
TRANSPORTE DE ELECTRONES EN HILOS CUÁNTICOS CON DESORDEN TIPO LÉVY

TRABAJO DE FINAL DE MÁSTER
TUTORIZADO POR VÍCTOR GOPAR
DEPARTAMENTO DE FÍSICA TEÓRICA

ZARAGOZA, 24 DE JUNIO DE 2015

ÍÑIGO ARRICIBITA

Universidad de Zaragoza



2015

MÁSTER EN FÍSICA Y TECNOLOGÍAS FÍSICAS

Índice

1. Introducción	1
2. Transporte cuántico de electrones	2
2.1. El concepto de canal	3
2.2. Matriz de <i>scattering</i> o de dispersión	6
2.3. Conductancia y fórmula de Landauer	8
3. Nanohilos desordenados	11
3.1. Nanohilo desordenado en una dimensión (caso de un canal)	11
3.2. Nanohilo desordenado cuasi-unidimensional	16
4. Nanohilos unidimensionales desordenados tipo Lévy	19
4.1. Distribuciones tipo Lévy o estables	19
4.2. Aplicación a la distribución de la conductancia	21
5. Nanohilos multicanal desordenados tipo Lévy	24
5.1. Aplicación de la teoría	24
5.2. Análisis de los resultados	24
6. Resumen y conclusiones	27
7. Agradecimientos	28

1. Introducción

El transporte de electrones a través de los materiales es uno de los temas clave en Física. Este fenómeno no sólo es de gran interés desde un punto de vista de ciencia fundamental sino que también lo es a nivel práctico debido a todas las aplicaciones tecnológicas que ofrece. Dado que la electrónica se basa en el transporte de carga eléctrica por los diferentes dispositivos de un circuito, la investigación en este campo nos lleva a una mayor sofisticación y progreso en la tecnología actual.

Los circuitos que empleamos a día de hoy requieren del estudio de sistemas físicos a unas escalas de distancia muy bajas. De hecho, de acuerdo con la ley experimental de Moore [1] cada año se duplica el número de transistores en un dispositivo electrónico, lo que nos lleva a que, para un mismo tamaño de circuito, tenemos el doble de elementos a cada año que pasa: así, el resultado es que las distancias entre elementos de circuito son tan pequeñas que la aplicación de la mecánica cuántica se hace necesaria para comprender la física que los gobierna.

Esto es algo que se aprecia en la tecnología que empleamos: ya en 1990, los dispositivos semiconductores comerciales eran del orden de entre $1\text{ }\mu\text{m}$ y 100 nm ¹; los *quantum dots* son sistemas semiconductores que confinan los electrones en un espacio reducido con una cuantización de la energía (cuyos niveles pueden ajustarse convenientemente según las condiciones que deseemos) y que tienen aplicaciones en optoelectrónica (lectores de CD, códigos de barras) y biomedicina (obtención de imágenes de mucho contraste con láseres de baja potencia). Queda claro que el estudio cuántico de los electrones resulta necesario y de una gran utilidad en nuestra tecnología actual.

Pero ¿cómo podemos estudiar estos sistemas? Idealmente, podemos analizar el transporte de electrones cuánticamente a través de la Física del Estado Sólido y la teoría de bandas. Sin embargo, la realidad experimental presenta problemas que estos modelos no pueden solucionar fácilmente: a diferencia de lo que en estas teorías se plantea, los sólidos reales no son periódicos y cristalinos ya que poseen átomos deslocalizados e impurezas. Este tipo de imperfecciones provoca que los electrones sufran una dispersión múltiple dentro del sólido, la cual resulta muy difícil de explicar con las teorías convencionales. Al tratar con estos sistemas hemos de afrontar procesos de dispersión que serán aleatorios, pues no podemos predecir cómo van a distribuirse las impurezas. Esto nos lleva a resultados con unas fuertes fluctuaciones en cantidades del transporte de electrones, tal y como se ilustra en la Figura 1. Es habitual encontrarse con estas oscilaciones tan violentas, pues un leve cambio en la energía (en la Figura 1 correspondería al potencial V en el eje de abscisas) provoca en la conductancia G unos cambios muy significativos. Tales fluctuaciones motivan un estudio estadístico de la conductancia, que es lo que trataremos en este trabajo.

Para afrontar este problema se necesita una teoría que tenga en cuenta el desorden de los sólidos. Anderson [3] fue el pionero en este campo: comprobó que la función de ondas de los electrones en medios desordenados se quedaba localizada en el sólido y decaía exponencialmente como $|\psi| \sim e^{-ar}$ espacialmente. Este modelo se ha estudiado ampliamente tanto a nivel teórico como experimental, comprobándose una muy buena concordancia entre las predicciones y las medidas.

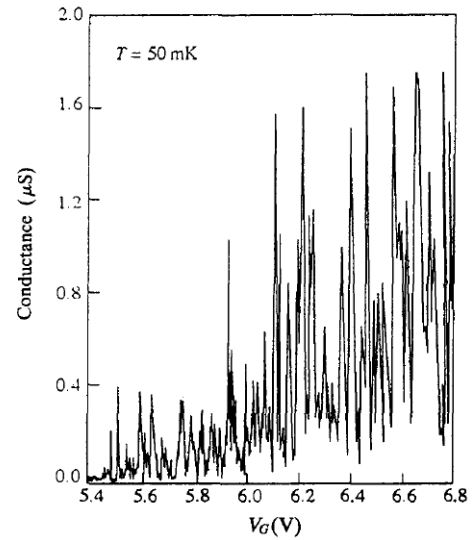


Figura 1: Conductancia frente a voltaje aplicado en un MOSFET a una temperatura de 50 mK. Fuente: referencia [2].

¹Datos sacados de la referencia [2]

En este trabajo se estudia el transporte de electrones en unos dispositivos sencillos: los nanohilos, sistemas nanoscópicos bidimensionales cuya longitud L es mucho mayor que su anchura a . Trataremos con estructuras con esta geometría en las que añadiremos un desorden, modelizado por la colocación de centros dispersores cuyas posiciones siguen una cierta distribución de probabilidad. En particular, usaremos un tipo de distribución de probabilidad que no tendrá el segundo momento definido, conocidas como distribuciones tipo Lévy [4]. Estas distribuciones son de «cola larga», lo que significa que para valores altos de la variable aleatoria la distribución toma valores significativos (por eso el segundo momento no está definido). El uso de estas estructuras matemáticas no es casual, pues se ha comprobado en trabajos previos [5] que tales distribuciones describen el fenómeno de la localización anómala de electrones.

Este trabajo consta de dos bloques: el primero es una introducción a los conceptos básicos de la teoría del transporte cuántico de electrones, de manera que en la sección 2 se estudiarán los fundamentos de esta teoría y, posteriormente, en la sección 3 se añadirá a este estudio básico los modelos convencionales de sistemas desordenados, esto es, la teoría de Anderson. En el segundo bloque presentamos los resultados más novedosos: la sección 4 explica el desorden tipo Lévy en un cable unidimensional y la sección 5 se reserva para la generalización de este resultado al caso multicanal, que son los resultados más recientes obtenidos. De hecho, son presentados por primera vez en este trabajo. Haremos un resumen y conclusiones de lo presentado en la sección 6 y dejamos el Anexo para los detalles técnicos de las simulaciones que apoyan nuestros resultados teóricos.

2. Transporte cuántico de electrones

Antes de comenzar el estudio de los nanohilos, vamos a ver algunos conceptos básicos a través de los cuales comprobaremos que, partiendo de la física fundamental, podemos asentar las bases que nos ayudarán a describir los sistemas desordenados.

Para estudiar cualquier sistema cuántico, los postulados de la Mecánica Cuántica [6] establecen que hemos de conocer la función de ondas $\Psi(\mathbf{r}, t)$ de tal sistema, que depende de la posición \mathbf{r} de la partícula y el tiempo t y cuya evolución temporal viene dada por la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = H(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (1)$$

donde $H(\mathbf{r}, t)$ es el operador hamiltoniano. Si éste solamente depende de la posición ($H(\mathbf{r}, t) = H(\mathbf{r})$), la solución a esta ecuación será

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) \psi_n(\mathbf{r}), \quad (2)$$

de manera que cada $\psi_n(\mathbf{r})$ queda determinada por

$$H(\mathbf{r})\psi_n(\mathbf{r}) = E_n\psi_n(\mathbf{r}), \quad (3)$$

siendo la ecuación (3) la llamada ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

En esta sección estudiaremos cómo podemos describir la función de ondas en un sistema cuántico de transporte de electrones. Tal sistema ha de modelizarse desde el hamiltoniano $H(\mathbf{r})$, que consta de una parte de energía cinética y otra de energía potencial

$$H(\mathbf{r}) = T + V(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}), \quad (4)$$

así que, como la energía cinética tiene siempre la misma expresión, modelizar nuestro sistema conductor equivaldrá a describir adecuadamente el potencial $V(\mathbf{r})$. A lo largo de este trabajo supondremos que el proceso de transporte es estacionario y, por tanto, emplearemos la ecuación (3). No obstante y tal como veremos en la subsección 2.2, para estudiar sistemas de interés tendremos que recurrir a otra clase de herramienta matemática: la matriz de *scattering*.

2.1. El concepto de canal

Cuando se habla de transporte cuántico es habitual mencionar que los electrones viajan por diferentes canales. Para explicar a qué nos referimos con «canal», veamos un sistema sencillo: un electrón viajando por un cable vacío con un centro dispersor, modelizado matemáticamente por un sistema tridimensional. A lo largo del eje x el electrón es libre (a excepción de la zona dispersora, representada por una barrera de potencial $V(x)$) y, en los ejes y y z , hay un confinamiento de la partícula (Ver Figura 2). Este sistema sería el análogo en ondas electromagnéticas a una guía de ondas. De hecho en el problema de transporte de electrones habitualmente a un hilo cuántico se le llama también guía de onda debido al comportamiento ondulatorio de los electrones, pues de hecho la ecuación de Schrödinger (1) es una ecuación de ondas.

Para describir este dispositivo, la definición del potencial $V(\mathbf{r})$ teniendo en cuenta las restricciones del problema será

$$V(\mathbf{r}) = V_{\text{disp}}(x) + V_{\text{pozo},a}(y) + V_{\text{pozo},b}(z), \quad (5)$$

de manera que el potencial del dispersor V_{disp} será nulo salvo en la región del dispersor y los potenciales de los pozos de anchuras b y a en las dimensiones z e y se definen como²

$$V_{\text{pozo},a}(y) = \begin{cases} +\infty & \text{si } -\infty < y < 0 \\ 0 & \text{si } 0 \leq y \leq a \\ +\infty & \text{si } a < y < +\infty \end{cases} \quad V_{\text{pozo},b}(z) = \begin{cases} +\infty & \text{si } -\infty < z < 0 \\ 0 & \text{si } 0 \leq z \leq b \\ +\infty & \text{si } b < z < +\infty \end{cases}. \quad (6)$$

De este modo, si tenemos en cuenta que el laplaciano en la energía cinética puede separarse en cada una de las dimensiones como $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ y dado que el potencial es igualmente separable, el hamiltoniano está dado por

$$H(\mathbf{r}) = H_{\text{disp}}(x) + H_{\text{pozo},a}(y) + H_{\text{pozo},b}(z), \quad (7)$$

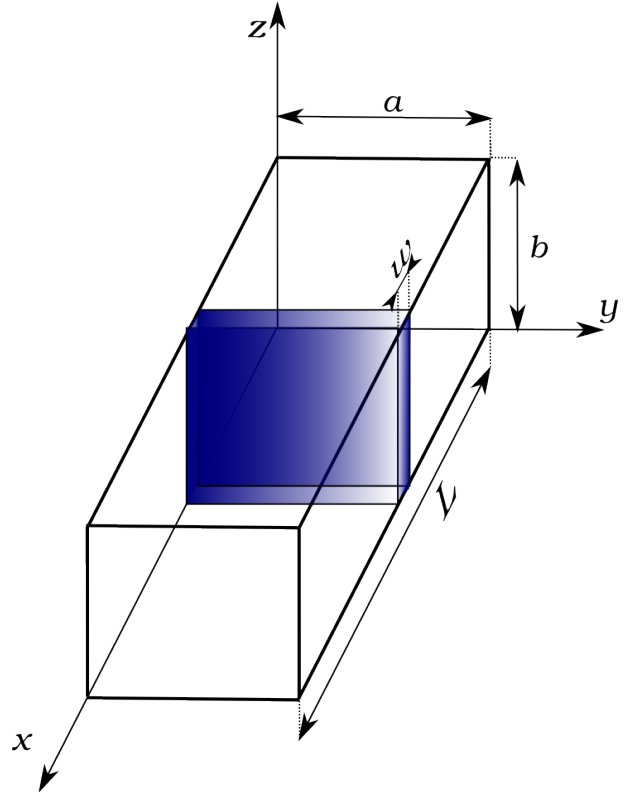


Figura 2: Sistema de dimensiones $a \times b \times L$ con un dispersor de grosor w .

²Nótese que hemos escogido el sistema de referencia de modo que la guía tiene su esquina inferior en el origen de coordenadas.

con

$$H_{\text{disp}}(x) = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{\text{disp}}(x), \quad H_{\text{pozo},a}(y) = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + V_{\text{pozo},a}(y) \quad \text{y} \quad H_{\text{pozo},b}(z) = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_{\text{pozo},b}(z). \quad (8)$$

Debido a la separabilidad del hamiltoniano, podemos escribir la función de ondas de nuestro sistema como

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_{\text{disp}}(x) \varphi_{n,a}(y) \varphi_{l,b}(z). \quad (9)$$

Los hamiltonianos unidimensionales $H_{\text{disp}}(x)$, $H_{\text{pozo},a}(y)$ y $H_{\text{pozo},b}(z)$ son resolubles de modo exacto (ver el libro *Quantum Mechanics* de Cohen-Tannoudji [6]). Se puede demostrar que las funciones de onda transversales son

$$\varphi_{n,a}(y) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi y}{a}\right) \quad \text{y} \quad \varphi_{l,b}(z) = \sqrt{\frac{2}{b}} \sin\left(\frac{l\pi z}{b}\right). \quad (10)$$

La energía total será la suma de energías de cada dimensión (hamiltoniano separable), que toma la siguiente expresión en la región previa al dispersor

$$E = E_x + E_{y,n,a} + E_{z,l,b} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} + \frac{l^2 \pi^2 \hbar^2}{2mb^2} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[k^2 + \pi^2 \left(\frac{n^2}{a^2} + \frac{l^2}{b^2} \right) \right]. \quad (11)$$

Vemos que la energía está determinada por tres números: $k \in \mathbb{R}$ y $n, l \in \mathbb{Z}$. El índice k es el que caracteriza el transporte del electrón en el eje x , que es el que en realidad nos interesa ya que describe la conducción de carga por el cable. Sin embargo, la energía total está determinada también por los índices transversales (n, l) , que indican los «modos de vibración» en los ejes y y z respectivamente de la función de ondas en tales direcciones. En el ámbito del transporte cuántico se le llama **canales** a las diferentes parejas de índices (n, l) .

El electrón puede viajar con diferentes modos (n, l) por el cable dependiendo de a cuánta energía total E pueda acceder. Por ejemplo, decimos que el canal $(1, 2)$ está abierto si el electrón es capaz de acceder a una energía tal que su función de onda en el eje y pueda «vibrar» con al menos el primer armónico y, en el eje z , con hasta dos armónicos.

El acceso del electrón a los diferentes canales resulta de una gran influencia para su transporte por el cable: la energía total se distribuye entre la «vibración» de la función de onda según los modos transversales y entre el transporte del electrón por el eje x , de modo que tal transporte se ve afectado en este reparto energético dependiendo de los modos (n, l) .

Estudiemos con detalle el sistema en el eje x para saber exactamente cómo afectan los canales (n, l) al transporte de electrones en tal dimensión, en la que no tenemos más interacciones que la del dispersor. Para estudiarlo, tomaremos las soluciones asintóticas del sistema, es decir, la forma que tiene la función de ondas antes y después del obstáculo, el cual describimos con el siguiente potencial

$$V_{\text{disp}}(x) = \begin{cases} 0 & \text{fuera del dispersor} \\ V_0 & \text{dentro del dispersor} \end{cases}. \quad (12)$$

Este es un caso muy sencillo: podríamos tratar con sistemas más complejos si usásemos un obstáculo dependiente de la posición ($V_0 = V_0(x)$). Consideremos el caso en el que la energía E_x es menor que la

barrera V_0 ($E_x < V_0$). Fuera de la región del dispersor tenemos una función de onda en forma de ondas planas:

$$\phi_{\pm}(E_x; x) = \frac{e^{\pm ikx}}{\sqrt{2\pi\hbar^2 k/m}}, \quad k = \sqrt{2mE_x/\hbar^2} > 0, \quad (13)$$

donde $\phi_+(E_x; x)$ es la función de onda libre con energía E_x moviéndose hacia la derecha y $\phi_-(E_x; x)$ la misma pero hacia la izquierda. Por otro lado, de acuerdo con (11), podemos reformular E_x como $E_x = E - E_{y,n,a} - E_{z,l,b} = E - E_{\text{transversal}}$. Ahora expresamos la solución para un electrón incidiendo desde el origen hasta el dispersor:

$$\psi_{\text{disp}}(x) = \begin{cases} \phi_+(E; x) + r\phi_-(E; x) & \text{si está antes del dispersor} \\ A\phi_+(E', x) + B\phi_-(E', x) & \text{si está en el dispersor} \\ t\phi_+(E; x) & \text{si está después del dispersor} \end{cases} \quad (14)$$

Los valores r y t indican la amplitud de **reflexión** y **transmisión** respectivamente de la función de onda por el dispersor, de manera que los coeficientes $|t|^2 = T$ y $|r|^2 = R = 1 - T$ son los **coeficientes de transmisión y reflexión**, que indican la probabilidad de T que el electrón atraviese la barrera y la probabilidad R de que se refleje en ésta. En la ecuación (14) $E' = E - E_{\text{transversal}} - V_0$. En particular, para este caso de una barrera constante se tiene que

$$T(E) = \frac{4k^2\kappa^2}{(k^2 - \kappa^2)^2 \sin^2 \kappa w + 4k^2\kappa^2}, \quad (15)$$

donde k es la descrita en (13) y $\kappa = \sqrt{2mE'/\hbar^2}$. Lo más importante de este resultado es que, pese a que la energía disponible es más pequeña que la de barrera, hay una probabilidad no nula de que el electrón la atraviese (efecto túnel).

Como veremos posteriormente y como ya puede entenderse intuitivamente, lo que caracterizará si un dispositivo conduce mejor o peor los electrones es su coeficiente de transmisión $T(E)$. Del análisis previo se entiende también la importancia del movimiento en el plano transversal, pues afecta a la energía total E y, por lo tanto, a la transmisión de electrones en el eje x , que es lo que nos interesa determinar.

Para comprender de un modo más claro esta relación entre las tres dimensiones, consideremos un sistema bidimensional (Figura 3): en la dimensión x tenemos la longitud L del cable, que tiene un centro dispersor; en la y una anchura a que confina el movimiento en ese eje. En la dimensión y tendremos las soluciones tipo (10), análogas a las de una cuerda estacionaria. De esa manera y de acuerdo con (11), dependiendo del modo de vibración de la función de onda en esta dimensión (es decir, el canal), tendremos una u otra energía. Así, aunque a primera vista la función de onda y la energía en el eje x no se vean afectadas por esto, la energía total de la partícula sí lo hace y, por lo tanto, el coeficiente de transmisión $T(E)$ se ve notablemente afectado.

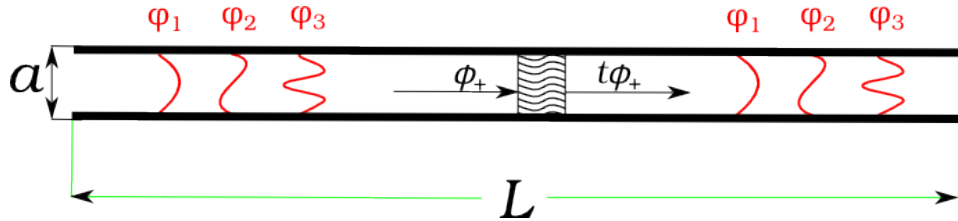


Figura 3: Representación de un cable bidimensional con tres modos transversales $n=1,2,3$ y un centro dispersor.

El concepto de canal es de vital importancia en nuestro estudio. Los electrones tienen la posibilidad de acceder a varios canales cuando se transportan por sistemas cuasi-unidimensionales, esto es, aquellos cuya longitud L sea mucho mayor que la anchura transversal. El transporte de electrones de un sistema unidimensional (o de un solo canal) y uno cuasi-unidimensional puede ser muy diferente, y las herramientas matemáticas involucradas serán de una mayor complejidad en el segundo caso.

2.2. Matriz de *scattering* o de dispersión

El ejemplo tratado en la sección previa ha servido para asentar la base de nuestro estudio. Con estas ideas vamos a desarrollar el concepto de **matriz de *scattering* o de dispersión**, el cual nos permitirá estudiar el problema del transporte cuántico de electrones por nanohilos como un problema de dispersión. Fue Rolf Landauer quien, en 1970, desarrolló esta idea [7] deduciendo la conocida **fórmula de Landauer**, resultado de gran importancia en este campo que estudiaremos en la subsección 2.3.

La matriz de *scattering* se fundamenta en el tratamiento asintótico de la función de onda cuando tenemos un centro dispersor, al igual que en la sección anterior solo que, en vez de poner una barrera de potencial constante V_0 , trabajamos con un potencial arbitrario. De hecho, tal potencial no tendrá por qué ser descriptible de un modo analítico: el método que sigue este tratamiento es tomar el nanohilo como una «caja negra» de la que queremos sacar información colocándolo entre dos cables ideales, donde tenemos funciones de onda libres. De esta manera, al comparar las funciones de onda libres a uno y otro lado del nanohilo podremos averiguar cómo afecta éste al transporte del electrón. El esquema con el que trabajamos en este modelo es el ilustrado en la Figura 4.

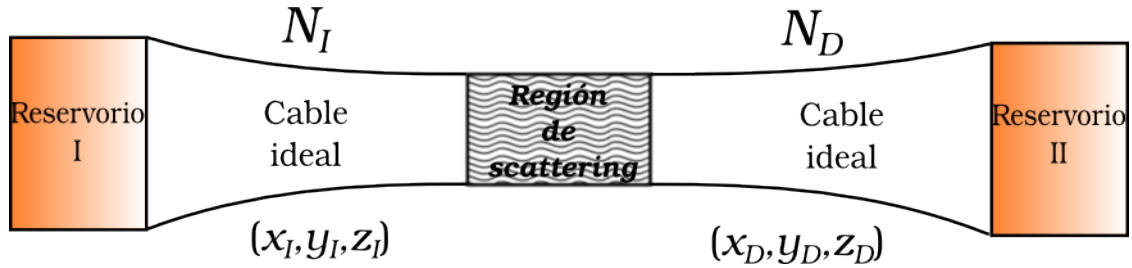


Figura 4: Esquema del modelo general para el transporte electrónico en nanohilos.

La **región de *scattering*** es el nanohilo que queremos estudiar. En los **cables ideales** que éste tiene a sus laterales usaremos el estudio de la sección anterior (donde el centro dispersor será la región de *scattering*), asumiendo que los **reservorios I y II** y la región de *scattering* se encuentran a distancia infinita. Estos reservorios son los que dotan de electrones al sistema y se encuentran a una diferencia de potencial V que tomamos como muy pequeña. En este tratamiento tendremos en cuenta que la orientación de los cables ideales con respecto a la región de *scattering* puede ser cualquiera, así que adjudicamos a cada uno de ellos un sistema de coordenadas propio: (x_I, y_I, z_I) para el cable de la izquierda y (x_D, y_D, z_D) para el de la derecha.

Teniendo en cuenta la separación de la función de onda como parte transversal y parte libre (9) en cada una de las guías (con N_I canales abiertos a la izquierda y N_D canales abiertos a la derecha), la solución

más general está dada por

$$\begin{aligned}\psi_I(x_I, y_I, z_I) &= \sum_{n=1}^{N_I} \varphi_n(y_I, z_I) \left[a_{In} \phi_+(E_{k_x^{(n)}}; x_I) + b_{In} \phi_-(E_{k_x^{(n)}}; x_I) \right] \\ \psi_D(x_D, y_D, z_D) &= \sum_{m=1}^{N_D} \varphi_m(y_D, z_D) \left[a_{Dm} \phi_-(E_{k_x^{(m)}}; x_D) + b_{Dm} \phi_+(E_{k_x^{(m)}}; x_D) \right],\end{aligned}\tag{16}$$

de manera que $x_I < 0$ y $x_D > 0$. Las funciones φ_l son las que describen el movimiento transversal, que dependerán de la geometría de cada cable. A cada energía $E_{k_x^{(n)}}$ le corresponde un vector de ondas $k_x^{(n)}$ tal que $k_x^{(n)} = \sqrt{\frac{2m(E-E_n)}{\hbar}}$, donde E es la energía disponible y E_n la energía transversal del canal n . Las amplitudes denotadas con a_{In} (o a_{Dm}) son las correspondientes a los electrones viajando hacia la derecha y las denotadas con b_{In} (o b_{Dm}) hacia la izquierda, de forma que los subíndices D e I indican si estamos a derecha o izquierda de la región de *scattering* y los subíndices n, m indican el canal. A diferencia de lo llevado a cabo en la sección anterior, en este caso hemos considerado la solución asintótica más general de todas, esto es, con electrones viajando tanto del reservorio izquierdo como del derecho a la región de *scattering*.

La clave de este tratamiento está en que las amplitudes a_{In} (a_{Dm}) y b_{In} (b_{Dm}) de las funciones de onda libres en las guías de onda no son independientes, sino que se pueden relacionar de la siguiente manera

$$b_{\alpha l} = \sum_{\beta=I,D} \sum_{l'} s_{\alpha l, \beta l'} a_{\beta l'}, \text{ con } l = n, m.\tag{17}$$

Los coeficientes $s_{\alpha l, \beta l'}$ pueden escribirse en forma matricial a través de la **matriz de scattering**:

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} \hat{s}_{II} & \hat{s}_{ID} \\ \hat{s}_{DI} & \hat{s}_{DD} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{r} & \hat{t}' \\ \hat{t} & \hat{r}' \end{pmatrix},\tag{18}$$

donde hemos renombrado cada submatriz según su función: \hat{s}_{II} relaciona los canales de la izquierda entre sí, así como \hat{s}_{DD} relaciona los de la derecha (es decir, describen la reflexión de los electrones en ambos cables), \hat{s}_{ID} relaciona los canales de la izquierda con los de la derecha y \hat{s}_{DI} los de la derecha con los de la izquierda (o sea que definen la transmisión de los electrones a través del nanohilo).

La interpretación física de cada elemento de matriz es importante; sirva como ejemplo los elementos de la submatriz \hat{r} de la forma r_{i2} : el número r_{i2} indica qué porción de la función de onda proveniente del canal 2 de la guía de ondas de la izquierda se ha reflejado al canal i -ésimo en la misma guía. Así, los elementos de \hat{t} del tipo t_{2i} indican qué proporción de la misma función de onda se ha transmitido al canal i -ésimo de la guía de ondas de la derecha.

La matriz de *scattering* tiene las siguientes propiedades de interés:

- Es unitaria: $\hat{S}^\dagger \hat{S} = \mathbb{I}$. Como consecuencia, elementos de la diagonal verifican que

$$(\hat{S}^\dagger \hat{S})_{nn} = \sum_{n'=1}^N |r_{nn'}|^2 + \sum_{m=1}^M |t_{mn}|^2 = 1,\tag{19}$$

es decir, que la probabilidad de que el electrón del canal n se transmita o se refleje a cualquier otro canal es 1, lo cual es perfectamente comprensible si tenemos en cuenta que el número de electrones del sistema se conserva.

- Si los procesos de dispersión son reversibles ante inversiones temporales, se satisface que, además de la unitariedad,

$$\hat{S} = \hat{S}^T \longrightarrow \hat{r} = \hat{r}^T \quad \hat{r}' = \hat{r}'^T \quad \hat{t} = \hat{t}^T. \quad (20)$$

- Si se rompe la reversibilidad temporal, por ejemplo por la existencia de un campo magnético \mathbf{B} , se tiene que

$$r_{nn'}(\mathbf{B}) = r_{n'n}(-\mathbf{B}) \quad r'_{mm'}(\mathbf{B}) = r'_{m'm}(-\mathbf{B}) \quad t_{mn}(\mathbf{B}) = t'_{nm}(-\mathbf{B}). \quad (21)$$

Este resultado es también lógico: para que la fuerza de Lorentz $\mathbf{F} = q \frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{B}$ ejercida sobre la carga q no cambie y, por tanto, la dinámica sea la misma, al invertir el tiempo (pasar de t a $-t$) el campo \mathbf{B} ha de cambiar a $-\mathbf{B}$.

A continuación estudiaremos cómo, a partir de esta matriz, podemos caracterizar cómo de buen conductor es un material, es decir, cuál es el valor numérico de su conductancia.

2.3. Conductancia y fórmula de Landauer

La **conductancia** G de un dispositivo está definida como

$$G = \lim_{V \rightarrow 0} \frac{I}{V}, \quad (22)$$

con I la intensidad de la corriente que circula por él y V la diferencia de potencial entre los extremos del cable. Esta magnitud no es otra cosa que la inversa de la resistencia $R = 1/G$ y, por tanto, indica con qué facilidad viajan los electrones por la nanoestructura: a más conductancia, más simple les es recorrerla y mayor es la intensidad de corriente. Lo que vamos a ver en esta sección es cómo podemos relacionar la matriz de *scattering* con esta magnitud; cómo es posible tratar el **transporte de electrones** como un **problema de dispersión**.

Partimos primero de la descripción de la intensidad de corriente I que circula por un cable de longitud L . Como sabemos, si la densidad de electrones es n y su velocidad media v , tal intensidad estará dada por

$$I = \frac{dq}{dt} = env. \quad (23)$$

Consideremos una situación algo más compleja: supongamos que no todos los electrones contribuyen a la corriente, sino sólo aquellos que llevan un cierto vector de ondas $+k_x$ en la dirección x . Si esos electrones siguen una distribución $f(k_x)$ y considerando que la densidad electrónica es $1/L$ (repartidos homogéneamente por el cable) tendremos que

$$I = \frac{e}{L} \sum_{k_x} v(k_x) f(k_x). \quad (24)$$

Si ahora consideramos un rango continuo de vectores de onda k_x en lugar de uno discreto, haciendo el cambio $\sum_{k_x} \rightarrow 2 \frac{L}{2\pi} \int dk_x$ (donde el 2 se incluye por la degeneración de espín), obtenemos que

$$I = \frac{2e}{2\pi} \int v(k_x) f(k_x) dk_x. \quad (25)$$

Calculemos ahora la intensidad en el sistema de la subsección previa (Figura 4) en el cable situado a la izquierda de la región de *scattering*. Para considerar todas las contribuciones a la intensidad de corriente I hemos de tener en cuenta todos los canales activos a ese lado: los electrones provenientes del Reservorio I, los que se reflejan en el centro dispersor y los que se transmiten desde el otro cable por la región de *scattering* (Ver Figura 5).

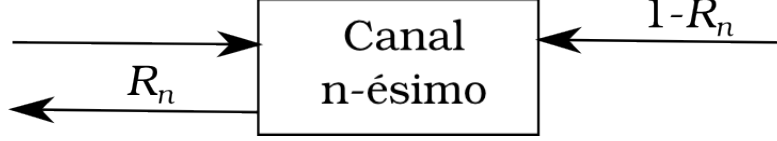


Figura 5: Procesos de scattering a la izquierda de la región de *scattering* en el canal n -ésimo.

Los electrones incidentes desde la izquierda darán contribuciones positivas a la intensidad (es decir, de $k_x > 0$) y los reflejados en el nanohilo darán contribuciones negativas ($k_x < 0$), al igual que aquellos provenientes del Reservorio II que se transmiten por el nanohilo. De este modo, sumando a todos los canales de la izquierda y teniendo en cuenta que una fracción R_n se refleja y otra $1 - R_n$ se transmite, la intensidad I será:

$$I = \frac{2e}{2\pi} \sum_{n=1}^{N_I} \left\{ \int_0^{\infty} v_x(k_x) f_I(k_x) dk_x + \int_{-\infty}^0 R_n(k_x) v_x(k_x) f_I(k_x) dk_x + \int_{-\infty}^0 (1 - R_n(k_x)) v_x(k_x) f_D(k_x) dk_x \right\}, \quad (26)$$

donde $f_I(k_x)$ y $f_D(k_x)$ son las funciones de distribución de los electrones en los Reservorios I y II respectivamente. Si en la fórmula (26) hacemos el cambio de variable $k_x \rightarrow -k_x$ en las dos últimas integrales y considerando que $v_x(k_x) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_x}$, de lo que se deduce que $v_x(-k_x) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial (-k_x)} = -v_x(k_x)$, tenemos la siguiente expresión para la intensidad de corriente I

$$I = \frac{2e}{2\pi} \sum_{n=1}^{N_I} \left\{ \int_0^{\infty} v_x(k_x) f_I(k_x) dk_x + \int_{+\infty}^0 R_n(k_x) v_x(k_x) f_I(k_x) dk_x + \int_{+\infty}^0 (1 - R_n(k_x)) v_x(k_x) f_D(k_x) dk_x \right\}. \quad (27)$$

Como $\int_a^b f(x) dx = -\int_b^a f(x) dx$, si reagrupamos términos tenemos

$$I = \frac{2e}{2\pi} \sum_{n=1}^{N_I} \int_0^{+\infty} v(k_x) (1 - R_n) (f_I(k_x) - f_D(k_x)) dk_x. \quad (28)$$

Si ahora consideramos la propiedad (19) de la matriz de *scattering*:

$$1 - R_n = \sum_{m=1}^M |t_{mn}|^2 = (\hat{t}^\dagger \hat{t})_{nn}, \quad (29)$$

donde $R_n = \sum_{n'=1}^{\infty} r_{nn'}$. Sustituyendo en (28) obtenemos lo siguiente

$$I = \frac{2e}{2\pi} \int_0^{\infty} v(k_x) \left(\sum_{n=1}^{N_I} (\hat{t}^\dagger \hat{t})_{nn} \right) (f_I(k_x) - f_D(k_x)) dk_x. \quad (30)$$

Como $\sum_{n=1}^{N_I} (\hat{t}^\dagger \hat{t})_{nn} = \text{Tr}(\hat{t}^\dagger \hat{t})$, escribimos (30) del siguiente modo

$$I = \frac{2e}{2\pi} \int_0^\infty v(k_x) \text{Tr}(\hat{t}^\dagger \hat{t}) (f_I(k_x) - f_D(k_x)) dk_x, \quad (31)$$

y si recordamos que $v_x = (1/\hbar) \partial E / \partial k_x$

$$I = \frac{2e}{2\pi} \int_0^\infty \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_x} \text{Tr}(\hat{t}^\dagger \hat{t}) (f_I(k_x) - f_D(k_x)) dk_x = \frac{2e}{h} \int_0^\infty \text{Tr}(\hat{t}^\dagger \hat{t}) (f_I(E) - f_D(E)) dE. \quad (32)$$

Planteamos ahora que podemos considerar el régimen lineal: dado que la diferencia de potencial V entre los reservorios es muy pequeña, la traza $\text{Tr}(\hat{t}^\dagger \hat{t})$ no depende de la energía. Esto se debe a que la integral $\int_0^\infty (f_I(E) - f_D(E)) dE$, que es el aporte energético debido a la diferencia de los niveles de energía de ambos reservorios (o sea, $\int_0^\infty (f_I(E) - f_D(E)) dE = eV$), es lo suficientemente pequeña como para que en ese rango de energías los coeficientes de transmisión T se mantengan constantes. Así, podemos escribir la fórmula (32) como

$$I = \frac{2e}{h} \text{Tr}(\hat{t}^\dagger \hat{t}) eV \longrightarrow G = \frac{2e^2}{h} \text{Tr}(\hat{t}^\dagger \hat{t}) = G_0 \sum_p T_p, \quad (33)$$

donde $G_0 = 2e^2/h$ es el llamado **cuanto de conductancia** y T_p los autovalores de la matriz $\hat{t}^\dagger \hat{t}$, que son los coeficientes de transmisión del sistema.

Esta última fórmula (33) es la llamada **fórmula de Landauer** y es uno de los resultados más importantes del campo del transporte cuántico de electrones: pone de manifiesto la importancia de nuestra matriz de *scattering* ya que, a través de su submatriz de transmisión \hat{t} , nos permite calcular directamente la conductancia G de nuestro sistema.

Pese a que las herramientas hasta ahora descritas son sofisticadas y permiten un estudio realista de un sistema físico, estamos tratando estos aún de un modo ideal sin tener en cuenta muchos de los detalles de la realidad experimental. En la próxima sección vamos a considerar que los nanohilos no son estructuras perfectas, sino que existen imperfecciones tales como impurezas, lo que provoca una dispersión múltiple de los electrones al viajar por ellos y requiere de un estudio distinto al visto hasta ahora.

3. Nanohilos desordenados

Cuando estudiamos un sistema físico teóricamente siempre se plantean las situaciones más sencillas, tratando de describir un cierto fenómeno de la forma más eficaz con el modelo más simple posible. Sin embargo, muchas veces dejamos de lado detalles que pueden llegar a ser cruciales. Esto sucede en el caso del transporte cuántico de electrones: cuando estos circulan por un sólido pueden encontrarse con imperfecciones en su estructura, las cuales hacen que éste no sea perfectamente cristalino. Este hecho complica el estudio del transporte electrónico en el material, pues nos impide usar aproximaciones relacionadas con las simetrías y la periodicidad de los sólidos.

La presencia de impurezas, o en general de imperfecciones, da un carácter aleatorio al transporte de electrones debido a la dispersión múltiple que estos sufren por el sistema. El estudio de tales imperfecciones a escala nanoscópica resulta muy complicado y, además, poco útil: no podemos controlar individualmente los defectos que un sólido pueda tener, su **estructura microscópica** sufre fluctuaciones aleatorias, es decir, dos muestras pueden ser macroscópicamente idénticas pero muy diferentes microscópicamente. Todo esto motiva un estudio estadístico del transporte de electrones: introducimos tales defectos del nanohilo dentro de un **desorden** del sistema, lo que nos llevará a una teoría que nos hará capaces de obtener cantidades estadísticas como promedios, varianzas y, en definitiva, todo lo que se pueda deducir de una distribución de probabilidad.

En este capítulo introduciremos un modelo estadístico para la matriz de transferencia (proveniente de la matriz de *scattering*) con el fin de definir las propiedades estadísticas de la conductancia eléctrica G , que será el fundamento de nuestro posterior estudio con el desorden de tipo Lévy.

3.1. Nanohilo desordenado en una dimensión (caso de un canal)

El estudio del nanohilo desordenado requiere de un desarrollo físico-matemático complejo y de gran extensión, por lo que en este trabajo presentaremos los fundamentos físicos en los que se basa y expondremos el resultado final. El objetivo de este tratamiento es encontrar una distribución de probabilidad $P_s(G)$ para la conductancia G . Para ello consideramos un *ensemble* (conjunto) de cables desordenados de longitud L con impurezas colocadas aleatoriamente, de manera que cada uno de los cables del *ensemble* tiene una colocación diferente de las impurezas y, por lo tanto, la conductancia eléctrica G fluctúa de muestra a muestra. Un desarrollo detallado de la deducción de tal distribución puede encontrarse en el capítulo 7 de la referencia [8]. Para comprender cómo resolver el sistema es conveniente introducir el concepto de **matriz de transferencia**. Ésta es una descripción alternativa a la matriz de *scattering* con unas propiedades que resultan de interés para el estudio del transporte de electrones en nanohilos. Como veremos a continuación, la matriz de transferencia y la matriz de *scattering* están estrechamente relacionadas

En el caso unidimensional, si consideramos un centro dispersor descrito por un cierto potencial $V(x)$ podemos plantear, como vimos en el capítulo previo, la solución más general a partir de las soluciones fuera del alcance del potencial $V(x)$ ilustrado en la Figura 6.

Para este sistema (Figura 6), la matriz de *scattering* relaciona las amplitudes $a^{(1)}, b^{(1)}, a^{(2)}$ y $b^{(2)}$ de la siguiente manera

$$\begin{pmatrix} b^{(1)} \\ b^{(2)} \end{pmatrix} = \hat{S} \begin{pmatrix} a^{(1)} \\ a^{(2)} \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} b^{(1)} \\ b^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^{(1)} \\ a^{(2)} \end{pmatrix}, \quad (34)$$

es decir, relaciona las amplitudes de las funciones de onda que viajan hacia la izquierda (b) con las que viajan hacia la derecha (a) (ver Figura 6). Por otro lado, la matriz de transferencia \hat{M} relaciona estos mismos coeficientes pero de otra manera:

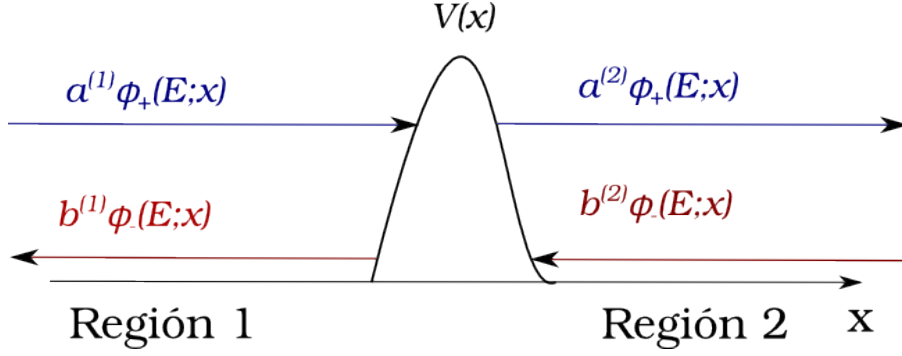


Figura 6: Esquema de reflexión y transmisión para un potencial $V(x)$ arbitrario. a indica que la función de onda viaja en el sentido positivo del eje x , b que viaja en el negativo; el superíndice señala la región en la que estamos: 1 para $x \rightarrow -\infty$ (a la izquierda del obstáculo) y 2 para $x \rightarrow +\infty$ (a la derecha del obstáculo).

$$\begin{pmatrix} b^{(2)} \\ a^{(2)} \end{pmatrix} = \hat{M} \begin{pmatrix} a^{(1)} \\ b^{(1)} \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} b^{(2)} \\ a^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^{(1)} \\ b^{(1)} \end{pmatrix}. \quad (35)$$

La relación que \hat{M} establece es entre las amplitudes de las funciones de onda en la región 2 y las de la región 1 (ver Figura 6). Por argumentos de la conservación de la corriente probabilística de la función de onda y en el caso en el que existe reversibilidad temporal (esto es, la función de ondas conjugada es también solución de la ecuación de Schrödinger), se deduce ³ lo siguiente acerca de los elementos de la matriz de transferencia:

$$\begin{aligned} |\alpha|^2 - |\gamma|^2 &= 1 \\ \alpha^* \beta &= \gamma^* \delta \\ |\beta|^2 - |\delta|^2 &= 1 \end{aligned} \quad (36)$$

Cuando se cumplen las igualdades de (36) se dice que la matriz \hat{M} es pseudounitaria. Por otro lado, si existe reversibilidad temporal se verifica que

$$\begin{aligned} \alpha^* &= \delta \\ \beta^* &= \gamma \end{aligned}, \quad (37)$$

de lo que se concluye que

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta^* & \alpha^* \end{pmatrix} \quad (38)$$

verificándose que $\det \hat{M} = 1$. Los elementos de \hat{M} están relacionados con las amplitudes de reflexión y transmisión a través de las relaciones:

$$\alpha = \frac{1}{t^*} \quad \beta = -\frac{r^*}{t^*} \longrightarrow r = -\frac{\beta^*}{\alpha^*} \quad t = t' = \frac{1}{\alpha^*} \quad r' = \frac{\beta}{\alpha^*}, \quad (39)$$

³Para un desarrollo en detalle, consultar la sección 2.1.5 de [8]

las cuales son válidas si hay reversibilidad temporal, es decir, si $\hat{S} = \hat{S}^T$ (20). Un modo sencillo de trabajar con la matriz de transferencia \hat{M} es la **representación polar** que consiste en escribirla como

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} e^{i\mu} & 0 \\ 0 & e^{-i\mu} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{1+\lambda} & \sqrt{\lambda} \\ \sqrt{\lambda} & \sqrt{1+\lambda} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\nu} & 0 \\ 0 & e^{-i\nu} \end{pmatrix}, \quad \lambda, \mu, \nu \in \mathbb{R}. \quad (40)$$

Así, tenemos la matriz \hat{M} parametrizada por tres números reales μ, ν y λ , lo que nos da el mismo número de parámetros que la definición de \hat{M} a través de (38): dos números complejos α y β (cada uno con parte real e imaginaria, esto es, cuatro números reales) relacionados mediante la fórmula $\det \hat{M} = 1 = |\alpha|^2 - |\beta|^2$. Las amplitudes de reflexión y transmisión pueden expresarse en base a los parámetros λ, μ y ν del siguiente modo:

$$r = -\sqrt{\frac{\lambda}{1+\lambda}} e^{2i\nu} \quad r' = \sqrt{\frac{\lambda}{1+\lambda}} e^{2i\mu} \quad t = \frac{1}{\sqrt{1+\lambda}} e^{i(\mu+\nu)}. \quad (41)$$

A través de estas expresiones podemos averiguar el coeficiente de transmisión:

$$T = tt^* = \frac{1}{\sqrt{1+\lambda}} e^{i(\mu+\nu)} e^{-i(\mu+\nu)} = \frac{1}{1+\lambda}. \quad (42)$$

Por lo tanto la transmisión T depende solamente del parámetro λ .

El motivo fundamental por el cuál usamos la matriz de transferencia en vez de la de *scattering* es por su propiedad de ser **multiplicativa**, esto es, si tenemos dos barreras de potencial consecutivas V_1 y V_2 , cada una con su correspondiente matriz de transferencia \hat{M}_1 y \hat{M}_2 , el sistema total está dado por la matriz \hat{M} de modo que

$$\hat{M} = \hat{M}_2 \hat{M}_1. \quad (43)$$

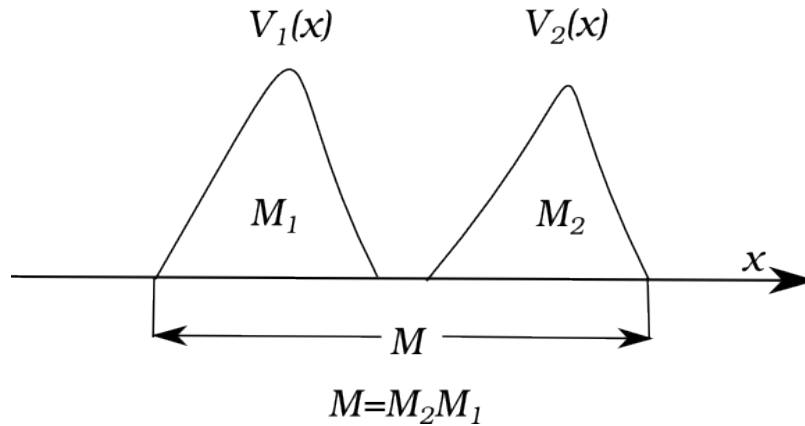


Figura 7: Las barreras de potencial consecutivas V_1 y V_2 representadas por sus matrices de transferencia \hat{M}_2 y \hat{M}_1 . El sistema total está descrito por la matriz de transferencia producto de ambas $\hat{M} = \hat{M}_2 \hat{M}_1$.

De este modo, si tenemos varios sistemas colocados en serie nos basta con multiplicar sus matrices de transferencia.

Ahora que ya hemos visto la matriz de transferencia podemos comenzar a resolver el problema del transporte de electrones en un nanohilo unidimensional de longitud L (Figura 8) en el cuál introducimos un ingrediente aleatorio (por ejemplo, centros dispersores colocados aleatoriamente).

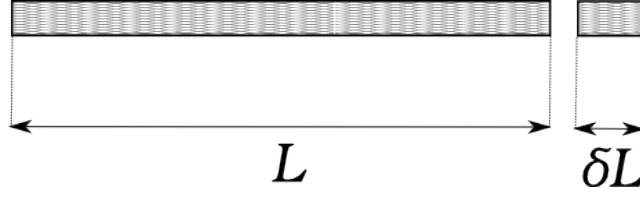


Figura 8: Nanohilo desordenado de longitud L con un añadido δL .

Como comentábamos al comienzo de esta sección, nuestro objetivo es conocer la distribución de probabilidad de la conductancia. La táctica para resolver el sistema es la siguiente: queremos conocer la distribución $p_{L+\delta L}$ del cable de longitud $L + \delta L$ de la Figura 8 basándonos en la distribución p_L del cable de longitud L y en la distribución $p_{\delta L}$ del de longitud δL . La longitud de este segundo cable (al que se le suele llamar *building block*) verifica que $\delta L \ll L$. Al estudiar la matriz de transferencia del sistema de longitud $L + \delta L$ llegaremos a una evolución (ecuación diferencial) para la distribución de probabilidad del cable de longitud L .

La matriz de transferencia del sistema completo $L + \delta L$ estará dada, tal y como hemos visto en (43), por el producto de \hat{M}_L (matriz de transferencia del hilo de longitud L) y $\hat{M}_{\delta L}$ (matriz de transferencia del *building block*):

$$\hat{M}_{L+\delta L} = \hat{M}_{\delta L} \hat{M}_L. \quad (44)$$

La distribución $p_{L+\delta L}(\hat{M}_{L+\delta L})$ se obtiene mediante la convolución denotada por \otimes de las distribuciones $p_L(\hat{M}_L)$ y $p_{\delta L}(\hat{M}_{\delta L})$, de manera que, si escribimos a partir de (44) que $\hat{M}_L = \hat{M}_{\delta L}^{-1} \hat{M}_{L+\delta L}$:

$$p_{L+\delta L}(\hat{M}_{L+\delta L}) = p_{\delta L} \otimes p_L = \int d\tilde{\mu}^{(\beta)}(\hat{M}_{\delta L}) p_L(\hat{M}_{\delta L}^{-1} \hat{M}_{L+\delta L}) p_{\delta L}(\hat{M}_{\delta L}), \quad (45)$$

con $d\tilde{\mu}^{(\beta)}$ es la **medida invariante** (definida de modo análogo al hecho en análisis matemático de funciones reales, pero involucrando matrices en lugar de números reales).

El punto clave de la obtención de $p_L(\hat{M}_{L+\delta L})$ (que, en realidad, dependerá sólo del parámetro λ como veremos a continuación) es el **ansatz de maximización de la entropía de Shannon**, es decir, buscamos que

$$S[p_{\delta L}] = - \int p_{\delta L}(\hat{M}_{\delta L}) \ln[p_{\delta L}(\hat{M}_{\delta L})] d\mu \quad (46)$$

sea máxima. Para esta maximización se imponen dos restricciones: la normalización de la distribución $p_{\delta L}$ y

$$\langle \lambda \rangle_{\delta L} = \frac{L}{l_e}, \quad (47)$$

con l_e el recorrido libre medio de los electrones en el nanohilo, de modo que el promedio de λ en el *building block* está fijado. Como sabemos por (42), esto significa que el promedio de T también lo estará y, como el coeficiente de transmisión se relaciona con la conductancia G a través de la fórmula de Landauer (33), esta condición indica que el primer momento de la distribución de la conductancia está fijado. Si seguimos un procedimiento de multiplicadores de Lagrange se encuentra que la distribución que maximiza la entropía (46) es

$$p_{\delta L}(\lambda) = \frac{l_e}{\delta L} \exp(-\lambda/(\delta L/l_e)). \quad (48)$$

La ecuación (45) puede transformarse en una ecuación de evolución según el tamaño del sistema L para la distribución $p_L(\lambda)$, obteniéndose el siguiente resultado:

$$\frac{\partial p_s(\lambda)}{\partial s} = \frac{\partial}{\partial \lambda} \left[\lambda(1 + \lambda) \frac{\partial}{\partial \lambda} p_s(\lambda) \right], \quad (49)$$

que es una **ecuación de Fokker-Planck** y es equivalente a (45). Hemos definido la variable

$$s = \frac{L}{l_e}. \quad (50)$$

La solución a esta ecuación (49) se dio en 1981 por Abrikosov⁴ viene dada por

$$p_s(\lambda) = \frac{s^{-3/2}}{\sqrt{2\pi}} e^{-s/4} \int_{\text{acosh}(1+2\lambda)}^{\infty} dy \frac{ye^{-y^2/4s}}{\sqrt{\cosh y - 1 - 2\lambda}}, \quad (51)$$

de modo que esta distribución viene en forma integral. De este resultado notamos que la solución a nuestro sistema depende solamente del parámetro s . Para conocer la distribución de probabilidad de la conductancia $P_s(G)$ hacemos el cambio de G a λ a través de la relación (42) usando que

$$P_s(G) = p_s(\lambda) \frac{d\lambda}{dG}, \quad (52)$$

obteniendo la siguiente distribución

$$P_s(G) = \frac{s^{-3/2}}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-s/4}}{G^2} \int_{y_0}^{\infty} dy \frac{ye^{-y^2/4s}}{\sqrt{\cosh y + 1 - 2/G}}, \quad (53)$$

con $y_0 = \text{acosh}(2/G - 1)$. Para llegar a (53) hemos utilizado la fórmula de Landauer para un solo canal, es decir, $G = T = 1/(1 + \lambda)$ y hemos expresado la conductancia G en unidades del cuanto de conductancia G_0 .

Podemos encontrar un ejemplo de esta distribución en la Figura 9, donde se muestran resultados de simulaciones numéricas *tight-binding* (modelos cuyo fundamento explicamos en el anexo de este trabajo) comparados con la gráfica de la distribución (53). Se aprecia que los resultados analíticos de $P_s(G)$ tienen una muy buena concordancia con los datos de las simulaciones. Para la comparación de los datos teóricos y experimentales es necesario obtener el valor de s (77): a partir de la ecuación (53) se puede comprobar que $\langle -\ln G \rangle = L/l_e = s$, de manera que podemos conocer s a partir de los datos experimentales si calculamos el promedio del logaritmo de G .

En el siguiente apartado vamos a extender el análisis anterior de un solo canal a un sistema cuasi-unidimensional con varios canales

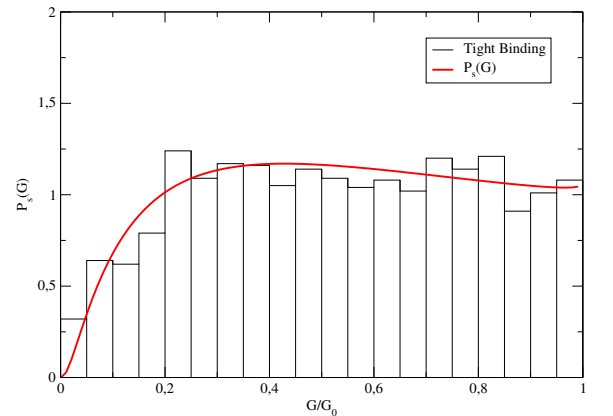


Figura 9: Ejemplo de la distribución (53) para $s=0.81$

⁴Consultar página 772 de [9]

3.2. Nanohilo desordenado cuasi-unidimensional

El sistema que estudiamos a continuación es tal que, en lugar de tener una sola dirección en el eje x , tenemos un hilo con un cierto grosor y varios canales abiertos (ver Figura 10). Esto permitirá describir la función de onda transversal a la dirección de propagación y, por tanto, permitirá a los electrones viajar por N canales distintos dentro del hilo, tal y como vimos en la subsección 2.1.

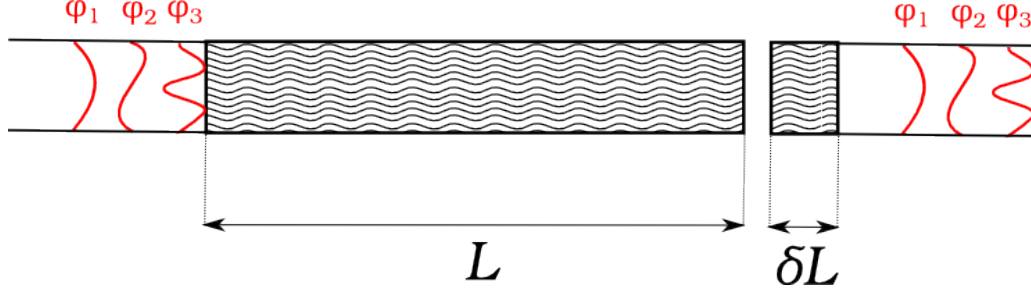


Figura 10: Nanohilo desordenado cuasi-unidimensional de longitud L con un añadido δL y con modos transversales $n=1,2,3$.

El tratamiento matemático requerido aquí es aún más complejo que en el caso unidimensional: con un solo canal podíamos reducir el tratamiento de matrices $2N \times 2N$ a una sola variable real λ mientras que en este caso el análisis se basa en matrices $2N \times 2N$ que se reduce al estudio de N variables $\lambda_1, \dots, \lambda_N$. La estrategia es esencialmente la misma, pues consiste en partir de un hilo desordenado de longitud L y un fragmento δL mucho menor, con el objetivo de averiguar la distribución de la conductancia del sistema total $L + \delta L$, solo que ahora permitimos la existencia de modos transversales.

Estudiando este sistema⁵ basándonos en los mismos fundamentos que en el caso de un solo canal (esto es, maximización de la entropía y convolución de las distribuciones de probabilidad de L y δL) se llega a que la distribución $P_s(\lambda_1, \dots, \lambda_N)$ de probabilidad para el caso multicanal está gobernada por la **ecuación de Dorokhov-Mello-Pereira-Kumar (DMPK)**:

$$\frac{\partial P_s(\lambda_1, \dots, \lambda_N)}{\partial s} = \frac{2}{N+1} \sum_{n=1}^N \frac{\partial}{\partial \lambda_n} \left\{ \lambda_n [1 + \lambda_n] J(\lambda_1, \dots, \lambda_N) \frac{\partial}{\partial \lambda_n} \frac{P_s(\lambda_1, \dots, \lambda_N)}{J(\lambda_1, \dots, \lambda_N)} \right\}, \quad (54)$$

con $J(\lambda_1, \dots, \lambda_N) = \prod_{n=1}^N \prod_{m=n+1}^N |\lambda_n - \lambda_m|$ y N es el número de canales, cada uno con su parámetro λ_n .

Estas ecuaciones son válidas para sistemas que cumplen **reversibilidad temporal**. Si definimos un nuevo parámetro x_n tal que⁶

$$T_n = \frac{1}{\cosh^2 x_n} \quad \lambda_n = \sinh^2 x_n, \quad (55)$$

la ecuación (54) puede reescribirse en términos de las variables x_i descritas en (55) como

$$\frac{\partial P_s}{\partial s} = \frac{1}{2\gamma} \sum_{n=1}^N \frac{\partial}{\partial x_n} \left(\frac{\partial P_s}{\partial x_n} + P_s \frac{\partial \Omega(x_1, \dots, x_N)}{\partial x_n} \right) \quad (56)$$

con

⁵Consultar sección 7.3 de [8] para un desarrollo pormenorizado.

⁶Recordemos que los coeficientes λ_n y los coeficientes de transmisión de cada canal T_n vienen dados por (42), es decir: $T_n = 1/(1 + \lambda_n)$

$$\Omega(x_1, \dots, x_N) = -\frac{1}{2} \sum_{m \neq n} \ln |\sinh^2 x_n - \sinh^2 x_m| - \sum_{n=1}^N \ln |\sinh 2x_n|. \quad (57)$$

La función de distribución $P_s(x_1, \dots, x_N)$ puede resolverse exactamente para sistemas en régimen metálico ($l_e \ll L \ll Nl_e$) y aislante ($L \gg Nl_e$). Para el régimen metálico, la distribución toma el siguiente valor⁷:

$$P_s(x_1, \dots, x_N) = C(s) \exp \left[- \left(\sum_{i < j} u(x_i, x_j) + \sum_{i=1}^N V(x_i) \right) \right], \quad (58)$$

donde $C(s)$ es una constante de normalización y

$$u(x_i, x_j) = -\frac{1}{2} \ln |\sinh^2 x_j - \sinh^2 x_i| - \frac{1}{2} \ln |x_j^2 - x_i^2| \quad \text{y} \quad V(x_i) = \frac{\gamma}{2s} x_i^2 - \frac{1}{2} \ln |x_i \sinh 2x_i|. \quad (59)$$

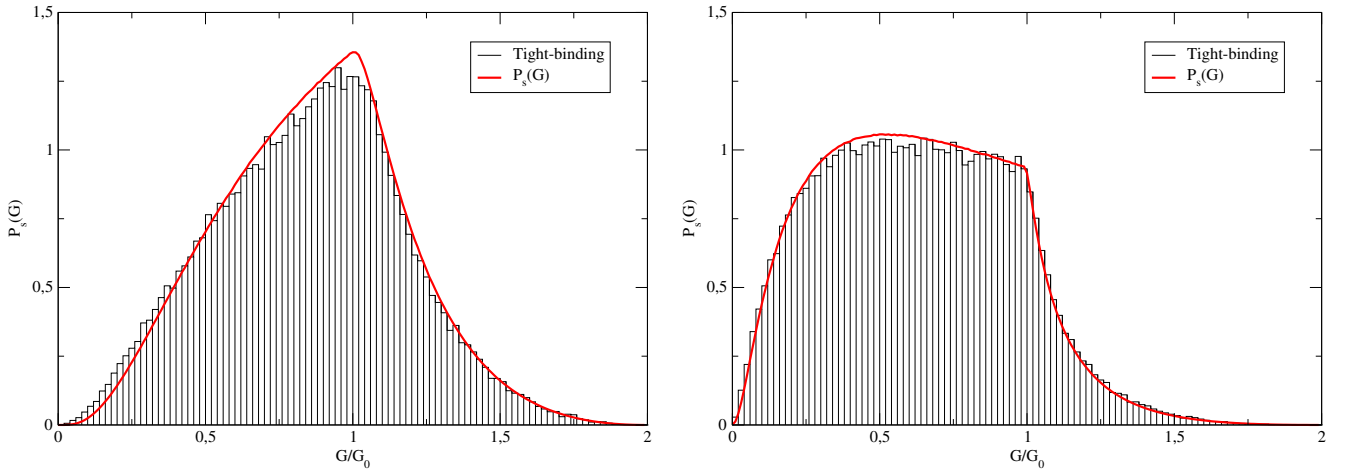
En el caso aislante también se cumplen las ecuaciones (58) y (59), salvo que en este caso $V(x_i) = \frac{\gamma}{2s} x_i^2 - \frac{1}{2} \ln |x_i \sinh 2x_i| - \ln x_i$. El término $-\ln x_i$ de $V(x_i)$ (que es la única diferencia con respecto a la fórmula (59) en régimen metálico) supone una contribución que es despreciable en comparación con el resto de términos de $V(x_i)$, así que usaremos la solución en régimen metálico para todos los casos. De este modo e introduciendo la fórmula de Landauer (33), la distribución de la conductancia en función de la de las variables x_i está dada por

$$P_s(G) = \int_{x_1=0}^{+\infty} \dots \int_{x_N=0}^{+\infty} \delta \left(G - \sum_{n=1}^N \frac{1}{\cosh^2 x_n} \right) P(x_1, \dots, x_N) dx_1 \dots dx_N, \quad (60)$$

donde hemos considerado el cambio de variables (55). Vemos que este resultado sólo depende del parámetro s , al igual que en el caso de un solo canal.

Para calcular la distribución de probabilidad $P_s(G)$ hemos de resolver la ecuación (60), que requiere de la integración en varias variables de una función cuya primitiva no conocemos. Por ello, para obtener la distribución $P_s(G)$ requerimos de cálculos numéricos. En este trabajo hemos empleado algoritmos de integración por Monte-Carlo implementados en un programa en C que resuelve la ecuación (60). En la Figura 11 mostramos los resultados teóricos en línea continua (calculados, como decimos, por algoritmos Monte-Carlo) junto con los de las simulaciones *tight-binding* (histograma) para el caso de dos canales con promedios de la conductancia $\langle G \rangle = 0.86G_0$ y $\langle G \rangle = 0.61G_0$. Al igual que en el caso de un solo canal, la concordancia entre las simulaciones y la teoría es muy buena.

⁷Consultar página 766 de [9]



(a) Distribución de la conductancia $P_s(G)$ para $\langle G \rangle = 0.86 G_0$ y $s = 0.396$.

(b) Distribución de la conductancia $P_s(G)$ para $\langle G \rangle = 0.63 G_0$ y $s = 0.610$.

Figura 11: Distribuciones de la conductancia $P_s(G)$ en el caso de dos canales $N = 2$ para $s = 0,396$ y $s = 0,610$. La solución analítica (60) se representa en línea continua y los resultados de las simulaciones *tight-binding* se presentan en forma de histograma.

El modelo anterior ha sido estudiado ampliamente y resulta ser muy efectivo para describir conductores desordenados donde los electrones sufren una localización en su función de onda: ésta queda casi totalmente localizada en un punto de la red, decayendo desde tal punto con un comportamiento exponencial $|\psi| \sim e^{-ar}$, lo que lleva a que $\langle G \rangle \sim e^{-L/l_e}$. A este fenómeno se le llama **localización de Anderson** y nuestro modelo permite describir sus propiedades estadísticas.

La efectividad de este modelo ha dado lugar a un estudio más profundo del mismo y a una extensión a otro tipo de sistemas. El objeto de estudio de nuestro trabajo es, precisamente, ir más allá de la localización de Anderson: basándonos en este modelo, en el próximo apartado vamos a extenderlo para que sea capaz de describir la llamada **localización anómala**, en la cual la función de onda de los electrones decae como $|\psi| \sim e^{-br^\alpha}$ que provoca que $\langle G \rangle \sim L^{-\alpha}$, a diferencia de lo que ocurre en localización de Anderson ($\langle G \rangle \sim e^{-L/l_e}$). Veremos en la próxima sección que este índice α está directamente relacionado con las distribuciones tipo Lévy.

4. Nanohilos unidimensionales desordenados tipo Lévy

La teoría empleada hasta ahora consideraba un desorden en el hilo cuántico cuyo promedio de número de centros de *scattering* estaba bien definido, de modo que la longitud del sistema era proporcional al número de centros dispersores. Lo que se plantea ahora es cambiar la densidad de probabilidad de la ubicación de los centros dispersores en el nanohilo, de manera que ésta será una **distribución tipo Lévy** (o también llamadas **distribución estable**), que se caracterizan por ser funciones de «cola larga», esto es, que decaen lentamente hacia cero: siguen una ley de potencias del tipo $1/x^{1+\alpha}$ (con $0 < \alpha < 2$) para valores grandes de x . Debido a esta propiedad, estas distribuciones no tienen definido el primer momento de la distribución $\langle x \rangle$ si $\alpha < 1$ y en ningún caso tienen el segundo momento $\langle x^2 \rangle$ definido.

La justificación de la elección de tal estructura matemática se basa en el hecho de que, en la naturaleza, se observan muchos fenómenos que siguen distribuciones probabilísticas de ese tipo. En particular, recientemente se han llevado a cabo estudios de propagación de la luz que viaja dispersándose por medios desordenados formados por esferas de cristal cuyos diámetros siguen una distribución tipo Lévy [10], donde se encuentran propiedades poco convencionales en la transmisión de la luz.

Experimentos como el mencionado en el párrafo anterior motivan nuestro trabajo: queremos comprobar cómo afecta un desorden tipo Lévy al transporte de electrones, comprender cómo funciona y ver qué cambia con respecto al desorden convencional. Un desarrollo detallado de tal teoría puede encontrarse para el caso del cable unidimensional en el artículo [5]. En esta sección explicaremos cómo llegar al resultado que en tal artículo se deduce y cómo aplicarlo a casos de estudio concretos.

4.1. Distribuciones tipo Lévy o estables

Decimos que una variable aleatoria x sigue una **distribución tipo Lévy o estable** [11] si existen unas constantes $b_n > 0$ y a_n tales que

$$\sum_{i=1}^n x_i \stackrel{d}{=} a_n + b_n x, \quad (61)$$

donde x_1, x_2, \dots, x_n son variables aleatorias independientes con **la misma distribución de probabilidad que x** (el símbolo $\stackrel{d}{=}$ indica que los términos a ambos lados de la igualdad son variables que siguen las mismas distribuciones). Así, una distribución es estable si la suma de un número arbitrario de variables aleatorias siguiendo cada una de ellas esta distribución sigue también el mismo tipo de distribución (por ejemplo, una suma de variables gaussianas es una distribución gaussiana, pero con diferente media y varianza).

De un modo general, una distribución estable está caracterizada por cuatro parámetros:

- El **exponente característico** $\alpha \in (0, 2]$.
- La **asimetría estadística** $\beta \in [-1, 1]$, que indica hacia «qué lado» tiende a ir la distribución.
- El **parámetro de escala** $c \geq 0$, que indica la escala de la distribución.
- El **parámetro de localización** $\delta \in \mathbb{R}$, que indica en qué punto está centrada la distribución.

Como ejemplos de este tipo de distribuciones tenemos:

- La distribución **normal** o **gaussiana**, con una densidad de probabilidad

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) \quad -\infty < x < +\infty, \quad (62)$$

con μ la media o primer momento de la distribución y σ la varianza. En esta distribución $\alpha = 2$ y $\beta = 0$.

- La distribución de **Cauchy** ($\alpha = 1$ y $\beta = 0$):

$$f(x) = \frac{1}{\pi} \frac{c}{c^2 + (x-\delta)^2} \quad -\infty < x < +\infty, \quad (63)$$

- La distribución de **Lévy** ($\alpha = 1/2$ y $\beta = 1$):

$$f(x) = \sqrt{\frac{c}{2\pi}} \frac{1}{(x-\delta)^{3/2}} \exp\left(-\frac{c}{2(x-\delta)}\right) \quad \delta < x < +\infty. \quad (64)$$

Es importante destacar que para casos diferentes al gaussiano, Cauchy o Lévy no hay una expresión analítica de estas distribuciones, pero es posible generarlas numéricamente [4]. En general, la forma que tienen estas distribuciones es de un pronunciado máximo cerca del origen y una larga cola que decae lentamente, tal y como se aprecia en los ejemplos de la Figura 12.

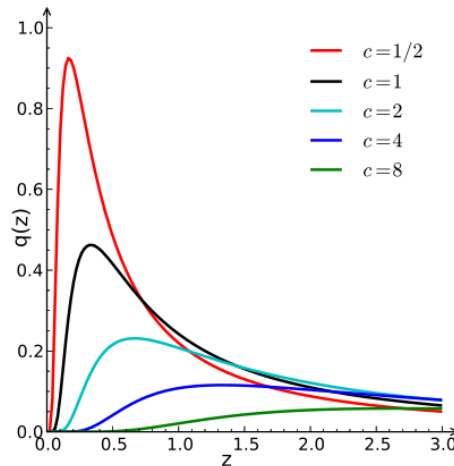


Figura 12: Ejemplos de distribuciones Lévy ($\alpha = 1/2, \beta = 1$) para diferentes parámetros de escala c y $\delta = 0$.

Uno de los aspectos de estas distribuciones de probabilidad es que no tienen definido su segundo momento (como pasa en las distribuciones de Cauchy y Lévy y, en general, aquellas cuyo exponente característico α sea $\alpha < 2$). De hecho, resultan de gran interés por su importante papel en el **Teorema del límite central generalizado**. Recordemos el **Teorema del límite central**:

Sea x_1, x_2, \dots, x_n un conjunto de variables aleatorias, independientes e idénticamente distribuidas de una distribución con media μ y varianza $\sigma^2 \neq 0$. Entonces, si n es lo suficientemente grande, la variable aleatoria

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$$

tiene una distribución normal con $\mu_{\bar{x}}$ y $\sigma_{\bar{x}}^2 = \sigma^2/n$ en el límite $n \rightarrow \infty$.

Enunciamos ahora el **Teorema del límite central generalizado**:

La suma de un número de variables aleatorias siguiendo una distribución de variancia infinita tiende a una distribución estable $f(x; \alpha, \beta = 0, c, \delta = 0)$ conforme el número de sumandos crece. Si $\alpha = 2$ entonces la suma converge a una distribución estable con $\alpha = 2$, es decir, una distribución gaussiana.

Dentro de la amplia familia de distribuciones estables, en este trabajo usaremos solamente aquellas cuya asimetría es $\beta = 1$ y su parámetro de localización es $\delta = 0$, de modo que nuestras distribuciones $q_{\alpha,c}(z)$ estarán determinadas solamente por el parámetro de escala c y el exponente característico α . De hecho, como veremos en la siguiente sección, en nuestros sistemas de estudio bastará con conocer el exponente característico α .

4.2. Aplicación a la distribución de la conductancia

En esta sección vamos a analizar cómo afecta a la distribución de probabilidad de la conductancia $P_s(G)$ el hecho de que entre nuestros centros dispersores haya una distancia l_i distribuida aleatoriamente siguiendo una distribución de probabilidad $p(x)$ de las de tipo «cola larga», esto es, que tenga segundo momento divergente (por ejemplo, una distribución Lévy).

Tenemos N dispersores distribuidos según una distribución tipo Lévy $q_{\alpha,c}(x)$ hasta alcanzar la longitud L del hilo, tal y como se ilustra en la Figura 13.

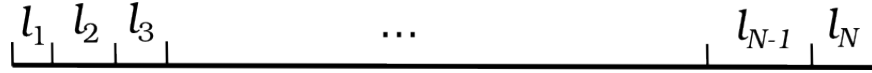


Figura 13: $N + 1$ dispersores en un cable de longitud L siguiendo la distribución tipo Lévy $q_{\alpha,c}(x)$.

Sea x una variable de longitud que podemos expresar como

$$x = \sum_{i=1}^N l_i, \quad (65)$$

con l_i la distancia entre el dispersor i y el $i - 1$. Estas distancias siguen una distribución tipo Lévy, de modo que de acuerdo con las propiedades de estas distribuciones, la distribución de probabilidad de la variable x será

$$p(x) = \frac{1}{N^{1/\alpha}} q_{\alpha,c} \left(\frac{x}{N^{1/\alpha}} \right). \quad (66)$$

Lo que haremos a continuación será averiguar la distribución acumulativa para, después, calcular la densidad de probabilidad mediante su derivada. La probabilidad de que $x \leq L$ es

$$p_r(x \leq L) = \int_0^L \frac{1}{N^{1/\alpha}} q_{\alpha,c} \left(\frac{x}{N^{1/\alpha}} \right) dx, \quad (67)$$

es decir, es la probabilidad de que tras N colocaciones de dispersores la suma x sea menor que L . Si tomamos la probabilidad total:

$$P_r(x \leq L) + P_r(x > L) = 1, \quad (68)$$

podemos obtener que

$$P_r(x > L) = 1 - P_r(x \leq L) = \int_0^{+\infty} \frac{1}{N^{1/\alpha}} q_{\alpha,c} \left(\frac{x}{N^{1/\alpha}} \right) dx + \int_0^L \frac{1}{N^{1/\alpha}} q_{\alpha,c} \left(\frac{x}{N^{1/\alpha}} \right) dx. \quad (69)$$

Considerando que $\int_a^b f(x)dx + \int_b^c f(x)dx = \int_a^c f(x)dx$, haciendo el cambio de variable $z = x/N^{1/\alpha}$ y teniendo en cuenta que $P_r(x > L)$ es la **distribución acumulativa** $F(L, N)$, se obtiene que

$$P_r(x > L) = F(L, N) = \int_{L/N^{1/\alpha}}^{+\infty} q_{\alpha,c}(z)dz. \quad (70)$$

A través de esta función y tomando L fijo, podemos sacar la densidad de probabilidad

$$\Pi(N) = \frac{\partial F}{\partial N} = \frac{L}{\alpha N^{1+1/\alpha}} q_{\alpha,c} \left(\frac{L}{N^{1/\alpha}} \right), \quad (71)$$

donde hemos usado el teorema del valor medio

$$\frac{\partial}{\partial x} \int_a^b f(x)dx = f(b) - f(a). \quad (72)$$

Si hacemos el cambio de variables $N = 2\nu$, obtenemos

$$\Pi_L(\nu) = \frac{2}{\alpha} \frac{L}{(2\nu)^{\frac{\alpha+1}{\alpha}}} q_{\alpha,c} \left(\frac{L}{(2\nu)^{1/\alpha}} \right). \quad (73)$$

A partir de este resultado podemos calcular cantidades como el promedio $\langle -\ln G \rangle_L$: de acuerdo con la teoría anterior el promedio $\langle -\ln G \rangle_\nu = a\nu$ para un número de dispersores ν fijo, con a una constante. De esta manera, se puede obtener el siguiente resultado

$$\langle -\ln G \rangle_L = \int_0^\infty \langle -\ln G \rangle_\nu \Pi_L(\nu) d\nu = a \frac{L^\alpha}{c} I_\alpha, \quad (74)$$

con $I_\alpha = \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} z^{-\alpha} q_{\alpha,1}(z) dz$ y donde se ha usado la propiedad

$$c^{1/\alpha} q_{\alpha,c}(c^{1/\alpha} z) = q_{\alpha,1}(z), \quad (75)$$

así como el cambio de variable $z = L/(2c\nu)^{1/\alpha}$. Notemos que en este caso $\langle \ln G \rangle_L \propto L^\alpha$, mientras que en la localización de Anderson teníamos $\langle \ln G \rangle_L \propto L$. Podemos encontrar la distribución completa $P_s(G)$ de nuestro sistema si utilizamos la densidad de probabilidad de los centros dispersores $\Pi(\nu)$ de (73) y $s = a\nu$ de modo que, haciendo los cálculos adecuados, se obtiene que

$$P_\xi(G) = \int_0^\infty p_{av}(G) \Pi_L(\nu) d\nu = \int_0^\infty P_s(G) q_{\alpha,1}(z) dz, \quad (76)$$

donde

$$s = \frac{\xi}{2z^\alpha I_\alpha} \quad \text{y} \quad \xi = \langle -\ln G \rangle_L. \quad (77)$$

Para obtener la distribución $P_\xi(G)$ hemos de resolver una integral doble (76) (pues $P_s(G)$ sigue la forma integral (53)). Para ello hemos desarrollado un programa en C que resuelve el problema numéricamente. En la Figura 14 se presentan dos ejemplos de esta distribución: para $\xi = 1.1$ con $\alpha = 1/2$ y para $\xi = 0.76$ con $\alpha = 3/4$. La línea continua es el resultado de resolver la ecuación (76) mientras que los resultados de las simulaciones *tight-binding* se muestra en forma de histograma. Tal y como se aprecia, la concordancia entre simulaciones y teoría es excelente. Para reproducir resultados numéricos o experimentales con este modelo basta con calcular $\langle -\ln G \rangle_L$ para averiguar ξ y así conseguir la distribución analítica $P_\xi(G)$.

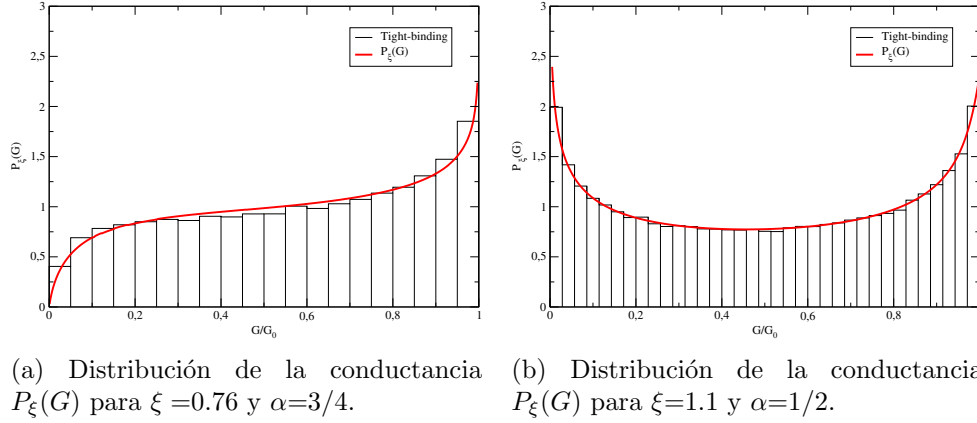


Figura 14: Distribuciones de la conductancia $P_\xi(G)$ para $\xi = 1.1$ con $\alpha = 1/2$ y $\xi = 0.76$ con $\alpha = 3/4$. El resultado analítico (76) se presenta en línea continua y el de las simulaciones *tight-binding* en forma de histograma.

Es de interés comparar el resultado obtenido con desorden tipo Lévy con el caso normal (localización de Anderson), es decir, el regido por la fórmula (53). En la Figura 15 se representa en azul el resultado con desorden tipo Lévy para $\alpha = 1/2$ y $\xi = 1.1$, siendo la línea roja el caso normal con $s = 0.709$ y, en ambas distribuciones, $\langle G \rangle = 0.57G_0$. En ella observamos que el hecho de insertar un desorden Lévy provoca, en este caso, una mayor conductancia en el sistema (la distribución toma valores más elevados para valores altos de G), aunque el decaimiento a conductancia nula es menos violento en el caso Lévy. Cuando estudiemos el caso multicanal (en la subsección 5.2) haremos un estudio más detallado de las diferencias entre ambos casos (normal y Lévy).

El marco teórico que hemos presentado es tan general que se puede aplicar a otros sistemas donde existe dispersión de ondas: a través de experimentos de microondas [12] viajando por una guía de ondas (que correspondería al cable unidimensional por el que se transporta la carga) con dispersores colocados según una distribución tipo Lévy (ver Figura 16a) podemos obtener resultados que concuerdan con los de esta teoría, tal y como se ve en la Figura 16b.

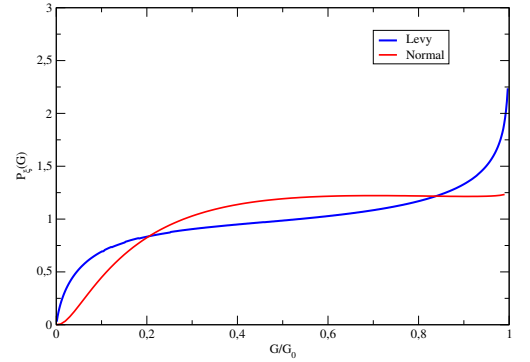


Figura 15: Comparación entre el caso normal (53) con $s = 0.709$ y Lévy (76) con $\xi = 0.76$ y $\alpha = 3/4$ en el caso de un solo canal con $\langle G \rangle = 0.57G_0$.

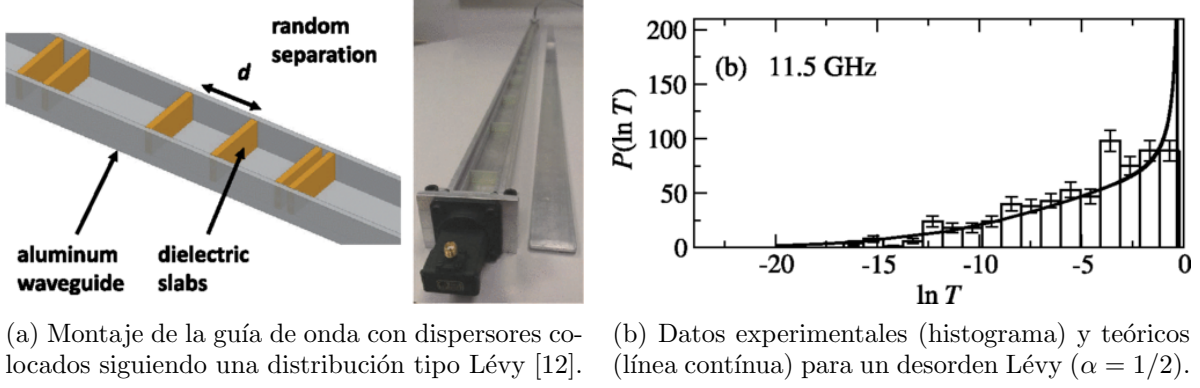


Figura 16: Esquema y resultados del proceso de comprobación experimental por microondas.

5. Nanohilos multicanal desordenados tipo Lévy

El estudio de un nanohilo de un sólo canal es un caso muy restringido y particular. En realidad, los nanohilos tienen una cierta anchura que no podemos despreciar y, por lo tanto, permiten el transporte de electrones por varios canales (tal y como vimos en la subsección 2.1). Es por eso que necesitamos ir más allá en nuestra teoría y aplicar nuestros conocimientos del desorden tipo Lévy en el caso cuasi-unidimensional: la generalización al caso multicanal es fundamental para el estudio de estos sistemas y en este trabajo presentamos los primeros resultados teóricos de este caso.

5.1. Aplicación de la teoría

Buscamos estudiar sistemas de transporte de electrones en cables con desorden tipo Lévy en los que estos pueden acceder a N canales. La versatilidad de nuestra teoría nos permite estudiar la distribución de la conductancia $P_\xi(G)$ de modo análogo al caso de un solo canal: dada la distribución $P_s(G)$ (60) para el caso multicanal convencional, si usamos la fórmula (76) la distribución $P_\xi(G)$ será

$$P_\xi(G) = \int_{z=0}^{\infty} \int_{x_1=0}^{+\infty} \dots \int_{x_N=0}^{+\infty} \delta \left(G - \sum_{n=1}^N \frac{1}{\cosh^2 x_n} \right) q_{\alpha,1}(z) P_{s(z)}(x_1, \dots, x_N) dz dx_1 \dots dx_N, \quad (78)$$

donde el parámetro $s(z)$ tiene la dependencia ya conocida (77). No obstante, en el marco del caso multicanal el valor de $\langle -\ln G \rangle$ difiere de la definición del caso de un solo canal $\xi = \langle -\ln G \rangle = L/l_e$. En vez de esto, en el caso multicanal $\langle -\ln G \rangle_L = L/l_l$, con l_l la longitud de localización. Debido a esto, el valor del parámetro ξ para el caso multicanal se obtiene haciendo que la distribución teórica tenga el mismo valor del promedio $\langle G \rangle$ que el de los datos numéricos.

5.2. Análisis de los resultados

Primero compararemos nuestros resultados teóricos (78) con simulaciones numéricas. Para obtener la distribución $P_\xi(G)$ en el caso multicanal es necesario resolver una integral N -dimensional (78). Tal y como hemos explicado al final de la subsección 3.2, requerimos de una solución numérica que, en este trabajo, hemos realizado a través de un programa en C con algoritmos de integración por Monte-Carlo. En la Figura 17 tenemos la distribución $P_\xi(G)$ analítica (línea continua) para $N = 2$, $\xi = 4.2$ y $\alpha = 0.75$ y para $N = 3$, $\xi = 1.23$ y $\alpha = 0.5$; estos resultados están comparados con simulaciones *tight-binding* (histogramas). En las gráficas de la Figura 17 puede apreciarse una muy buena concordancia entre las simulaciones y la

distribución de probabilidad de nuestra teoría para diferentes valores de α y N . Comprobamos así que nuestra teoría nos permite estudiar también sistemas multicanal con la misma efectividad que en el caso de un sólo canal.

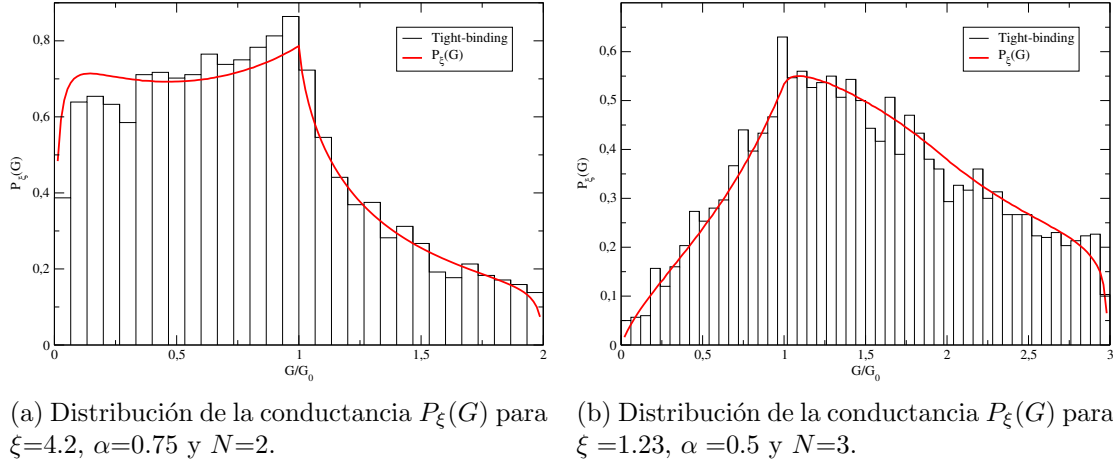


Figura 17: Distribuciones de la conductancia $P_\xi(G)$ multicanal para $N = 2$, $\xi = 4.2$ y $\alpha = 0.75$ y $N = 3$, $\xi = 1.23$ y $\alpha = 0.5$.

A continuación vamos a analizar la distribución de probabilidad (78) poniendo diferentes ejemplos. Comencemos por variar el parámetro ξ : para un mismo exponente α podemos ver cómo cambia $P_\xi(G)$ según la distribución tenga diferentes valores del promedio de la conductancia $\langle G \rangle$, tal y como vemos en la Figura 18. Se aprecia que al aumentar el promedio de la conductancia la distribución se concentra para valores altos de G , pero siguiendo una forma suave; por otro lado, para valores bajos de la conductancia media tenemos un crecimiento más abrupto hacia los valores bajos.

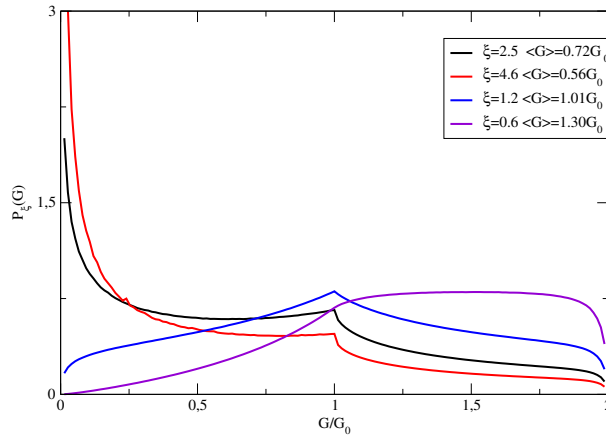
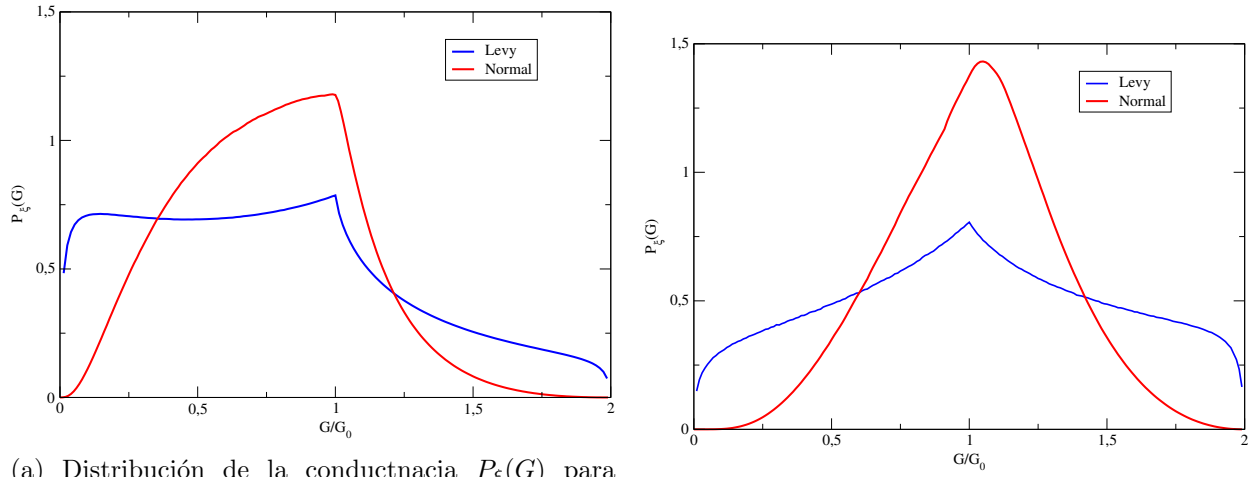


Figura 18: Distribución de la conductancia $P_\xi(G)$ con $\alpha = 1/2$ y $N = 2$ para diferentes valores de $\langle G \rangle$: $\langle G \rangle = 0.72G_0$ (negro), $\langle G \rangle = 0.56G_0$ (rojo), $\langle G \rangle = 1.01G_0$ (azul) y $\langle G \rangle = 1.30G_0$ (violeta).

Para ver los efectos de las distribuciones tipo Lévy en el transporte electrones, es interesante comparar los resultados con estadística tipo Lévy con los que la teoría de transporte multicanal normal (es decir, de la que se obtiene la distribución (60)). En la Figura 19 mostramos una comparativa de distribuciones de conductancia en el caso normal (Anderson) y el caso tipo Lévy.

En la Figura 19 representamos la distribución tipo Lévy (78) en azul y la normal (60) en rojo. La densidad de probabilidad cuando incluimos desorden tipo Lévy es **más «uniforme»**, en el sentido de que las distribuciones son más anchas: la distribución toma valores más significativos para todo el rango de



(a) Distribución de la conductancia $P_\xi(G)$ para $\xi=4.2$ y $\alpha=0.75$ comparada con la distribución $P_s(G)$ con $s=0.480$.

(b) Distribución de la conductancia $P_\xi(G)$ para $\xi=0.12$ y $\alpha=0.5$ comparada con $P_s(G)$ con $s=0.302$.

Figura 19: Distribuciones de la conductancia con desorden tipo Lévy $P_\xi(G)$ multicanal ($N=2$) comparadas con distribuciones de la conductancia $P_s(G)$. En 19a el promedio de ambas distribuciones es $\langle G \rangle = 0.76G_0$ y en 19b $\langle G \rangle = 1.01G_0$.

G/G_0 , a diferencia de en el caso normal con respecto del cual vemos un aumento de la distribución para valores cercanos a $G=0$ y G máxima. Esto es consecuencia de que **las fluctuaciones son mucho más grandes en el caso del desorden tipo Lévy**. Podemos comprobar esto calculando la varianza, tal y como se ve en el Cuadro 1, donde apreciamos unas fluctuaciones mayores para el caso Lévy que para el normal.

	$\langle G \rangle = 0.76G_0$		$\langle G \rangle = 1.01G_0$	
	Normal	Lévy	Normal	Lévy
VarG	$0.312G_0$	$0.488G_0$	$0.313G_0$	$0.503G_0$

Cuadro 1: Cálculo de $\text{Var}G = \sqrt{\langle G^2 \rangle - \langle G \rangle^2}$ en caso normal y Lévy.

La interpretación física de este hecho es la **localización anómala** de los electrones frente a la **localización de Anderson**. En el caso normal (Anderson) la función de onda se localiza en un punto del sólido, de modo que su módulo decrece exponencialmente desde el lugar de localización $|\psi| \sim e^{-ar}$, y como consecuencia $\langle G \rangle \sim e^{-L/l}$. Sin embargo, en la localización anómala la función de ondas decae como $|\psi| \sim e^{-br^\alpha}$ haciendo que el promedio de la conductancia decaiga con una ley de potencias $\langle G \rangle \sim 1/L^\alpha$. Debido a esto los electrones no están tan localizados y se permite un movimiento más libre de los mismos, lo que se traduce en el acceso a valores mayores de la conductancia G .

6. Resumen y conclusiones

A lo largo de este trabajo hemos presentado la teoría del transporte cuántico de electrones desde sus fundamentos: partiendo de la física cuántica elemental hemos ido construyendo esta teoría y sofisticándola para, comenzando por sistemas muy ideales, llegar a describir nanohilos cuánticos con modelos probabilísticos que han resultado ser muy eficaces.

En primer lugar hemos usado la mecánica cuántica elemental para acercarnos al estudio de los nanohilos. De esta primera parte extraemos dos resultados fundamentales: la **matriz de scattering**, que nos permite tratar cualquier nanohilo como una «caja negra» y nos dota de un tratamiento muy general y la **fórmula de Landauer**, que hace del transporte de electrones un problema de dispersión de mecánica cuántica, haciendo que nos baste con conocer los coeficientes de transmisión T_p para calcular la conductancia eléctrica G .

Tras ver estos primeros resultados hemos tratado con los nanohilos desordenados, sistema físico más realista y de gran interés. El estudio de los modelos convencionales de desorden nos ha desvelado que en esta clase de sistemas es necesario un **tratamiento estadístico**, pues debido a las fuertes fluctuaciones que sufre la conductancia G a causa de la dispersión múltiple de los electrones por los defectos de los nanohilos, resulta extremadamente complicado determinar con exactitud el valor de la conductancia. Lo que sí podemos obtener es una distribución de probabilidad $P_s(G)$ de la conductancia, la cual quedará determinada por el parámetro $s = L/l_e$ que, para comparar con datos experimentales, basta con usar la propiedad $\langle -\ln G \rangle = s$. Esta teoría resulta de una gran versatilidad y eficacia, mostrando una gran concordancia entre datos teóricos y experimentales y describiendo con éxito la **localización de Anderson** en la cual la función de ondas se localiza en un punto y decae con la distancia r como $|\psi| \sim e^{-ar}$.

Nuestra contribución consiste en ir más allá de esta teoría incluyendo el desorden tipo Lévy, cuya eficacia para describir la **localización anómala** ha sido ya probada teórica y experimentalmente ([5],[12]) para el caso de un canal. En el fenómeno de localización anómala la función de ondas decae como $|\psi| \sim e^{-br^\alpha}$, donde α es el exponente característico de la distribución tipo Lévy. En este trabajo hemos extendido el estudio de desorden tipo Lévy a sistemas multicanal en los cuales se requiere de dos parámetros α y ξ para una descripción completa, mientras que en el caso normal bastaba con un sólo parámetro s . A través de la resolución de la ecuación (78) mediante integración numérica por Monte-Carlo, hemos podido comprobar una excelente concordancia entre nuestra teoría y las simulaciones *tight-binding*. Después hemos pasado a analizar la influencia del parámetro ξ en nuestro modelo, comprobando que tiene una gran importancia a la hora de determinar cómo de aislante es un sistema. También hemos realizado una comparativa entre el caso normal y el caso Lévy, de modo que en este último se aprecian fluctuaciones en la conductancia G mayores que en el caso normal, cuestión relacionada con la diferencia entre localización anómala y localización de Anderson. Gracias a este nuevo análisis hemos sido capaces de analizar sistemas cuasi-unidimensionales, cuya descripción se acerca más a cómo es un nanohilo desordenado en la realidad.

El siguiente paso en este trabajo es la comprobación experimental: al igual que en el caso de un sólo canal, un experimento con microondas y dispersores colocados aleatoriamente según una distribución tipo Lévy en la guía de ondas permitiría contrastar los resultados de nuestro modelo con datos de laboratorio. Esperamos que en un futuro se lleve a cabo tal experimento; además, podríamos tratar de comparar nuestro modelo con la conductancia eléctrica en nanohilos en un laboratorio, la cual pensamos que podría estudiarse en condiciones similares a las que se plantea en este modelo debido al gran desarrollo que ha alcanzado la nanociencia en los últimos años.

Como posibles retos teóricos para el futuro, el uso de este modelo podría plantearse para sistemas de más dimensiones (como pueda ser, por ejemplo, un sólido en tridimensional). De hecho, para el caso normal se ha comprobado que, pese a que el modelo está ideado para sistemas cuasi-unidimensionales, los resultados son también satisfactorios en redes bidimensionales. El paso a las tres dimensiones resulta muy interesante, aunque se trata de un reto de una gran envergadura.

7. Agradecimientos

Queremos dar las gracias a Ioannis Kleftogiannis e Ilias Amanatidis, investigadores de la Universidad de Ioannina, por sus simulaciones de *tight-binding* que han apoyado y corroborado nuestros resultados teóricos y a Héctor Villarrubia por su trabajo en la resolución de la ecuación (78) a través de algoritmos Monte-Carlo.

Referencias

- [1] G. E. Moore, “Readings in computer architecture,” ch. Cramming More Components Onto Integrated Circuits, pp. 56–59, San Francisco, CA, USA: Morgan Kaufmann Publishers Inc., 2000.
- [2] S. Datta, “Electronic Transport in Mesoscopic Systems,” 1997.
- [3] P. W. Anderson, “New method for scaling theory of localization. ii. multichannel theory of a ”wire.“and possible extension to higher dimensionality,” *Phys. Rev. B*, vol. 23, pp. 4828–4836, May 1981.
- [4] J. P. Nolan, *Stable Distributions - Models for Heavy Tailed Data*. Birkhauser, 2015.
- [5] F. Falceto and V. A. Gopar, “Conductance through quantum wires with levy-type disorder: Universal statistics in anomalous quantum transport,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 92, no. 5, p. 57014, 2010.
- [6] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë, *Quantum mechanics*. Quantum Mechanics, Wiley, 1977.
- [7] R. Landauer, “Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices,” *Philosophical Magazine*, vol. 21, pp. 863–867, 1970.
- [8] P. Mello and N. Kumar, *Quantum Transport in Mesoscopic Systems: Complexity and Statistical Fluctuations. A Maximum Entropy Viewpoint*. Mesoscopic physics and nanotechnology, OUP Oxford, 2010.
- [9] C. W. J. Beenakker, “Random-matrix theory of quantum transport,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 69, pp. 731–808, Jul 1997.
- [10] P. Barthelemy, J. Bertolotti, and D. S. Wiersma, “A levy flight for light,” *Nature*, vol. 453, pp. 495–498, May 2008.
- [11] V. Uchaikin and V. Zolotarev, *Chance and Stability: Stable Distributions and their Applications*. Modern Probability and Statistics, De Gruyter, 1999.
- [12] A. Fernandez-Marin, J. Mendez-Bermudez, J. Carbonell, F. Cervera, J. Sanchez-Dehesa, and V. Gopar, “Beyond anderson localization in 1d: Anomalous localization of microwaves in random waveguides,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 113, p. 233901, Dec 2014.