) - \cosh(x-y)$, e l'espressione per D = 2 è ottenuta con un passaggio al limite $\xi \to 0$.

Nei grafici di Figura 1 vengono paragonati gli elementi delle inverse di alcune matrici di Toeplitz con i limiti superiori dati dal teorema 2.1.6. Si può osservare che la formula (3.9) risulta effettivamente in un decadimento esponenziale nel caso D > 2, mentre nel caso D = 2 si osserva un decadimento ancora più rapido. La stima data dal teorema migliora progressivamente con D.

Il comportamento osservato è lo stesso per tutti i valori (sufficiemente grandi) di n.

Si riportano anche le formule per il caso -2 < D < 2 (rilevanti per il laplaciano "spostato" Toepl $(-1, 0, -1)_n$ che verrà introdotto nel capitolo 4):

$$(M_n^{-1})_{pq} = \begin{cases} \frac{\cos\left[(n+1-|q-p|)\xi\right]-\cos\left[(n+1-q-p)\xi\right]}{2\sin\xi\sin\left[(n+1)\xi\right]} & (n+1)\xi \notin \pi\mathbb{Z} \\ \frac{(q+p-|q-p|)(2n+2-|q-p|-q-p)}{4(n+1)} & (n+1)\xi \in \pi\mathbb{Z}, \end{cases}$$

dove ora $D = 2\cos\xi$.

3.1.2 Caso d = 2 e d = 3

Nel caso d = 2 il laplaciano agisce su funzioni della forma f = f(x, y), che sono supposte C^2 su un rettangolo aperto $I \subset \mathbb{R}^2$. L'azione discretizzata di Δ può essere scritta nella forma

$$\Delta f(x,y) = \frac{f(x+h,y) + f(x,y+h) - 4f(x,y) + f(x-h,y) + f(x,y-h)}{h^2},$$



Figura 1: In blu sono mostrati gli elementi di matrice (p,q) di $S_D^{-1} \equiv [\text{Toepl}(-1, D, -1)_{101}]^{-1}$, con la condizione p + q = 52 (antidiagonale principale); in rosso, per confronto, sono inseriti i limiti superiori dati dal teorema DMS. Per D > 2 il teorema fornisce una buona stima per gli elementi di matrice, mentre il caso D = 2 presenta una "transizione di fase" con decadimento ultra-esponenziale.



Figura 2: Il laplaciano su uno spazio discreto (una griglia) equivale a una media sui primi vicini di ciascun nodo: per d = 2, ad esempio, l'azione dell'operatore sul vettore u è data dalla formula (3.10).

e prendendo come sopra h = 1 e $f(x, y) \hookrightarrow u_{ij}$ si ottiene

$$(-h_0 u)_{ij} = u_{i+1,j} + u_{i,j+1} - 4u_{ij} + u_{i-1,j} + u_{i,j-1}.$$
(3.10)

L'azione di h_0 può essere rappresentata da un'opportuna matrice tridiagonale *a blocchi*: detto *u* il vettore $(u_{11}, u_{21}, \ldots, u_{m1}, u_{21}, \ldots, u_{mn})^* \in \mathbb{R}^{mn}$, $(h_0 u)$ è il risultato della moltiplicazione a sinistra di *u* per la matrice $mn \times mn$

$$h_0 = \begin{pmatrix} T & -\mathbb{I} & & \\ -\mathbb{I} & T & -\mathbb{I} & & \\ & -\mathbb{I} & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & T & -\mathbb{I} \\ & & & -\mathbb{I} & T \end{pmatrix},$$

dove $T = \text{Toepl}(-1, 4, -1)_m$. Questa può essere scritta nella forma più illuminante

$$h_0 = h_{0,n}^{(1)} \otimes \mathbb{I}_m + \mathbb{I}_n \otimes h_{0,m}^{(1)}, \tag{3.11}$$

dove con $h_{0,k}^{(1)}$ si è denotato il laplaciano (negativo) sullo spazio \mathbb{R}^k , e \otimes è in questo caso il prodotto di Kronecker tra matrici, definito da

$$\otimes : \mathbf{M}(m, n, \mathbb{R}) \times \mathbf{M}(m', n', \mathbb{R}) \to \mathbf{M}(mm', nn', \mathbb{R})$$
$$A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \cdots & a_{1n}B \\ a_{21}B & a_{22}B & \cdots & a_{2n}B \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}B & a_{m2}B & \cdots & a_{mn}B \end{pmatrix}.$$

Le matrici della forma (3.11) godono della seguente proprietà: se $C = A \otimes \mathbb{I}_n + \mathbb{I}_m \otimes B$ e $\{a_i\}_{i=1}^m, \{b_j\}_{j=1}^n$ sono gli autovalori di A e B rispettivamente, allora gli autovalori di C sono $\{a_i + b_j\}_{i=1,\dots,m}^{j=1,\dots,n}$ ([9], p. 119). Pertanto, lo spettro di h_0 è completamente determinabile a partire da quello di $h_0^{(1)}$ (che può essere calcolato esplicitamente).

In modo analogo, il laplaciano in d = 3 dimensioni, che agisce su funzioni f = f(x, y, z) di classe C^2 su un parallelepipedo aperto, viene discretizzato nell'operatore

$$h_0 = h_{0,m_1}^{(1)} \otimes \mathbb{I}_{m_2} \otimes \mathbb{I}_{m_3} + \mathbb{I}_{m_1} \otimes h_{0,m_2}^{(1)} \otimes \mathbb{I}_{m_3} + \mathbb{I}_{m_1} \otimes \mathbb{I}_{m_2} \otimes h_{0,m_3}^{(1)},$$

che è una matrice $m_1m_2m_3 \times m_1m_2m_3$ (indicando con m_i la lunghezza della griglia lungo l'*i*-esima direzione cartesiana), la quale agisce a sinistra su vettori della forma

$$u = (u_{111}, \ldots, u_{m_111}, u_{121}, u_{221}, \ldots, u_{m_1m_2m_3})^*$$

ottenuta "impilando" i vettori a due indici $\{(u_{ijk})_i\}_{j,k}$ — a loro volta ottenuti in questo modo a partire da vettori a un solo indice, come spiegato sopra. È evidente che lo stesso procedimento permette di ricondurre al caso 1-dimensionale qualunque operatore su uno spazio discreto di questo tipo, sostanzialmente sfruttando la catena di isomorfismi

$$\underbrace{\mathbb{R}^{m_1} \times \cdots \times \mathbb{R}^{m_1}}_{m_2 \text{ volte}} \sim \mathbb{R}^{m_1 m_2},$$
$$\underbrace{\mathbb{R}^{m_1 m_2} \times \cdots \times \mathbb{R}^{m_1 m_2}}_{m_3 \text{ volte}} \sim \mathbb{R}^{m_1 m_2 m_3},$$

e così via. Questo ragionamento è riassunto nell'espressione

$$h_0^{(d)} = h_0^{(d-1)} \otimes \mathbb{I}_{m_3} + \mathbb{I}_{m_1 m_2} \otimes h_0^{(1)}$$

$$\equiv h_0^{(d-1)} \oplus h_0^{(1)},$$

dove si è introdotta la notazione abbreviata

$$A \oplus B = A \otimes \mathbb{I} + \mathbb{I} \otimes B$$

(occorre prestare attenzione alla dimensione degli spazi su cui sono definiti gli operatori).

In Figura 3 sono mostrate a titolo di esempio tre matrici laplaciane su reticoli tridimensionali e le corrispettive inverse, che esibiscono il caratteristico decadimento esponenziale lontano dalla diagonale principale. È piuttosto evidente che il decadimento non è monotono rispetto alla distanza dalla diagonale, bensì — come ci si dovrebbe aspettare — si "partiziona" in blocchi e sotto-blocchi: più precisamente, ogni lato della matrice è lungo m_1 blocchi, ogni blocco è lungo m_2 sotto-blocchi e ogni sotto-blocco è di ordine m_3 .

3.2 Matrici di Anderson

Definiamo matrice di Anderson qualunque matrice ottenuta sommando a $h_0 = h_0^{(m)}$ (di qualunque dimensione) una matrice del tipo diag $(\omega_1, \ldots, \omega_{mn})$, dove ciascun ω_i assume un valore casuale secondo una comune distribuzione μ su un insieme $W \subset \mathbb{R}$ a supporto μ -compatto. Il motivo di questa denominazione sarà chiaro nel capitolo 4.

In questa sezione, ci limitiamo a considerare il caso unidimensionale (m = 1), e prenderemo W = [-w/2, w/2], con $w \in \mathbb{R}^+$. La distribuzione è inoltre presa *uniforme*, ossia μ è la misura di Lebesgue opportunamente normalizzata sull'intervallo W:

$$\mu(B) = \int_{B \cap W} \frac{1}{w} \, \mathrm{d}x \qquad \forall B \in \mathscr{B}(\mathbb{R}).$$



Figura 3: Rappresentazione visiva degli elementi di matrice del laplaciano tridimensionale: (a) su una griglia $4 \times 4 \times 4$; (c) su una griglia $6 \times 2 \times 5$; (e) su una griglia $12 \times 8 \times 6$; e dei corrispettivi inversi (b)–(d)–(f) (grafici esportati da Mathematica).



Figura 4: Rapporto tra il valore vero degli elementi dell'inversa di h_w (la matrice di Anderson corrispondente a una distribuzione uniforme degli ω_i in [-w/2, w/2]) e la stima DMS per gli stessi; lo scarto aumenta con w, il parametro di disordine.

Consideriamo una matrice $h = h_w$ costruita in questo modo; le proprietà di h verranno discusse rigorosamente nel capitolo 4, mentre in questa sezione ci si limiterà a studiarne qualitativamente l'inversa h^{-1} . Ci aspettiamo che sommando una perturbazione diagonale a h_0 la matrice ottenuta non sia più, in generale, definita positiva. La positività *potrebbe* essere preservata se w è preso sufficientemente piccolo rispetto a 2 (il valore diagonale di h_0), ma poiché siamo interessati a invertire una "tipica" matrice di Anderson ci porremo da subito nel caso di h indefinita.

Per una distribuzione uniforme della perturbazione diagonale ci aspettiamo che h rimanga "con ogni probabilità" invertibile (si può dimostrare che l'insieme delle scelte di $(\omega_i)_i$ che annullano il determinante di $h = h_0 + \text{diag}(\omega_1, \ldots, \omega_n)$ ha misura $\mu^{\otimes n}$ -nulla). Viene pertanto naturale studiare il comportamento degli elementi di h^{-1} — e in particolare la velocità con cui decadono a 0 lontano dalla diagonale principale — e confrontarlo con i limiti superiori disponibili grazie al teorema generale 2.1.8 di Demko, Moss e Smith.

I risultati numerici mostrano che il limite superiore dato dal teorema è pessimistico, sovrastimando gli elementi di matrice di un gran numero di ordini di grandezza. Il problema fondamentale è dovuto al fatto che il coefficiente q, quello tale per cui $|A^{-1}(i,j)| \leq Cq^{|i-j|/2}$, si avvicina sempre più a 1 all'aumentare della dimensione, risultando in un vincolo esponenziale sempre più lasso. Questa osservazione verrà ripresa e analizzata nel capitolo 5.

In Figura 4 viene paragonato il rapporto tra gli elementi antidiagonali dell'inversa di una matrice di Anderson 500×500 e i loro vincoli DMS per diversi valori del parametro di disordine.

3.3 Localizzazione in matrici casuali non hermitiane

In questa sezione, studiamo una classe di matrici tridiagonali dalle proprietà particolarmente interessanti, ossia matrici del tipo

$$M(z^{n}) = \begin{pmatrix} a_{1} & b_{1} & & z^{n}c_{1} \\ c_{2} & a_{2} & b_{2} & & \\ & c_{3} & a_{3} & & \\ & & \ddots & b_{n-1} \\ b_{n}/z^{n} & & c_{n} & a_{n} \end{pmatrix}$$

dove gli elementi a_i, b_i, c_i assumono valori casuali uniformemente distribuiti sul disco unitario complesso ($|a_i| \leq 1$ eccetera), e $z \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$ (ma i risultati presentati di seguito sono qualitativamente validi anche per distribuzioni più generali [24]).

Questa è una matrice del tipo (2.26) (nel caso m = 1). Si può dimostrare che $M(z^n)$ è simile alla matrice "bilanciata"

$$M_b(z) = \begin{pmatrix} a_1 & b_1/z & zc_1 \\ zc_2 & a_2 & b_2/z & \\ zc_3 & a_3 & \\ & & \ddots & b_{n-1}/z \\ b_n/z & zc_n & a_n \end{pmatrix}$$
(3.12)

tramite la matrice $S = \text{diag}(z, z^2, \dots, z^n)$; dal punto di vista computazionale risulta conveniente adoperare la matrice $M_b(z)$ anziché $M(z^n)$, dal momento che *n* viene preso molto grande. Ricordiamo che due matrici simili possiedono lo stesso spettro, e che *u* è un autovettore di $M(z^n)$ se e solo se Su è un autovettore di $M_b(z)$ (relativo allo stesso autovalore).

Dal punto di vista fisico, $M(z^n)$ può essere pensata come l'Hamiltoniano di un sistema discreto unidimensionale con *hopping asimmetrico* a primi vicini, dove il valore di $|z|^2$ codifica una direzione preferenziale di transizione.

Una generica matrice con elementi casuali indipendenti e identicamente distribuiti obbedisce alla *legge circolare*, ossia possiede autovalori che tendono a distribuirsi uniformemente su un disco nel piano complesso centrato nell'origine. Per matrici della forma (3.12), si osserva numericamente che il raggio di tale disco (detto *raggio spettrale*) non supera il valore 2. È possibile indagare numericamente come cambia lo spettro di $M_b(z)$ al variare di z una volta fissati gli elementi a_i, b_i e c_i . Questa idea di rendere progressivamente più asimmetrica una matrice tridiagonale per studiarne le proprietà spettrali è stata adoperata per la prima volta da Hatano e Nelson [15] su matrici inizialmente hermitiane ($b_i = \bar{c}_{i+1}$); in quel caso lo spettro della matrice, dapprima confinato sull'asse reale, inizia ad "aprirsi" sul piano complesso non appena |z| supera un certo valore critico, con la parte centrale dell'intervallo di autovalori che si dispone su due archi simmetrici rispetto all'asse reale in una caratteristica forma "a occhio".

Nel caso in esame, in cui la matrice iniziale è già non hermitiana, si osserva un comportamento analogo; in Figura 5 è riportato ad esempio lo spettro di una matrice 500×500 per valori crescenti di |z|. Si osserva un comportamento affascinante: mentre |z| aumenta, gli autovalori più lontani dall'origine non vengono affatto perturbati, almeno entro la precisione disponibile, mentre quelli più interni vengono repulsi via da un "fronte di deplezione" di forma approssimativamente (e in effetti, asintoticamente) circolare. La forma esatta di tale fronte, così come il valore critico di |z| in corrispondenza del quale esso si forma, dipende dalla particolare realizzazione di elementi casuali a_i, b_i e c_i della matrice, ma la dipendenza diviene trascurabile



Figura 5: Spettro di una matrice del tipo (3.12), con n = 500. Il parametro z assume i valori (reali) 1.3, 1.5, 2.5 in (a), (b), (c) rispettivamente (cosicché |z| = z in questo caso).

per valori sufficientemente elevati di n. Si osserva che il valore critico tende a essere compreso tra |z| = 1.3 e |z| = 1.4.

Facendo variare arg z, la fase del parametro, si osserva invece che tutti e soli gli autovalori disposti sul fronte circolare — se questo è presente — iniziano a ruotare attorno all'origine, occupando ciascuno il sito di quello successivo quando $\Delta(\arg z) = 2\pi/n$ (e in effetti notiamo che $M(z^n)$ non cambia a seguito di una tale trasformazione di fase per z). Di nuovo, gli autovalori più esterni rimangono inalterati.

Il motivo per cui il fronte diventa asintoticamente circolare può essere compreso osservando che per $|z| \to \infty$ gli elementi sopradiagonali della matrice $M_b(z)$ tendono a 0; il determinante può allora essere calcolato esattamente, dando

$$\det M_b(z) \sim (a_1 - E) \cdots (a_n - E) - (-1)^n z^n c_1 \cdots c_n \stackrel{!}{=} 0 \implies E^n \sim z^n c_1 \cdots c_n,$$

cosicché il valore atteso degli *n* autovalori tende asintoticamente a $|z|e^{\langle \ln |c| \rangle + i(\varphi + 2\pi k/n)}$, dove $k \in \{0, \ldots, n-1\}$, φ è una fase globale e si è indicato con $\langle \cdot \rangle$ il valore atteso rispetto alla distribuzione scelta per gli elementi di matrice (nel caso in esame, $\langle \ln |c| \rangle = -1/2$).

Notiamo che la matrice $M_b(z)$ è associata, secondo quanto detto nella sezione 2.3, alla matrice di trasferimento

$$T(E) = \prod_{j=1}^{n} \begin{pmatrix} b_j^{-1}(E-a_j) & -b_j^{-1}c_j \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$
(3.13)

il cui autovalore massimo, per il teorema di Oseledec, è caratterizzato da una crescita esponenziale $e^{n\xi_+}$, con $\xi_+ \to \gamma(E)$ (esponente di Lyapunov) per $n \to +\infty$.

Questo può essere calcolato esplicitamente grazie alla formula di Herbert–Jones–Thouless (teorema 2.3.10) generalizzata al caso non hermitiano:

$$\gamma(E) = \gamma(|E|) = \ln|E| \mathcal{N}_0(|E|) + 2\pi \int_{|E|}^{+\infty} E' \rho_0(E') \ln E' dE' + \frac{1}{2}, \qquad (3.14)$$

dove si tiene conto che la distribuzione degli autovalori dipende solo da |E| (dato che gli elementi a_i, b_i e c_i hanno una distribuzione angolare uniforme) e $\mathcal{N}_0(|E|)$ è la frazione di autovalori E' tali che $|E'| \ge |E|$. L'esponente di Lyapunov è una funzione crescente di |E|, e si riduce a

$$\gamma(|E|) = \ln|E| + \frac{1}{2},$$

per $|E| \ge 2$ (ricordiamo che 2 è il raggio spettrale).

È possibile dimostrare che un autovettore è tanto più localizzato quanto maggiore è il modulo dell'autovalore a cui si riferisce. L'insorgere di un fronte di deplezione con l'aumentare di |z| corrisponde pertanto a una sempre minore localizzazione degli autovettori, fino al regime di |z| molto grande, in cui ciascun autovettore è delocalizzato. La delocalizzazione di un autovettore $v = (v_k)_k$ può essere misurata quantitativamente calcolando, ad esempio, la deviazione standard delle sue componenti:

$$\sigma(v) = \sum_{k=1}^{n} (v_k - \bar{v})^2 |v_k|^2,$$

con $\bar{v} = \sum_k k |v_k|^2$. In Figura 6 è riportata la localizzazione degli autovettori di una matrice 500×500 in corrispondenza del valore |z| = z = 1.5.

Ricordiamo che nel modello descritto da $M(z^n)$ il (modulo del) parametro può essere pensato come preferenzialità direziona-



Figura 6: Deviazione standard dell'autovettore v^E relativo all'autovalore E in funzione di |E|. Ad autovalori più distanti dall'origine corrispondono autovettori più localizzati.

le; quando esso assume valori elevati, il moto in una delle direzioni risulta quasi completamente soppresso, costringendo la corrente a fluire nella direzione preferenziale. Notiamo che per lo stesso motivo ci aspettiamo un comportamento analogo quando $|z| \rightarrow 0$ (ossia per $|1/z| \rightarrow +\infty$, il che corrisponde a privilegiare la direzione opposta); questo è proprio il comportamento che si osserva: il sistema di autovalori "medio" di $M_b(z)$ è lo stesso di quello di $M_b(1/z)$.

Ricordiamo altresì che z può anche essere visto come il parametro che fissa le condizioni al contorno del sistema descritto da $M(z^n)$; variando di poco queste condizioni, ci aspettiamo che il comportamento degli autovettori stessi venga modificato solo leggermente. La presenza di un valore critico per |z| segnala una transizione di regime a cui sono massimamente sensibili gli autovettori relativi ad autovalori vicini all'origine.

Concludiamo dimostrando che il raggio del circolo di deplezione è asintoticamente legato al massimo esponente di Lyapunov della matrice di trasferimento (3.13).

Proposizione 3.3.1. Asintoticamente per $n \to +\infty$, la matrice $M_b(e^{\xi+i\varphi})$ non possiede autovalori nel disco di raggio |E|, dove $\gamma(|E|) = \xi$.

Dimostrazione. Il principio dell'argomento di Cauchy è un teorema di analisi complessa che afferma che il numero di zeri di una funzione analitica f all'interno di un cerchio di raggio requivale alla variazione dell'argomento di $f/2\pi$ lungo il contorno del cerchio stesso. Consideriamo $f(E) = \det [E - M_b(z)]$ (funzione ovviamente analitica in E, essendo un polinomio); per la relazione di dualità 2.3.2 si ha

$$\det \left[E - M_b(z) \right] = -z^{-n} b_1 \cdots b_n \det \left[T(E) - z^n \right],$$

da cui

$$\arg \det \left[E - M_b(e^{\xi + i\varphi}) \right] = \cos t + \arg \left[e^{n(\xi_+ - \xi) + in(\varphi_+ - \varphi)} - 1 \right] + \arg \left[e^{n(\xi_- - \xi) + in(\varphi_- - \varphi)} - 1 \right],$$

dove si sono indicati con $z_{\pm}^n = z_{\pm}^n(E) = e^{n(\xi_{\pm} + i\varphi_{\pm})}$ i due autovalori di T(E). È possibile dimostrare che per *n* sufficientemente grande vale $\xi_+ > 0$ e $\xi_- < 0$, e in effetti $\xi_+ + \xi_- \to 0$ per $n \to +\infty$. Si fissi ora $\xi > 0$ e si faccia tendere $n \to +\infty$, di modo che sia $\pm \xi_{\pm} > 0$. Allora si ha

$$\arg\left[e^{n(\xi_+-\xi)+\mathrm{i}n(\varphi_+-\varphi)}-1\right] \to \begin{cases} n(\varphi_+-\varphi) & \xi < \xi_+\\ \pi & \xi > \xi_+ \end{cases}$$

mentre di certo $\arg[e^{n(\xi_--\xi)+in(\varphi_--\varphi)}-1] \to \pi$. Per il teorema di Oseledec, nel limite $n \to +\infty$ l'esponente ξ_+ tende a $\gamma(|E|)$, completando la dimostrazione.

Capitolo 4

Il modello di Anderson

4.1 Definizione dell'Hamiltoniano

Questa sezione segue le presentazioni esposte in [26] e [18].

Il modello di Anderson viene introdotto per studiare la dinamica di una singola particella non interagente in un sistema cristallino ideale cui viene aggiunto un grado arbitrario di disordine sotto forma di un potenziale a valori casuali. L'ambientazione naturale del modello è lo spazio di Hilbert $\ell^2(S)$ delle successioni a quadrato sommabile sull'insieme $S \subseteq \mathbb{Z}^d$, il cui generico elemento viene denotato da $u = (u(n))_{n \in S}$.

4.1.1 Hamiltoniano libero

Per cominciare, verrà considerato il caso di reticolo *d*-dimensionale illimitato, con $S = \mathbb{Z}^d$; lo spazio di Hilbert $\ell^2(S)$ viene equipaggiato dell'usuale prodotto hermitiano

$$\langle u, v \rangle = \sum_{n \in \mathbb{Z}^d} \overline{u(n)} v(n).$$

Definiamo la norma-1 in \mathbb{Z}^d come

$$|k| = |k_1| + \dots + |k_d|; \tag{4.1}$$

l'operatore di Laplace su $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$ è allora definito da

$$(-h_0 u)(n) = \sum_{\substack{k \in \mathbb{Z}^d \\ |k|=1}} u(n+k),$$
(4.2)

in perfetta analogia con il capitolo precedente (in cui però S era un insieme finito). Si noti che in questa definizione di h_0 abbiamo posto uguali a zero tutti gli elementi diagonali, effettuando lo spostamento uniforme $h_0 \hookrightarrow h_0 - 2d \mathbb{I}_{\mathbb{Z}^d}$; questo non ha conseguenze matematicamente o fisicamente rilevanti perché la parte diagonale (che può essere eventualmente incorporata nel potenziale) corrisponde a una ridefinizione dello zero dell'energia. L'operatore h_0 è l'Hamiltoniano del reticolo cristallino in assenza di potenziale, e il suo spettro corrisponde alle energie ammissibili per un singolo elettrone che si muove all'interno di un reticolo infinito con *hopping* a primi vicini. Come nel caso finito-dimensionale, l'operatore h_0 è limitato e autoaggiunto; per vederlo, è sufficiente osservare che è unitariamente equivalente all'operatore G di moltiplicazione per la funzione

$$g(x) = -2\sum_{j=1}^d \cos x_j$$

definito su $\mathfrak{L}^2([0, 2\pi)^d)$ (qui $x = (x_1, \ldots, x_d)^*$ è il vettore delle variabili standard su $[0, 2\pi)^d$). In effetti, si può dimostrare che

$$\mathscr{F}^{-1}h_0\mathscr{F}=G$$

dove \mathscr{F} è la trasformata di Fourier da $\mathfrak{L}^2([0,2\pi)^d)$ a $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$, definita da

$$(\mathscr{F}g)(n) = (2\pi)^{-d/2} \int_{[0,2\pi)^d} g(x) e^{-ix \cdot n} \mathrm{d}x,$$

con $g \in \mathfrak{L}^2([0,2\pi)^d)$ e $x \cdot n = x_1n_1 + \cdots + x_dn_d$; l'inversa è data da

$$(\mathscr{F}^{-1}u)(x) = \lim_{N \to \infty} (2\pi)^{-d/2} \sum_{\substack{n \in \mathbb{Z}^d \\ |n| \le N}} u(n) e^{ix \cdot n}$$

 $\operatorname{con} \, u \in \ell^2(\mathbb{Z}^d).$

Lo spettro di h_0 coincide pertanto con quello di g; lo spettro di un operatore di moltiplicazione su \mathfrak{L}^2 coincide con il suo *essential range*, definito da

$$\operatorname{Im}_{e} g = \left\{ y \in \mathbb{R} \, \big| \, \mu \left(g^{-1} \left(B_{\varepsilon}(y) \right) \right) > 0 \quad \forall \varepsilon > 0 \right\},$$

dove $B_{\varepsilon}(y) = \{x \mid |x - y| < \varepsilon\}$ e μ è la misura di Lebesgue su \mathbb{R} . Si ha pertanto $\sigma(h_0) = [-2d, 2d]$.

Le autofunzioni generalizzate di h_0 hanno la forma

$$\varphi_x(n) = e^{ix \cdot n},$$

 \cos

$$(h_0\varphi_x)(n) = -\sum_{|k|=1} e^{ix \cdot (n+k)} = \left(-\sum_{j=1}^d 2\cos x_j\right)\varphi_x(n).$$

4.1.2 Disordine

Come già accennato, il disordine viene introdotto addizionando all'Hamiltoniano libero una parte di potenziale che assume valori casuali $\omega(n)$ su ciascun sito del reticolo. L'azione del potenziale V_{ω} sui vettori è moltiplicativa:

$$(V_{\omega}u)(n) = \omega(n)u(n).$$

L'Hamiltoniano completo è definito, per ogni $\omega,$ da

$$h_{\omega} = h_0 + V_{\omega}; \tag{4.3}$$

questa è di fatto una famiglia di operatori in dipendenza dall'elemento $\omega \in \Omega$; ma che cos'è esattamente Ω ? Un modo standard per costruire lo spazio campionario è definirlo come prodotto diretto di copie della retta reale, ossia

$$\Omega = \mathbb{R}^{\mathbb{Z}^d} \equiv \prod_{n \in \mathbb{Z}^d} \mathbb{R},$$

dove qui, come di seguito, \prod indica il prodotto cartesiano tra insiemi; la σ -algebra a esso associata in modo naturale è l'algebra prodotto \mathscr{E} generata¹ dagli insiemi del tipo

$$\prod_{n \in \mathbb{Z}^d} C_n \qquad \text{con} \quad \#\{k \,|\, C_k \neq \mathbb{R}\} < +\infty$$

(insiemi cilindrici di Ω), dove # è la cardinalità di un insieme.

La misura di probabilità \mathbb{P} viene definita come l'unica estensione su Ω della premisura definita sull'algebra degli insiemi cilindrici dalla formula

$$\mathbb{P}(C) = \prod_{n \in K} \mu(C_n),$$

dove C è l'insieme cilindrico $\prod_{n \in \mathbb{Z}^d} C_n$, $K = \{k \mid C_k \neq \mathbb{R}\}$ e μ è una misura di probabilità su \mathbb{R} .

Si può anche scegliere come insieme di appartenenza delle $\omega(n)$ un sottinsieme di \mathbb{R} , tipicamente della forma I = [-w/2, w/2]; in questo caso μ può essere scelta proporzionale alla misura di Lebesgue (essendo ora una misura finita, μ può essere normalizzata). Di fatto non si perde in generalità considerando $\Omega = \mathbb{R}^{\mathbb{Z}^d}$, dal momento che si possono "cancellare le parti in eccesso" moltiplicando la misura per un'opportuna funzione indicatrice χ_I . Poniamo pertanto uguale a \mathbb{R} l'insieme cui appartengono le $\omega(n)$.

La funzione identità $\mathbb{1} \equiv \mathbb{1}_{\mathbb{R}} : x \mapsto x$ è una variabile casuale su \mathbb{R} la cui distribuzione coincide con la misura μ . Essa fornisce il collegamento tra la nozione di variabile casuale "secondo Kolmogorov" — funzione misurabile su uno spazio di probabilità — e quella adoperata comunemente in statistica — valore estratto da un insieme di valori possibili in accordo a una certa distribuzione. Ad esempio, il valore atteso di ciascuna componente $\omega(n)$ è

$$\langle \omega(n) \rangle \equiv \mathbb{E}[\mathbb{1}] = \int_{\mathbb{R}} \mathbb{1} \, \mathrm{d}\mu = \int_{I} x \, \mathrm{d}x,$$

ipotizzando che $\mu = \mu_I = \chi_I \mu_{\mathbb{R}}$ sia la misura di Lebesgue su *I*; più in generale, possiamo supporre che d μ abbia la forma

$$\mathrm{d}\mu = p(x)\mathrm{d}x$$

per qualche funzione $p : \mathbb{R} \to [0, +\infty)$ (chiamata la *densità di probabilità* delle $\omega(n)$). Ad esempio, una distribuzione gaussiana su \mathbb{R} sarebbe caratterizzata da un valore atteso

$$\langle \omega(n) \rangle = \int_{\mathbb{R}} \frac{e^{(x-x_0)^2/2\sigma^2}}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \,\mathrm{d}x = x_0$$

Per qualunque realizzazione ω del disordine, l'Hamiltoniano h_{ω} descrive il sistema costituito da un singolo elettrone confinato in un cristallo infinito che possiede in ciascun nodo una carica casuale. Per come abbiamo costruito lo spazio di probabilità, ciascuna carica è indipendente e identicamente distribuita secondo la comune distribuzione μ (vedi l'inizio di Sezione 2.2.1 e formula (2.17)).

¹Si dice che la collezione di insiemi \mathscr{B} genera la σ -algebra \mathscr{E} se \mathscr{E} è la più piccola σ -algebra che contiene \mathscr{B} .

4.1.3 Proprietà spettrali e spettro di h_{ω}

Come già scritto sopra, non siamo alle prese con un singolo operatore, ma con una famiglia di operatori $\{h_{\omega}\}_{\omega\in\Omega}$ parametrizzata dal "vettore delle cariche"² $\omega = (\omega_n)_n$; vedremo che la maggior parte delle proprietà che verranno enunciate (perlopiù senza dimostrazione) non si applicano in generale all'intera famiglia, bensì — come spesso accade nelle trattazioni di natura probabilistica — per un sottoinsieme $\Omega_0 \subset \Omega$ tale che $\mathbb{P}(\Omega_0) = 1$; questo verrà evidenziato scrivendo che la proprietà esposta vale "P-quasi certamente", o per brevità soltanto "quasi certamente".

La prima proprietà presentata costituisce in realtà un'eccezione alla regola, essendo valida per $ogni \ \omega$.

Teorema 4.1.1. $\forall \omega \in \Omega$, l'operatore h_{ω} definito in (4.3) è autoaggiunto sull'insieme

$$\mathcal{D}(V_{\omega}) = \left\{ u \in \ell^2(\mathbb{Z}^d) \, \Big| \, \sum_{n \in \mathbb{Z}^d} |\omega(n)u(n)|^2 < +\infty \right\}$$

(il dominio massimale di V_{ω}).

L'Hamiltoniano è quindi un operatore autoaggiunto su tutto il dominio di V_{ω} . Perché sia anche limitato, è necessario aggiungere un'ipotesi sulla distribuzione del disordine; a questo scopo, definiamo il *supporto* della misura μ nel seguente modo:

$$\operatorname{supp} \mu = \left\{ x \in \mathbb{R} \, \big| \, \mu \big(B_{\varepsilon}(x) \big) > 0 \quad \forall \varepsilon > 0 \right\}.$$

Vale il seguente teorema.

Teorema 4.1.2. Se supp μ è un insieme limitato, allora h_{ω} è un operatore limitato su $\mathcal{D}(V_{\omega}) = \ell^2(\mathbb{Z}^d)$. Se invece supp μ non è limitato, h_{ω} è quasi certamente non limitato.

Naturalmente, la limitatezza di h_{ω} dipende unicamente da quella di V_{ω} ; intuitivamente parlando, se gli $\omega(n)$ prendono valori quasi solo in un insieme limitato, allora V_{ω} (che moltipica l'*n*-sima componente di un vettore per $\omega(n)$) è a sua volta limitato, e in questo caso può essere esteso all'intero spazio di Hilbert.

Per quanto riguarda lo spettro, è possibile dimostrare che esiste un insieme chiuso $\Sigma \subset \mathbb{R}$ tale che $\sigma(h_{\omega}) = \Sigma$ per quasi ogni $\omega \in \Omega$; in altre parole, lo spettro di h_{ω} è quasi certamente deterministico. In effetti, si può dare una caratterizzazione ancora più precisa di $\sigma(h_{\omega})$.

Teorema 4.1.3. Per quasi ogni $\omega \in \Omega$,

$$\sigma(h_{\omega}) = \{ x + y \, | \, x \in \sigma(h_0), y \in \operatorname{supp} \mu \},\$$

o più brevemente

$$\sigma(h_{\omega}) = \sigma(h_0) + \operatorname{supp} \mu.$$

Abbiamo in questo modo una caratterizzazione esatta dello spettro dell'Hamiltoniano valida per tutte le realizzazioni del disordine eccetto un insieme di probabilità zero.

²Questa definizione è in effetti coerente (a patto di considerare un "vettore" infinito-dimensionale), a causa della forma di spazio prodotto di Ω .

4.2 Localizzazione degli autostati

4.2.1 Localizzazione spettrale e dinamica

Esistono due modi possibili per formalizzare il concetto di "localizzazione" esibita dal modello di Anderson: la localizzazione *spettrale* e quella *dinamica*.

Definizione 4.2.1. Si dice che la famiglia $\{h_{\omega}\}_{\omega \in \Omega}$ esibisce *localizzazione spettrale esponen*ziale nell'intervallo $I \subset \mathbb{R}$ se per quasi ogni $\omega \in \Omega$ si ha

$$\sigma(h_{\omega}) \cap I \subset \sigma_p(h_{\omega}),$$

dove $\sigma_p(h_{\omega})$ è lo spettro puntuale di h_{ω} , e se inoltre gli autovettori relativi a ciascun autovalore in $\sigma(h_{\omega}) \cap I$ decadono esponenzialmente per $|n| \to \infty$.

Dal punto di vista fisico, una famiglia di Hamiltoniani localizzati in questo senso possiede autostati la cui possibilità di "movimento" per effetto tunnel è esponenzialmente soppressa a causa degli effetti di decoerenza indotti dalla presenza del disordine casuale, in contrapposizione al caso di elettroni "Bloch" in un reticolo periodico, le cui funzioni d'onda sono libere di mantenersi non nulle all'infinito. In altre parole, l'esistenza di stati delocalizzati (o *diffusivi*) è segnalata dalla presenza della parte assolutamente continua dello spettro; mentre gli stati localizzati (o *legati*) si trovano in corrispondenza degli autovalori propri dell'Hamiltoniano, cioè del suo spettro puntuale³. La localizzazione spettrale in un certo intervallo di energie equivale alla richiesta che in quell'intervallo lo spettro sia puramente puntuale, perciò escludendo la possibilità di stati diffusivi.

Contrariamente a quanto si potrebbe pensare, questo *non* è sufficiente a garantire l'assenza di *trasporto quantico*, nel senso che persino per un autovettore esponenzialmente localizzato dal punto di vista spettrale i momenti dell'operatore posizione potrebbero non mantenersi limitati nel tempo.

Un elettrone che si muova "balisticamente" con velocità media v_0 sarà caratterizzato da uno spostamento $x(t) \sim v_0 t$ per t elevati. Se chiamiamo u_0 lo stato iniziale, l'evoluzione temporale ristretta all'intervallo di energie I si ottiene — in virtù dell'equazione di Schrödinger — tramite il gruppo unitario a un parametro

$$u(t) = e^{-ith_{\omega}}\chi_I(h_{\omega})u_0,$$

dove χ_I è il proiettore spettrale su I. Definiamo ora l'operatore |x| tramite

$$(|x|u)(n) = |n|u(n)$$

per ogni $u \in \mathcal{D}(|x|) = \{v \in \ell^2(\mathbb{Z}^d) \mid |x|v \in \ell^2(\mathbb{Z}^d)\}$. Poiché il moto è balistico, si avrà che la quantità

 $|||x|u(t)||^2$

cresce asintoticamente come t^2 , segno evidente della non localizzazione dello stato. Benché la localizzazione spettrale implichi effettivamente l'assenza di moto balistico, è stato dimostrato esplicitamente che esistono operatori di Schrödinger unidimensionali che sono spettralmente localizzati ma per cui vale

$$\limsup_{t \to \pm \infty} \frac{\||x|u(t)\|^2}{t^{2-\delta}} = +\infty \qquad \forall \delta > 0.$$

 $^{{}^{3}}$ È possibile rendere questa affermazione rigorosa tramite il *teorema di Ruelle-Amrein-Georcescu-Enss*, meglio noto come *teorema RAGE*.

Il motivo per cui ciò può accadere è da ricercarsi nel fatto che la localizzazione spettrale, per quanto imponga agli autovettori di decrescere secondo una legge del tipo

$$u^{(m)}(n) \le C_m e^{-\kappa |n|},$$

non pone alcuna restrizione sulle costanti moltiplicative C_m , che hanno così la possibilità di crescere con m in modo arbitrario.

È chiaro pertanto che la definizione 4.2.1 non è sufficientemente restrittiva per poter parlare di autostati "localizzati" in modo soddisfacente. Per questo motivo, si introduce la seguente nozione.

Definizione 4.2.2. Si dice che la famiglia $\{h_{\omega}\}_{\omega \in \Omega}$ esibisce *localizzazione dinamica* nell'intervallo $I \subset \mathbb{R}$ se $\exists C \in \mathbb{R}, \exists \kappa > 0$ tali che

$$\mathbb{E}\left[\sup_{t\in\mathbb{R}}\left|e^{-ith_{\omega}}\chi_{I}(h_{\omega})(j,k)\right|\right] \leq Ce^{-\kappa|j-k|} \qquad \forall j,k\in\mathbb{Z}^{d}$$

per quasi ogni $\omega \in \Omega$, dove $(\cdot)(j,k) \equiv \langle e_j, (\cdot)e_k \rangle$ è l'elemento di matrice (j,k) rispetto alla base canonica $\{e_j\}_{j \in \mathbb{Z}^d}$ di $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$.

Questa condizione assicura che tutti i momenti dell'operatore posizione si mantengano limitati uniformemente nel tempo per ogni condizione iniziale a supporto finito. In effetti, se h_{ω} soddisfa la definizione 4.2.2, allora

$$\sup_{t\in\mathbb{R}}\left\||x|^{p}e^{-ith_{\omega}}\chi_{I}(h_{\omega})u_{0}\right\|<+\infty$$

per ogni p > 0, per ogni $u_0 \in \ell^2(\mathbb{Z}^d)$ a supporto finito e per quasi ogni $\omega \in \Omega$; la localizzazione dinamica è quindi una condizione fisicamente soddisfacemente di assenza di trasporto quantico. Si può dimostrare che la localizzazione dinamica è una proprietà strettamente più forte della localizzazione spettrale esponenziale; in simboli,

 h_{ω} localizzato dinamicamente in $I \implies h_{\omega}$ localizzato spettralmente in I.

4.2.2 Teoremi di localizzazione per il modello di Anderson

Per quantificare l'ordine di grandezza del disordine, introduciamo un parametro adimensionale $\lambda \ge 0$ davanti al potenziale casuale:

$$h_{\omega} = h_{\omega,\lambda} = h_0 + \lambda V_{\omega}.$$

Inoltre, introdurremo la fisicamente ragionevole ipotesi di lavoro per cui la distribuzione μ del disordine può essere scritta nella forma

$$\mu(\delta) = \int_{\delta} \rho(x) \, \mathrm{d}x \qquad \forall \delta \in \mathscr{B}(\mathbb{R}),$$

il che è sempre possibile se μ è assolutamente continua⁴ rispetto alla misura di Lebesgue su \mathbb{R} (*teorema di Radon–Nikodym*). Supponiamo per semplicità che ρ sia limitata e a supporto compatto: in questo modo, h_{ω} è un operatore limitato (e autoaggiunto) su $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$.

⁴Una misura μ su una σ -algebra \mathscr{E} è *assolutamente continua* rispetto a un'altra misura ν su \mathscr{E} se $\nu(\delta) = 0 \implies \mu(\delta) = 0$ per ogni $\delta \in \mathscr{E}$.

Con queste ipotesi, è possibile dimostrare che h_{ω} è dinamicamente localizzato in qualunque dimensione se λ è sufficientemente elevato. In effetti, per d = 1 la localizzazione è verificata per qualunque valore non nullo del disordine; dal momento che per $\lambda = 0$ si ottiene $h = h_0$, a valori sempre minori di λ corrispondono lunghezze tipiche di decadimento sempre maggiori. Anche per d = 2 l'operatore rimane dinamicamente localizzato per qualunque $\lambda > 0$, ma in modo più debole rispetto al caso unidimensionale: se λ è piccolo, si può comunque verificare trasporto quantico a seguito di effetti di accoppiamento magnetico (dovuto a un campo esterno o a un'interazione spin-orbitale).

Il caso d = 3 è quello più interessante, sia dal punto di vista fisico sia da quello matematico. In questo caso, un basso livello di disordine non inficia la delocalizzazione degli autostati, permettendo così moti diffusivi di un elettrone per il cristallo, che è in questo caso un conduttore; se invece il disordine è elevato, esso è sufficiente a smorzare qualunque tipo di trasporto quantico, localizzando dinamicamente gli stati. Dal momento che h_{ω} dipende con continuità da λ , ci aspettiamo di osservare una transizione di fase più o meno segnata nel passaggio dal regime ordinato a quello disordinato; questo fenomeno, detto transizione di Anderson, è proprio quello che si osserva teoricamente e sperimentalmente.

Uno dei modi per dimostrare questo risultato matematicamente è tramite l'analisi dei cosiddetti *momenti frazionari* della funzione di Green del sistema. Quest'ultima è definita come l'elemento di matrice del risolvente di h_{ω} :

$$G_{\omega}(j,k;\epsilon) = (h_{\omega} - \epsilon)^{-1} (j,k)$$

 $(j, k \in \mathbb{Z}^d, \epsilon \in \mathbb{C} \setminus \sigma_p(h_\omega)).$

Aizenman e Molchanov hanno dimostrato che se λ è sufficientemente elevato, il valore atteso dei "momenti frazionari" di G_{ω} , ossia le quantità

$$|G_{\omega}(j,k;\epsilon)|^s$$

con 0 < s < 1, decade esponenzialmente con |j - k| per ogni fissata energia $\epsilon = E + i\varepsilon$ uniformemente in $\varepsilon \neq 0$, e questo risultato vale per qualunque d. La parte immaginaria viene aggiunta per garantire che G_{ω} risulti definito (i poli di G_{ω} giacciono interamente sull'asse reale). Analogamente, l'elevazione a una potenza $s \in (0, 1)$ è usata per assicurare che la quantità di cui si sta prendendo il valore atteso sia uniformemente limitata in $\varepsilon \neq 0$.

Questa caratterizzazione di h_{ω} è molto forte; una conseguenza del decadimento dei momenti frazionari per ogni $E \in I$ (I intervallo aperto di \mathbb{R}) è che h_{ω} risulta dinamicamente localizzato in I.

4.2.3 Cenno ai modelli a volume finito

Finora abbiamo identificato il reticolo cristallino in cui si muove l'elettrone con lo spazio \mathbb{Z}^d , uno spazio illimitato. Un altro approccio possibile consiste nel considerare dapprima un volume finito, ossia il caso $u \in \ell^2(\Lambda)$ con

$$\Lambda = \Lambda_L = [-L, L]^d \cap \mathbb{Z}^d$$

e successivamente prendere il "limite termodinamico" $L \to +\infty$. L'operatore Hamiltoniano è semplicemente

$$h_{\omega}^{\Lambda} = h_{\omega} \big|_{\ell^2(\Lambda)}$$

(la restrizione di h_{ω} sul reticolo finito), con funzione di Green G_{ω}^{Λ} .

In questo caso si può dimostrare che, sotto opportune ipotesi sui momenti della funzione di Green sul bordo del reticolo, vale un risultato analogo a quello di Aizenman–Molchanov sul decadimento dei momenti frazionari; questo approccio permette di dimostrare la localizzazione dinamica del sistema infinito sfruttando vincoli uniformi validi nel caso finito-dimensionale.

4.3 Transizione metallo \rightarrow isolante

Come già accennato, il modello di Anderson nel caso tridimensionale è in grado di spiegare qualitativamente e in molti casi quantitativamente la fenomenologia coinvolta nella transizione metallo \rightarrow isolante (spesso chiamata MIT, *metal-insulator transition*) osservata in diversi materiali.

Questa transizione può essere prevista qualitativamente dallo studio del modello osservando che nel caso $\lambda = 0$ (per cui $h = h_0$) lo spettro dell'Hamiltoniano è puramente assolutamente continuo, $\sigma(h) = \sigma_{ac}(h)$, mentre per λ sufficientemente elevato, come abbiamo accennato nel paragrafo 4.2.2, esso diventa quasi certamente puramente puntuale, $\sigma(h) = \sigma_{pp}(h)$.

Dal punto di vista quantitativo, a ogni modo, il passaggio da stati estesi a stati localizzati in dimensione 3 (o superiore) rimane un problema aperto [11, 19]. Il comportamento congetturato, e osservato sperimentalmente in alcuni sistemi, è che nello spettro di energie di h a un livello intermedio di disordine coesistono entrambi i regimi, puntuale e continuo, in regioni contigue separate da un "bordo" — il cosiddetto mobility edge — in corrispondenza del (brusco) passaggio dal regime localizzato a quello esteso. In particolare, la parte centrale dello spettro corrisponde ad autostati estesi, mentre quelle laterali (simmetriche rispetto al centro) ad autostati localizzati; all'aumentare del disordine, i due bordi si avvicinano tra loro fino a unirsi al centro, dando così completa localizzazione spettrale.

Questa caratteristica forma dello spettro ha conseguenze fisicamente rilevanti. È noto dalla teoria che un materiale si comporta da isolante se l'energia di Fermi del sistema cade in un intervallo di energie non appartenente allo spettro; ciò che emerge dal modello di Anderson è che, per livelli sufficientemente elevati di disordine, lo spettro puntuale dell'Hamiltoniano è denso in un intervallo di \mathbb{R} (in effetti questo è implicato dalla localizzazione spettrale), e un sistema la cui energia di Fermi vada a cadere in tale intervallo si comporta anch'esso da isolante.

In esperimenti in cui sia possibile controllare la posizione dell'energia di Fermi (modificando il grado di disordine o la densità del materiale in questione) ciò consente di osservare in maniera diretta gli effetti della localizzazione, ad esempio misurando la variazione di conducibilità elettrica del materiale. Il regime localizzato è distinto da quello isolante dal fatto che, mentre in quest'ultimo la conduzione di corrente è soppressa completamente, nel primo essa rimane possibile tramite meccanismi di *hopping* dell'elettrone tra siti reticolari; questo meccanismo viene attivato dall'interazione dell'elettrone con il campo elastico di fononi, ed è pertanto contrariamente alla conduzione ordinaria — favorito dall'aumento di temperatura.

Capitolo 5 Conclusioni

Tra i risultati esposti nel capitolo 2, quelli di principale interesse nell'economia di questo lavoro sono senz'altro il teorema generale di Demko, Moss e Smith sull'inversa di una matrice a banda e la relazione di dualità tra il determinante di una matrice a banda e quello della matrice di trasferimento associata. Abbiamo mostrato come il vincolo esponenziale fornito dal primo possa essere tradotto in una condizione di crescita o descrecita esponenziale sui valori singolari di una singola matrice di trasferimento; questo equivale a stimare la crescita o decrescita della norma degli autovettori, dal momento che se u è un autovettore di T vale

$$||Tu||^2 = \langle Tu, Tu \rangle = \langle T^*Tu, u \rangle = \sigma^2 \langle u, u \rangle = \sigma^2 ||u||^2,$$

dove σ è un valore singolare di T.

L'asserzione cui vorremmo arrivare è che in un sistema tridiagonale (a blocchi), ad esempio in un reticolo di diametro n, gli autovettori sono caratterizzati da una norma che cresce o decresce esponenzialmente con l'aumentare di n, di modo che gli stati fisicamente accettabili rimangono soppressi esponenzialmente all'infinito. Questo risultato è essenzialmente già noto quasi certamente dal teorema di Oseledets, con moderate assunzioni sulla distribuzione degli elementi di matrice, ma il teorema 2.3.9 da noi enunciato è un'affermazione valida per ogni singola matrice di trasferimento, a qualunque valore finito di n. Inoltre, la dimostrazione di questo teorema è fondamentalmente più semplice di quella del teorema di Oseledets, ed è applicabile con un numero minimo di ipotesi (ad esempio, non essendo un teorema di natura stocastica, non si fanno supposizioni sulla distribuzione degli elementi di matrice, purché sia preservata l'invertibilità).

Il problema fondamentale del vincolo fornito dal teorema 2.3.9 è che il valore del coefficiente q, che descrive il tasso di crescita o decadimento esponenziale, possiede una dipendenza da n sconosciuta. Ricordiamo che il teorema afferma che metà dei 2m valori singolari di una matrice di trasferimento T = T(E) per un'Hamiltoniano h tridiagonale di dimensione $mn \times mn$ devono soddisfare il vincolo

$$\sigma \le Kq^{n/2}$$

dove

$$q = \frac{\operatorname{cond}(h^{o} - E\mathbb{I}_{mn}) - 1}{\operatorname{cond}(h^{o} - E\mathbb{I}_{mn}) + 1} = 1 - \frac{2}{\operatorname{cond}(h^{o} - E\mathbb{I}_{mn}) + 1}$$
$$K = \frac{\left[\operatorname{cond}(h^{o} - E\mathbb{I}_{mn}) + 1\right]^{2}}{2 \|h^{o} - E\mathbb{I}_{mn}\|_{\mathcal{B}}^{2}} m \|C_{1}\|_{\mathcal{B}} (\|h_{n}^{o} - \lambda\mathbb{I}_{m}\|_{\mathcal{B}} + \|C_{n}\|_{\mathcal{B}}) q^{-1}$$

Per assicurare che il vincolo rimanga significativo nel limite di grande n è necessario stimare la velocità con cui il numero cond $(h^o - E\mathbb{I}_{mn})$ tende a infinito. Ricordando la definizione di numero di condizionamento

$$\operatorname{cond}(h^{o} - E\mathbb{I}) = ||h^{o} - E\mathbb{I}|| ||(h^{o} - E\mathbb{I})^{-1}||$$

possiamo osservare con un calcolo diretto che

$$||h^{o} - EI|| \le \left(\max_{i} (a_{i} - E)^{2} + \max b_{i}^{2} + \max c_{i}^{2}\right)^{1/2}$$

(dove $a_i, b_i \in c_i$ sono rispettivamente gli elementi diagonali, sopradiagonali e sottodiagonali di h^o , presa per semplicità nel caso m = 1). Se gli elementi di matrice vengono scelti secondo una distribuzione a supporto limitato, questo fornisce un limite su $||h^o - EI||$ che è uniforme in n; altrimenti, ci aspettiamo che la norma tenda quasi certamente a infinito, essendo

$$\|h^o - E\mathbb{I}\| \ge \max_{ij} (h^o - E\mathbb{I})_{ij}.$$

La velocità con cui la norma tende a infinito, in questo caso, dipende naturalmente dal dettaglio della distribuzione. Ciononostante, ci aspettiamo che per una distribuzione sufficientemente centrata, con code esponenzialmente soppresse, la crescita della norma sia subesponenziale.

Più difficile risulta la stima di $||(h^o - E)^{-1}||$. Un risultato di grande rilevanza sarebbe dimostrare che anch'essa cresce subesponenzialmente con n (sotto opportune ipotesi sulla distribuzione degli elementi di matrice). Questo permetterebbe di mostrare che i vincoli esibiti dai teoremi di DMS e di dualità sono significativi, perché q tenderebbe a 1 abbastanza lentamente da essere annullato esponenzialmente al crescere di n.

Bibliografia

Testi

- K.B. Athreya, S.N. Lahiri (2006). Measure Theory and Probability Theory. Springer. New York.
- [2] R. Bhatia (1997). *Matrix Analysis*. Springer. New York.
- [3] P. Bougerol, J. Lacroix (1985). Products of Random Matrices with Application to Schrödinger Operators. Birkhäuser. Boston.
- [4] A. Crisanti, G. Paladin, A. Vulpiani (1993). Products of Random Matrices in Statistical Physics. Springer. Berlin.
- [5] G. Meinardus (1967). Approximation of Functions: Theory and Numerical Methods. Springer. Berlin.
- [6] M. Reed, B. Simon (1980). Methods of Modern Mathematical Physics, Vol. 1: Functional Analysis (revised and enlarged edition). Academic Press. San Diego.
- [7] W. Rudin (1991). Functional Analysis (second edition). McGraw-Hill. New York.
- [8] W. Rudin (1976). Principles of Mathematical Analysis (third edition). McGraw-Hill. New York.
- [9] F. Zhang (2011). Matrix Theory: Basic Results and Techniques (second edition). Springer. New York.

Articoli

- [10] P.W. Anderson (1958). Absence of Diffusion in Certain Random Lattices. Phys. Rev. 109, pp. 1492–1505.
- J. Bellissard, P. Hislop, A. Klein, G. Stolz (2009). Random Schrödinger Operators: Universal Localization, Correlations, and Interactions. http://www.birs.ca/workshops/2009/09w5116/report09w5116.pdf (12 pp).
- [12] C. de Boor (1980). Dichotomies for Band Matrices. SIAM J. Numer. Anal. 17, pp. 894– 907.
- S. Demko (1977). Inverses of Band Matrices and Local Convergence of Spline Projections. SIAM J. Numer. Anal. 14, pp. 616–619.

- [14] S. Demko, W.F. Moss, P.W. Smith (1984). Decay Rates for Inverses of Band Matrices. Mathematics of Computation 43, pp. 491–499.
- [15] N. Hatano, D.R. Nelson (1996). Localization Transitions in Non-Hermitian Quantum Mechanics. Phys. Rev. Lett. 77, pp. 570–573.
- [16] D.C. Herbert, R. Jones (1971). Localized states in disordered systems. J. Phys. C: Solid. State Phys. 4, pp. 1145–1161.
- G.Y. Hu, R.F. O'Connell (1996). Analytical inversion of symmetric tridiagonal matrices. J. Phys. A: Math. Gen. 29, pp. 1511–1513.
- [18] D. Hundertmark (2008). A short introduction to Anderson localization. In Analysis and Stochastics of Growth Processes and Interface Models. Oxford University Press. Oxford.
- B. Kramer, A. MacKinnon (1993). Localization: Theory and Experiment. Rep. Prog. Phys. 56, pp. 1469–1564.
- [20] J. Lacroix (1984). Computations of the sum of positive Lyapunov exponents for the Lloyd model in a strip. In Lyapunov Exponents. Lect. Notes in Mathematics 1186. Springer. Berlin.
- [21] A. Lagendijk, B. van Tiggelen, D.S. Wiersma (2009). Fifty years of Anderson localization. Phys. Today 62, pp. 24–29.
- [22] G. Meurant (1992). A Review on the Inverse of Symmetric Tridiagonal and Block Tridiagonal Matrices. SIAM J. Matrix Anal. Appl. 13, pp. 707–728.
- [23] L.G. Molinari (2013). Identities and exponential bounds for transfer matrices. J. Phys. A: Math. Theor. 46, 254004 (15 pp).
- [24] L.G. Molinari, G. Lacagnina (2009). Disk-annulus transition and localization in random non-Hermitian tridiagonal matrices. J. Phys. A: Math. Theor. 42, 395204 (9 pp).
- [25] G. Nabben (1992). Decay Rates of the Inverse of Nonsymmetric Tridiagonal and Band Matrices. SIAM J. Matrix Anal. Appl. 20, pp. 820–837.
- [26] G. Stolz (2011). An Introduction to the Mathematics of Anderson Localization. arXiv:1104.2317
- [27] R.C. Thompson (1972). Principal submatrices IX: Interlacing Inequalities for Singular Values of Submatrices. Linear Algebra and its Applications 5, pp. 1–12.
- [28] D.J. Thouless (1972). A relation between the density of states and range of localization for one dimensional random systems. J. Phys. C: Solid State Phys. 5, pp. 77–81.