

Serie de Chebyshev para un operador Schrödinger 1-D ergódico.

J.C. ABDERRAMÁN¹, M. A. SASTRE¹, E. TORRANO¹

¹ Dpto. de Matemática Aplicada. Facultad Informática. Universidad Politécnica de Madrid.
Campus Montegancedo. Boadilla del Monte. E-28660 Madrid.
E-mails: jc.abderraman@fi.upm.es, masastre@fi.upm.es, emilio@fi.upm.es.

Palabras clave: Operador Schrödinger ergódico, Serie de Chebyshev, Matriz de transferencia.

Resumen

Las autofunciones $\{\Psi_n(\epsilon)\}$ ($n \in Z^+$) de algunos operadores Schrödinger unidimensionales, de interés tanto académico como tecnológico, tienen una representación en forma de ecuación en diferencias lineal de segundo orden conocida como ecuación de Harper. La dificultad del análisis del espectro de estos operadores en el caso ergódico y la producción científica que ha generado puede consultarse en [9]. Con las condiciones iniciales adecuadas, se puede asociar a este tipo de operador una familia $\{\Psi_n(\epsilon)\}$ de autofunciones en forma de polinomios mónicos ortonormales.

En [1] se usan las propiedades algebraicas de los polinomios de Chebyshev de primera clase en la familia ortonormal de autofunciones, para separar variables y obtener para cada $\Psi_n(\epsilon)$ una expansión en serie de $\{T_k(\omega)\}$. Los coeficientes de la serie $\{a_k^{(n)}(\epsilon, \lambda)\}$ se obtienen de forma recurrente y la energía ϵ depende de aquellos. En este trabajo se obtienen las matrices de transferencia entre los vectores de coeficientes y se comenta brevemente las propiedades del espectro y de las soluciones según valores de θ .

1. Introducción.

Los operadores Schrödinger unidimensionales aparecen en los modelos cuánticos aproximados de los espectros de energías de sistemas atómicos. Un tipo especial de operador se representa en forma de ecuación en diferencias lineal de segundo orden, la ecuación de Harper [6].

$$\Psi_{n+1}(\epsilon) = (\epsilon - 2\lambda \cos(n2\pi\theta + \nu))\Psi_n(\epsilon) - \Psi_{n-1}(\epsilon). \quad (1)$$

Ψ_n pertenece a la familia de autofunciones $\{\Psi_n(\epsilon, \lambda, \theta, \nu)\}$, ($n \in Z^+$), del operador de Schrödinger unidimensional y depende además de la energía ϵ , de otros parámetros

relacionados con las características particulares del sistema. A continuación se indican tres modelos físicos donde aparece este tipo de operador:

- En [7] se estudia la ecuación de Schrödinger para el electrón en una red cristalina bidimensional con potencial periódico, sometida a un campo magnético transversal uniforme. Se parte de la ecuación de Schrödinger en derivadas parciales

$$\frac{1}{2m}[-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{x})]^2\Psi(\mathbf{x}) - V_0[\cos(\frac{2\pi x}{a}) + \cos(\frac{2\pi y}{a}) - 2]\Psi(\mathbf{x}) = H\Psi(\mathbf{x}). \quad (2)$$

Para su resolución se usa la aproximación *tight binding*, $V_0 \rightarrow \infty$, y el *gauge* de Landau para obtener un operador Schrödinger unidimensional, caso particular con $\lambda = 1$, de la ecuación (1). El significado físico de los parámetros λ , θ y ν , irrelevante para nuestro estudio, puede consultarse en [7].

- En los modelos de Anderson, de localización de estados electrónicos en sólidos fuertemente desordenados [2].
- En la construcción de dispositivos nanoelectrónicos basados en cuasi cristales con un desorden adecuado. Superredes cuánticas [5], basadas en las teorías y dispositivos desarrollados a partir del modelo de Anderson. Se pueden realizar diferentes ordenaciones cuasi-periódicas de las moléculas que forman el cuasicristal con crecimientos de tipo Fibonacci, Thue-Morse, etc. Se obtienen operadores análogos a la ecuación (1).

La dificultad del análisis del espectro de (1) en el caso ergódico, θ irracional, ha generado abundante literatura y es una línea abierta. Se han obtenido resultados cualitativos importantes usando una combinación de técnicas avanzadas, tanto de Análisis Funcional como de Sistemas Dinámicos [9].

El teorema de Favard [3], para las condiciones iniciales $\Psi_0(\epsilon) = 1$, $\Psi_1(\epsilon) = \epsilon - 2\lambda \cos(\nu)$, asegura la existencia y unicidad de una familia de autofunciones $\{\Psi_n(\epsilon)\}$ ($n \in \mathbb{Z}^+$) que son polinomios mónicos ortonormales respecto de una medida en un soporte real.

2. Expansión de las autofunciones en serie de Chebyshev .

Para cada autofunción de la familia ortonormal $\{\Psi_n(\epsilon)\}$, que cumplen la ecuación (1) con las condiciones iniciales del teorema de Favard, se ensaya una solución en forma de serie de polinomios de Chebyshev de primera clase [1]. Se usan las propiedades del producto de polinomios de Chebyshev $T_n(\omega)$, con $\omega = \cos(2\pi\theta)$. Aquí se ha tomado por simplicidad $\nu = 0$ sin pérdida de generalidad. En el caso θ irracional el espectro no depende de ν . En los casos θ entero o racional la variación de ν produce desplazamientos en las bandas espectrales. La serie ensayada debe ser coherente con las características de la recurrencia (1). Así, el desarrollo en serie para $\{\Psi_n(\epsilon)\}$ puede tener términos no nulos hasta un cierto valor que depende de n y resulta:

$$\Psi_n(\epsilon) = \sum_{k=0}^{[\frac{n(n-1)}{2}]} a_k^{(n)}(\epsilon, \lambda) T_k(\omega). \quad (3)$$

Con $[x]$ la parte entera de x . Sustituyendo (3) en (1) e igualando los coeficientes de los polinomios $T_n(\omega)$ del mismo orden en n , se obtiene de forma inductiva una expresión recurrente para los coeficientes $a_k^{(n)}(\epsilon, \lambda)$ cuya expresión compacta es:

$$a_k^{(n+1)} = -\lambda a_{k-n}^{(n)} \sigma(n-1) + \epsilon a_k^{(n)} \left(1 - \sigma\left(\frac{(n)(n-1)}{2}\right)\right) - \lambda a_{n-k}^{(n)} (1 - \sigma(n)) \\ - \lambda a_{k+n}^{(n)} (1 - \delta_{k,0} - \sigma\left(\frac{(n)(n-3)}{2}\right)) - a_k^{(n-1)} \left(1 - \sigma\left(\frac{(n-1)(n-2)}{2}\right)\right). \quad (4)$$

$\sigma(k)$ es la función escalón de Heaviside y $\delta_{k,0}$ la delta de Kronecker, $0 \leq k \leq \frac{(n+1)(n)}{2}$.

Se separa una de las variables. Por un lado las variables ϵ y λ de las que dependen los coeficientes de la serie. Por otro, la variable θ , de la que dependen los polinomios de Chebyshev $T_n(\omega)$. La ecuación (3) puede verse como el producto escalar estándar entre dos vectores, $\Psi_n(\epsilon, \lambda, \theta) = \vec{T}_{[\frac{n(n-1)}{2}]}^T(\omega) \cdot \vec{A}_{[\frac{n(n-1)}{2}]}(\epsilon, \lambda)$. El vector $\vec{T}_{[\frac{n(n-1)}{2}]}$, con componentes $t_i = \cos(2i\pi\theta)$, $i = 0, 1, \dots, [\frac{n(n-1)}{2}]$, el vector $\vec{A}_{[\frac{n(n-1)}{2}]}$ que se genera a través de la recurrencia (4).

3. Matrices de transferencia para el vector \vec{A}_n de coeficientes de la series.

Para la obtención del vector $\vec{A}_{[\frac{n(n-1)}{2}]}$ asociado a la autofunción Ψ_n con la recurrencia dada por la ecuación (4), están involucrados el vector $\vec{A}_{[\frac{(n-1)(n-2)}{2}]}$ de las autofunción Ψ_{n-1} y el vector $\vec{A}_{[\frac{(n-2)(n-3)}{2}]}$ de Ψ_{n-2} . Se puede usar técnicas de matrices de transferencia para conseguir una aplicación lineal que permita obtener el $\vec{A}_{[\frac{n(n-1)}{2}]}$. Para que la recurrencia vectorial resultante sea de primer orden y homogénea, caso más sencillo, necesitamos trabajar con un vector \vec{A} que contenga tanto al vector $\vec{A}_{[\frac{n(n-1)}{2}]}$ como al $\vec{A}_{[\frac{(n-1)(n-2)}{2}]}$.

$$\vec{A}_n^T = (\vec{A}_{[\frac{n(n-1)}{2}]}^T, \vec{A}_{[\frac{(n-1)(n-2)}{2}]}^T). \quad (5)$$

La recurrencia vectorial, para $n \geq 2$, con el vector inicial $\vec{A}_1 = \begin{pmatrix} \epsilon - 2\lambda \\ 1 \end{pmatrix}$ es:

$$\vec{A}_n = \mathbf{M}_{n,n-1} \vec{A}_{n-1}$$

$$\mathbf{M}_{n,n-1} = \begin{pmatrix} \epsilon \mathbf{I}_{n-1} - \lambda \mathbf{L}_{n-1} & -\lambda \mathbf{I}_{[\frac{(n-1)(n-4)}{2}]+1} & -\mathbf{I}_{[\frac{(n-2)(n-3)}{2}]+1} \\ -\lambda(\mathbf{I}_1 + \mathbf{I}_{n-1}) & \epsilon \mathbf{I}_{[\frac{(n-1)(n-4)}{2}]+1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\lambda(\mathbf{I}_{[\frac{(n-1)(n-4)}{2}]+1}) & \mathbf{0} \\ \mathbf{I}_{[\frac{(n-1)(n-2)}{2}]+1} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (6)$$

La matriz $\mathbf{M}_{n,n-1}$ está escrita por bloques. Además de la matriz identidad de dimensión indicada para cada caso, aparece en el primer bloque una matriz \mathbf{L}_n , que vale 1 en toda la primera subdiagonal inferior de la contradiagonal de orden n . $l_{i,j} = \delta_{n,i+j}$ (delta de Kronecker); $i, j = 0, 1, \dots, n-1$, con $2 \leq n$. Esta matriz va mezclando coeficientes y complica la recurrencia.

Las matrices identidad contribuirán cuando su orden sea mayor que 0. Hay bloques para n pequeño donde algunas matrices no contribuyen y no son tenidos en cuenta. A continuación se indican las tres primeras matrices de transferencia:

$$\mathbf{M}_{2,1} = \left(\begin{array}{c|c} \epsilon & -1 \\ \hline -2\lambda & 0 \\ \hline 1 & 0 \end{array} \right); \mathbf{M}_{3,2} = \left(\begin{array}{cc|c} \epsilon & 0 & -1 \\ 0 & \epsilon - \lambda & 0 \\ \hline -2\lambda & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda & 0 \\ \hline 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{array} \right)$$

$$\mathbf{M}_{4,3} = \left(\begin{array}{ccc|c|cc} \epsilon & 0 & 0 & -\lambda & -1 & 0 \\ 0 & \epsilon & -\lambda & 0 & 0 & -1 \\ 0 & -\lambda & \epsilon & 0 & 0 & 0 \\ \hline -2\lambda & 0 & 0 & \epsilon & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & -\lambda & 0 & 0 \\ \hline 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{array} \right)$$

4. Propiedades de las autofunciones.

De la solución en forma de producto de vectores se observa que toda la dependencia de las soluciones en θ está recogida en el vector $\vec{T}_{\lfloor \frac{n(n-1)}{2} \rfloor}(\cos(2\pi\theta))$. Al variar la naturaleza de θ es de esperar que las características de las soluciones cambien.

A continuación se estudia el caso θ entero, que sirve para fijar la forma del vector de coeficientes y comprobar que la suma de sus componentes generan a los polinomios de Chebyshev de segunda clase. Es conocido que el espectro es continuo en el intervalo o banda de ortogonalidad de los polinomios

Posteriormente, se comentan los casos θ racional e irracional. Ambos casos se pueden ver como perturbaciones al caso entero por lo que se espera que la banda de espectro continuo se degeneren en subbandas y la posible aparición fuera o entre las subbandas de espectro puntual.

4.1. Caso θ entero.

Si $\theta \in \mathbb{Z}$, $\vec{T}_{[\frac{n(n-1)}{2}]}(\cos(2\pi\theta)) = \vec{1}_{[\frac{n(n-1)}{2}]}$. Si ampliamos el vector $\vec{1}_{[\frac{n(n-1)}{2}]}$ con el número de ceros adecuado, exactamente con $\frac{(n-1)(n-2)}{2}$ ceros, su producto escalar con el vector \vec{A}_n reproduce la suma de las primeras $\frac{n(n-1)}{2}$ componentes de \vec{A}_n . Esta suma S_n de componentes es un polinomio mónico de orden n en ϵ y representa a la autofunción Ψ_n . Por tanto, S_n debe cumplir la misma relación de recurrencia (1) que Ψ_n .

$$\begin{aligned} S_{n+1}(\epsilon, \lambda) &= 2\left(\frac{\epsilon}{2} - \lambda\right)S_n(\epsilon, \lambda) - S_{n-1}(\epsilon, \lambda). \\ S_0 &= 1; S_1 = 2\left(\frac{\epsilon}{2} - \lambda\right). \end{aligned} \tag{7}$$

Resultando que $S_n = \Psi_n = U_n(\frac{\epsilon}{2} - \lambda)$, el polinomio de Chebyshev de segunda clase y de orden n . Como el coeficiente de la potencia n -ésima de los $U_n(x)$ es 2^n y aquí $x = \frac{\epsilon}{2} - \lambda$, se comprueba que los polinomios autofunciones son mónicos en ϵ , como se esperaba.

Obsérvese que al ser θ entero la expresión $\cos(2\pi\theta + \nu) = \cos(\nu) = 1$ si $\nu = 0$. Si $\nu \neq 0$ la recurrencia vectorial (6), y la recurrencia (7) siguen siendo válidas si cambiamos en ellas el parámetro λ por $\lambda\cos(\nu)$. La solución para las autofunciones para ν cualquiera queda entonces $\Psi_n = U_n(\frac{\epsilon}{2} - \lambda\cos(\nu))$.

El espectro de energías resulta inmediato del intervalo de ortogonalidad de la familia de polinomios $\{U_n(x)\}_{n=1}^{\infty}$, que tiene los ceros densos en el abierto $(-1, 1)$. Tiene espectro continuo en $\sigma = [-2 + 2\lambda\cos(\nu), 2 + 2\lambda\cos(\nu)]$. La medida de Lebesgue del espectro es $L_\sigma = 4$.

Adicionalmente, se ha obtenido una recurrencia vectorial (6), en la que la suma de componentes del vector a cada paso genera los polinomios de Chebyshev de segunda clase $\{U_n(\frac{x}{2} - b)\}$.

4.2. Caso θ racional.

Si $\theta = \frac{p}{q} \in \mathbb{Q}$, con p y q coprimos, $\vec{T}_{[\frac{n(n-1)}{2}]}(\cos(2\pi\theta))$ es un vector cuyas componentes se repiten con período q y cambian significativamente la solución Ψ_n respecto al caso entero. Para $q = 2$ se puede aplicar el teorema de Blumenthal generalizado y obtenemos dos bandas donde hay espectro continuo, los ceros son densos en dichos intervalos, y la localización de estos no es difícil, véase la figura 1. Para $q \geq 3$, ya no es aplicable Blumenthal y se utiliza en este caso la teoría de Bloch-Floquet, resultando q bandas de anchura variable según valores de los parámetros. Las bandas pueden desplazarse colectivamente al variar ν , aunque nunca hay solapamiento de bandas [9]. La medida de Lebesgue del espectro L_σ depende ahora del valor de los parámetros.

4.3. Caso ergódico (θ irracional).

Cuando $\theta \in \mathbb{R}/\mathbb{Q}$, el valor de $2\lambda\cos(2n\pi\theta + \nu)$ va llenando todo el intervalo $(-2|\lambda|, 2|\lambda|)$ al crecer n , y pasa infinitas veces a una distancia arbitrariamente pequeña de cualquier punto del intervalo. Las componentes de $\vec{T}_{[\frac{n(n-1)}{2}]}(\cos(2\pi\theta))$ van oscilando y su suma está aco-

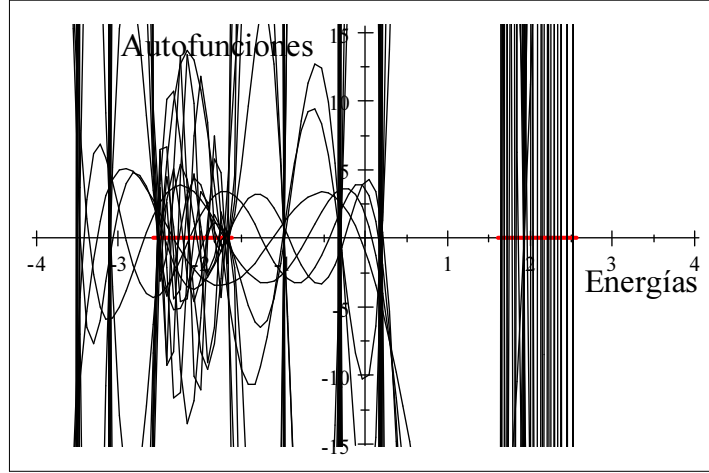


Figura 1: Algunas autofunciones y localización de las bandas de espectro continuo, líneas rojas de trazo grueso, para los parámetros $\theta = \frac{1}{2}$, $\lambda = 1$, $\nu = \frac{\pi}{5}$.

tada.

Se cree que la medida de Lebesgue del espectro es $L_\sigma = 4 - 4|\lambda|$ [9] y solo depende del parámetro λ . Para $\lambda = 1$, caso del ejemplo de [7], la medida de Lebesgue es nula y el espectro es del tipo de Cantor.

5. Conclusiones

Se ha obtenido para las autofunciones de (1), con las condiciones iniciales adecuadas, un desarrollo en serie de polinomios de Chebyshev de primera clase, que sirve para separar alguna de las variables independientes. Esta forma de producto escalar de vectores con variables separadas nos permite un análisis más directo de las soluciones y de las propiedades del espectro de energías del operador de Schrödinger unidimensional.

En el caso racional se obtiene periodicidad en las componentes del vector $\vec{T}_{[\frac{n(n-1)}{2}]}(\cos(2\pi\theta))$. Esto perturba al espectro de manera ordenada, deformando la banda en q subbandas, con q la periodicidad de las componentes del vector dependiente de θ .

En el caso irracional la ergodicidad de las componentes de $\vec{T}_{[\frac{n(n-1)}{2}]}(\cos(2\pi\theta))$ perturba de manera caótica el resultado del producto escalar. Debido a que las soluciones de los polinomios en los puntos de interés son oscilantes, se puede combinar la Teoría de la Oscilación [4] con la teoría espectral de los Polinomios Ortogonales [3] para acotar y localizar la zona donde puede existir espectro continuo. La figura 2 muestra un primer resultado para la acotación y localización en el caso θ racional con periodo 3.

Finalmente, tanto para θ racional como irracional, un estudio cuidadoso sobre la acotación y convergencia en norma de los vectores involucrados en el producto escalar, será de utilidad para el avance cuantitativo en el conocimiento de las propiedades tanto del operador como de la familia de autofunciones.

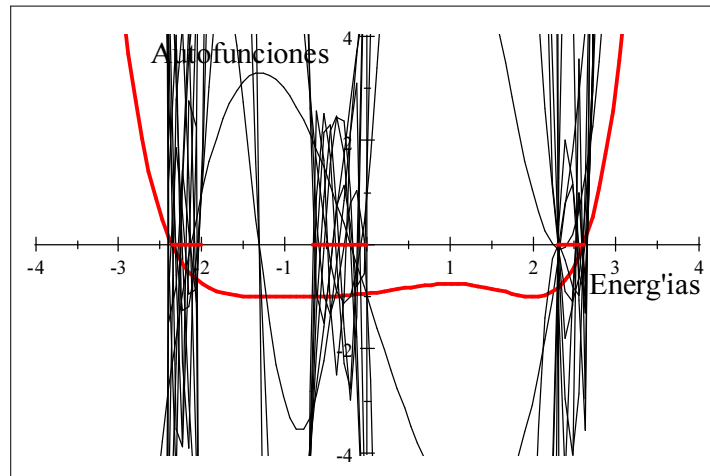


Figura 2: Algunas autofunciones, acotación y localización de las bandas de espectro continuo (usando teoría de oscilación), líneas rojas de trazo grueso, para los parámetros $\theta = \frac{2}{3}$, $\lambda = 1$, $\nu = 0$.

Referencias

- [1] J.C. Abderramán, *Chebyshev expansion for the eigenfunctions of the almost Mathieu operator*, 6th Int. Congress on Industrial and Applied Math. ICIAM07, Zurich, 2007.
- [2] P. W. Anderson, *Absence of Diffusion in Certain Random Lattices* Physical Review (109), 1492, 1958.
- [3] T.S. Chihara, *An Introduction to Orthogonal Polynomials*. Gordon and Breach. New York 1978.
- [4] S. Elaydi, *An Introduction to Difference Equations*. Springer. New York 2005.
- [5] W. Gellerman, M. Kohmoto, B. Sutherland, P.C. Taylor, *Localization of Light Waves in Fibonacci Dielectric Multilayers*. Physical Review Letters.72,5,633–636, 1994.
- [6] P.G. Harper, *Single band motion of conduction electrons in a uniform magnetic field*. Proc. Physical Society London.A68,874–892, 1955.
- [7] D. F. Hofstadter, *Energy levels and waves functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields*. Physical Review B.14,6,455–460, 1976.
- [8] J. Mason, H. Handscomb, *Chebyshev Polynomials*, Chapman and Hall/CRC Press, 2003.
- [9] J. Puig, *Cantor Spectrum for the Almost Mathieu Operator*, Comm. Math. Phys. 244(2):297-309, 2004.