



Impurezas no lineales en cadenas unidimensionales

Non-linear Impurities in One Dimensional Chains

L. F. Chaparro^{a*}, F. Rodríguez^a

^aUniversidad de los Andes

Recibido marzo 23 de 2010; aceptado agosto 24 de 2010.

Resumen

Cadenas unidimensionales acopladas a reservorios, presentan fenómenos de decoherencia en el transporte electrónico. Impurezas distribuidas aleatoriamente sobre la red, llevan al fenómeno de localización de Anderson, sin importar el grado de desorden. Sin embargo, este efecto puede ser modificado si en la cadena se incluyen efectos de impurezas no lineales, que dan lugar a un autoatrapamiento de la densidad de carga. En este trabajo se calcula la dinámica temporal de la probabilidad de ocupación por sitio como función del parámetro no lineal que caracteriza a la impureza y la amplitud de saltos entre sitios adyacentes. Se demuestra que existe un fenómeno de autoatrapamiento que depende de la dimensionalidad de la red que da lugar a la creación de solitones. La creación de solitones depende de un exponente crítico, el cual es una función de la dimensionalidad de la red considerada.

Palabras clave: impurezas no lineales, autoatrapamiento, localización de Anderson.

Abstract

One dimensional chains coupled to reservoirs present decoherence phenomena in electron transport. Impurities, which are randomly distributed over the chain, lead to the Anderson localization phenomenon, regardless of the degree of disorder. However, this effect can be modified if the chain includes non-linear effects of impurities, leading to a self-trapping of the charge density. In this paper, we estimate the temporal dynamics of site-occupation probability as a function of the non-linear parameter that characterizes the impurity and the amplitude of hopping between adjacent sites. The existence of a self-trapping phenomenon, which produce solitons, is demonstrated. The electron production depends on a critical exponent, which is a function of the dimensionality of the considered chain.

Keywords: non-linear impurities, self-trapping, Anderson localization.

1. Introducción

La presencia de impurezas lineales dentro de una cadena, genera la aparición de un estado ligado. Cuando la red contiene una fracción finita de estas impurezas, distribuidas aleatoriamente, se produce la localización de Anderson: localización de estados sin importar el

grado de desorden del sistema [1]. Sin embargo, este fenómeno se puede modificar si en la cadena se encuentra una impureza no lineal.

Se puede demostrar que existe un autoatrapamiento de la densidad de carga, el cual, al contrario de la lo-

* lchaparr@uniandes.edu.co

Este trabajo es publicado por la Sociedad Colombiana de Física y distribuido en open access según los términos de la licencia Creative Commons Attribution.

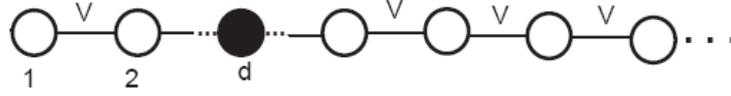


Figura 1. Cadena unidimensional periódica con impureza no lineal.

calización de Anderson, depende de la dimensionalidad de la red y del exponente de la no linealidad [2]. La dinámica de este tipo de sistemas está descrita por medio de la ecuación discretizada no lineal de Schrödinger (DNLS) [3], la cual describe la dinámica de polarones en medios deformables, modos locales en sistemas moleculares, entre otros[4].

El autoatrapamiento no es más que el agrupamiento de energía vibracional o probabilidad de energía electrónica o electromagnética en una pequeña región del espacio. El electrón que escapa desde el sitio inicial, es parcialmente atrapado en dicho sitio (localización). La fracción no atrapada escapa al infinito. El mecanismo de autoatrapamiento resulta de la competencia entre la localización (energía potencial) y la deslocalización (energía cinética)[5].

En la figura 1, se considera el sistema de interés: consta de una cadena unidimensional semi-infinita de átomos. En uno de los sitios de la cadena se incluye una impureza no lineal. Se estudia el comportamiento temporal de la probabilidad de ocupación de cada sitio de la cadena como función de la amplitud de salto, el parámetro de no linealidad y el exponente de la no linealidad.

2. Formalismo

Se considera una excitación (un electrón) moviéndose a lo largo de una cadena unidimensional periódica (Figura 1). La dinámica está descrita por la ecuación no lineal discretizada de Schrödinger (DNLS):

$$i \frac{dC_n}{dt} = V[C_{n+1} + C_{n-1}] - \chi |C_n|^\alpha C_n \quad (1)$$

donde C_n es la amplitud de probabilidad de encontrar el electrón en el sitio n de la cadena, V es la amplitud de salto entre sitios adyacentes de la cadena, χ y α representan la intensidad y el grado de no-linealidad de la impureza, donde para el caso convencional $\alpha = 2$. En materia condensada este valor de $\alpha = 2$ corresponde a un grado de libertad de un oscilador armónico anclado al sitio donde se localiza la impureza.

Estamos interesados en la probabilidad de ocupación que tiene la excitación (electrón) en cada sitio de la ca-

dena y su dependencia con la variación del parámetro de no linealidad, la amplitud de salto entre primeros vecinos y el exponente no lineal diferente del caso usual $\alpha = 2$.

Expresando la ecuación (1) en términos de la parte real e imaginaria:

$$i \frac{dC_n^r}{dt} = V[C_{n+1}^i + C_{n-1}^i] - \chi [(C_n^r)^2 + (C_n^i)^2] C_n^i \quad (2)$$

$$i \frac{dC_n^i}{dt} = -V[C_{n+1}^r + C_{n-1}^r] + \chi [(C_n^r)^2 + (C_n^i)^2] C_n^r \quad (3)$$

Solucionando para un número pequeño de sitios y luego expandiendo a n sitios de una cadena semi-infinita puede demostrarse que:

$$C_n^r = C_{n-1}^r \quad (4)$$

$$C_n^i = C_{n-1}^i \quad (5)$$

Teniendo (4) y (5) y con la impureza no lineal en el centro de la cadena, estudiamos la dinámica de la cadena para tres casos:

- (i) Cuando existen variaciones en el exponente no lineal (α).
- (ii) Variaciones en el parámetro de no linealidad (χ).
- (iii) Cambios en la amplitud de salto de sitios adyacentes (V).

3. Resultados y discusión

Para todas las simulaciones numéricas se ha tomado una cadena unidimensional con $n = 100$ sitios, y se ha colocado inicialmente la impureza no lineal en $n = 50$. La simulación se hace para un tiempo entre $t = 0$ y $t = 100$.

Para el caso (i) (variaciones en el exponente no lineal), fijamos la amplitud entre sitios adyacentes $V = 1, 0$, el parámetro de no linealidad $\chi = 3, 0$ y variamos α . Luego de dejar evolucionar con el tiempo el sistema

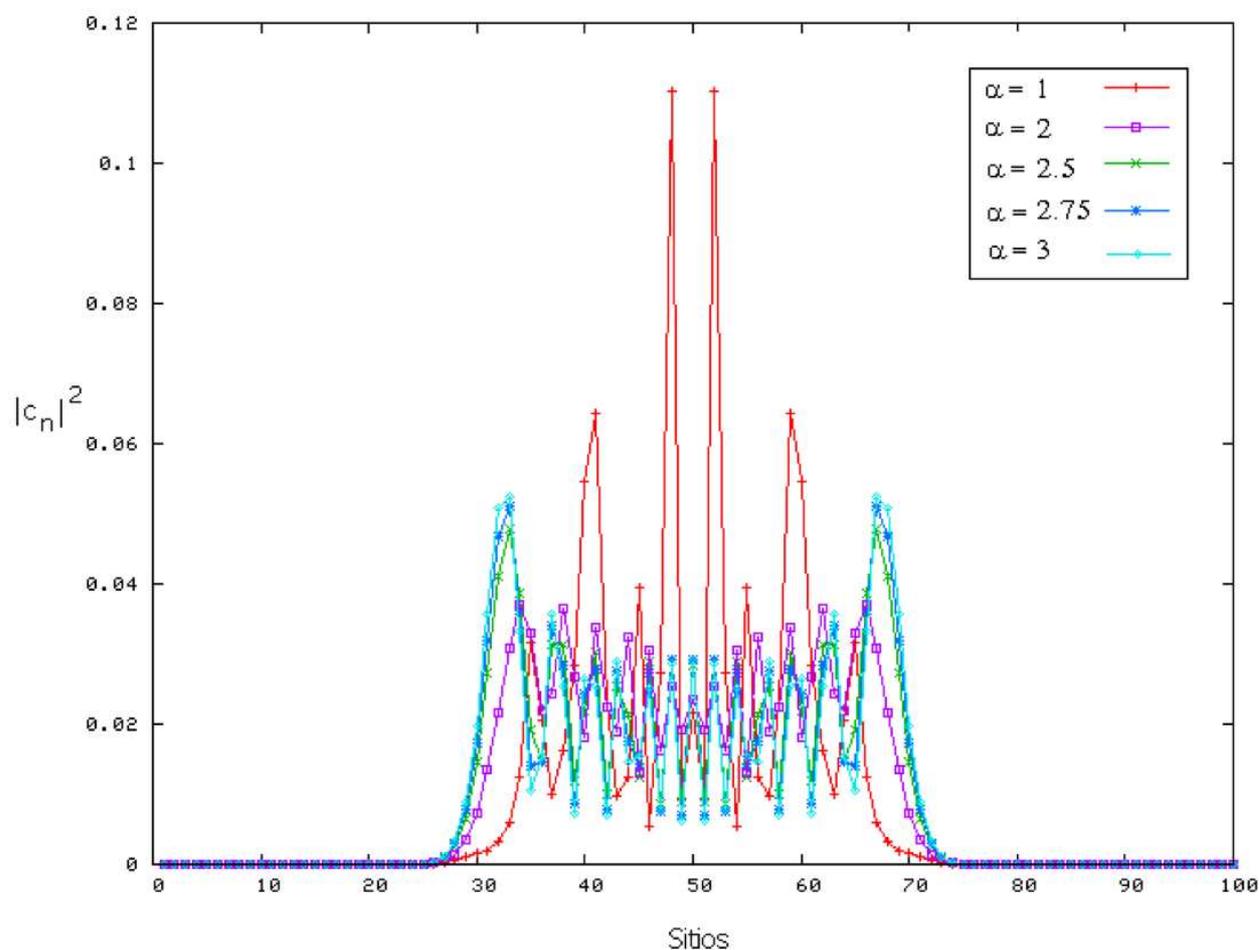


Figura 2. Probabilidad de ocupación por sitio para un tiempo dado, variando el exponente no lineal α .

tomamos el resultado para un tiempo $t = 10$. (Figura 2). A medida que el exponente no lineal crece, la probabilidad de ocupación por sitio disminuye desde el sitio inicial de la ubicación de la impureza. Si se quiere obtener un autoatrapamiento para valores de exponentes grandes es necesario incrementar el valor del parámetro de no linealidad. Por esta razón, se emplea como exponente convencional $\alpha = 2$.

En el caso (ii) (variaciones en la intensidad que caracterizan la impureza), se deja fijo la amplitud de salto entre sitios adyacentes, el exponente que caracteriza el grado de no linealidad α y se varia χ . Para un tiempo fijo $t = 1, 0$, se obtiene lo que se muestra en la Figura (3).

Puede observarse la probabilidad de ocupación como función del tiempo y de los sitios de la cadena. Si $\chi = 0$, la excitación tiende a deslocalizarse y a tener la misma probabilidad de ocupación en todos los sitios de la red (red lineal); por el contrario si la intensidad de la

no linealidad es grande ($\chi = 7, 0$) la localización permanece para todo tiempo en el sitio donde fue inicialmente introducida la impureza. Para valores intermedios de intensidad de la no linealidad, existe la localización, pero un mayor porcentaje de la excitación tiende a deslocalizarse con mayor rapidez. Esto quiere decir, que a medida que la intensidad crece, el autoatrapamiento tiene muchas más probabilidades de observarse.

Veamos ahora la figura 4. En este caso podemos apreciar toda la dinámica del sistema durante el tiempo que dura la simulación. Es claro que para amplitudes no lineales pequeñas, a tiempos grandes, la excitación tendrá igual probabilidad en cualquier sitio de la cadena, probabilidad que se incrementará alrededor del sitio inicial de la impureza para parámetros no lineales grandes. Es fácil notar como el valor límite que proporciona el autoatrapamiento en todo tiempo esta alrededor de $\chi = 4, 7$. Valor que depende también del exponente no lineal y de la amplitud de salto.

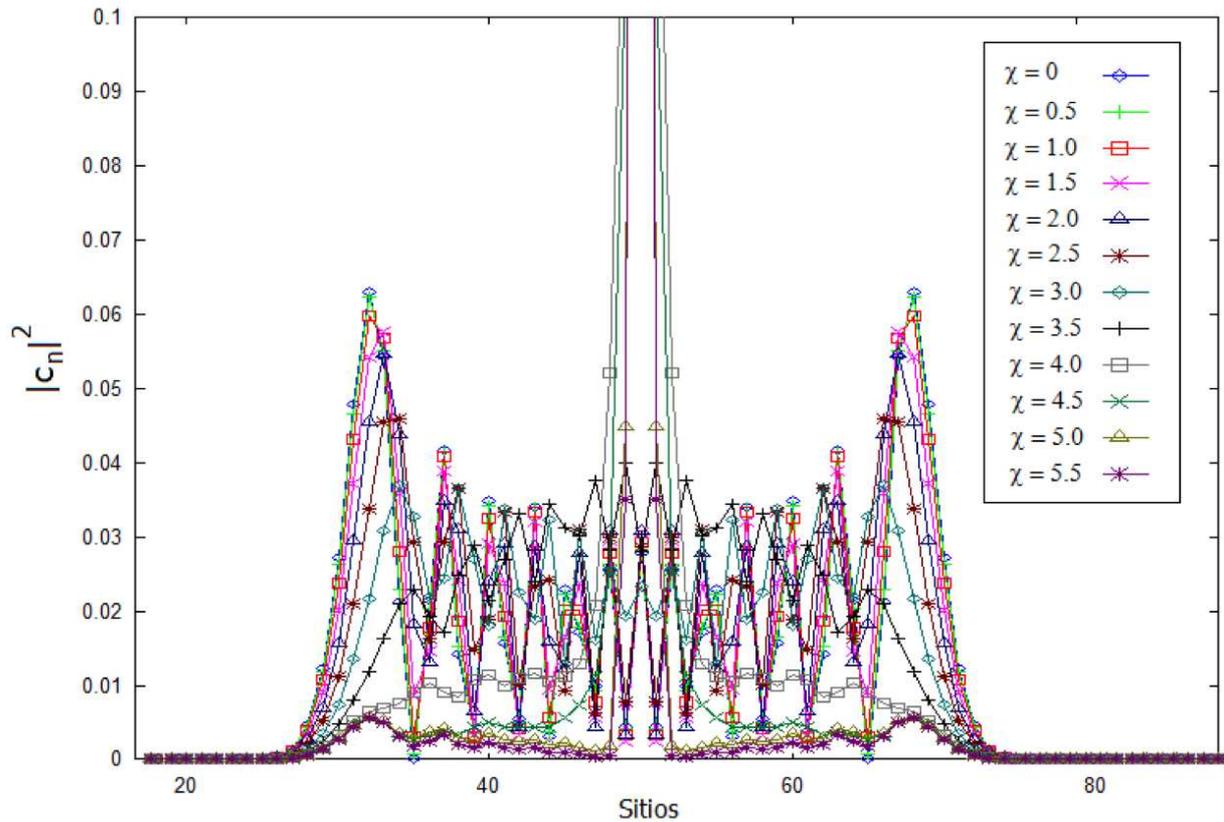


Figura 3. Probabilidad de ocupación por sitio para un tiempo dado, variando el parámetro no lineal χ .

Por último estudiemos el caso en el cual se varía la amplitud de salto entre sitios adyacentes. Los demás parámetros en la simulación serán $\alpha = 2$, $\chi = 3$, 0 (Figura 5). Podemos observar como a medida que la amplitud de salto aumenta, la probabilidad de tener autoatrapamiento disminuye. Si regresamos a la ecuación (1), es fácil notar que si el primer término se hace grande con respecto al segundo, la no linealidad se pierde y por lo tanto no habrá autoatrapamiento. Por ello, si quiere incrementarse la amplitud de salto entre sitios, también deberá crecer el parámetro de no linealidad para asegurar que el fenómeno de autoatrapamiento aparezca. Cuanto más disminuya el valor de V , más probable será observar la localización.

4. Conclusiones

La dinámica del electrón, inicialmente localizado en el sitio de la impureza, revela la existencia de una dependencia exponencial del autoatrapamiento a ciertas no linealidades. Dependiendo de los parámetros inicialmente escogidos, se puede encontrar el valor crítico del

exponente no lineal o de la amplitud de no linealidad que permita evidenciar el fenómeno de autoatrapamiento de un gran porcentaje de la excitación en el sitio inicial de creación. Es posible encontrar valores de parámetros que proporcionen el comportamiento de autoatrapamiento a cualquier tiempo, produciéndose así los solitones.

Agradecimientos:

Este trabajo fue apoyado por la Facultad de Ciencias y el departamento de Física de la Universidad de los Andes.

Referencias

- [1] M. Molina, H. Bahlouli, *Physics Letters A*, **294**, 2002, pp. 87-94.
- [2] M. Molina, *Physical Review B*, **60**, 1999, pp. 2276-2280.

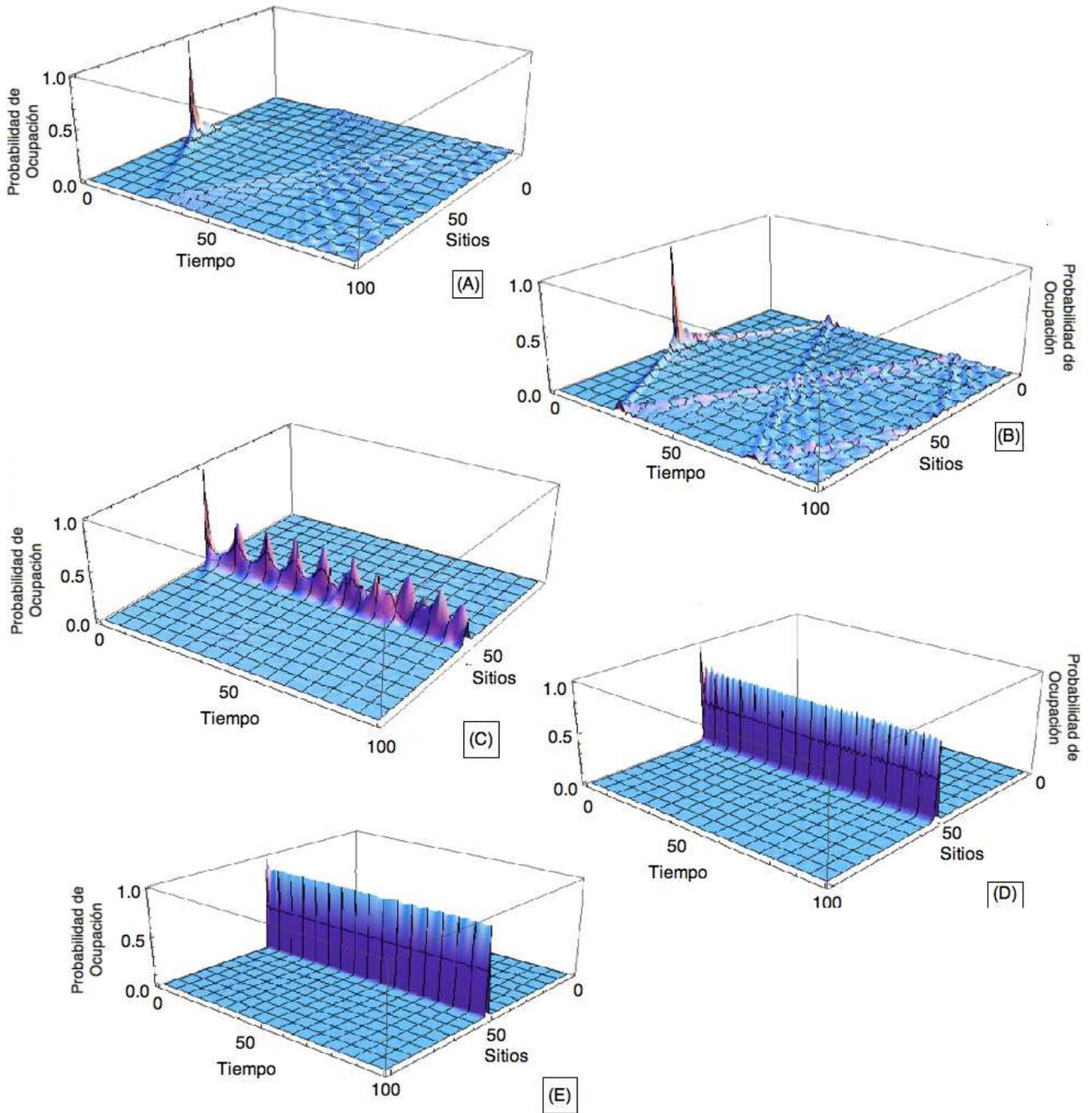


Figura 4. Amplitud de probabilidad de ocupación por sitio y tiempo para distintos valores de χ (parámetro no lineal) (A) $\chi = 3,0$, (B) $\chi = 3,5$, (C) $\chi = 4,0$, (D) $\chi = 5,0$, (E) $\chi = 7,0$

[3] P.G. Kevrekidis, *The discrete non linear equation: Mathematical Analysis, Numerical Computations and Physical Perspectives.*, Berlín. Springer, 2009, pp. 3-53.

[4] M. Molina, *Modern Physics Letters B*, **13**, 1999, pp.837-847.

[5] D. Chen, et al. *Journal Physics of Condensed Matter*, **5**, 1993, pp. 8689-8702.

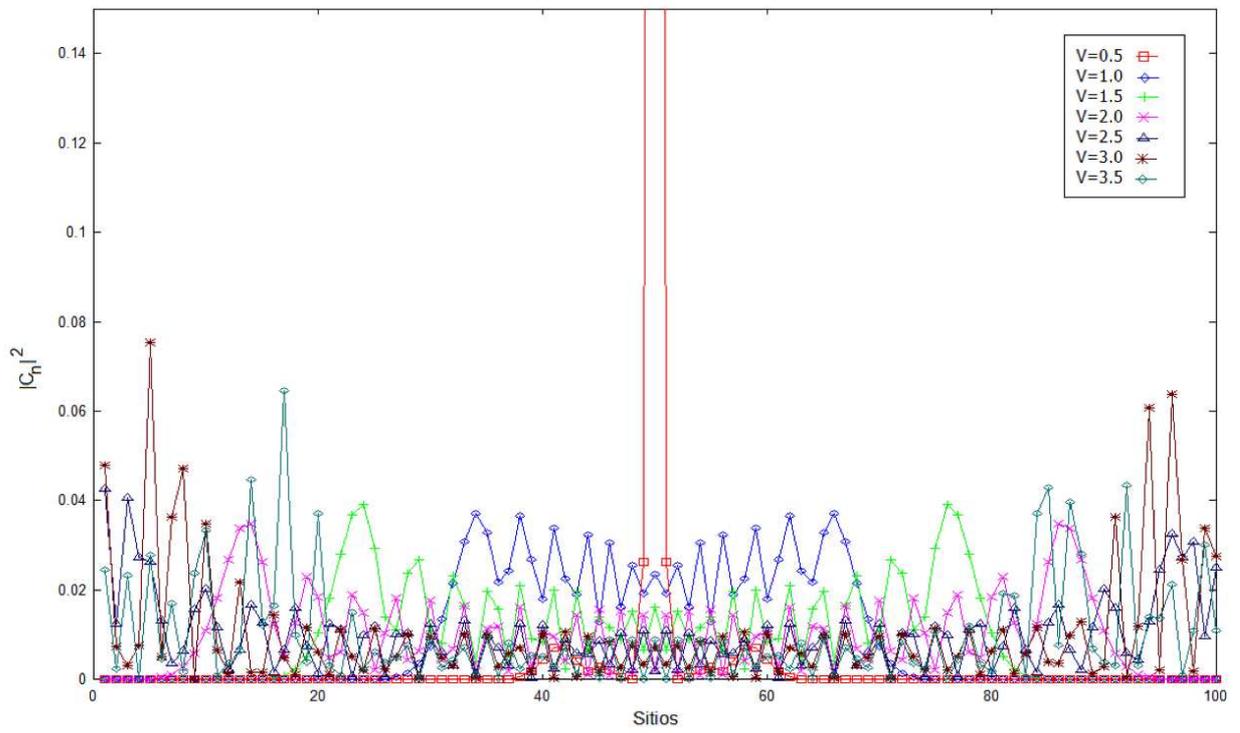


Figura 5. Probabilidad de ocupación por sitio para un tiempo dado, variando la amplitud de salto entre sitios adyacentes V .