

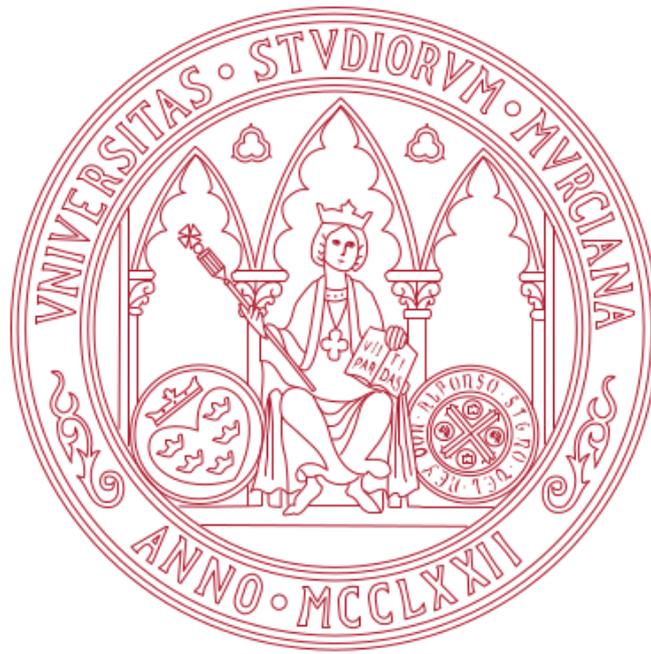


UNIVERSIDAD DE MURCIA

ESCUELA INTERNACIONAL DE DOCTORADO

Dinámica de sistemas desordenados y vórtices

D. Francisco Estellés Duart
2021



DEPARTAMENTO DE FÍSICA

FACULTAD DE QUÍMICA

UNIVERSIDAD DE MURCIA

Dinámica de sistemas desordenados y vórtices

Memoria presentada para optar al grado de doctor en físicas por:

Francisco Estellés Duart

2021

Directores:

Andrés M. Somoza Gimeno

Miguel Ortuño Ortín

Agradecimientos

A Maqui, al meu gat, sempre li parle en valencià. Entenc, aleshores, que les paraules que m'ixen del cor ho fan en aquesta llengua.

Per començar, he d'agrair infinitament els meus tutors de tesi, Andrés i Miguel, que fa quatre anys i mig férem possible que aplegara i m'instal·lara a aquesta ciutat que ara també és meua. Gràcies a ells i a la seua experiència em vaig introduir i vaig aprendre moltíssim del món de les simulacions en matèria condensada. Gràcies a la gent del CIOyN que em va acollir des del primer dia com si fora un més. M'enrecorde dels estudiants de doctorat que vaig tindre la sort de veure com defensaven les seues tesis i que ja han agafat diferents camins, Maria, Jesus i Carlos. En especial gràcies a Lisa per acompanyar-me des del principi i estar ahí per a qualsevol cosa, per la seua culpa ara estic preparant-me una mitja maratón. Gràcies a Elisa estic escrivint aquesta tesi en una plantilla magnífica, a Rafa per donar-me a provar la guaiaba per primera vegada, a Pablo, Javier Abellán, Javi Prior i Jaime per les converses de café i segur que em deixe a gent...

Aquell Paco que va aplegar a Múrcia en 2017 no tenia ni idea de les xarxes d'afectes i suport mutu que es trobaria en aquesta ciutat, però a poc a poc va anar descobrint la bellesa de la ciutat des de dins. Ara ve la part en què em falta lloc per tots els costats, per què no puc enumerar ací a totes les persones de Múrcia que m'han ajudat en aquest camí, i que han fet que ara aquell riberenc de Benifaió siga mig murcià. Infinites gràcies a la meua família d'ac, a la gent de Minas Tirith, que encara que aquestes lletres no signifiquen massa els agraïments es fan al dia i sabeu que ací em tindreu sempre per al que calga. Gràcies a la meua gent més propera, a la meua colla d'ac, a la banda del patio, tots formeu part de mi i vos vull com a

germans. Gràcies també a innumerables companyes de militància, que ha estat la meua segona vida més enllà del treball de la tesi.

Per últim me n'he d'anar a València i donar les gràcies als meus fonaments, a tots qui m'han fet ser qui soc. Primer que tot gràcies a ma mare i a mon pare, que són les meues arrels més profundes i dels que estaré eternament agraït per donar-me la vida que m'han donat, tant de bo tot el món tinguera la meitat de sort que he tingut jo. Porte en el cor sempre també a la meua germana i, no cal dir-ho, a Darío, Lutxo i Lucas. Moltes gràcies a la resta de la meua família de Benifaió i Alginet, m'enrecorde en especial de ma tia Mari, que sé que ens acompanya sempre disfressada de marieta. Gràcies als meus amics del poble, per què eixos no fallen mai, tinc la sort de conservar-los i sentir-los prop tot i que ens separen un grapar de kilòmetres.

I, per què a estos no sé on clavar-los, gràcies a les meues xiquetes de Les Houches, Beñat i Álvaro, ens trobarem a Lisboa.

Este trabajo ha sido posible gracias a la ayuda económica del contrato FPI BES-2016-078542.

Resumen

Las simulaciones dinámicas son herramientas muy útiles para el estudio de multitud de sistemas físicos. Desde la física de la materia condensada se han explotado las técnicas de simulación dinámica para tratar de entender con mayor profundidad la respuesta con el tiempo de materiales de todo tipo. En este trabajo utilizamos este tipo de técnicas para estudiar la dinámica de vórtices impulsados por una corriente externa a través de una red de uniones Josephson bidimensional. Más concretamente, en el campo de los defectos topológicos nos preguntamos cuáles son las velocidades máximas para la estabilidad que pueden alcanzar los vórtices en función de los parámetros del sistema y qué ocurre más allá de estas velocidades máximas, cuando el movimiento de los vórtices deviene inestable. Hemos obtenido perfiles de las velocidades de los vórtices en función de los parámetros de las redes de uniones Josephson y hemos sido capaces de descifrar por qué se dan saltos discretos en la velocidad de los vórtices, que resultan en inestabilidades que generan cascadas de pares vórtice-antivórtice. Además, presentamos un diagrama de fases que caracteriza los diferentes regímenes dinámicos que se pueden encontrar para un vórtice moviéndose a través de una red de uniones Josephson.

En esta tesis también nos proponemos estudiar la dinámica de sistemas de electrones desordenados. Nuestro primer objetivo era centrarnos el caso interactuante. En este sentido hemos abordado la ley de Efros-Shklovskii, que se produce cuando domina la interacción coulombiana, y el régimen activado, que se origina cuando la interacción es aproximadamente logarítmica. Pero, durante el desarrollo de la tesis, nos dimos cuenta de que era conveniente estudiar primero el caso no interactuante y profundizar en la ley de Mott en tres dimensiones. Realizamos las simulaciones más

punteras en tres dimensiones de la conductividad en sistemas desordenados no interactuantes a bajas temperaturas mediante el método de Monte Carlo, obteniendo los valores más fiables de la temperatura característica. Encontramos en la conductividad ligeras diferencias con respecto a la ley de Mott. Hemos acompañado estas simulaciones con medidas microscópicas y de tamaño finito que nos informan sobre la posible estructura que subyace en la generación de conductividad en este tipo de sistemas, así como de simulaciones de la red de resistencias aleatorias que nos permiten llegar a temperaturas más bajas. También aportamos un modelo teórico basado en teoría de percolación que nos permite obtener la ley de Mott con términos de órdenes adicionales en la exponencial. Simulamos la conductividad del caso bidimensional no interactuante, del interactuante en tres dimensiones y del régimen activado en dos dimensiones. Sugerimos los mejores parámetros que se pueden obtener hasta el momento en el campo de las simulaciones en cada una de las diferentes situaciones.

Índice

Agradecimientos	III
Resumen	V
1. Introducción	1
1.1. Dinámica de vórtices en redes de uniones Josephson	3
1.1.1. Superconductividad	3
1.1.2. Efecto Josephson	5
1.1.3. Defectos topológicos	6
1.1.4. Modelo RCSJ y redes de uniones Josephson	8
1.1.5. Dinámica de vórtices	11
1.2. Conducción en sistemas desordenados	13
1.2.1. Saltos de rango variable	14
1.2.2. Teoría de percolación	24
1.2.3. Fractalidad	29
1.2.4. Régimen activado	32
1.2.5. Resultados experimentales: Estado del arte	33
2. Métodos numéricos	49
2.1. Dinámica de vórtices	50
2.1.1. Runge-Kutta de cuarto orden	50
2.1.2. Generación de un vórtice simple	51
2.1.3. Propogación estable	52

2.2. Método de Monte Carlo para vidrios de electrones	54
2.2.1. Método de Monte Carlo dinámico	57
2.3. Detalles de las simulaciones Monte Carlo	58
2.3.1. Obtención de la conductividad	58
2.3.2. Fuentes de error	60
2.3.3. Régimen lineal	62
2.4. Red de resistencias aleatorias	63
2.5. Red de condensadores	67
3. Dinámica de vórtices en redes de uniones Josephson	71
3.1. Estado estacionario	72
3.2. Tipos de inestabilidad	78
3.3. Diagrama de fases	87
4. Conducción en sistemas desordenados	91
4.1. Modelo analítico de conducción de Mott	91
4.2. Simulaciones anteriores	97
4.2.1. Simulaciones recientes	98
4.3. Ley de Mott en sistemas tridimensionales	100
4.3.1. Efecto de tamaño finito	103
4.3.2. Medidas microscópicas	113
4.3.3. Prefactor en la ley de Mott en tres dimensiones	126
4.4. Ley de Mott en sistemas bidimensionales	131
4.5. Ley de Efros-Shklovskii	132
4.5.1. Representación de Zabrodskii	134
4.6. Régimen activado	135
4.7. Discusión de los resultados	137
Conclusiones	145
Bibliografía	149

Índice de figuras

1.1. Defectos topológicos	8
1.2. Red de uniones Josephson bidimensional	10
1.3. Distribuciones aleatorias con y sin correlación	30
2.1. Esquema de la red de uniones Josephson durante el proceso de generación de vórtices	52
2.2. Vórtice en movimiento	54
2.3. Histograma de las conductividades	61
2.4. Conductividad en función del campo eléctrico	63
2.5. Esquema RRN unidimensional	65
2.6. Red de condensadores	68
3.1. Velocidad del vórtice en función de i y ε	73
3.2. Velocidad del vórtice en función de i y η	74
3.3. Perfil de las diferencias de fase verticales	77
3.4. Inestabilidades	79
3.5. Perfil de la diferencia de fases durante una inestabilidad	81
3.6. Evolución dinámica de la inestabilidad A	84
3.7. Evolución dinámica de la inestabilidad C	85
3.8. Evolución dinámica de la inestabilidad B	86
3.9. Diagrama de fases de la dinámica del vórtice en una red de uniones Josephson	89

4.1. Función $F(\omega)$	93
4.2. Función $\partial \log R / \partial \Theta$	95
4.3. Cálculos numéricos de la conductividad en función de la temperatura	96
4.4. Conductividad en función de la temperatura para el caso no interac- tuante	102
4.5. Conductividad en función del tamaño para la simulación de Monte Carlo	106
4.6. Conductividad en función del tamaño para la simulación de la RRN	107
4.7. Varianza de la conductividad en función del tamaño de la muestra .	109
4.8. Ordenada en el origen de los ajustes de la varianza	110
4.9. Varianza de la conductividad en escala lineal	111
4.10. Longitudes críticas	112
4.11. Conductividad por enlace en 3D	114
4.12. Fracción de corriente que atraviesa el nivel de Fermi	116
4.13. Mapa de la distribución de corriente en función de la distancia de salto y de la diferencia de energía de los sitios	118
4.14. Conductividad por tamaños para la simulación de Monte Carlo . . .	119
4.15. Conductividad por tamaños para la simulación de la RRN	122
4.16. Factor de distancias de fractalidad	124
4.17. Distribución de enlaces ordenados	125
4.18. Conductividad en función de la temperatura para el caso bidimensional	132
4.19. Conductividad en función de la temperatura para el caso interactuante	133
4.20. Zabrodsky Plot	135
4.21. Régimen activado	136
4.22. Mapas de nivel para diferentes temperaturas	139

Índice de Tablas

1.1. Parámetros experimentales para semiconductores dopados	37
1.2. Parámetros experimentales para sólidos amorfos	41
1.3. Parámetros experimentales para materiales granulares	42
1.4. Parámetros experimentales para otros materiales	48
4.1. Valores de los diferentes ajustes	104
4.2. Prefactores sugeridos en trabajos teóricos anteriores.	129
4.3. Resultados principales de las simulaciones numéricas	144
4.4. Propuesta para los parámetros de las leyes de conducción	147

Capítulo 1

Introducción

La física computacional constituye una parte fundamental del estudio de sistemas en materia condensada. En el campo de las simulaciones nos encontramos, por un lado, con simulaciones de sistemas en equilibrio, que tratan de determinar propiedades físicas independientes del tiempo. Por otro, tenemos las simulaciones dinámicas, que consisten en el estudio de la evolución temporal de las magnitudes físicas de los sistemas que estudia. Incorporar el tiempo como parámetro físico en las simulaciones es una cuestión que entraña dificultades que se irán viendo a lo largo del presente trabajo.

En particular, nos encontramos en la naturaleza con multitud de sistemas interactuantes que tienen un elevado interés tecnológico y, por su complejidad, su comportamiento dinámico no se entiende completamente. La dinámica de vórtices o defectos topológicos y de sistemas de electrones desordenados es buen ejemplo de ello. En primer lugar, los defectos topológicos son entidades físicas con propiedades dinámicas sumamente interesantes. Cuando los defectos topológicos o vórtices se encuentran en redes de uniones Josephson atravesadas por una corriente eléctrica suficientemente intensa pueden empezar a moverse, dando lugar a escenarios dinámicos muy ricos. Tanto la influencia de los parámetros de la red en la velocidad de los vórtices como la aparición de inestabilidades que generan nuevos pares vórtice-antivórtice son algunos de ellos. En segundo lugar, la conductividad en los sistemas de electrones desordenados es una cuestión que permanece sin ser totalmente expli-

cada a día de hoy.

En este trabajo nos proponemos estudiar mediante simulaciones la dinámica de vórtices en redes de uniones Josephson atravesadas por una corriente externa y la conducción eléctrica sistemas de electrones desordenados interactuantes. Al abordar esta segunda hemos considerado que aun existen deficiencias en cuanto a la comprensión de la conducción en sistemas de electrones desordenados no interactuantes en el caso tridimensional. Por lo tanto, de manera natural hemos considerado estudiar primero a fondo el caso no interactuante, que nos parece previo en complejidad e incluido en el caso interactuante. También simulamos la conductividad del caso interactuante en tres dimensiones, del caso no interactuante en dos dimensiones y de interacción logarítmica en dos dimensiones.

En este capítulo presentamos de manera introductoria todos los elementos teóricos necesarios para entender las simulaciones que vamos a realizar. Lo terminamos con una revisión bibliográfica de los resultados experimentales para la conducción de sistemas de electrones desordenados.

En el capítulo 2 hablamos de los métodos numéricos mediante los que realizamos las simulaciones. Introducimos los detalles técnicos necesarios para simular el movimiento de un vórtice a través de una red de uniones Josephson y para obtener la conductividad de un sistema de electrones desordenado con el método de la red de resistencias aleatorias y de Monte Carlo.

En el capítulo 3 estudiamos los resultados obtenidos en la simulación de las redes de uniones Josephson con detalle. Presentamos los perfiles de temperatura en función de los parámetros de la red, las diferentes inestabilidades que se pueden generar y un diagrama de fases de los diferentes estados dinámicos del sistema.

En el capítulo 4 estudiamos la conductividad en sistemas de electrones desordenados mediante simulaciones. Abordamos en profundidad la ley de Mott tridimensional mediante diferentes enfoques, simulamos la ley de Mott en dos dimensiones y de Efros-Shklovskii en tres, así como el régimen activado.

Por último, enumeramos todas las conclusiones que se desprenden de nuestros estudios.

1.1. Dinámica de vórtices en redes de uniones Josephson

En esta sección presentamos los elementos teóricos necesarios para poder describir la simulación de redes de uniones Josephson bidimensional y los resultados que obtenemos con ellas. Hablamos de la superconductividad en general para poder hacer una introducción básica del efecto Josephson y los defectos topológicos. A continuación abordamos el modelo que utilizaremos para tratar las uniones Josephson de manera simplificada y cómo construimos la red. Cerramos la sección comentando brevemente algunas de las situaciones en las que se trata la dinámica de vórtices.

1.1.1. Superconductividad

Las propiedades electromagnéticas de los superconductores, desde su descubrimiento en 1911 por H. K. Onnes, han despertado el interés de la comunidad científica. Los superconductores son capaces de conducir electricidad con resistencia nula o de repeler las líneas de campo magnético y tienen aplicaciones tecnológicas de un elevado interés. Unas décadas después del descubrimiento de los superconductores y por vías independientes nos encontramos con dos teorías que fueron capaces de explicar sus principales propiedades. Las dos teorías que explican la superconductividad son la teoría Ginzburg-Landau (GL), que lo hace mediante consideraciones macroscópicas, y la teoría BCS (Bardeen, Cooper y Schrieffer) que lo hace a escala microscópica.

Dos de las principales propiedades de los superconductores son la conductividad perfecta, es decir, la capacidad de transportar corriente con resistencia nula, y el diamagnetismo perfecto, la capacidad de repeler por completo las líneas de campo originadas por un campo externo. Ginzburg y Landau proponen una función de onda compleja ψ para describir el superconductor, y que desempeña el papel del parámetro de orden en la teoría general de Landau para transiciones de fase de se-

gundo orden. El tratamiento de la teoría GL permite estudiar variaciones espaciales en el parámetro de orden ψ , que resulta de especial interés para caracterizar los defectos topológicos que estudiaremos a continuación. Después de la publicación de la teoría GL, BCS desarrollan su teoría microscópica de la superconductividad y consiguen explicar la existencia de una temperatura crítica T_c y un *gap* de energías Δ , encontradas mediante medidas calorimétricas y de absorción electromagnética. La teoría microscópica se basa en la existencia de pares de electrones ligados, llamados pares de Cooper, debido a las interacciones electrón-fonón. Con la teoría BCS se explica el *gap* superconductor que está directamente relacionado con la temperatura crítica T_c a partir de la cual podemos encontrar comportamiento superconductor en un material dado. La teoría BCS fue capaz también de explicar de forma robusta el efecto Meissner o diamagnetismo perfecto. Esta teoría dota de soporte teórico microscópico al fenómeno de la superconductividad y resulta de una importancia crucial en el campo de la física del estado sólido.

En esencia, las teorías GL y BCS se conjugan teniendo en cuenta la existencia de una función de onda de un condensado de pares de Cooper y que da sentido físico microscópico al parámetro de orden introducido en la teoría Ginzburg-Landau. En el límite macroscópico podemos tomar el módulo, $|\psi|^2$, que es proporcional al número de portadores, y la fase de la función de onda ϕ como variables semiclásicas. Hay que destacar que la función de onda ψ tiene que ser univaluada, por lo que debe ser equivalente sumarle cualquier múltiplo de 2π a la fase. El grado de libertad que aporta la fase implica el fenómeno de la cuantización del flujo para un camino cerrado. En el punto de unión del camino cerrado ambas fases de las funciones de onda de los superconductores deberán coincidir excepto por un posible múltiplo de 2π . Por lo tanto, el flujo a través de un camino cerrado en ausencia de un campo magnético externo tendrá que estar cuantizado

$$\Phi \propto \oint \nabla\varphi d\mathbf{s} = 2\pi n. \quad (1.1)$$

La cuantización del flujo magnético implica la existencia de una porción mínima de flujo llamado cuanto de flujo $\Phi_0 = hc/2e$, introducido originalmente por F. London.

1.1.2. Efecto Josephson

En 1973, el premio Nobel de física fue concedido a B.D. Josephson por el descubrimiento teórico del efecto que lleva su nombre. El efecto Josephson consiste en la aparición de corriente eléctrica en la interfase de dos superconductores con resistencia nula, provocada por una diferencia de fase entre ambos (supercorriente). Este efecto se da, en general, cuando existe una “unión débil” entre dos elementos superconductores cualesquiera. Una unión débil se caracteriza por la separación de dos islas superconductoras, que puede darse por la presencia de un material aislante o un superconductor más débil en la interfase, o por un estrechamiento entre las dos islas. Los pares de Cooper pueden atravesar esta barrera gracias al efecto túnel, generando una supercorriente. La intensidad de corriente producida por el efecto Josephson puede derivarse a partir de la ecuación unidimensional de Ginzburg-Landau y viene descrita por la siguiente ecuación

$$I = I_C \sin \Delta\varphi, \quad (1.2)$$

donde I_C es la corriente crítica del enlace, que depende de la masa de los portadores y las dimensiones de la unión, y $\Delta\varphi$ es la diferencia de fases $\varphi_2 - \varphi_1$ entre ambos elementos superconductores. La caída de potencial en la unión viene dada por

$$\frac{d\Delta\varphi}{dt} = \frac{2e}{\hbar} V. \quad (1.3)$$

Aunque estamos trabajando con magnitudes puramente cuánticas, como la diferencia de fase, a través del efecto Josephson obtenemos magnitudes macroscópicas, que podemos medir en un laboratorio, como una corriente y un potencial eléctricos. También existe la vertiente del efecto Josephson para corriente alterna, aunque no la presentamos por no formar parte del objetivo del presente trabajo.

El efecto Josephson ha jugado un gran papel en cuanto a la aplicabilidad de los superconductores en el campo tecnológico. Encontramos uniones Josephson en el desarrollo de circuitos superconductores, que forman un paradigma para la información cuántica (Devoret y Schoelkopf, 2013), en la tecnología de líneas de transmisión

(Pedersen y Ustinov, 1995), en la creación de estándares de voltaje (Kautz, 1996), en la detección de partículas (Booth y Goldie, 1996), entre otras aplicaciones.

1.1.3. Defectos topológicos

En el caso de los sistemas ordenados es posible definir un parámetro de orden $f(\mathbf{r})$ que caracteriza una cierta fase. Si el sistema es uniforme f es constante, pero en los sistemas no uniformes el parámetro de orden puede depender de la posición. De la misma forma que en la teoría Ginzburg-Landau, podemos asumir que las variaciones de este parámetro a lo largo del espacio van a ser suaves. Aun así, es posible encontrar regiones en las que se producen saltos discretos en el valor del parámetro de orden. Las regiones donde el parámetro de orden cambia de forma abrupta son lo que llamamos *defectos topológicos* (Mermin, 1979). Se habla de defectos topológicos en cristales líquidos, en la caracterización de defectos en física del estado sólido, en dinámica de fluidos, entre muchos otros campos.

Los defectos topológicos son fenómenos de gran interés en sistemas de materia condensada. En el caso de la superconductividad, se empezaron a encontrar indicios de la existencia de estos defectos en los superconductores del tipo II descubiertos por Abrikosov (1957). En este trabajo nos centraremos en los defectos topológicos magnéticos, como los vórtices de Abrikosov, a través de los cuales el campo magnético atraviesa el superconductor mediante paquetes de flujo cuantizados. Concretamente, cada vórtice es atravesado por un flujo múltiplo de $\Phi_0 = hc/2e$. Desde el punto de vista de la teoría Ginzburg-Landau, donde el parámetro de orden del superconductor viene dado por la función de onda de Ginzburg-Landau, los vórtices se caracterizan por tener circulación de la fase $2\pi n$ para un camino cerrado que incluya el defecto topológico (ecuación (1.1)). Se define el factor n de la circulación como la carga topológica del vórtice y puede tomar cualquier valor entero. Si consideramos un superconductor en volumen la función de onda de Ginzburg-Landau dependerá de las coordenadas espaciales de forma continua, y la podemos separar en su módulo

y fase de la siguiente manera

$$\Psi(x, y) = |\Psi(x, y)|e^{i\phi(x, y)}, \quad (1.4)$$

para el caso bidimensional.

En la figura 1.1 podemos ver el esquema de diferentes estructuras de vórtices con distintos valores de su carga topológica, donde los vectores representan la fase de la función de onda de Ginzburg-Landau con su ángulo respecto al eje x . Estamos representando $\phi(x, y)$ para $|\Psi|$ constante en el espacio. En la columna de la izquierda hemos dibujado vórtices en los que la fase suma 2π al realizar una circulación completa alrededor del defecto, mientras que en la de la derecha este valor suma 4π . En el caso de las redes de uniones superconductoras estas diferencias de fase se encuentran localizadas en el espacio, pero podemos establecer analogías con el caso continuo, que viene a ser un límite del discreto.

La presencia de vórtices en materiales con propiedades topológicas puede determinar las propiedades físicas del material en cuestión. En algunos casos, las fluctuaciones térmicas pueden provocar la proliferación de vórtices en los sistemas superconductores, rompiendo las características que los hacen interesantes a nivel tecnológico. Un ejemplo de este fenómeno es la famosa transición de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT), por cuyo descubrimiento fueron galardonados sus autores con el premio Nobel en 2016 (Thouless et al., 2016). La transición BKT se traduce en un aumento de la resistencia eléctrica y en la pérdida de coherencia cuántica al romperse el orden en el sistema. Dada la gran aplicabilidad tecnológica de los materiales superconductores en general y de las uniones Josephson en particular nos encontramos ante fenómenos físicos que cuentan con una importante atención investigadora en la actualidad.

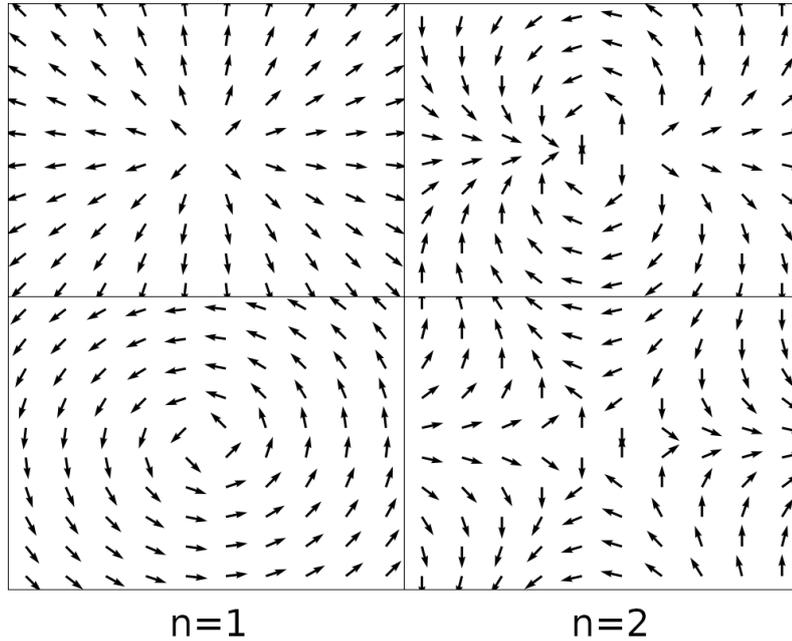


Figura 1.1: Esquema de cuatro defectos topológicos para diferentes valores de la carga topológica, $n = 1$ en la columna izquierda y $n = 2$ en la derecha. En esta figura se representa la fase de la función de onda de Ginzburg-Landau como el ángulo de los vectores respecto al eje x .

1.1.4. Modelo RCSJ y redes de uniones Josephson

Para describir la dinámica de las uniones Josephson contamos con una aproximación que consiste en reducir el efecto completo de la unión a la combinación en paralelo de una unión Josephson ideal, una resistencia y un condensador (José y Torres, 2003). A esta aproximación la llamamos modelo RCSJ, siglas en inglés de *resistively and capacitively shunted junction*. Entonces, la corriente eléctrica que atraviesa una unión vendrá dada por la expresión

$$I = I_{C_0} \sin \varphi + V/R + CdV/dt, \quad (1.5)$$

donde I_{C_0} es la resistencia crítica de la unión ideal, φ su diferencia de fases, V la caída de potencial a través del sistema y R y C los valores de la resistencia y la capacidad introducidas en el modelo, respectivamente. Aplicando la segunda

relación de Josephson (ecuación (1.3)), obtenemos la siguiente ecuación

$$\ddot{\varphi} + \eta\dot{\varphi} + \sin \varphi = i \quad (1.6)$$

donde $i = I/I_{C_0}$ es la intensidad de corriente normalizada al valor de la resistencia crítica, $\eta = \omega_p RC$ es la amortiguación y hemos derivado respecto de $\tau = \omega_p t$. También hemos definido ω_p como

$$\omega_p = \sqrt{\frac{2eI_{C_0}}{\hbar C}}. \quad (1.7)$$

El modelo RCSJ es útil para describir la dinámica de redes de uniones Josephson bajo determinadas condiciones. Las uniones no pueden ser demasiado grandes, en ese caso existen dificultades para definir la diferencia de fase ya que en ese caso pueden depender de la posición a lo largo de la unión. Por lo tanto, el tamaño de la unión deberá ser mucho más pequeño que el parámetro de red. Las ecuaciones del modelo RCSJ, en esencia, son clásicas, por lo que también estamos asumiendo que las incertidumbres para las variables conjugadas involucradas son pequeñas. Pero, por otro lado, este modelo también presenta ventajas. Las redes de uniones Josephson son relativamente fáciles de construir en el laboratorio, así que los resultados teóricos y de simulaciones pueden ser contrastados. Además, la naturaleza discreta de este tipo de sistemas los hace muy aptos para su simulación.

Se puede generalizar la ecuación (1.5) para el caso de una red de uniones Josephson cuadrada bidimensional como la que dibujamos en la figura 1.2. En caso de una red de uniones hay que tener en cuenta el flujo de campo magnético que atraviesa la red y considerar la contribución a la corriente de cada unión. Teniendo en cuenta las corrientes que atraviesan las uniones y el flujo magnético que atraviesa las plaquetas, podemos escribir el sistema de ecuaciones (José y Torres, 2003) que caracteriza la corriente eléctrica de cada enlace

$$\begin{aligned} \ddot{\alpha}_{ij} + \eta\dot{\alpha}_{ij} + \sin \alpha_{ij} &= \varepsilon(\xi_{ij} - \xi_{ij-1}), \\ \ddot{\beta}_{ij} + \eta\dot{\beta}_{ij} + \sin \beta_{ij} &= \varepsilon(\xi_{i-1j} - \xi_{ij}) + \gamma, \\ \xi_{ij} &= \beta_{ij} + \alpha_{ij+1} - \beta_{i+1j} - \alpha_{ij}, \end{aligned} \quad (1.8)$$

donde las α son las diferencias de fase de los enlaces horizontales y las β las de los verticales; ε es el parámetro que cuantifica el acoplamiento inductivo entre uniones

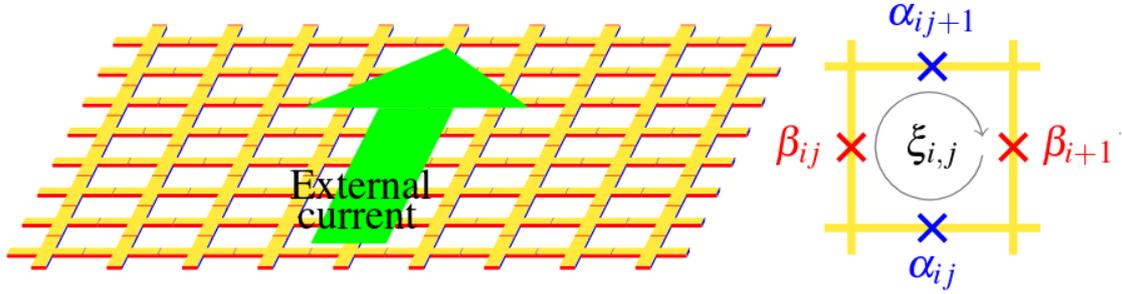


Figura 1.2: A la izquierda se presenta un dibujo de una red de uniones Josephson bidimensional como la que simulamos en el presente trabajo. Los elementos amarillos representan las islas superconductoras que componen la red. La flecha verde representa la dirección en la que se ha simulado la corriente externa. A la derecha tenemos un esquema de una plaqueta del sistema, rodeada por cuatro uniones Josephson. En azul hemos destacado las diferencias de fase de las uniones horizontales y en rojo las de las verticales. La circulación $\xi_{i,j}$ es la suma de las diferencias de fase en la dirección de las agujas del reloj.

vecinas, definido como $\epsilon = sI_d/\ell I_C$, donde I_d es la corriente de desapareamiento, ℓ la longitud de coherencia y s es el área de la zona que encierran cuatro uniones vecinas; y γ es la corriente externa normalizada a la corriente crítica de las uniones. Nótese que las ecuaciones (1.8) sirven para una red cuadrada homogénea de uniones Josephson donde introducimos una corriente externa en el eje vertical (γ), adimensional, ya que se encuentra normalizada a la corriente crítica de las uniones que conforman la red.

Es posible simular el comportamiento magnético y eléctrico mediante la resolución del sistema de $2N$ ecuaciones diferenciales de segundo orden que presentamos en la ecuación (1.8), donde N es el número de islas superconductoras con las que cuenta la red. Otra cuestión importante para la simulación de redes de uniones Josephson son las condiciones de contorno que debemos imponer. El contorno puede generar la entrada de defectos topológicos no deseados en el sistema y jugar un

papel crítico. En particular vamos a utilizar condiciones de contorno periódicas en una dirección, la transversal al movimiento de los vórtices, y abiertas en la otra, la paralela al movimiento de los vórtices.

El movimiento de los vórtices a través de redes de uniones Josephson se puede modelizar también entendiéndolos como cuasipartículas. Entonces se tiene en cuenta que se desplazan a través de un potencial similar a una caja de huevos (*egg crate potential*). El centro del vórtice ve “valles” y “cimas” en los huecos y en los centros de los elementos superconductores respectivamente. Entender el vórtice como una cuasipartícula que se mueve sobre un potencial periódico puede ser útil para interpretar algunos de los fenómenos que aparecen en el estudio de la dinámica de vórtices.

1.1.5. Dinámica de vórtices

Como se ha comentado anteriormente, los defectos topológicos pueden determinar las propiedades físicas de materiales superconductores y su proliferación puede provocar la ruptura de la superconductividad y la coherencia. Entender el comportamiento de los vórtices resulta crucial para mantener bajo control los dispositivos que se fundamenten en materiales superconductores. Encontramos en la literatura multitud de trabajos que tratan la dinámica de vórtices desde diferentes perspectivas. Las primeras simulaciones de vórtices en redes bidimensionales de uniones Josephson se dan en Nakajima y Sawada (1981). Gracias a las simulaciones se verifican numéricamente conceptos ya introducidos por algunos modelos, como la energía de anclado (*pinning energy*) de los vórtices en la red.

Los vórtices Josephson no solo se estudian en redes de uniones discretas, podemos encontrarlos en uniones continuas unidimensionales o bidimensionales en las cuales aparecen fenómenos característicos como la radiación Cherenkov asociada a su movimiento (Mints y Snapiro, 1995). Para el tratamiento de los vórtices Josephson, como se ha comentado en el apartado anterior, podemos hacer servir dos formalismos diferentes. Por un lado, se pueden describir mediante las diferencias de fase dependientes del tiempo, que es el formalismo explícito que utilizamos en

nuestra simulación y del que hemos introducido las ecuaciones dinámicas en la sección anterior (Ciria y Giovannella, 1998). Y, por otro, podemos ver los vórtices como cuasipartículas que se mueven a través de un medio viscoso. A efectos prácticos utilizaremos esta segunda perspectiva para interpretar los resultados de las simulaciones, mientras que todos los cálculos están realizados mediante la primera perspectiva.

De los experimentos que se centran en el estudio del movimiento de vórtices en redes de uniones Josephson destacamos algunos puntos clave ampliamente estudiados. En líneas generales, el movimiento de los vórtices empujados por una corriente eléctrica externa se puede describir mediante tres etapas. Para corrientes suficientemente bajas, el vórtice se encuentra anclado en la red. Cuando la corriente rebasa un cierto umbral (i_d , *deppining current*) el vórtice empieza a moverse a través de la red de forma viscosa, empujado por la corriente externa. En esta etapa la velocidad del vórtice aumenta con la intensidad de corriente. Existe un cierto valor de corriente i_s , que depende de las características de la red, para el cual el vórtice deja de ser estable. La corriente de desanclaje, el movimiento a velocidad constante y la corriente de inestabilidad pueden verse modificadas por las características de la red, que en nuestro caso vienen determinadas por los parámetros η y ϵ . En la literatura se distinguen dos regímenes límite en los que el movimiento de los vórtices presenta comportamientos diferentes, el régimen sobre-amortiguado ($\eta > \epsilon$) y el régimen infra-amortiguado ($\eta < \epsilon$). En el régimen infra-amortiguado podemos estudiar los vórtices sencillamente como partículas que presentan movimiento balístico, es decir, mantienen su velocidad constante sin presencia de corriente externa. En el caso sobre-amortiguado (Ciria y Giovannella, 1997) se aprecian efectos como el de generación de cascadas de vórtices inducidos por los límites de la muestra.

El movimiento de los vórtices a través de las redes de uniones Josephson presenta también efectos no locales. A partir de una cierta velocidad, concretamente la velocidad de Swihart, el movimiento de los vórtices origina ondas Cherenkov que se propagan a lo largo de toda la red. La velocidad de Swihart es la velocidad de propagación de las ondas electromagnéticas a través de la red (Malishevskii et al.,

2006, 2009; Alfimov et al., 2014).

En el presente trabajo planteamos como problema el movimiento de un vórtice aislado a través de una red de uniones Josephson, para diferentes valores de los parámetros de la red. Trataremos también de minimizar el efecto de los bordes para encontrar los efectos que aparecen como producto del movimiento de un vórtice arrastrado por una corriente externa.

1.2. Conducción en sistemas desordenados

Desde hace décadas, el campo de las simulaciones en física ha sido clave para entender la estructura de multitud de materiales y sus propiedades. En particular, el estudio y uso de materiales semiconductores revolucionó el mundo de las tecnologías de la información, pero a día de hoy seguimos sin comprenderlos por completo. La característica que les da nombre a los semiconductores es la capacidad para comportarse como conductor o como aislante en función de ciertos parámetros. De aquí destacamos que en los semiconductores podemos encontrar diferentes regímenes de conducción, es decir, los electrones se pueden comportar de diferentes formas en su interior. Entre los parámetros que determinan los regímenes de conducción en un semiconductor nos encontramos con la temperatura, la estructura, la dimensionalidad, la concentración de impurezas o el campo electromagnético. Las distintas variaciones de cada una de estas pueden repercutir de forma crucial en el comportamiento electrónico.

De prácticamente todas las posibles combinaciones que existen podemos encontrar referencias en la literatura, siendo el de los semiconductores y sus posibilidades un campo de investigación tremendamente prolífico. En este caso nos centramos en la ventana de los sistemas desordenados en el régimen de bajas temperaturas. Las fuentes de desorden en un material semiconductor pueden ser diversas (defectos estructurales, impurezas) y se manifiestan como niveles de energía localizados espacialmente y con energías que dependerán de las características del defecto. La movilidad de los electrones puede encontrarse determinada por los saltos que es-

tos pueden realizar entre los diferentes estados localizados, entonces hablamos de conducción por *hopping*. Este tipo de sistemas, bajo determinadas condiciones pueden presentar características típicamente asociadas a los vidrios, como la relajación lenta, hecho que ha llevado a algunos autores a denominarlos vidrios de Coulomb.

El objetivo de esta sección es introducir la teoría acerca de la conductividad de los vidrios de Coulomb a bajas temperaturas, en los regímenes tanto de electrones interactuantes como no interactuantes en sistemas tridimensionales. Para este propósito presentamos la teoría relacionada con la conducción por saltos de rango variable, es decir, las leyes de Mott para el caso no interactuante y la de Efros-Shklovskii para el caso interactuante. De ambas se obtiene la tendencia de la conductividad a baja temperatura para el caso interactuante y no interactuante respectivamente, pero se encuentran aún en debate aspectos finos, aunque no menos cruciales, como posibles términos adicionales en los exponentes o la forma del prefactor, intensamente discutida en la bibliografía y que trataremos a lo largo del presente trabajo. También es necesario hablar de teoría de percolación, que es la herramienta teórica que nos permite abordar el estudio de la conductividad en este tipo de sistemas. A continuación trataremos algunos conceptos sobre sistemas fractales que podrán ser útiles para el estudio en detalle las distribuciones de las transiciones de electrones que se dan en la muestra. Por último presentamos una revisión bibliográfica del estado del arte en el plano experimental

1.2.1. Saltos de rango variable

A mediados del siglo pasado, el interés por entender el funcionamiento de sistemas desordenados encontró en los semiconductores inorgánicos dopados un buen ejemplo. Los semiconductores dopados o con impurezas presentan una variedad de regímenes de conducción que indujeron a pensar en los detalles de su estructura electrónica para explicarlos. Como sabemos, las impurezas modifican la estructura de bandas aportando niveles localizados de donores o aceptores de portadores. Estos nuevos niveles tienen un efecto importante sobre las propiedades de conducción, introduciendo nuevos regímenes cuando las temperaturas de las muestras son sufi-

cientemente bajas. Así, nos encontramos con tres temperaturas a partir de las cuales tenemos propiedades de conducción completamente diferentes (Shklovskii y Efros, 1984). A temperaturas altas se da la conducción *intrínseca* del semiconductor, con los portadores excitados térmicamente por encima del *gap*, donde los niveles localizados modifican el número de portadores y actúan como centros de dispersión. A medida que la temperatura baja por debajo de la energía del *gap* semiconductor la concentración de portadores también baja, dando lugar a la conductividad *extrínseca*, gobernada por las impurezas. En este punto, a temperaturas suficientemente bajas, llegamos a la situación en que la conductividad se encuentra determinada por el salto de los electrones entre diferentes niveles de impurezas.

Nos referiremos a este último régimen como conducción por *hopping* y se encuentra determinado por el salto de portadores de carga entre diferentes estados de energía localizados. Las interacciones entre estos electrones y los fonones del sistema determinarán la probabilidad de que los diferentes saltos ocurran. Para calcular esta probabilidad necesitamos tener en cuenta todos los escenarios posibles: que el electrón descienda a un estado de energía menor emitiendo un fonón, y puede hacerlo de forma espontánea o estimulada, o que ascienda a un estado de energía mayor absorbiendo un fonón. Las expresiones de la probabilidad de transición entre dos estados con diferencia de energía ΔE vienen dadas por

$$\Gamma \propto \begin{cases} \frac{1}{e^{\Delta E/kT} - 1} & \Delta E > 0 \\ 1 + \frac{1}{e^{\Delta E/kT} - 1} & \Delta E < 0. \end{cases}$$

En el caso en que $\Delta E > kT$, las distribuciones de Bose-Einstein se pueden aproximar por el factor de Boltzmann. En cuanto a la parte espacial, en el caso de los sistemas que estamos tratando, la presencia de desorden provoca una localización de las funciones de onda de los electrones. Mientras que en los casos en los que tenemos una red cristalina podemos hablar de los estados extendidos de los electrones, el desorden hace que las densidades de probabilidad de las funciones de onda de los electrones dependan de la posición y se concentren en ciertos puntos. De hecho, de la teoría obtenemos que la probabilidad de encontrar un electrón en una posición dada decae exponencialmente respecto del centro de localización de la siguiente

forma

$$|\Psi(\mathbf{r})|^2 \propto \exp\left(-\frac{2|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}{\xi}\right). \quad (1.9)$$

La separación espacial entre los sitios involucrados en la transición también aporta un factor a la probabilidad que dependerá de la longitud de localización del sistema.

Para construir la probabilidad de transición de un electrón de un sitio a otro contamos con tres elementos: el factor de Boltzmann $\exp(-\Delta E/kT)$, un factor τ_0^{-1} que depende del espectro de fonones y el factor correspondiente al solapamiento de las funciones de onda de los electrones en las impurezas (Mott y Davis, 1979). Entonces, la tasa de intercambio de electrones entre un sitio i y otro j viene dada por

$$\Gamma_{ij} = \tau_0^{-1} \exp(-2r_{ij}/\xi) \min(\exp[-\Delta E_{ij}/kT], 1), \quad (1.10)$$

propuesta por Abrahams y Miller en 1960 (Miller y Abrahams, 1960). Donde r_{ij} es la distancia entre sitios, ξ la longitud de localización y ΔE_{ij} la diferencia entre las energías de los electrones localizados en los sitios i y j . Si la localización de los electrones es muy grande nos encontramos solo con saltos a primeros vecinos, es decir, estaremos en un escenario de *hopping* a primeros vecinos. Pero en general, a medida que bajamos la temperatura esperamos que la distancia de salto aumente, por lo que nos encontramos en el régimen *variable-range hopping* (VRH). Este efecto fue propuesto por Mott (Mott, 1968), que también propone la dependencia en temperatura de la conductividad bajo estas condiciones. El desarrollo de esta propuesta fue modificado para dotarlo de más rigor matemático por Efros y Shklovskii (Shklovskii y Efros, 1975), que utilizan los conceptos de teoría de percolación para estudiar el problema. La teoría de percolación sigue siendo, a día de hoy, una herramienta teórica útil para tratar de entender la conductividad en sistemas desordenados y más adelante introduciremos sus ideas clave.

A medida que la temperatura del sistema baja, la interacción entre electrones empieza a ser relevante, por lo que deberá incluirse esta interacción en la diferencia de energías (ΔE_{ij}) de alguna manera. (Pollak, 1970) menciona por primera vez la existencia de un valle en la densidad de estados en el nivel de Fermi ocasionado por la presencia de interacción entre portadores. En este sentido enfocan su trabajo

Efros y Shklovskii (Efros y Shklovskii, 1975), que introducen la forma que ha de tener esta densidad de estados alrededor del nivel de Fermi, el denominado *gap* de Coulomb, y dan una expresión para la dependencia de la conductividad con la temperatura para el caso interactuante.

El contraste entre la ausencia de interacción y su presencia se manifiesta en dos tendencias diferentes para la conductividad en función de la temperatura: sin interacción se comporta como la ley de Mott y con interacción como la ley de Efros-Shklovskii.

Cabe remarcar que la ecuación (1.10) solo tiene en cuenta el salto de un electrón en la muestra, es decir, presupone que los saltos electrónicos se suceden de uno en uno, que las frecuencia de las transiciones simultáneas son despreciables y que son independientes entre ellos. Esta cuestión ha suscitado mucho debate que se puede encontrar en trabajos de impacto (Tsigankov y Efros, 2002; Díaz-Sánchez et al., 1999; Pollak, 1981; Gosar, 1983). En cualquier caso, siempre es posible encontrar rangos de los parámetros que permitan despreciar estos efectos. Bajo estas suposiciones se propone el estudio de los dos regímenes previamente citados.

En los últimos años, aparece también un importante aumento del interés científico en los semiconductores orgánicos, así como de las estructuras nanométricas, sistemas en los que podemos encontrar conducción por VRH (Groves, 2017; Marinov et al., 2020; Kaiser y Skákalováb, 2011). En el caso de los semiconductores orgánicos, existe la necesidad de introducir densidades de estado gaussianas como propone Bäessler (1993), que a temperaturas suficientemente bajas se pueden mapear con una densidad de estados constante. Se pueden encontrar en la bibliografía numerosos experimentos muy recientes que reproducen el comportamiento VRH para diferentes materiales, que comentaremos en detalle en la sección 1.2.5.

Es necesario remarcar que, aunque sea un tema ampliamente estudiado durante tanto tiempo, la complejidad de los sistemas con los que trata dificulta la capacidad que tenemos de simularlos. La capacidad de cálculo ha aumentado muchísimo desde que apareció formulada por primera vez la ley de Mott en 1968, pero todavía hoy encontramos dificultades para tender un puente seguro entre los resultados que

se obtienen de las simulaciones numéricas y los despliegues teóricos con los que contamos. En ese sentido se expresa Nenashev et al. (2015) en su revisión, al poner de manifiesto la separación entre, lo que ellos llaman, el mundo de la simulación (*World of Simulation*, WoS) y el mundo de la teoría (*World of Theory*, WoT). Dos mundos que pierden todo el sentido si no añadimos el que los fundamenta, el mundo de la naturaleza. Es clave, para entender este último, establecer bien la teoría con la que contamos y contrastarla con simulaciones suficientemente fiables y que cuenten con todas las suposiciones que construyen la teoría.

1.2.1.1. Ley de Mott

En el contexto del estudio de la conducción en vidrios que contienen iones metálicos, Mott (1968), fija las bases de la conducción por *hopping* para temperaturas bajas. Explicaremos brevemente los fundamentos del desarrollo que se realiza en su trabajo.

Bajo las condiciones de suficientemente baja temperatura, donde la conducción se encuentra gobernada por *hopping*, es posible obtener una expresión para la conductividad en función de la temperatura a partir de los siguientes argumentos. Consideremos a y ϵ la distancia media entre primeros vecinos y su diferencia de energía media, respectivamente. Supongamos que el electrón salta una distancia más larga que primeros vecinos pR siendo $p \gg 1$. Entonces, si nos encontramos en un sistema tridimensional, aumenta el número de sitios a los que puede saltar como p^3 , donde podemos encontrar puntos más cercanos en energía, de manera que la diferencia de energía irá como ϵ/p^3 . Así, podemos escribir la probabilidad de salto

$$\exp(-2pa/\xi - \epsilon/p^3kT), \quad (1.11)$$

que tiene un máximo en

$$p = \left(\frac{3\epsilon\xi}{2akT} \right)^{1/4}. \quad (1.12)$$

Entonces, si sustituimos este máximo de p en la ecuación (1.11) de la probabilidad de salto, obtenemos una dependencia en temperaturas de la longitud de salto como

$$\exp(-C(a/\xi)^{3/4}(\epsilon/kT)^{1/4}), \quad (1.13)$$

donde C es una constante. Resultando así la dependencia en temperatura de $T^{-1/4}$ en la exponencial, además de otras dependencias adicionales que dependen de los parámetros de la red, como la distancia media entre primeros vecinos a y la diferencia de energía media entre primeros vecinos ϵ .

Es posible repetir esta deducción para cualquier dimensión del sistema haciendo uso de la densidad de estados. Una forma de modelar un sistema desordenado consiste en la introducción de un parámetro de desorden W , que delimita un rango en el que nos podemos encontrar las energías de los sitios que conforman el sistema. Si asociamos a los sitios energías de manera aleatoria y hacemos que estas se encuentren dentro de la franja $[-W/2, W/2]$, obtendremos una densidad de estados constante en función de la energía. Podemos escribir esta densidad de estados como

$$g(\epsilon) = \begin{cases} 1/W & -W/2 \leq \epsilon \leq W/2 \\ 0 & \epsilon > W/2 \vee \epsilon < -W/2. \end{cases}$$

En este caso, el argumento de Mott se puede reducir a la siguiente relación entre la diferencia de energías y la longitud de salto, que sustituiremos en la expresión para la probabilidad de salto. Supongamos que nos encontramos en un sitio del sistema y queremos saltar a otro, tal que la diferencia de energías del salto sea ΔE . Nos podemos preguntar entonces cual es la cantidad de sitios accesibles a una diferencia de energía ΔE a través de la densidad de estados g de la siguiente manera

$$\int_0^{\Delta E} g(\epsilon) d\epsilon = \Delta E g(\epsilon_F) = \frac{\Delta E}{W}. \quad (1.14)$$

Si suponemos que los sitios del sistema se encuentran uniformemente distribuidos a lo largo del espacio de dimensión d , cabe esperar que esta cantidad de sitios a una diferencia de energía ΔE decaiga conforme al volumen de la hipersfera de radio R

$$\frac{\Delta E}{W} = \frac{1}{R^d}, \quad (1.15)$$

siendo R la distancia entre los sitios. Una forma ilustrativa de verlo puede ser la siguiente. Para diferencias de energía arbitrariamente grandes dentro del desorden del sistema, siempre podremos encontrar sitios relativamente cercanos. A medida que disminuimos ΔE resulta cada vez más poco probable encontrar sitios cercanos

con energías próximas a la del sitio en que nos encontramos, de manera que tendremos que aumentar la distancia R a la que buscamos el sitio al que saltar, y la densidad de sitios que encuentro a una distancia R va como R^{-3} .

Maximizando la probabilidad de salto y utilizando la relación (1.15), obtenemos un par de distancia de salto y diferencia de energías típicas, más probables, para la ley de Mott, que resultan

$$R_{\text{Mott}} = \left(\frac{dW\xi}{2kT} \right)^{1/(d+1)} ; \quad \Delta E_{\text{Mott}} = W \left(\frac{2kT}{dW\xi} \right)^{d/(d+1)}. \quad (1.16)$$

Estos son los valores óptimos para los saltos según los argumentos de Mott, es decir, los más probables. Entonces, podemos escribir la expresión de la conductividad, suponiendo que nos encontramos en una red de resistencias como la de Miller-Abrahams

$$\sigma(T) = A \exp \left[- \left(\frac{T_{\text{M}}}{T} \right)^{1/(d+1)} \right], \quad (1.17)$$

donde

$$T_{\text{M}} = \frac{\alpha_d}{g_0 \xi^{d+1}}, \quad (1.18)$$

donde α_d es un coeficiente numérico que depende de la dimensionalidad del sistema y g_0 la densidad de estados en el nivel de Fermi. En la expresión (1.17) nos encontramos con dos parámetros, el factor preexponencial A , y la temperatura de Mott T_{M} . La asunción en ecuación (1.15) no es necesaria para realizar esta derivación, como demuestran Apsley y Hughes (1974). Por otro lado, aquí nos estamos limitando al caso tridimensional, pero el cálculo se puede hacer para una dimensión arbitraria a través del exponente de R en la ecuación (1.15), con lo que se obtiene un exponente en temperatura $1/(1+d)$, donde d es la dimensión del sistema.

En el desarrollo hemos asumido una dependencia suave de estos parámetros con la temperatura y que podemos despreciar. Veremos posteriormente que estos parámetros pueden incorporar dependencias adicionales en la temperatura, aportando modificaciones al comportamiento previsto por la ecuación (1.17). Encontramos en la literatura trabajos en esta dirección, ya Efros y Shklovskii se preguntan por la forma del factor preexponencial A en la ecuación (1.17) (Shklovskii y Efros, 1984).

La deducción de Mott, más bien cualitativa, fue tempranamente reforzada mediante la teoría de percolación (V. Ambegaokar, B. I. Halperin, 1971; Efros y Shklovskii, 1975), que será ampliamente usada en el estudio de problemas de conducción en materiales con localización y desorden, entre muchas otras aplicaciones. Para profundizar en esta deducción será necesario utilizar conceptos de teoría de percolación, por lo que volveremos a esta cuestión en la sección 1.2.2.

1.2.1.2. Ley de Efros-Shklovskii

Podemos añadir las interacciones para un sistema de electrones mediante el siguiente hamiltoniano

$$H = \sum_i \phi_i n_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{r_{ij}} (n_i - \nu)(n_j - \nu) \quad (1.19)$$

donde $n_i = 0, 1$ son las ocupaciones, las ϕ_i son las energías aleatorias de los sitios, entre 1 y -1 , y ν es la ocupación media, para la que hemos tomado $1/2$. Mientras que el primer término incluye el desorden en los diferentes sitios de la red, el segundo término de este hamiltoniano corresponde al de interacción. Las interacciones entre electrones añaden un nivel adicional de complejidad que complica la derivación de la ley de conducción para este caso. Una de las primeras consecuencias es que la inclusión de interacción hace que no podamos modelar el sistema mediante una densidad de estados constante.

Efros y Shklovskii (1975) introducen los efectos de las interacciones electrónicas en la conductividad de sistemas con desorden. En este trabajo se presenta el conocido como *gap* de Coulomb, que supone una disminución en la densidad de estados alrededor del nivel de Fermi. Habitualmente se llama *soft gap* (*gap* débil o suave) por el hecho de que la densidad de estados solo se anula en un punto, en este caso en el nivel de Fermi ε_F . Para su derivación debemos plantearnos cual es el papel de las correlaciones entre los electrones, como se afectan entre ellos.

Aunque la propuesta de Efros y Shklovskii se consolidó como válida en los escenarios en los que las interacciones entre electrones son relevantes para la conducción, podemos encontrar en la bibliografía sugerencias adicionales para tener en cuenta,

como la posibilidad de encontrar saltos simultáneos (Pollak, 1981; Gosar, 1983).

La incorporación de la interacción coulombiana hace que las energías de los sitios ya no dependan únicamente de su energía potencial, en este escenario hay que tener en cuenta la energía que proviene de las interacciones con el resto de electrones que forman el sistema. Entonces escribimos la energía de sitio para un sitio i , en el caso interactuante, de la siguiente forma

$$\varepsilon_i = \varphi_i + \sum_{j \neq i} \frac{e^2}{R_{ij}}, \quad (1.20)$$

donde φ_i es la energía potencial del sitio i , e es la carga del electrón. A su vez hay que añadir el término e^2/kR a la diferencia de energías del salto, que describe el “efecto excitónico”, la energía del par electrón-hueco creado. Entonces incorporamos la nueva diferencia de energías a la expresión de las probabilidades de salto

$$\Delta E_{ij} = \varepsilon_j - \varepsilon_i - \frac{e^2}{R_{ij}} > 0. \quad (1.21)$$

Esta construcción de la diferencia de energías provoca un desplome de la densidad de estados en el nivel de Fermi. De hecho puede demostrarse que esta expresión no es compatible con una densidad de estados constante alrededor del nivel de Fermi. En esta situación, la densidad de estados alrededor del nivel de Fermi adquiere la forma

$$g(\varepsilon) \propto |\varepsilon - \varepsilon_F|^{d-1}, \quad (1.22)$$

donde ε_F corresponde a la energía del nivel de Fermi.

Para obtener la conductividad basta con tener en cuenta esta densidad de estados y seguir una derivación análoga a la realizada para la ley de Mott, maximizando la probabilidad de salto. Así, de la misma forma que hemos procedido para la deducción de la ley de Mott, el número de estados en un entorno ΔE alrededor del nivel de Fermi viene dado por la siguiente integral de la densidad de estados

$$N(\Delta E) \propto \int_0^{\Delta E} |\varepsilon - \varepsilon_F|^{d-1} d(\varepsilon - \varepsilon_F) \propto \Delta E^d \quad (1.23)$$

donde d es la dimensionalidad del sistema. De forma análoga a la expresión (1.15), para cualquier dimensión d la tendencia del número de estados con una diferencia

de energía ΔE va como $1/R^d$. Así, para el caso interactuante podemos escribir la siguiente dependencia de la diferencia de energías con la distancia de salto

$$\Delta E \propto \frac{1}{R}. \quad (1.24)$$

Con todo, podemos obtener una dependencia de la conductividad respecto a la temperatura

$$\sigma(T) = A \exp \left[- \left(\frac{T_{\text{ES}}}{T} \right)^{1/2} \right], \quad (1.25)$$

donde A , en el caso tridimensional puede aun depender como una exponencial de la temperatura del tipo T^γ . En esta ecuación hemos introducido la temperatura de Efros-Shklovskii T_{ES} que se define como

$$T_{\text{ES}} = \frac{\beta_d e^2}{\xi}, \quad (1.26)$$

donde β_d es un coeficiente numérico que depende de la dimensionalidad del sistema. Expresión que puede contener, de la misma manera que para la ley de Mott, dependencias en temperatura que no estamos considerando en nuestro desarrollo teórico, no solo en el prefactor A .

En el plano experimental hay artículos muy recientes que manifiestan esta ley de conducción en diferentes compuestos inorgánicos (Gupta y Srivastava, 2020; Hizi et al., 2020; Ma y Scott, 2020; Paes et al., 2019). Otra cuestión de relevante interés investigador es la presencia de una transición entre la ley de Mott y la ley de Efros-Shklovskii. Como hemos visto, la diferencia entre ambos regímenes de conducción se encuentra en la magnitud de la interacción coulombiana, por lo que cabe esperar que, para la variación de algún parámetro, esta se atenúe o cobre más presencia. En particular, a medida que bajamos la temperatura esperamos que los efectos interacción entre portadores cobren importancia. A temperaturas altas, las transiciones no “ven”, de manera efectiva, la hendidura en la densidad de estado, mientras que al bajar la temperatura esta zona estrecha en la densidad de estados puede llegar a dominar la conducción. Esta transición ha sido estudiada desde el punto de vista teórico también en el caso tridimensional, mediante modificaciones en las densidades de estados (Rosenbaum et al., 1997), introduciendo funciones de

escalado con teoría de percolación (*scaling*) (Meir, 1996) y con otras propuestas que tratan de refinar esta cuestión (Amir et al., 2009). Encontramos en la bibliografía resultados experimentales recientes que avalan esta transición (Souri et al., 2019). Aun así, hasta la fecha y conocido por los autores, no existen propuestas en el campo de las simulaciones que sean capaces de reproducir este *crossover*. Este hecho destaca que nos encontramos ante un problema abierto y que el terreno de las simulaciones puede arrojar luz sobre las características de esta transición en el caso de que sean capaces de reproducirlas.

Para tratar de fundamentar estas propuestas en el campo de la conducción en materiales desordenados es necesario recurrir a un formalismo matemático sólido capaz de sustentarlo. Entonces se propuso utilizar teoría de percolación en esta clase de problemas, que presentaremos en el siguiente apartado y a partir de este momento tendrá un papel central en este trabajo.

1.2.2. Teoría de percolación

Como se ha comentado en secciones anteriores, la propuesta de utilizar teoría de percolación para estudiar la conductividad en semiconductores desordenados debemos atribuirle originalmente a Shante y Kirkpatrick (1971), que ya ven esta aplicación y que se formaliza con Kirkpatrick (1973). A esta propuesta le siguen las simulaciones realizadas por Pike y Seager (1974a,b). Pero fueron Shklovskii y Efros (1975) los que trabajaron con estos conceptos para describir teóricamente la conductividad en sistemas con desorden, y lo condensan en su libro Shklovskii y Efros (1984).

La idea básica de teoría de percolación consiste en conectar diferentes sitios de la red de forma aleatoria. Dada una red infinita cualquiera, podemos plantearnos cuantas de estas conexiones necesitamos para que un punto al azar conecte con un conjunto finito o infinito de sitios. Entonces se parte de la probabilidad $P(x)$ de que un sitio se encuentre conectado con un número infinito de sitios, para una fracción x de enlaces conectados. Existe un valor crítico x_c a partir del cual la probabilidad de encontrar sitios conectados con infinitos sitios crece de forma brusca.

Este x_c depende del tipo de red en que nos encontremos o, en el caso de una red aleatoria en posiciones, de la densidad de puntos. El cambio brusco en $P(x_c)$ se puede estudiar como una transición de fase, de hecho es posible calcular exponentes críticos relacionados con esta transición. En una primera aproximación, podemos aplicar esta magnitud x_c en el desarrollo que hemos presentado para la derivación de la conductividad mediante los argumentos de Mott. En la expresión (1.15), donde sacamos la relación entre la distancia y la diferencia de energías entre los sitios, hemos asumido una densidad de sitios igual a 1. Es decir, para un radio $R = 1$, en promedio encontramos un sitio. En el caso de teoría de percolación se sugiere que en realidad esta red es más densa, y que para $R = 1$ podemos encontrar más conexiones. En concreto la relación de Mott tomando el valor de percolación queda

$$\frac{\Delta E}{W} = \frac{2,3}{R^3}, \quad (1.27)$$

donde el factor 2,3 es el valor de percolación para el número medio de enlaces por sitio en un espacio cuatridimensional, en nuestro caso las tres dimensiones espaciales más la energía como cuarta dimensión. Teniendo en cuenta el factor que hemos introducido de percolación, los valores promedio de las distancias de salto y las diferencias de energía de la ecuación (1.16) se modifican para el caso tridimensional ($d = 3$) de la siguiente manera

$$R_{\text{Máx}} = \left(\frac{2,3 \cdot 3W\xi}{2kT} \right)^{1/4}; \quad \Delta E_{\text{Máx}} = 2,3W \left(\frac{2kT}{2,3 \cdot 3W\xi} \right)^{3/4}. \quad (1.28)$$

Pero desde el punto de vista de la conductividad, nos interesa cómo podemos mapear las conexiones de teoría de percolación a transiciones de electrones entre estados localizados. Una posibilidad es asignarle a cada posible transición una resistencia proporcional a la probabilidad de salto, que hemos introducido en la ecuación (1.10). Esta construcción es la llamada red de resistencias aleatorias o RRN por sus siglas en inglés (*Random Resistor Network*), introducidas por Miller y Abrahams (1960) y de la que volveremos a hablar en secciones posteriores. Tenemos entonces una red de resistencias exponencialmente distribuidas

$$r_{ij} = r_0 e^{\zeta_{ij}}, \quad (1.29)$$

donde obtenemos r_0 y ζ_{ij} de la comparación con la probabilidad de salto descrita en la ecuación (1.10). Abrahams y Miller sugieren que para calcular la conductividad total de este tipo de sistemas hay que ir incorporando resistencias cada vez menores progresivamente. Llegará un punto de este proceso en el que se habrán conectado los dos extremos de la muestra, en este punto habremos encontrado el camino de percolación del sistema. La distribución exponencial de resistencias nos lleva a poder afirmar que la conductividad del sistema puede ser determinada por la resistencia más grande que podamos encontrar en este camino de percolación, a la que le asociamos el valor crítico de percolación ζ_c . En este caso la resistencia total de la red vendrá dada por

$$R = R_0 e^{\zeta_c}, \quad (1.30)$$

donde R_0 es una constante.

Hay que destacar que la complejidad de los caminos de percolación que aparezcan en el sistema van a estar fuertemente determinadas por su tamaño y dimensionalidad. En el caso tridimensional, el aumento del tamaño del sistema puede venir acompañado por la formación de nuevos caminos de percolación en paralelo hasta formar una red de percolación. Esta red, por tanto, tendrá sus características que determinarán las propiedades de tamaño finito de las muestras. Podemos ilustrar el efecto de la influencia de la red de percolación en las propiedades de conducción del sistema mediante la siguiente explicación. Supongamos que troceamos nuestro sistema tridimensional cúbico de lado L en cubos más pequeños de lados ℓ . En este caso, en virtud de la ley de Ohm, la resistencia total del sistema viene dada por

$$R \approx R_\ell \frac{\ell}{L}. \quad (1.31)$$

Solo en el caso en el que la longitud ℓ sea suficientemente grande, la resistencia del sistema aumentará con el tamaño de acuerdo con la ley de Ohm. Existen tamaños demasiado pequeños para los cuales esta ley no se cumple. Entendemos que, para que pueda formarse la red de percolación en nuestro sistema, necesitamos, como mínimo, que el sistema tenga el tamaño del parámetro de red de esta red de percolación. Esperamos que, a partir de una cierta longitud l_c , la longitud típica de

la red de percolación, la conductividad de nuestras muestras tenga un comportamiento macroscópico y que deje de depender del tamaño del sistema. Al final de la presente sección desarrollamos brevemente las ideas con las que se puede derivar una dependencia con la temperatura en el prefactor de las leyes de conductividad a partir de estos conceptos.

Tenemos que destacar que el comportamiento percolativo funciona bien a temperaturas bajas (Kirkpatrick, 1973), ya que se basa en la situación crítica de encontrarnos en el límite de percolación, pero en este trabajo nos preguntamos por las posibles correcciones debido a que no nos encontramos en el límite que se supone en teoría de percolación. En nuestro caso, todos los enlaces de la muestra pueden jugar un papel en la conductividad. Trabajos muy recientes apuntan a la posibilidad de que mediante teoría de percolación nos falten ingredientes para la caracterización eficiente de la conductividad en sistemas desordenados (Pasveer et al., 2005; Agam y Aleiner, 2014). Estas aportaciones informan de que nos encontramos ante un problema muy complejo, tanto a nivel teórico como numérico. Necesitamos tanto teoría que tenga en cuenta todos los factores involucrados, como llevar las simulaciones al límite (temperaturas muy bajas, tiempos muy largos, grandes promedios...) para llegar a resultados satisfactorios.

El ejemplo de Agam y Aleiner (2014) es relativamente reciente y volveremos a él en capítulos posteriores. En su trabajo abordan la problemática de las dependencias en temperatura adicionales en sistemas electrónicos desordenados a través de teoría de percolación. Agam y Aleiner (2014) consideran que a temperaturas suficientemente bajas la conductividad se puede describir mediante dos redes de percolación que se encuentran débilmente ligadas entre sí: la de los saltos por encima del nivel de Fermi y la de los saltos por debajo. Este esquema teórico deriva en un componente adicional en el argumento de la exponencial que, según los autores, en ciertas ocasiones puede hacerse pasar por un prefactor exponencial.

Otra forma intuitiva de abordar los resultados numéricos de las simulaciones en términos de teoría de percolación puede ayudar a interpretar las curvaturas de las leyes de conducción como un prefactor exponencial. Para tratar la percolación en

una red infinita podemos hacerlo mediante los conceptos introducidos en el modelo SSDG, llamado así por ser planteado de forma paralela por Skal y Shklovskii y De Gennes. El modelo SSDG asume que el conjunto conectado completo de percolación conforma una especie de red de la que podemos extraer una longitud característica del mismo orden que la longitud de correlación. En virtud de este esquema general, podemos asumir que cuando el sistema es suficientemente grande como para tener una red de percolación consolidada, su conductividad en función del tamaño de la muestra se comportará de acuerdo con la ley de Ohm. Para tamaños inferiores esperamos una fuerte dependencia de la conductividad con el tamaño de la muestra, es decir, esperamos un apreciable efecto de tamaño finito.

Como hemos visto anteriormente, podemos escribir la resistencia macroscópica de nuestro sistema como

$$R = R_0(\ell) \frac{\ell}{L}, \quad (1.32)$$

siendo l la longitud a partir de la cual el sistema empieza a comportarse de forma óhmica, la longitud característica de la red de percolación. Por tanto la conductividad viene dada por

$$\sigma = \frac{1}{R_0(\ell)\ell}. \quad (1.33)$$

El ingrediente que falta para el estudio del VRH es la temperatura. En cuanto a las dependencias en temperatura de las magnitudes que constituyen la conductividad, nos encontramos con

$$R_0(\ell) = CT \exp \left[\left(\frac{T_M}{T} \right)^{1/4} \right]. \quad (1.34)$$

Por otro lado, de la longitud crítica ℓ , relacionada también con la distancia de correlación, esperamos que dependa como una potencia de T . Así,

$$\ell \propto T^\alpha. \quad (1.35)$$

Con estas suposiciones podemos esperar una conductividad que dependa de la combinación de la exponencial junto a una potencia de T .

En síntesis, teoría de percolación ofrece un abanico de conceptos muy interesantes para abordar el problema de la conducción por VRH. Aporta tanto una

herramienta teórica para obtener resultados analíticos como una herramienta intuitiva para tratar de entender qué ocurre a nivel microscópico en el interior de la red. Estas perspectivas nos dan un soporte sólido para estudiar los resultados de las simulaciones que se han realizado en este capítulo. La presencia de estructuras correlacionadas, como la subred crítica de percolación, en un espacio a priori aleatorio nos abre la puerta a pensar esta cuestión en términos de fractales, como haremos a continuación.

1.2.3. Fractalidad

La complejidad espacial de los sistemas de electrones desordenados nos lleva a plantear herramientas de cálculo con las que poder abordar la cuestión de su estructura. Si recurrimos al modelo intuitivo de la red de resistencias aleatorias, podemos imaginarnos nuestra red de electrones desordenados como una maraña de resistencias tridimensional con múltiples nodos, de los que salen diversas resistencias hacia todos los lados de la muestra. En este escenario nos encontramos enlaces de diferentes tamaños, que pueden ir aproximadamente desde la distancia media entre los sitios de la red hasta la mitad del lado de la muestra¹. Una forma de abordar este tipo de complejidad es mediante los conceptos y las herramientas que introducen los fractales.

Los fractales se definen como distribuciones espaciales invariantes de escala, es decir, no podemos definir longitudes características que aporten información sobre ellas. Existen dos tipos de estructuras fractales: las deterministas y las aleatorias. Las deterministas se caracterizan porque pueden ser construidas mediante una regla fija que se repite y existen numerosos ejemplos ampliamente conocidos, como el fractal de Mandelbrot o el conjunto de Cantor. Las aleatorias, por contra, se definen como estructuras aleatorias con cierto grado de correlación espacial.

Para clarificar el concepto de los fractales aleatorios podemos imaginar un conjunto de puntos posicionados de forma aleatoria en el plano. Si las posiciones de los

¹Las condiciones de contorno periódicas, tal y como las hemos definido, impiden saltos más grandes que $L/2$, donde L es la longitud del lado de la muestra.

puntos son aleatorias y homogéneamente distribuidas, las distancias entre los puntos son aproximadamente las mismas en cualquier dirección y es posible asignarle a la distribución una distancia media entre los puntos. Pero es posible que exista cierta correlación espacial entre los puntos, de manera que no podemos definir una longitud específica. En este caso nos encontramos con que la densidad de puntos depende de la escala en la que nos encontremos para medirla, mientras que en el caso anterior sin correlación espacial la densidad de puntos es independiente de la escala².

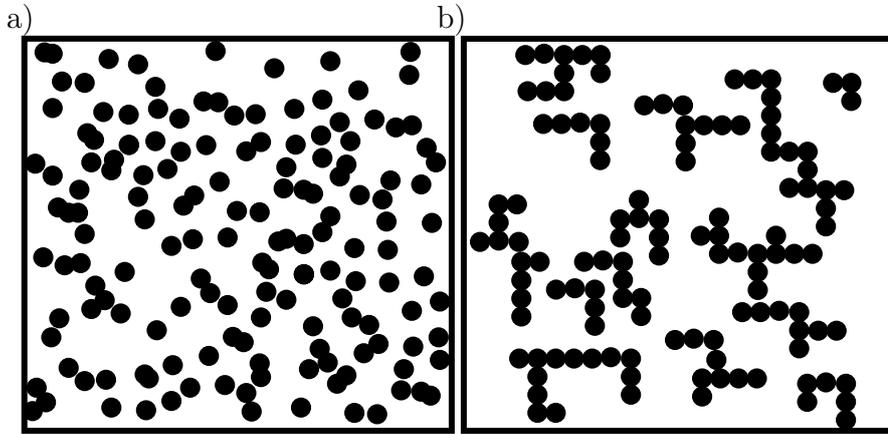


Figura 1.3: a) Distribución aleatoria y homogénea de puntos en el plano de la que se puede extraer una densidad de puntos y una longitud característica (distancia media entre los puntos). b) Distribución aleatoria y no homogénea de puntos en el plano, su densidad depende de la escala a la que sea medida.

Una forma de calcular la fractalidad de una distribución de puntos cualquiera es midiendo las densidades a lo largo de la muestra mediante cajas de diferentes tamaños, el llamado método del *box counting*. Este método puede ser ilustrado por la siguiente generalización de la densidad

$$\bar{\rho}(l) = \frac{\langle M_i(l) \rangle_i}{l^d}, \quad (1.36)$$

donde l es la longitud arbitraria de las cajas con las que medimos la densidad, i es el índice para las diferentes cajas y d es la dimensión del sistema.

²Siempre que nos encontremos por encima de la longitud característica del sistema.

En la figura 1.3 representamos dos configuraciones bidimensionales aleatorias diferentes, en la de la izquierda los sitios están colocados de forma aleatoria y homogénea de manera que es posible definir una distancia media entre ellos. En la configuración de la derecha, en cambio, los sitios están colocados también aleatoriamente pero con cierta correlación espacial. Si aplicamos el método de las cajas para calcular la densidad a las distribuciones de la figura 1.3a, podemos apreciar que la $\bar{\rho}$ se mantendrá constante, así

$$\langle M_i(l) \rangle_i \propto l^d. \quad (1.37)$$

En el caso de la distribución de la figura 1.3b nos encontramos con una dependencia de la densidad $\bar{\rho}(l)$ con la longitud de la caja l , de manera que no se cumple la proporción de la ecuación 1.37. En este caso se cumple

$$\langle M_i(l) \rangle_i \propto l^{D_f}, \quad (1.38)$$

donde D_f es un parámetro que depende de la distribución espacial de puntos. En caso de que $D_f < d$, $\bar{\rho}(l)$ disminuye al aumentar l y podemos decir que la estructura es fractal, ya que no es posible definir una longitud característica. Llamamos al parámetro D_f dimensión fractal y es posible tener una percepción intuitiva de su significado.

Hay casos de estructuras fractales que no son descritas completamente por la dimensión fractal. Podemos tomar como ejemplo para ilustrar esta cuestión una red de resistencias aleatorias que transportan corriente. La fractalidad en un sistema de enlaces que transportan corriente, como el de una red de resistencias aleatorias, puede enfocarse mediante una pequeña modificación del *box-counting*. Para simplificar la complejidad que se encuentra en la red tridimensional con enlaces que transportan diferentes corrientes, podemos reducir las corrientes en los enlaces a corrientes en los nodos de la red. De esta forma tenemos un conjunto de puntos aleatoriamente distribuidos pero con diferentes pesos asociados a las corrientes que los atraviesan. Así, podemos rellenar el espacio con cajas de una cierta escala r y contar la contribución a la corriente de los nodos que caen dentro de cada caja.

Si las resistencias de la red están distribuidas exponencialmente, esperamos que solo unos pocos caminos transporten el grueso de corriente de la muestra. Por un lado podemos estudiar la dimensión fractal de los caminos que portan la mayor parte de la corriente. Pero también podemos calcular la dimensión fractal de los caminos que portan fracciones inferiores de corriente, ante lo que podemos obtener diferentes valores para la dimensión fractal. Para estudiar esta posible multifractalidad hacemos uso de los diferentes momentos de las variables que estemos tratando. Sea una magnitud física μ , podemos calcular su momento q de la forma

$$\langle \mu^q \rangle = \sum_i \mu_i^q \propto L^{\tau(q)}, \quad (1.39)$$

donde $\tau(q)$ juega el papel de la dimensión fractal. En caso de que $\tau(q)$ no sea lineal en q podemos afirmar que la distribución de la magnitud μ es multifractal (Nakayama y Yakubo, 2003).

Los datos sobre las posibles propiedades de fractalidad en la red y su dimensión fractal nos pueden ayudar a conocer la estructura microscópica de la propagación de corriente a través de la muestra. Además, las medidas cuantitativas pueden contribuir a aportar más información a la ley de conductividad que gobierna los sistemas de electrones desordenados.

1.2.4. Régimen activado

El régimen de Arrhenius o activado se encuentra en multitud de aislantes y se caracteriza por una dependencia en temperatura de la conductividad que va como

$$\sigma = A(T) \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right), \quad (1.40)$$

donde llamamos a T_a temperatura de activación. La energía de activación es proporcional a la energía de carga

$$kT_a = \gamma \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0\kappa d}, \quad (1.41)$$

donde γ es una constante de proporcionalidad.

Este régimen se da cuando la conducción se encuentra determinada por saltos a primeros vecinos, es decir, cuando la longitud de localización es grande y nos encontramos a temperaturas suficientemente elevadas. De manera paradójica, experimentalmente nos encontramos este régimen para muy bajas temperaturas en sistemas cerca de la transición de superconductor a aislante (Shahar y Ovadyahu, 1992; Kowal y Ovadyahu, 2008; Delahaye et al., 2008; Givan y Ovadyahu, 2012).

La situación de longitudes de localización grandes y, consecuentemente, constantes dieléctricas elevadas en sistemas bidimensionales provoca que las líneas de campo tiendan a mantenerse en la capa bidimensional y como resultado obtenemos una interacción efectiva que puede aproximarse por una interacción logarítmica de la forma

$$V(r) \propto \ln \frac{r_{max}}{r}, \quad (1.42)$$

donde r_{max} corresponde a la distancia de apantallamiento electrostático. Con la interacción de la ecuación (1.42) y extendiendo el argumento de Mott es posible deducir la resistencia total del sistema de la ecuación (1.40).

1.2.5. Resultados experimentales: Estado del arte

Existen numerosos estudios que han medido experimentalmente las propiedades de materiales desordenados y que obtienen conducción por VRH. En la década de los 50 ya se empezaba a estudiar en los laboratorios la conductividad de semiconductores dopados a bajas temperaturas, pero no fue hasta dos décadas después que se comenzaron a observar evidencias experimentales del VRH en la forma tanto de la ley de Mott como de la de Efros y Shklovskii (Brodsky y Gambino, 1972; Sheng et al., 1973; Knotek et al., 1973; Knotek, 1975; Pollak y Knotek, 1977; Apsley et al., 1978). Los experimentos realizados para encontrar este tipo de conducción son muy variados y, en general, se utilizan tanto compuestos inorgánicos dopados o aleaciones de estos, como nanoestructuras y compuestos orgánicos. En este apartado reunimos las diferentes contribuciones experimentales que reportan comportamientos identificables con las leyes de conductividad de VRH. A parte del interés de catalogar

los diferentes materiales que responden a la ley de Mott debido a sus posibilidades tecnológicas, los resultados experimentales pueden contribuir a comparar las interpretaciones de los resultados que obtenemos de nuestras simulaciones.

Nos interesa comprobar el rango de temperaturas en el que se mueven los experimentos, o, dicho de otra manera, cual es el intervalo, en órdenes de magnitud de la conductividad, que abarca el régimen de VRH. En relación con el objetivo del trabajo, también resulta de especial interés prestar atención a la calidad de los ajustes en función de las leyes que asumen los autores, con el propósito de buscar posibles desviaciones que hagan pensar en la existencia de prefactores adicionales en las leyes de Mott y Efros-Shklovskii. Para este propósito nos sirve recopilar las temperaturas de Mott (T_M) de los diferentes experimentos, así como las temperaturas más bajas a las que llegan. También analizaremos si se necesita o no una preexponencial dependiente de T para explicar los datos. Clasificaremos los materiales que se han usado para realizar experimentos en tres grandes familias, los semiconductores dopados, los sólidos amorfos y los metales granulares. La última sección la destinaremos a aquellos materiales nuevos que no hemos podido clasificar en estas tres categorías.

Semiconductores dopados

El primer trabajo del que tenemos noticia en el que se estudia la conductividad de semiconductores dopados data de 1946 en SiC (Busch y Labhart, 1946). Le siguen las medidas en germanio realizadas por Hung y Gliessman (1954) y Fritzsche (1955), donde se detallan los diferentes regímenes de conducción que existen en este tipo de materiales a bajas temperaturas. Después de las predicciones teóricas de Mott (1968) nos encontramos con los primeros trabajos que se centran en el régimen de VRH obteniendo la ley de Mott o la ley de Efros-Shklovskii. Shlimak y Nikulin (1972) y Allen y Adkins (1972) realizan sus experimentos con germanio dopado. Los últimos presentan valores para T_M entre 29 K y 2×10^4 K y llegan a temperaturas $T_{\min} = 0,19$ K partiendo de los $T_{\max} = 1,52$ K. También sugieren diferentes exponentes para el prefactor de la exponencial que extraen de los diversos

desarrollos teóricos que encuentran en la bibliografía. Por un lado consideran la propuesta de Miller y Abrahams (1960) donde, en función de las condiciones del sistema, incluyen antes de la exponencial un factor $T^{1/2}$ o $T^{-1/2}$. Por otro presentan las ecuaciones a las que llegan Mott y Davis (1979), que proponen también dos prefactores en función de las condiciones, e incorporan un factor $T^{1/4}$ o $T^{5/4}$. Por último, tienen en cuenta la aportación de Pollak (1972) que considera un factor del tipo $T^{-1/4}$ previo a la exponencial. Allen y Adkins (1972) concluyen que la primera aportación de Miller y Abrahams (1960) aporta resultados satisfactorios en cuanto al ajuste de sus datos experimentales.

En su artículo de revisión Castner (1991) recopila la información clave de los experimentos relevantes realizados hasta ese momento. En el mismo libro, (Mansfield, 1991) se centra en revisar los aportes en los que se realizan experimentos con compuestos III-V. También se incluyen los diferentes regímenes que se encuentran en la bibliografía para distintos compuestos, mayormente InP y GaAs (Castner, 1991). Pignatelli y Sanguinetti (1993) presenta un posible *crossover* entre los regímenes de Mott y Efros-Shklovskii. Estos autores introducen una pequeña variación del exponente, cercana a $1/4$, para la que presentan valores de $T_M = 0,0399$ K y $T_{ES} = 0,006124$ K para el AsG y el AsD. Miden aproximadamente la ley de Mott en el rango de temperaturas de 0,35 K a 1,2 K y no se aprecia una notable curvatura en los datos. En el trabajo de Zhang et al. (1993) interpretan que sus muestras de Si dopadas con boro y fósforo se encuentran en el régimen de Efros-Shklovskii, con valores para la T_{ES} entre 1,36 K y 47,5 K. Han medido las conductividades en el rango de temperaturas $0,05\text{K} < T < 20$ K, donde se puede apreciar una clara curvatura en los datos. Itoh et al. (1996) miden la ley de Efros-Shklovskii en muestras de germanio dopado con galio. Los valores de T_{ES} en función del dopaje oscilan entre 1,5 y 800 K. El rango de temperaturas del experimento va de 0,02 a 0,64 K, donde obtienen un buen ajuste a al exponente $1/2$. Moreira et al. (1998) estudian la conductividad en AlGaAs:Si y se encuentran con la ley de Mott para temperaturas entre 16 K y 2,4 K, donde no apreciamos curvatura. Las temperaturas de Mott asociadas a las diferentes concentraciones van de 200 K a 3 K.

Bhatt et al. (1999) realizan el experimento para silicio dopado con boro. Los datos parecen indicar que la respuesta de la conductividad se encuentra más próxima al régimen de Efros-Shklovskii. Reportan la ley de Efros-Shklovskii en un rango de temperaturas entre 0,5 y 1 K. Obtienen valores de T_{ES} entre 0,2 y 5,2 K. Incorporan un prefactor $T^{1/2}$ en la presentación de la conductividad. Lee y Massey (2000) observan también la transición entre regímenes para el silicio dopado con boro. Encuentran la ley de Mott en el rango de temperaturas entre 2 K y 11 K, con un valor de la pendiente de $T_M = 1480$ K. Apenas se aprecia curvatura en sus datos experimentales. Sandow et al. (2001) miden la resistividad en germanio tipo n en un rango de temperaturas entre 0,1 y 16 K. Del ajuste de la resistividad en función de la temperatura se quedan con el comportamiento del tipo Efros-Sklovskii. Obtienen un valor de T_{ES} para la ley de Efros-Shklovskii de 0,4 K. Rentzsch y Ionov (2001) utilizan para sus experimentos diversas muestras de GaAs, CdTe, Ge y Si dopados. Miden la conductividad en el rango de temperaturas ente 0,03 – 300 K y obtienen la ley de Efros-Shklovskii. Los valores de T_{ES} en los ajustes se encuentran en el rango 366 – 1324 K. Park et al. (2015) aportan una tendencia con pocos puntos, de los cuales es difícil discernir si existe una curvatura en el rango estudiado. Para los autores el sistema se comporta de acuerdo con la ley de Mott por debajo de la temperatura $T_M = 17,4$ K y se llega a una temperatura de $T_{min} = 1,92$ K. No incluyen prefactores adicionales a la ley de Mott. Zhou et al. (2017) estudian la conductividad del Sr_2IrO_4 dopado con calcio. No tienen en cuenta ningún prefactor y la curvatura que se aprecia respecto a la ley de Mott pura es despreciable. Para los distintos dopajes de Ca se obtienen valores de $T_M = 1,09 \times 10^7$ K, $T_M = 1,4 \times 10^6$ K y $T_M = 1,67 \times 10^5$. Llegan a temperaturas de $T_{min} = 10$ K desde los $T_{max} = 100$ K.

Referencia	Rango T_0/T	T_0 (K)	Exp.	Prefac.
Allen y Adkins (1972)	$1,3 \times 10^4 -$ $1,1 \times 10^5$	$29 - 2 \times 10^4$	1/4	$T^{1/2}$, $T^{-1/2}$
Pignatelli y Sanguinetti (1993)	$3,3 \times 10^{-2}$ -0,114	$3,9 \times 10^{-2}$, $6,1 \times 10^{-3}$	$\sim 1/4$	-

Zhang et al. (1993)	2,37 – 34,9	1,36 – 47,5	1/2	-
Itoh et al. (1996)	$1,3 \times 10^3 - 4 \times 10^4$	1,5 – 800	1/2	-
Moreira et al. (1998)	12,5 – 83,3	3 – 200	1/4	-
Bhatt et al. (1999)	5,2 – 10,4	0,2 – 5,2	1/2	$T^{1/2}$
Lee y Massey (2000)	$1,3 \times 10^2 - 7,4 \times 10^3$	1480	1/4	-
Sandow et al. (2001)	$2,5 \times 10^{-2} - 4$	0,4	1/2	-
Rentzsch y Ionov (2001)	$4,4 - 4,4 \times 10^4$	366 – 1324	1/2	-
Park et al. (2015)	-	17,4	1/4	-
Zhou et al. (2017)	$10^5 - 10^6$	$1,67 \times 10^5 - 1,09 \times 10^7$	1/4	-

Tabla 1.1: Tabla de los parámetros de temperatura y de los ajustes utilizados en diversos trabajos experimentales encontrados en la literatura para semiconductores dopados.

Sólidos amorfos

El primer trabajo que hemos encontrado en el campo experimentando con sólidos amorfos es de Brodsky y Gambino (1972). Los autores incorporan un prefactor $T^{1/2}$ para un óptimo ajuste de los datos. Incorporando el prefactor obtienen un valor de $T_M = 3,5 \times 10^7$ K y llegan a una $T_{\min} = 1,32$ K. Unos años más tarde Apsley et al. (1978) miden la conductividad en capas de germanio y silicio amorfo en un rango de temperaturas de 14 – 300 K. Encuentran valores para la ley de Mott entre $T_M = 2,7 \times 10^6$ K y $T_M = 3,9 \times 10^5$ K.

Posteriormente, en la recopilación bibliográfica de Möbius (1985) se recogen algunos experimentos en aleaciones entre un semiconductor y un metal de transición con respuestas asociadas a la ley de Efros-Shklovskii. En el caso de la aleación oro germanio, midiendo la conductividad en el rango de los 1 – 300K se obtienen valores

de T_{ES} entre 2 K y 400 K. Para la aleación estaño niobio se obtiene una variación del exponente de la temperatura que varía entre 0,5 y 0,7. Kumar et al. (1991) estudian la conductividad en capas amorfas de Ge–Sb–Se. Ajustan los datos a la ley de Mott, y en ellos puede apreciarse una ligera curvatura. El rango de temperaturas va de $T_{\min} = 95$ K a $T_{\max} = 256$ K. Obtienen valores de T_M alrededor de $1,2 \times 10^7$.

Maddison y Tansley (1992) estudian la conductividad VRH en capas de polipirrol. Lo hacen en el rango de temperaturas 40 – 300 K, donde se aprecia curvatura. Obtienen valores de la temperatura de Mott entre $T_M = 4,65 \times 10^4$ K y $T_M = 9 \times 10^7$ K. Yoon et al. (1995) utilizan diversos materiales orgánicos como el polipirrol, la polianilina y los polialquitiofenos. Interpretan que sus materiales se comportan de acuerdo con la ley de Mott en temperaturas $10 < T < 40$ K, mientras que lo hacen con la de Efros-Shklovskii para temperaturas $T < 10$ K. Para la ley de Mott obtienen valores de T_M entre $1,01 \times 10^3$ K y $1,3 \times 10^5$, y para la ley de Efros-Shklovskii entre 29,1 K y 56,3 K. Shi et al. (1998) miden las propiedades de transporte en carbono amorfo dopado con nitrógeno. Obtienen la ley de Mott representando la conductividad con el prefactor $T^{-1/2}$ y bajo estas condiciones no se aprecia curvatura alguna en los datos. Realizan estos experimentos en el rango de temperatura 108 – 301 K. Obtienen valores de T_M en el rango entre $2,24 \times 10^6$ K y $1,39 \times 10^8$ K.

Ya entrados en los años 2000, Rogatchev y Mizutani (2000) realizan el experimento en aleaciones amorfas de titanio y silicio. Para una misma muestra obtienen, en el rango de temperaturas 3,6 – 14 K, la ley de Mott y, en el rango 30 – 100 K, la de Efros-Shklovskii, a la inversa de lo que apunta la teoría. Con valores de $T_M = 5,9 \times 10^5$ K y $T_{ES} = 790$ K respectivamente. Aoki et al. (2000) miden la conductividad en capas amorfas de la aleación silicio germanio. Ajustan las dos leyes e interpretan la existencia de una transición entre la ley de Efros-Shklovskii y la ley de Mott a una temperatura de 156 K. El rango de temperaturas experimental va de los 70 K a los 270 K. Butko et al. (2000) miden la conductividad de capas ultrafinas de berilio amorfo. La conductividad de este sistema responde a la ley de Efros-Shklovskii con una ligera curvatura. Realizan las medidas en el rango de temperaturas 0,05 – 6 K. Del ajuste extraen un valor de $T_{ES} = 1,6$ K. Roy et al. (2002)

estudian las propiedades electrónicas del YHx. Obtienen un comportamiento acorde con la ley de Efros-Shklovskii, para lo que incluyen un prefactor en la conductividad del tipo $T^{1/6}$. La curva de conductividad con más pendiente la recogen en un rango de temperaturas entre $T_{\min} = 1,5$ K y $T_{\max} = 25$ K. En este caso obtienen un valor de $T_{\text{ES}} = 14$ K y no se aprecia curvatura.

Imran y Lafi (2013) utilizan para sus experimentos aleaciones basadas en selenio, telurio y estaño. Incorporan un prefactor $T^{-1/2}$ en la representación de los datos para la ley de Mott. Obtienen valores de la conductividad en el rango de temperaturas 175 – 245 K y se aprecia una ligera curvatura en los datos. Encuentran un valor de $T_{\text{M}} = 10^4$ K. Dult et al. (2014) miden la conductividad en aleaciones de silicato de bismuto y óxido de titanio. Presentan la ley de Mott en el rango de temperaturas de 623 K a 703 K sin que se aprecie ninguna curvatura. Obtienen una $T_{\text{M}} = 1,1 \times 10^9$ K. Ovadyahu (2014) estudia el caso en capas amorfas de óxido de indio. No aprecia curvatura en los datos, que ajustan de forma razonable a la ley de Mott. Se realizan las medidas en un rango de temperaturas entre 4 K y 67 K. Para dos valores diferentes del desorden en las muestras, se aportan dos valores para la temperatura de Mott, $T_{\text{M}} = 6,6 \times 10^3$ K y $T_{\text{M}} = 4 \times 10^4$ K.

Souri et al. (2016) miden la conductividad en un material vítreo con óxidos de metales de transición. Apreciamos en sus resultados experimentales que dependiendo de las concentraciones pueden conseguir comportamientos asociados a la ley de Mott. Se han realizado las medidas en un rango de temperaturas de 150 – 380 K. Obtienen valores de para la temperatura de Mott entre $T_{\text{M}} = 3,4 \times 10^9$ K y $T_{\text{M}} = 1,2 \times 10^{10}$ K. Yao et al. (2018) estudian la conductividad en capas delgadas de arsenuro de indio amorfo. Comprueban la transición entre el régimen de Mott y de Efros-Shklovskii, para los que recogen valores de T_{M} entre $1,3 - 8,5 \times 10^6$ K y T_{ES} entre 747 – 2186 K. Realizan su estudio en un rango de temperaturas de 2 K a 30 K. Incorporan a su representación de los datos un factor en la conductividad $T^{-1/2}$.

Unos años más tarde Soury et al. (2019) vuelven con nuevas medidas y el mismo material. Presentan la ley de Mott en 3D sin ningún prefactor con una leve curva-

tura. Obtienen valores de la temperatura de Mott entorno a $T_M = 2,2 \times 10^6$ K en el rango de temperaturas desde $T_{\min} = 53$ K hasta $T_{\max} = 300$ K. Paes et al. (2019) realiza medidas de conductividad con óxido de titanio con zonas amorfas. Representa los datos utilizando un prefactor $T^{1/2}$ y no aparece curvatura. Su estudio se centra en el rango de temperatura entre $T_{\min} = 43$ K y $T_{\max} = 108$ y del ajuste obtienen $T_M = 1,4 \times 10^8$. Hizi et al. (2020) miden las propiedades de transporte del $\text{La}_{0,9}\text{Sr}_{0,1}\text{MnO}_3$ donde se pueden distinguir dos fases cristalinas. Representan los datos sin prefactor y no se puede apreciar ninguna curvatura ya que ajustan pocos puntos a ley de Mott. También interpretan que existe un cambio de pendiente para un cierto valor de la temperatura. De los ajustes se obtiene una temperatura de Mott de $T_M = 3,9 \times 10^5$ K y los experimentos llegan a temperaturas $T_{\min} = 75$ K y $T_{\max} = 256$ K.

Referencia	Rango T_0/T	T_0 (K)	Exp.	Prefac.
Brodsky y Gambino (1972)	$9,8 \times 10^2 - 9,0 \times 10^3$	$3,5 \times 10^5$	1/4	$T^{-1/2}$
Apsley et al. (1978)	$9 \times 10^3 - 1,9 \times 10^5$	$2,7 \times 10^6, 3,9 \times 10^5$	1/4	-
Möbius (1985)	1,3 – 400	2 – 400	1/2 - 0.7	-
Kumar et al. (1991)	$4,7 \times 10^4 - 1,3 \times 10^5$	$\sim 1,2 \times 10^7$	1/4	-
Maddison y Tansley (1992)	$3 \times 10^5 - 2,3 \times 10^6$	$4,7 \times 10^4 - 9 \times 10^7$	1/4	-
Yoon et al. (1995)	$3,3 \times 10^3 - 1,3 \times 10^4$	$1 \times 10^3 - 1,3 \times 10^5$	1/4	-
	5,6 – 563	29,1 – 56,3	1/2	-
Shi et al. (1998)	$4,7 \times 10^5 - 1,3 \times 10^6$	$2,2 \times 10^6 - 1,4 \times 10^8$	1/4	$T^{-1/2}$

Rogatchev y Mizutani (2000)	$4,2 \times 10^4 -$ $1,6 \times 10^5$ $7,9 - 26,3$	$5,9 \times 10^5$ 790	1/4 1/2	- -
Butko et al. (2000)	0,27 – 32	1,6	1/2	-
Roy et al. (2002)	0,56 – 9,3	14	1/2	$T^{1/6}$
Imran y Lafi (2013)	41 – 57	10^4	1/4	$T^{-1/2}$
Dult et al. (2014)	$1,6 \times 10^6 -$ $1,8 \times 10^6$	$1,1 \times 10^9$	1/4	-
Ovadyahu (2014)	$6 \times 10^2 - 10^4$	$6,6 \times 10^3,$ 4×10^4	1/4	-
Souri et al. (2016)	$3,2 \times 10^6 -$ 8×10^7	$3,4 \times 10^9 -$ $1,2 \times 10^{10}$	1/2	-
Yao et al. (2018)	$2,8 \times 10^5 -$ $4,3 \times 10^6$ –	$1,3 \times 10^6 -$ $8,5 \times 10^6$ 747 – 2186	1/4 1/2	$T^{1/2}$
Souri et al. (2019)	$7,3 \times 10^3 -$ $4,2 \times 10^4$	$2,2 \times 10^6$	1/4	-
Paes et al. (2019)	$3,3 \times 10^6 -$ $1,3 \times 10^6$	$1,4 \times 10^8$	1/4	$T^{-1/2}$
Hizi et al. (2020)	$1,5 \times 10^3 -$ $5,2 \times 10^3$	$3,9 \times 10^5$	1/4	-

Tabla 1.2: Tabla de los parámetros de temperatura y de los ajustes utilizados en diversos trabajos experimentales encontrados en la literatura para sólidos amorfos.

Metales granulares

Sheng et al. (1973) miden la conductividad en capas granulares de Ni-SiO₂. Lo hacen en el rango de temperaturas entre $T_{\min} = 16$ K y $T_{\max} = 278$ K donde observan un comportamiento del tipo Efros-Shklovskii. En este rango obtienen una

$T_{ES} = 1,3 \times 10^4$. Heinz et al. (2001) estudian la conductividad en capas granulares de trióxido de wolframio. Los datos de conductividad se comportan de manera acorde a la ley de Mott en el rango de temperaturas 90 – 256 K. Obtienen de sus datos valores aproximados de la temperatura de Mott $T_M = 1,1 \times 10^7$ K. Dekic et al. (2015) miden la resistividad en capas nanocristalinas de $K_{0,3}MoO_3$. Representan los datos de conductividad en función de $T^{-1/2}$, por lo que los autores interpretan que sus muestras se comportan de acuerdo con la ley de Efros-Shklovskii y que capturan un cambio de T_{ES} en valores intermedios del rango de temperatura que estudian. Miden resistividades en el rango de 20 K a 300 K y los valores de T_{ES} que obtienen se encuentran en el rango de 1000 K a 1150 K. En su ajuste tienen en cuenta un prefactor exponencial en temperaturas para el que encuentran exponentes entorno a 2. Roy y Ghosh (2014) miden el efecto en rutenocuprato superconductor. En este caso sí se aprecia una curvatura emergente a medida que se aumenta la cantidad de oxígeno del compuesto, aunque la abordan sin tener en cuenta un prefactor adicional en la exponencial. Representan sus datos de conductividad en función de $T^{-1/4}$, por lo que asumen que corresponde la ley de Mott. Realizan su estudio en el rango de temperaturas 35 – 300 K. De los datos que se aprecian más o menos rectos, podemos obtener de la pendiente un valor de $T_M = 74,8$ K.

Referencia	Rango T_0/T	T_0 (K)	Exp.	Prefac.
Sheng et al. (1973)	47 – 813	$1,4 \times 10^4$	1/2	-
Heinz et al. (2001)	$4,3 \times 10^4$ – $1,2 \times 10^5$	$1,1 \times 10^7$	1/4	-
Dekic et al. (2015)	3,8 – 57,5	1000 – 1150	1/2	T^2
Roy y Ghosh (2014)	0,2 – 2,1	74,8	1/4	-

Tabla 1.3: Tabla de los parámetros de temperatura y de los ajustes utilizados en diversos trabajos experimentales encontrados en la literatura para metales granulares.

Otros materiales

Briggs et al. (1983) estudian heterouniones de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As} - \text{InP}$ a bajas temperaturas. Incorporan un prefactor para representar la conductividad T^{-1} y la asocian a la ley de Efros-Shklovskii. Estudian un rango de temperatura entre 50 mK y 1 K y obtienen, para tres muestras diferentes, valores para la temperatura de Efros-Shklovskii de $T_{\text{ES}} = 11, 70$ y $7,8$ K. No se aprecia curvatura significativa en los datos. Ebert et al. (1983) lo hacen para heteroestructuras de $\text{GaAs} - \text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Para una de las muestras asignan la ley de Mott bidimensional y para otra la ley de Efros-Shklovskii, con prefactores $T^{-2/3}$ y T^{-1} respectivamente. Se aprecia una ligera curvatura en los datos presentados. Van Keuls et al. (1997) mide la conductividad en heteroestructuras de GaAs-Al . En este caso los autores manifiestan la existencia de una transición entre el régimen de Mott en dos dimensiones y el de Efros-Shklovskii. En ambos casos representan la conductividad acompañada de un prefactor $T^{-0,8}$. Para las muestras que miden obtienen valores de T_{ES} en el rango entre 4,5 K y 320 K. Se puede apreciar una curvatura suave en los datos presentados. Shlimak et al. (1999) utilizan heteroestructuras GaAs-AlGaAs en sus experimentos. El sistema responde con una conductividad del tipo Efros-Shklovskii en el rango de temperaturas $1 - 0,02$ K. Obtienen un valor de $T_{\text{ES}} = 0,125$ K para la muestra con el rango de temperatura más grande recogida. Se aprecia poca curvatura Khondaker et al. (1999b) experimenta con los mismos materiales en un rango de temperaturas entre 0,16 K y 4 K. Asumen la existencia de una transición entre Mott bidimensional y Efros-Shklovskii en una temperatura intermedia del intervalo. Los valores que aportan para T_{ES} en el régimen de Efros-Shklovskii se encuentran entre 2,65 K y 7,07 K.

En el caso de Liu et al. (2017) se representa la conductividad acompañada de un prefactor $T^{-0,8}$. Así, los datos ajustan razonablemente a una recta, aunque seguimos apreciando cierta curvatura a medida que la temperatura disminuye. Para las dos configuraciones del fósforo negro (*black phosphorus*) con las que experimentan, obtienen $T_{\text{M}} = 6,8 \times 10^4$ K y $T_{\text{M}} = 7,9 \times 10^4$ K. Se llega hasta temperaturas $T_{\text{min}} = 29$

K desde los $T_{\max} = 390$ K. Nieves et al. (2017) miden la conductividad de estructuras de carbono en un rango que llega desde los $T_{\max} = 300$ K hasta $T_{\min} = 80$ K. No utilizan ningún prefactor adicional y se aprecia una ínfima curvatura en los datos. Obtienen dos valores de T_M para diferentes configuraciones $T_M = 1,3 \times 10^5$ K y $T_M = 2,5 \times 10^6$ K. Gu et al. (2018) utilizan nanocompuestos de metales y polímeros. En sus datos de conductividad se aprecian curvaturas y no incorporan prefactores adicionales. En temperatura llegan desde $T_{\max} = 188$ K hasta $T_{\min} = 53$ K y obtienen valores de la temperatura de Mott entre $T_M = 1,39 - 5,53 \times 10^7$ K. Sarkar et al. (2019) también utilizan nanoestructuras de óxido de grafeno. La temperatura mínima que alcanzan es $T_{\min} = 85$ K y no utilizan prefactor adicional ni se aprecia curvatura alguna en los datos. De la gráfica que presentan podemos extraer una temperatura de Mott $T_M = 9,5 \times 10^6$ K. Karachevtsev y Kurnosov (2019) miden el transporte electrónico en nanoestructuras de óxido de grafeno hasta $T_{\min} = 5$ K. No se aprecia curvatura en sus medidas y obtienen valores de la temperatura de Mott $T_M = 1,7 \times 10^4$ K y $T_M = 2,9 \times 10^3$ K.

Bouzidi et al. (2020) se centran en el mecanismo de transporte en el $\text{La}_{0,75}\text{Ca}_{0,25-x}\text{Na}_x\text{MnO}_3$. Ajustan un tramo ínfimo de los datos, por lo que resulta imposible apreciar la existencia de curvatura. No incorporan ningún tipo de prefactor adicional a los datos experimentales. Obtienen valores de la temperatura de Mott en torno a 10^6 K. Stavropoulos et al. (2020) estudian nanoestructuras de carbono. Ajustan los datos con un prefactor $T^{-1/2}$ y se aprecia curvatura. Reportan valores de la temperatura de Mott en órdenes de magnitud entre 10^7 y 10^{11} . Llegan a valores de temperatura $T_{\min} = 300$ K. Mollah et al. (2020) mide la conductividad en compuestos basados en óxido de bismuto. No incluyen prefactor al representar la conductividad ni tampoco se aprecia curvatura en los datos. La temperatura mínima alcanzada es $T_{\min} = 108$ K y obtienen valores de $T_M = 0,8 \times 10^9$ K y $T_M = 1,07 \times 10^9$ K. Venugopal et al. (2020) miden la conductividad en nanotubos de carbono. No tienen en cuenta ningún prefactor y se aprecia curvatura al representar los datos experimentales. Llegan a los $T_{\min} = 20$ K y se obtiene una temperatura de Mott $T_M = 1,3 \times 10^5$ K. Raghav et al. (2020) miden la conducción en perovskitas de man-

ganita. Representan los datos de conductividad sin prefactor y se aprecia una ligera curvatura. Se obtienen valores de T_M alrededor de 10^8 K y llegan a temperaturas mínimas de $T_{\min} = 70$ K. Gupta et al. (2020b) no utilizan prefactor para representar los datos y no se aprecia una curvatura clara en una dirección. Obtienen una temperatura de Mott de $T_M = 3,81 \times 10^9$ K y llegan a temperaturas de $T_{\min} = 277$ K.

Kharkwal et al. (2020) miden las propiedades de la doble perovskita $(\text{Sr}_{1-x}\text{Ca}_x)_2\text{FeIrO}_6$. No incorporan prefactor en la representación de sus datos de conductividad. Interpretan que en sus datos existen dos rangos de temperatura en los que el material presenta dos temperaturas de Mott diferentes. Mediante esta interpretación obtienen valores de T_M del orden de 10^5 K. Llegan a temperaturas $T_{\min} = 19$ K desde los $T_{\max} = 300$ K. Aswathi y Varma (2020) estudian las propiedades estructurales, de transporte y magnéticas del $\text{Pr}_2\text{CoMnO}_6$. No incorporan ningún prefactor y se aprecia curvatura en los datos. Alcanzan temperaturas $T_{\min} = 108$ K y de su ajuste se obtiene una temperatura de Mott $T_M = 7,7 \times 10^8$ K. Sharma et al. (2020) miden la conductividad en sistemas basados en nanopartículas de óxido de cobalto. No utilizan ningún prefactor para representar los datos, se aprecia una ligera curvatura y llegan a valores de temperatura $T_{\min} = 162$ K. Obtienen valores de la temperatura de Mott del orden de 10^{10} K.

Gupta et al. (2020a) estudian la conductividad en SrRuO_3 y su dopaje con Ti. No se aprecia curvatura en sus datos y representan la conductividad acompañada de un factor dependiente de la temperatura como $T^{1/2}$. Llegan a valores mínimos en temperatura de $T_{\min} = 40$ K. Obtienen temperaturas de Mott en función de la concentración de Ti que van de $T_M = 466$ K a $T_M = 14561$ K. Jeon et al. (2020) también estudian conductividad en polímeros. No consideran ningún prefactor adicional para estudiar la ley de Mott y llegan a temperaturas mínimas de $T_{\min} = 8$ K. Los valores de la temperatura de Mott que reportan van de los 10^5 K a los 10^{-2} K. Hasanli et al. (2020) miden la conductividad en óxidos de metales de transición. También representan la ley de Mott sin prefactor y los datos se ajustan a ella hasta valores de temperatura $T_{\min} = 75$ K. De sus ajustes se obtienen valores de

$T_M = 2 \times 10^7$ K. Mandal y Mitra (2020) estudia la aleación de TiO_2 y MnCo_2O_4 . No utilizan ningún prefactor para representar los datos y apreciamos curvatura en ellos. La temperatura más baja a la que miden es $T_{\min} = 383$ K y obtienen valores de la temperatura de Mott entorno a $T_M = 136$ K.

Rawal y Goyal (2020) miden la conductividad en nanoestructuras de polímeros. Sin incorporar ningún prefactor en la representación de los datos se aprecia que estos obedecen la ley de Mott. Llegan a temperaturas mínimas de $T_{\min} = 75$ K y de los ajustes extraen los valores $T_M = 2,36 \times 10^6$ K y $T_M = 9,76 \times 10^7$ K. Gupta y Srivastava (2020) estudian el caso del aislante topológico Bi_2Se_3 . Puede notarse curvatura en los datos representados sin ningún prefactor. El valor mínimo de temperatura es $T_{\min} = 25$ K y obtienen valores de la temperatura de Mott entorno a $T_M = 256$ K. Sui et al. (2020) miden la conductividad en óxido de grafeno. Se aprecia curvatura en los datos de conductividad y no incorporan prefactor para representar los datos. Se llega a una temperatura $T_{\min} = 10$ K y se obtienen valores de la temperatura de Mott $T_M = 3,1 \times 10^4$ K.

Este mismo año nos encontramos con Chauhan et al. (2021) que estudian la conducción por VRH en el NiFe_2O_4 . No añaden prefactor a las representaciones y se puede apreciar una ligera curvatura. Llegan a temperaturas $T_{\min} = 175$ K. Del ajuste se obtiene el valor para la temperatura de Mott $T_M = 8,6 \times 10^8$ K. Zambrzycki et al. (2021) miden la estructura y el transporte eléctrico en nanofibras y nanotubos de carbono. No utilizan prefactor para presentar los datos y llegan a temperaturas de $T_{\min} = 101$ K desde los $T_{\max} = 333$ K. Obtienen una temperatura de Mott de $T_M = 6355$ K y no se aprecia curvatura notable. Liu et al. (2021) estudian el mecanismo de transporte en capas delgadas de siliciuro de molibdeno. No consideran prefactor y llega a temperaturas de $T_{\min} = 70$ K. Obtienen valores de la temperatura de Mott entorno a 10^5 K. Rudra et al. (2021) estudian la posible conductividad por VRH en $\text{Pr}_2\text{ZnMnO}_6$. Representan los datos sin prefactor acompañando a la conductividad y no se aprecia curvatura. La temperatura mínima a la que miden es $T_{\min} = 300$ K y parten de los $T_{\max} = 566$ K. Del ajuste se obtiene una temperatura de Mott $T_M = 5,4 \times 10^7$ K.

Estas discrepancias en los resultados experimentales coexiste con el debate acerca de la fundamentación teórica de la ley de Mott. Para tratar de cerrar tal brecha, uno de los caminos que tenemos a nuestro alcance son las simulaciones. En el siguiente apartado vemos como han evolucionado estas en el campo del VRH y como se ha sacado provecho de ellas.

Referencia	Rango T_0/T	T_0 (K)	Exp.	Prefac.
Briggs et al. (1983)	$70 - 1,4 \times 10^3$	$7,8 - 70$	1/2	T^{-1}
Shlimak et al. (1999)	$0,125 - 6,25$	$0,125$	1/2	-
Khondaker et al. (1999a)	-	-	1/3	-
	$1,8 - 44,2$	$2,65 - 7,07$	1/2	-
Liu et al. (2017)	$2 \times 10^2 -$	$6,8 \times 10^4 -$	1/4	$T^{-0,8}$
	$2,7 \times 10^3$	$7,9 \times 10^4$		
Nieves et al. (2017)	$8,3 \times 10^3 -$	$1,3 \times 10^5,$	1/4	-
	$3,1 \times 10^4$	$2,5 \times 10^6$		
Gu et al. (2018)	$2,9 \times 10^5$	$1,39 \times 10^7 -$	1/4	-
	-10^6	$5,53 \times 10^7$		
Sarkar et al. (2019)	$3,2 \times 10^4 -$	$9,5 \times 10^6$	1/4	-
	$1,1 \times 10^5$			
Karachevtsev y Kurnosov (2019)	$66 - 6,4 \times 10^3$	$2,9 \times 10^3,$ $1,7 \times 10^4$	1/4	-
Bouzidi et al. (2020)	-	10^6	1/4	-
Stavropoulos et al. (2020)	-	$10^7 - 10^{11}$	1/4	$T^{-1/2}$
Mollah et al. (2020)	$3,6 \times 10^6 -$	$8 \times 10^8,$	1/4	-
	$9,9 \times 10^6$	$1,09 \times 10^9$		
Venugopal et al. (2020)	$4,3 \times 10^2 -$	$1,3 \times 10^5$	1/4	-
	$6,5 \times 10^3$			
Raghav et al. (2020)	$3,3 \times 10^5 -$ $1,4 \times 10^6$	$\sim 10^8$	1/4	-

Gupta et al. (2020b)	$6,1 \times 10^6 -$ $1,4 \times 10^7$	$3,8 \times 10^9$	1/4	-
Kharkwal et al. (2020)	$3,3 \times 10^2 -$ $5,3 \times 10^3$	10^5	1/4	-
Aswathi y Varma (2020)	$2,6 \times 10^6 -$ $7,1 \times 10^6$	$7,7 \times 10^8$	1/4	-
Sharma et al. (2020)	-	10^{10}	1/4	-
Jeon et al. (2020)	$3,3 \times 10^2 -$ $1,3 \times 10^4$	$10^{-2} - 10^5$	1/4	-
Hasanli et al. (2020)	$6,7 \times 10^4 -$ $2,7 \times 10^5$	2×10^7	1/4	-
Mandal y Mitra (2020)	0,296 – 0,355	136	1/4	-
Rawal y Goyal (2020)	$2,7 \times 10^5 -$ $1,3 \times 10^6$	$2,4 \times 10^6,$ $9,8 \times 10^7$	1/4	-
Gupta y Srivastava (2020)	1 – 10	256	1/4	-
Sui et al. (2020)	$103 - 3,1 \times 10^3$	$3,1 \times 10^4$	1/4	-
Chauhan et al. (2021)	$2,9 \times 10^6 -$ $4,9 \times 10^6$	$8,6 \times 10^8$	1/4	-
Zambrzycki et al. (2021)	19 – 63	6355	1/4	-
Liu et al. (2021)	$333 - 1,4 \times 10^3$	$\sim 10^5$	1/4	-
Rudra et al. (2021)	$9,5 \times 10^4 -$ $1,8 \times 10^5$	$5,4 \times 10^7$	1/4	-

Tabla 1.4: Tabla de los parámetros de temperatura y de los ajustes utilizados en diversos trabajos experimentales encontrados en la literatura para otros materiales.

Capítulo 2

Métodos numéricos

En el presente capítulo introducimos los métodos numéricos que se han utilizado a lo largo del presente trabajo, tanto para realizar los cálculos relativos a nuestras investigaciones, como para la interpretación de los resultados que obtenemos. Abordamos los problemas asociados a la dinámica en redes de uniones superconductoras y de electrones desordenados mediante tres métodos distintos que desarrollamos en las secciones que siguen.

Para simular la dinámica de vórtices en redes de uniones Josephson bidimensionales utilizamos el método de integración de Runge-Kutta de 4^o orden, junto con algunas técnicas particulares que pueden facilitar el estudio y que comentaremos a continuación. Para la conductividad en sistemas desordenados utilizamos dos técnicas diferentes, cada una con su propia potencialidad. Por un lado veremos el método de Monte Carlo para simular este tipo de sistemas, al que añadimos una pequeña modificación para aumentar su eficiencia. Por otro lado presentamos el modelo de la red de resistencias aleatorias que simplifica y nos permite llegar a temperaturas más bajas a costa de obviar la correlación entre electrones. El concepto de la red de resistencias se puede llevar a otros ejemplos como la red de condensadores, que nos permitirá estudiar el régimen activado.

2.1. Dinámica de vórtices

Para la simulación de la dinámica de vórtices en redes de uniones Josephson hemos utilizado el método de integración Runge-Kutta de 4^o orden. Además de la resolución numérica de las ecuaciones que describen el sistema necesitamos, por un lado, construir una muestra con un vórtice que sea capaz de moverse a través de la red y, por otro, ser capaces de interpretar físicamente la distribución de diferencias de fase entre elementos superconductores. Por lo tanto, se explicará la generación y aislamiento de un vórtice simple, la técnica utilizada para minimizar los efectos de borde y como calculamos el campo magnético que aparece en la muestra.

2.1.1. Runge-Kutta de cuarto orden

La dinámica de vórtices en redes de uniones Josephson viene descrita, como hemos visto en la sección 1.1.4, por un sistema de $2N$ ecuaciones diferenciales de segundo orden acopladas (1.8). Para la resolución numérica del sistema se ha utilizado el método de integración de Runge-Kutta de 4^o orden, ampliamente empleado para la integración de este tipo de ecuaciones. El método Runge-Kutta se basa en el de Euler, en el que se utiliza la derivada en un punto para estimar el punto posterior. Mientras que en el método de Euler se utiliza la pendiente en un punto para calcular el próximo a una cierta distancia, en el caso del método Runge-Kutta se calcula la pendiente en puntos intermedios para estimar el punto final con mayor precisión. De la misma forma que en el método de Euler, el paso en la integración resulta crucial para que el cálculo converja. El Runge-Kutta de 4^o orden contiene una dependencia más suave con el paso que el Euler pero es más costoso a nivel computacional ya que necesita cuatro evaluaciones previas. En este trabajo utilizamos el algoritmo estándar para la resolución de un sistema de ecuaciones diferenciales de segundo orden acopladas, que obtenemos de la referencia *Numerical Recipes* (Press et al., 1996).

2.1.2. Generación de un vórtice simple

El proceso de generación de un vórtice simple es convencional tanto en el campo de las simulaciones como en el de los experimentos. Una posibilidad para construir un vórtice en la muestra consiste en elegir las diferencias de fase de manera que construyan una de las configuraciones que aparecen en la figura 1.1. En las redes de uniones Josephson no es suficiente con fijar las diferencias de fase, ya que no tenemos la libertad de elegir las fases de cada elemento superconductor, como sí ocurre en el modelo XY. Para generar la configuración de un vórtice basta con introducir un enlace débil en algún punto de la muestra (Ciria y Giovannella, 1998). En el dibujo de la figura 2.1 representamos la red de uniones Josephson en el momento en el que empiezan a aparecer vórtices. Para que se de esta generación espontánea de nuevos vórtices por efecto de la corriente construimos un enlace débil modificando la ecuación de un enlace (vertical, en la dirección de la corriente externa) en medio de uno de los extremos de la muestra, como se ilustra en la figura 2.1, de la siguiente manera:

$$\ddot{\beta}_{ij} + \eta\dot{\beta}_{ij} + \chi \sin \beta_{ij} = \varepsilon(\xi_{i-1j} - \xi_{ij}) + \gamma, \quad (2.1)$$

donde hemos fijado el valor $\chi = 0,01$ en nuestras simulaciones. El enlace débil, bajo la acción de la corriente a través de la muestra, produce una cascada constante de defectos topológicos en ambas direcciones, conservando la carga topológica total. Ya que el enlace débil se encuentra en uno de los extremos de la muestra, solo aparecen vórtices de carga topológica positiva. Los vórtices de carga topológica opuesta salen de la muestra debido a las condiciones de contorno abiertas.

Una vez generados vórtices en el interior de la muestra es suficiente con guardar la configuración de las diferencias de fase. Para obtener un vórtice estable y aislado en la muestra simplemente cargamos la configuración en una nueva red homogénea y dejamos que el sistema se estabilice de forma apropiada.

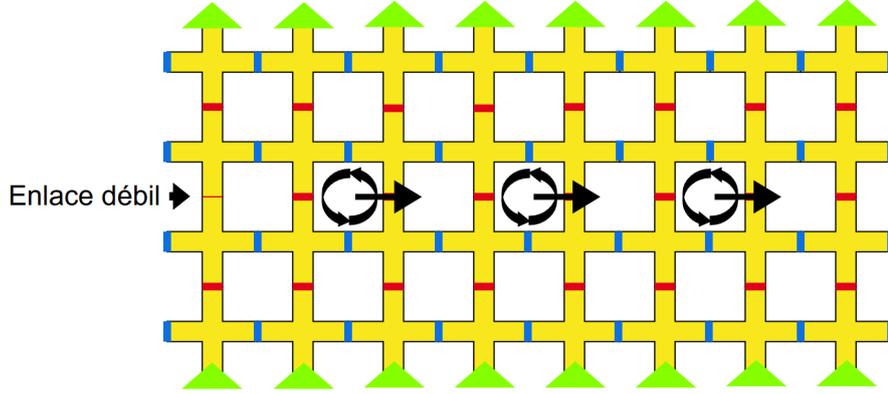


Figura 2.1: Esquema de la red de uniones Josephson durante el proceso de generación de vórtices. En el margen izquierdo se encuentra el enlace débil vertical, en la dirección de la corriente externa. Las flechas verdes indican la dirección de la corriente eléctrica externa que atraviesa la muestra. Se han representado los núcleos de los vórtices mediante dibujos en negro, cuyas flechas indican el sentido de movimiento generado por la acción de la corriente eléctrica.

2.1.3. Propogación estable

Una herramienta útil para visualizar el movimiento y comportamiento del vórtice a través de la red es la magnitud del campo magnético generado por la distribución de corrientes. Para el cálculo de la componente transversal del campo magnético utilizamos la versión discreta de la ley de Biot-Savart

$$H_z(x, y, z) = H_0 \sum_{x'y'} \frac{(y - y')J_x(x', y') - (x - x')J_y(x', y')}{|(x - x')^2 + (y - y')^2 + z^2|^{3/2}}, \quad (2.2)$$

donde $H_0 = \mu_0 J_c / 4\pi s^2$ (todas las variables están en unidades de s) y

$$\begin{aligned} J_x(x', y') &= \ddot{\alpha}_{ij} + \eta \dot{\alpha}_{ij} + \sin \alpha_{ij}, \\ J_y(x', y') &= \ddot{\beta}_{ij} + \eta \dot{\beta}_{ij} + \sin \beta_{ij} \end{aligned} \quad (2.3)$$

son las componentes de la corriente en las posiciones (x', y') en los puntos medios de cada unión. Los perfiles de la componente transversal del campo magnético a lo

largo de la red son una herramienta esencial para la interpretación de los resultados que veremos en las próximas secciones del trabajo. Mediante las representaciones del campo magnético apreciamos tanto la presencia de vórtices como de radiación Cherenkov asociada a su movimiento. Para la identificación de los núcleos de los vórtices calculamos los máximos de las circulaciones, que resaltamos con líneas continuas cerradas en los perfiles de campo magnético.

La principal limitación que se presenta a la hora de simular el movimiento de un vórtice simple es el tamaño de la muestra. Para aumentar la posibilidad de movimiento del vórtice construimos muestras más largas en una dirección que en otra, como podemos apreciar en la figura 1.2. La dirección larga (eje x) es la dirección de movimiento del vórtice, con condiciones de contorno abiertas, y la corta la transversal, con condiciones de contorno cerradas. En nuestro caso hemos impuesto las condiciones de contorno sobre las circulaciones ξ . Para las condiciones de contorno cerradas o periódicas cada plaqueta en un extremo de la red equivale a la del otro extremo, mientras que para las condiciones abiertas hemos forzado a que las circulaciones en los extremos sean igual a cero. En nuestros cálculos hemos simulado una muestra de 100×50 sitios.

Para maximizar la posibilidad de movimiento a través de la red, además de construir una red rectangular, se ha utilizado un artificio en la simulación que posibilita el movimiento del vórtice sin límites. El algoritmo utilizado modifica la red sobre la que se mueve el vórtice de manera que forzamos a que el centro del defecto topológico se encuentre siempre en un punto concreto de la muestra, en el que se encuentra el vórtice en la figura 2.2. En la figura 2.2 representamos mediante un mapa de colores la componente vertical del campo magnético para el caso en el que un vórtice se propaga de forma estable a través de la red. En esta imagen vemos el centro del vórtice y también la cola de radiación Cherenkov provocada por el movimiento de este. Cuando el centro del vórtice salta de una plaqueta a otra eliminamos una columna en la parte trasera y añadimos otra en la delantera. La tasa de refresco de este proceso también nos sirve para medir la velocidad del vórtice. Este procedimiento nos permite estudiar los efectos que proceden de manera

intrínseca del movimiento del vórtice a través de la red, sin influencia de los extremos de la muestra.

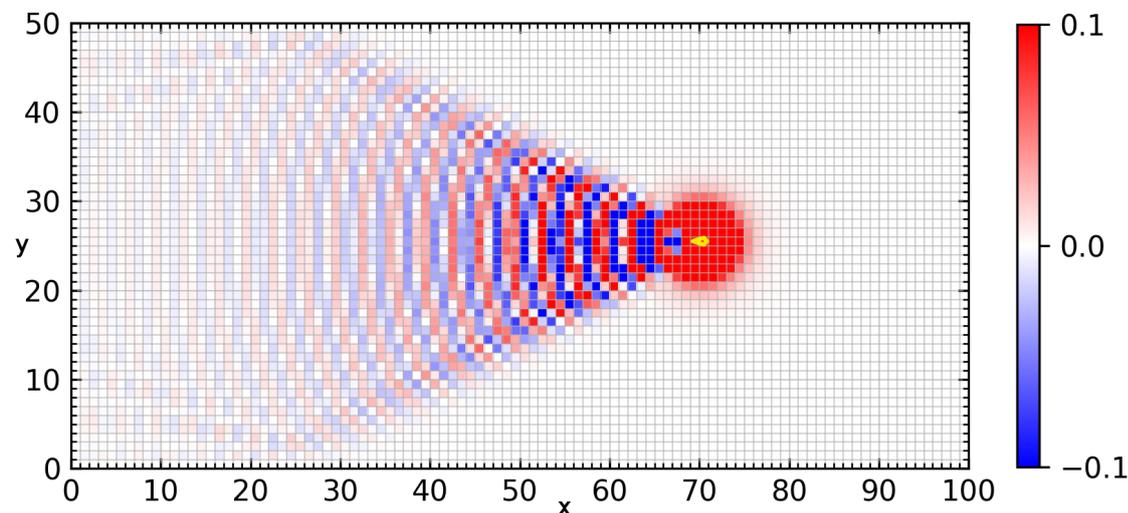


Figura 2.2: Mapa de color de la componente vertical del campo magnético para un vórtice moviéndose a través de una red de uniones Josephson. La línea amarilla representa un máximo de circulación en la plaqueta del centro del vórtice, donde se encuentra el defecto topológico. Se aprecia el cono de radiación Cherenkov en la dirección en la que se mueve el vórtice. Este cálculo ha sido realizado bajo condiciones $\eta = 0,1$, $\varepsilon = 1,0$ e $i = 0,575$.

2.2. Método de Monte Carlo para vidrios de electrones

El método de Monte Carlo es un método numérico estocástico mediante el que es posible resolver problemas numéricos complejos. En general, el método de Monte Carlo consiste en la realización de sucesivas pruebas con números aleatorios para abordar problemas tanto de naturaleza probabilística como determinista. El uso de la aleatoriedad para realizar distintos tipos de cálculo aparece ya a finales del siglo XVIII (Kalos y Withlock, 2004), pero no será hasta la eclosión de la computación digital moderna cuando las técnicas que explotan el potencial de los números

aleatorios empiezan a cobrar verdadera importancia. La flexibilidad del método de Monte Carlo hace que se aplique en multitud de campos y situaciones diferentes. Concretamente, en el campo de la física de la materia condensada encontramos el método de Monte Carlo en la simulación de sistemas tan distintos como el modelo de Ising en magnetismo, el modelo de Potts en vidrios o modelos de percolación en transiciones de fase (Binder, 1992), etc.

En nuestro caso el método de Monte Carlo se compone de los siguientes procesos. Primero elegimos un par de sitios de la muestra. En caso de que un sitio del par esté ocupado y otro vacío, le podemos asociar al par una probabilidad de salto, tal y como hemos introducido en la sección 1.2.1. En caso de que ambos se encuentren ocupados o vacíos, elegimos otro par de sitios. Conocida la probabilidad de salto, generamos un número aleatorio entre 0 y 1: si el número aleatorio es menor que la probabilidad de salto, realizamos el salto, si es mayor, no. Si el sorteo resulta exitoso, eliminamos el electrón del sitio ocupado y lo incluimos en el vacío, en caso contrario volvemos a elegir un nuevo par. Así, se actualiza la configuración de los electrones a lo largo de la muestra.

La probabilidad de transición de un estado a otro puede depender de la trayectoria de configuraciones que el sistema haya recorrido, de los estados anteriores al que se encuentra. Una característica interesante de algunos sistemas que nos puede ayudar a reducir la complejidad del cálculo de las probabilidades de transición entre estados es la propiedad de Markov. Consideramos a un sistema como markoviano cuando se cumple que las probabilidades de transición solo dependen de la configuración inicial y final, y no de las configuraciones anteriores. Para una cadena de Markov podemos escribir las probabilidades asociadas a una transición arbitraria como $P(\mathbf{x}_j|\mathbf{x}_i)$, donde x_i y x_j representan diferentes configuraciones de los electrones en la muestra.

El método de Monte Carlo puede aplicarse de formas muy diversas. La forma más común de aplicar el método de Monte Carlo en física es para el estudio de propiedades de equilibrio, donde es posible hacer uso de la condición de balance

detallado

$$P(\mathbf{x}_j|\mathbf{x}_i)P(\mathbf{x}_i) = P(\mathbf{x}_i|\mathbf{x}_j)P(\mathbf{x}_j), \quad (2.4)$$

donde $P(\mathbf{x}_j|\mathbf{x}_i)$ son las probabilidades de transición de una configuración a otra y $P(\mathbf{x}_i)$ es la probabilidad de encontrar al sistema en la configuración \mathbf{x}_i . De todos modos, es posible adaptar el método de Monte Carlo para obtener la dinámica de ciertos sistemas. Llamamos métodos de Monte Carlo dinámicos a los métodos que son capaces de reflejar la evolución temporal del sistema de forma fidedigna. Una de las ventajas del método de Monte Carlo dinámico es que tiene en cuenta de manera natural las posibles correlaciones espaciales y temporales de los electrones.

Para el caso que estamos estudiando, como hemos visto en el capítulo anterior, la probabilidad del sistema para realizar una transición viene dada por la ecuación (1.10). En caso de que la transición disminuya la energía del sistema la probabilidad de salto será independiente de la temperatura y solo incorporará el factor espacial

$$\Gamma_{ij}^R = \tau_0^{-1} \exp(-2r_{ij}/\xi). \quad (2.5)$$

Estas probabilidades forman parte de la dinámica que viene dada por los saltos de un electrón. Para nuestras simulaciones descartaremos los ordenes superiores, es decir, saltos de electrones simultáneos. Además, consideraremos que los sitios solo pueden ser ocupados por un único electrón, es decir, restringimos los posibles valores de las ocupaciones de los sitios a 0 y 1. Esto implica asumir que la interacción dentro de los sitios es mucho más grande que el resto de energías relevantes.

Otra cuestión a abordar si se quiere capturar la dinámica del sistema mediante la simulación Monte Carlo es el tiempo. En este caso el tiempo de un paso Monte Carlo, es decir, de realizar N pruebas¹, será igual al factor τ_0 de la probabilidad de la ecuación (1.10). Una de las características habituales de este tipo de métodos aplicados a sistemas a muy bajas temperaturas es su baja tasa de éxito. Existen algunas modificaciones en el algoritmo que nos permiten atajar este problema, y en nuestro caso hemos utilizado la modificación aportada por Tsigankov et al. (2003). Gracias a ella la eficacia del método de Monte Carlo dinámico mejora considerablemente,

¹Donde N es el tamaño del sistema.

disminuyendo así el tiempo de computación.

2.2.1. Método de Monte Carlo dinámico

La modificación del método de Monte Carlo dinámico que se ha utilizado en este trabajo consiste en aprovechar que la probabilidad de salto se compone de un producto de dos elementos que podemos tratar por separado, ya que realizar dos pruebas para cada factor equivale a hacer una con el producto de ambos. Es posible tener en cuenta el factor de distancias a la hora de elegir el sitio que va a saltar y, a continuación, proseguir solo con el factor de energías². Teniendo en cuenta el factor de distancias en la elección del salto a realizar se aumenta notablemente la tasa de éxito de cada prueba. El único inconveniente de este procedimiento es el aumento en memoria que supone. En el momento de construcción de la muestra es necesario guardar todos los pares y ordenarlos en función de su distancia. Mediante la generación de un primer número aleatorio elegimos un par de acuerdo con el factor espacial, tal y como lo hemos escrito en la ecuación (2.5). La generación de un segundo número aleatorio nos permite compararlo solo con el factor de energías, que podemos escribir como

$$\Gamma_{ij}^E = \min \left(\exp \left[\frac{-\Delta E_{ij}}{kT} \right], 1 \right). \quad (2.6)$$

Si una vez elegido el par comprobamos que la energía del sistema disminuye al realizarlo, llevamos a cabo la transición automáticamente. Podemos calcular la modificación en el tiempo de cada paso Monte Carlo como

$$\Delta t = \left(\sum_i \sum_{j \neq i} \exp \left(\frac{2r_{ij}}{\xi} \right) \right)^{-1}, \quad (2.7)$$

que ahora depende del factor espacial de las probabilidades de salto.

Podemos comparar la eficiencia que esta modificación del método de Monte Carlo dinámico aporta a nivel computacional. En el método de Monte Carlo tradicional

²Cabe destacar que en un método de Monte Carlo tradicional los sitios en los que se prueba la transición se suelen elegir de forma aleatoria.

elegimos al azar el par que vamos a probar para realizar la transición. Una vez elegido se calcula la probabilidad de salto en función de su distancia, ecuación (2.5), y su diferencia de energías y se sortea un número aleatorio para comprobar si realizamos la transición o no. Un par elegido al azar tendrá una distancia del orden de L , y en la mayoría de los casos se rechazará el salto por la ecuación (2.5). Eligiendo directamente los pares proporcionalmente a Γ_{ij}^R se evita dicho rechazo. La probabilidad de elegir al azar una transición cualquiera va como $1/N^2$, donde N es el número de sitios del sistema. Por lo tanto, el coste computacional de este método es de orden $O(N^2)$. Si elegimos el par teniendo en cuenta el factor de probabilidad asociado al efecto túnel, el tiempo asociado a cada transición va como $1/N$. Es decir, estamos reduciendo el coste computacional a $O(N)$.

Una de las características que hace más atractivo al método de Monte Carlo es que, gracias a que reproduce la evolución temporal en cada instante, tiene en cuenta el efecto de las posibles correlaciones entre los electrones a lo largo de la muestra, tanto espaciales como temporales. También nos permite guardar la conductividad para cada uno de los enlaces del sistema, ventaja que explotaremos en detalle en secciones posteriores. Existen otros métodos que obvian la cuestión de las correlaciones y, por ello, resultan más eficientes a nivel computacional. En la siguiente sección explicamos como hemos aplicado uno de estos métodos simplificados, la red de resistencias aleatorias.

2.3. Detalles de las simulaciones Monte Carlo

2.3.1. Obtención de la conductividad

Para realizar medidas de conductividad en las muestras, es necesario llevarlas a un estado estacionario de conducción mediante la acción de un campo eléctrico externo que atraviese la muestra o de una diferencia de potencia entre los extremos. En cuanto a las simulaciones, podemos utilizar de manera indistinta estos dos métodos para incluir el aporte energético que hará que las cargas se muevan en una

dirección. Hemos aplicado condiciones de contorno periódicas en todos los extremos de la muestra y se ha aplicado un campo eléctrico externo homogéneo a lo largo de la muestra. En particular, el efecto del campo se ha incluido añadiendo el término relativo al cambio de energía por efecto del campo en la diferencia de energía de los sitios. Así, podemos reescribir la diferencia de energía entre un sitio i y otro j , para en caso no interactuante, como

$$\Delta\epsilon_{ij} = |\epsilon_i - \epsilon_j| + \Delta x_{ij} E, \quad (2.8)$$

donde E es el módulo del campo eléctrico en el eje x y Δx_{ij} es la proyección en el eje x de la distancia entre los sitios i y j . Para el cálculo de la conductividad de la muestra hacemos uso de este mismo valor Δx_{ij} , ya que la obtenemos a través del cálculo de la velocidad de la carga. La carga en el interior de la muestra se mueve una distancia total Δx_{ij} en un tiempo t . Asumiendo que las cargas tienen valor unidad, podemos escribir el módulo de la densidad de corriente en el eje x como

$$j = \frac{\sum_{\text{saltos}} \Delta x_{ij}}{\tau_M N_{\text{pruebas}}}, \quad (2.9)$$

donde \sum_{saltos} es la suma para todos los saltos realizados, τ_M es el tiempo asociado a la prueba del salto de un par y N_{pruebas} es el número total de pruebas de salto entre dos sitios que se dan en la simulación. Para calcular la conductividad, simplemente tenemos que considerar los factores espaciales que nos encontramos en el caso tridimensional, así la conductividad resulta

$$\sigma = \frac{\sum_{\text{saltos}} \Delta x_{ij}}{\tau_M N_{\text{pruebas}} L^3 E}. \quad (2.10)$$

Es necesario destacar que este procedimiento de cálculo de conductividad de la muestra necesita un tiempo de termalización, al que se puede asociar un tiempo característico $1/\sigma$.

Este cálculo de la conductividad entraña ciertas complicaciones que debemos tener en cuenta a la hora de estimar el error estadístico de nuestros datos.

2.3.2. Fuentes de error

De las simulaciones realizadas extraemos valores de la conductividad en función de las condiciones físicas del sistema (fundamentalmente la temperatura), calculada a partir de promedios. Las fuentes de aleatoriedad en la simulación de las conductividades provienen de las pruebas Monte Carlo y de realizar experimentos para diferentes muestras construidas aleatoriamente. Conviene, entonces, tener en cuenta que es necesario realizar simulaciones suficientemente largas, así como promediar para un número de muestras grande. Un tiempo suficientemente largo en las simulaciones disminuye el error provocado por la aleatoriedad de las sucesivas pruebas Monte Carlo, mientras que el promedio en muestras disminuye el error provocado por la aleatoriedad de la muestra concreta que estemos simulando. Para el tratamiento de los datos de conductividad tendremos pues que aplicar cierta estadística que conviene tener en cuenta. Además, al calcular la conductividad en la ecuación (2.10) como la pendiente de una recta, estamos asumiendo que los datos responden a una tendencia lineal con el tiempo.

En la figura 2.3 representamos un histograma de las conductividades para diferentes muestras del mismo tamaño y que han sido simuladas a la misma temperatura. El error de la conductividad proveniente del promedio de muestras viene dado por el error estándar, ya que las conductividades responden a una distribución gaussiana, como se aprecia en la figura 2.3. Por lo tanto, el error asociado al promedio en muestras vendrá dado por su error estándar $\delta\sigma = \sqrt{\text{Var}(\sigma)/N_{\text{muestras}}}$.

El error asociado al tiempo de simulación utilizado para estimar la conductividad viene dado por el error asociado al estimar la pendiente de la recta mediante la ecuación (2.10), y que podemos escribir de la siguiente manera

$$\delta\bar{\sigma} = \frac{1}{\tau_M L^3 E} \sqrt{\frac{\text{Var}[\alpha]}{N_{\text{pruebas}}}}, \quad (2.11)$$

donde $\alpha = \sum_{\text{saltos}} \Delta x_{ij}$, como hemos visto en la ecuación 2.10. En este caso la varianza se realiza respecto al promedio de los diferentes saltos realizados a lo largo del tiempo.

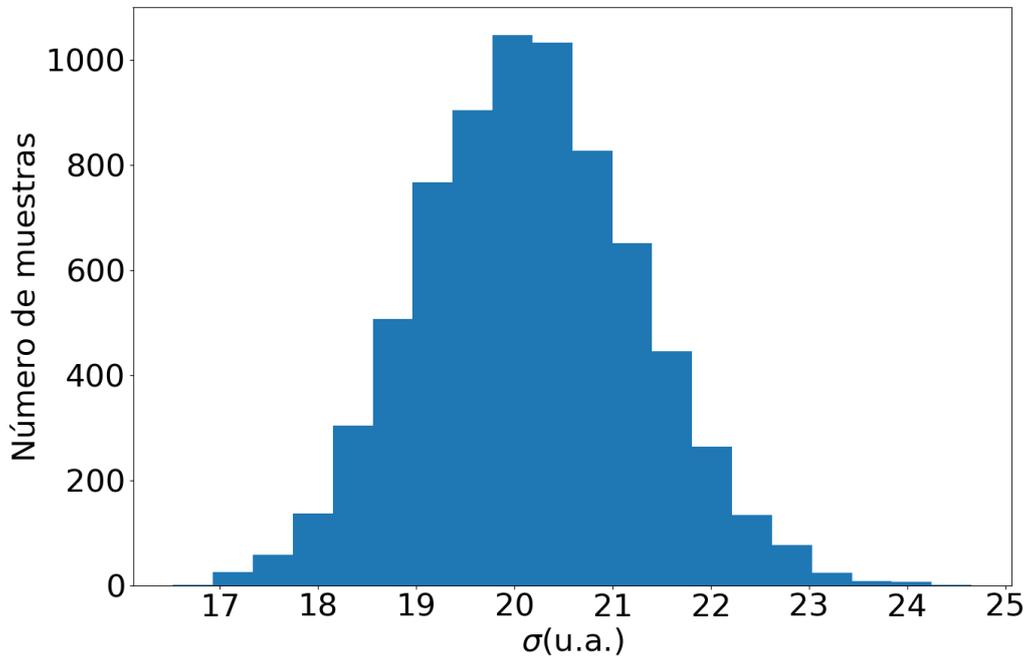


Figura 2.3: Histograma de las conductividades para un tamaño y temperatura fijado. Podemos apreciar como los datos responden a una distribución gaussiana.

Otro de los efectos a tener en cuenta para obtener la conductividad con precisión es la posible variación de la conductividad de las muestras con el tiempo, es decir, que la pendiente de la carga frente al tiempo varíe. Mientras que para disminuir el error para el promedio de muestras tendremos que aumentar el número de muestras, en el caso del error debido al tiempo de simulación convendrán simulaciones más largas en las que se aprecie mejor comportamiento lineal de nuestros datos. A medida que nos alejamos del tiempo de termalización de las muestras, disminuimos el error procedente de asumir una conductividad lineal con el tiempo.

Las estimaciones de estos errores concluyen que para las muestras y los tiempos que han sido simulados, existe un peso sistemáticamente mayor en el error proveniente del número de muestras, que ha sido para todos los casos ~ 100 , excepto para los tamaños más pequeños, donde se necesitan más muestras para obtener buenos

promedios. El error estadístico del promedio respecto a las muestras nunca excede el valor relativo del 12 % en el peor de los casos.

2.3.3. Régimen lineal

Otro de los parámetros que es necesario controlar en las simulaciones es la magnitud del campo eléctrico externo. Para valores pequeños del campo eléctrico se pueden empezar a excitar saltos que produzcan corriente pero, a medida que lo incrementamos, es posible que aparezcan respuestas no lineales en la muestra.

Para el objetivo del presente trabajo se espera una respuesta lineal del sistema. Resulta importante entender a fondo el comportamiento más básico (lineal) de la conducción por VRH para entender por completo el funcionamiento de este tipo de sistemas. A las bajas temperaturas donde encontramos es fácil excitar no linealidades en el sistema debido al débil acoplamiento entre electrones y fonones, que impide que se disipe la potencia eléctrica con facilidad (Pollak et al., 2013). Como el foco del estudio se encuentra en la determinación de las dependencias en temperatura debido a percolación, una posible no linealidad aparecería como efecto adicional, introduciendo error sistemático en nuestras medidas de conductividad. Así, necesitamos asegurar que todos los datos aquí presentados para el propósito que nos concierne se encuentran libres de efectos no lineales.

La forma de asegurar que nos encontramos en el rango de intensidad del campo eléctrico en que el sistema responde de forma lineal es estableciendo la cota a partir de la cual esta condición desaparece. Un conjunto de medidas de la corriente eléctrica para distintos valores del campo nos permiten realizar una estimación al respecto. En la figura 2.4 mostramos diferentes valores de la conductividad en función del campo eléctrico externo para un valor fijo de temperatura. La conductividad en función del campo eléctrico muestra una región lineal, hasta $E = 0,05$, para seguir creciendo exponencialmente a partir de este valor del campo. Teniendo en cuenta que en nuestras simulaciones el campo eléctrico lo fijamos como parámetro de manera que $E = T/10$, podemos constatar que nos encontramos en el régimen lineal en todos nuestros experimentos numéricos.

Las no linealidades pueden aparecer con campos más débiles a medida que bajamos la temperatura, por lo que es conveniente mantener un campo que dependa de esta. Una vez considerado y analizado este efecto, podemos eliminarlo como posible fuente de error sistemático en los datos provenientes de nuestras simulaciones.

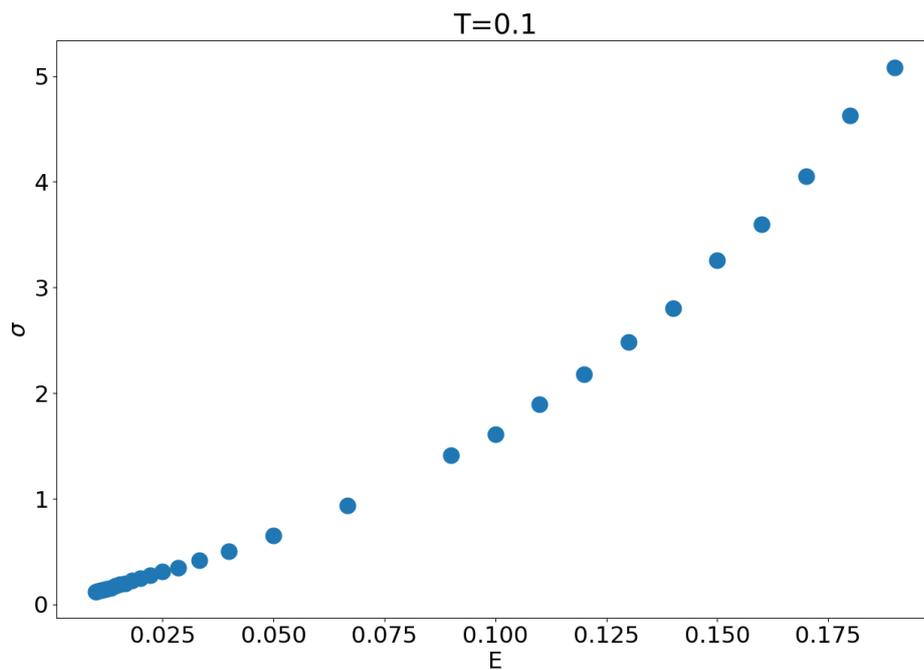


Figura 2.4: Conductividad en función del campo eléctrico externo a temperatura $T = 0,1$.

2.4. Red de resistencias aleatorias

Para abordar el problema de la conductividad en sistemas de electrones desordenados, Miller y Abrahams (1960) propusieron el modelo de una red de resistencias aleatorias. La construcción de la red de resistencias aleatorias consiste en asignar a cada posible transición en la muestra un enlace con una determinada resistencia. Una vez construida la red de resistencias es posible plantear cual será la conductividad total del sistema. Aun así, el cálculo de la conductividad total de una red de

resistencias aleatorias no es una cuestión trivial, como vamos a ver a continuación.

Existen en la literatura diversos métodos para calcular la conductividad de una red de resistencias aleatorias. Shklovskii y Efros (1984) destacan que el cálculo de la conductividad total del sistema a partir de la media de las conductividades de los enlaces no aporta más información que una cota superior para la conductividad. Uno de los métodos más comunes para abordar el problema de la red de resistencias aleatorias es la teoría de percolación, que se ha presentado en el capítulo anterior. Hay que destacar que el planteamiento del problema de la red de resistencias aleatorias es inexacto, ya que no tiene en cuenta todas las posibles contribuciones a la corriente que se dan en la red. Aun así, ha sido históricamente un método viable para estudiar este tipo de sistemas, cuando no era posible una resolución analítica de los mismos por falta de recursos computacionales.

En este apartado introducimos el método matricial del que hacemos uso para resolver la conductividad de la red de resistencias aleatorias. El método matricial consiste en la construcción de un sistema de ecuaciones que nos permita obtener el resultado de la corriente que atraviesa el sistema a partir del campo eléctrico externo. Dada una conductividad para cada resistencia del sistema, como es posible resolver el problema haciendo uso de las ecuaciones de Kirchhoff y de la ley de Ohm. En virtud de la ley de Ohm podemos escribir la corriente de un enlace entre el nodo i y el nodo j como

$$G_{ij}(V_i - V_j), \quad (2.12)$$

donde $G_{ij} = G_{ji}$ es la conductancia entre el nodo i y el j y V_i es el valor del potencial en un nodo i . La conductancia G_{ij} es proporcional a la probabilidad de salto Γ_{ij} por lo que sus valores son conocidos en la simulación. También podemos definir la intensidad que atraviesa un nodo mediante la siguiente expresión

$$I_i = \sum_j G_{ij}(V_i - V_j), \quad (2.13)$$

donde el subíndice j cuenta los nodos con los que se encuentra enlazado el nodo i .

A continuación utilizaremos una versión simplificada, con solo tres sitios y unidimensional, para construir las ecuaciones que describen el problema de forma siste-

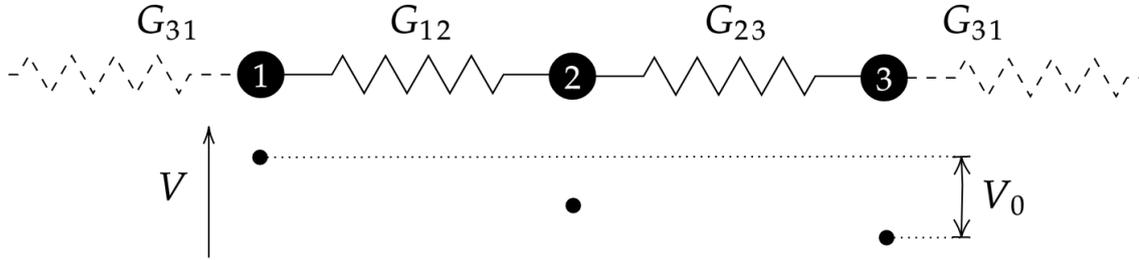


Figura 2.5: Esquema del sistema unidimensional simplificado que utilizamos para la construcción de las ecuaciones matriciales que permiten resolver el problema de la red de resistencias aleatorias. Las etiquetas G_{ij} dan nombre a las conductancias de cada enlace entre nodo i y nodo j . Los puntos de la parte inferior representan los valores del potencial eléctrico en cada punto. La diferencia de potencial entre los puntos unidos por las condiciones de contorno periódicas se ha etiquetado como V_0 .

mática. Después llevaremos a cabo la generalización para un sistema arbitrariamente grande y tridimensional. Supongamos un sistema con tres nodos y unidimensional como el que hemos dibujado en la figura 2.5. Teniendo en cuenta que la suma de corrientes que entran y salen de un nodo de la red es igual a cero, es decir, la intensidad de la ecuación (2.13) tiene que ser nula en cualquier nodo, podemos escribir la ecuación de conservación de la corriente en un punto intermedio de la red como

$$\begin{aligned} G_{12}(V_2 - V_1) - G_{23}(V_3 - V_2) &= 0; \\ -G_{12}V_1 + (G_{12} + G_{23})V_2 - G_{23}V_3 &= 0. \end{aligned} \tag{2.14}$$

Si suponemos condiciones de contorno periódicas que unan el nodo 3 con el nodo 1, tenemos que añadir una sutileza en las ecuación para la suma de corrientes nula en el nodo 1. En este punto, se tiene que tener en cuenta que para cumplir con las condiciones de contorno periódicas las diferencias de potencial tienen que seguir cayendo del nodo 3 al nodo 1. Para que la condición de contorno se cumpla introducimos un potencial V_0 que añadiremos al límite de la muestra, como se

ilustra en la figura 2.5. Así, la ecuación (2.14) en el límite de la muestra queda de la siguiente manera

$$\begin{aligned} (V_1 - (V_0 + V_3))G_{31} - G_{12}(V_2 - V_1) &= 0; \\ (G_{31} + G_{12})V_1 - G_{12}V_2 - G_{31}V_3 - G_{31}V_0 &= 0. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Es posible escribir las ecuaciones (2.14) y (2.15) en forma matricial

$$\begin{pmatrix} G_{12} + G_{13} & -G_{12} & -G_{13} \\ -G_{12} & G_{21} + G_{23} & -G_{23} \\ -G_{13} & -G_{23} & G_{13} + G_{23} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \end{pmatrix} = V_0 \begin{pmatrix} G_{13} \\ 0 \\ -G_{13} \end{pmatrix}. \quad (2.16)$$

De esta manera podemos definir la matriz \hat{G} y el vector \mathbf{q} para un sistema de n sitios de la siguiente manera, por un lado

$$\hat{G} = -G_{i,j} + \left(\sum_{k \neq i} G_{i,k} \right) \delta_{i,j} \quad (2.17)$$

donde δ_{ij} es la delta de Kronecker. Por otro definimos el vector que incluye las condiciones de contorno, en este vector todas las componentes tendrán que ser 0 excepto las que atraviesan el contorno de la muestra. En una dirección serán positivas y en otra negativas. Con estas definiciones podemos escribir de manera compacta la ecuación (2.16) como

$$\hat{G}\mathbf{v} = V_0\mathbf{q}, \quad (2.18)$$

donde \mathbf{v} contiene los valores del potencial en cada punto de la muestra. Hay que destacar que la ecuación (2.18) no depende de las dimensiones del sistema. Podemos aplicar este método para sistemas de cualquier tamaño y dimensionalidad, ya que solo tenemos que conocer cuales son las conexiones que imponen nuestras condiciones de contorno periódicas. En forma matricial, podemos escribir la ecuación (2.18) para un conjunto de n nodos de la siguiente manera

$$\begin{pmatrix} \sum_{i \neq 1} G_{1i} & -G_{12} & \dots & -G_{1n} \\ -G_{12} & \sum_{i \neq 2} G_{2i} & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ -G_{1n} & \dots & & \sum_{i \neq n} G_{ni} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_1 \\ \vdots \\ V_n \end{pmatrix} = V_0 \begin{pmatrix} G_{n1} \\ 0 \\ \vdots \\ -G_{n1} \end{pmatrix}. \quad (2.19)$$

Esta ecuación está escrita para el caso de conexiones a primeros vecinos y en una dimensión, ya que solo estamos aplicando las condiciones de contorno periódicas uniendo el último nodo con el primero. En caso de aumentar las dimensiones y las posibilidades de salto en el sistema, el conjunto de nodos conectados sería mayor, haciendo que tengamos menos ceros en el vector \mathbf{q} .

En la ecuación (2.19) tenemos N incógnitas que se corresponden con el valor del potencial de cada nodo. Por lo tanto, podemos resolver el problema simplemente invirtiendo la matriz de conductancias. Con lo que podemos escribir el vector \mathbf{v} como

$$\mathbf{v} = V_0 \hat{\mathbf{G}}^{-1} \mathbf{q}. \quad (2.20)$$

Para determinar la conductividad de la muestra es necesario seleccionar las intensidades que atraviesan una superficie cualquiera perpendicular a la dirección de la corriente. Por construcción del problema ya contamos con una superficie relevante en la que imponemos las condiciones de contorno periódicas. El vector \mathbf{q} , como se aprecia en la ecuación (2.19), solo contiene la información relativa al borde de la muestra en el que aplicamos las condiciones de contorno periódicas, de modo que la intensidad de corriente que atraviesa el sistema vendrá dada por el siguiente producto escalar

$$I = \mathbf{q} \cdot \mathbf{v}. \quad (2.21)$$

Conocidas las dimensiones de la muestra y el campo eléctrico, resulta trivial el cálculo de la conductividad σ .

2.5. Red de condensadores

Haciendo uso de la idea de la red de resistencias aleatorias, podemos construir una red de condensadores para modelar la conductividad por *hopping* en sistemas desordenados de alta constante dieléctrica. En este caso, suponemos que los enlaces entre los diferentes sitios no se cruzan, de manera que solo tendremos enlaces que conecten primeros vecinos. Nombramos a las capacidades que enlazan cada sitio C_{ij} distribuidas exponencialmente tal que $C_{ij} = Ce^\phi$, donde $\phi \in [-B/2, B/2]$. Hemos

elegido $C = 1$ y $B = 2$. Conectamos el extremo izquierdo de la muestra al suelo y el extremo derecho a un potencial V e imponemos condiciones de contorno periódicas en la dirección vertical. En el caso bidimensional, si queremos tener en cuenta las líneas de campo que salen de la muestra en dirección transversal, debemos incluir conexiones para cada sitio con el suelo, a una capacidad C_0 .

En la figura 2.6 presentamos el esquema de la red de condensadores bidimensional que hemos simulado para estudiar el régimen activado. También añadimos su sección transversal, donde podemos ver las conexiones a los condensadores C_0 .

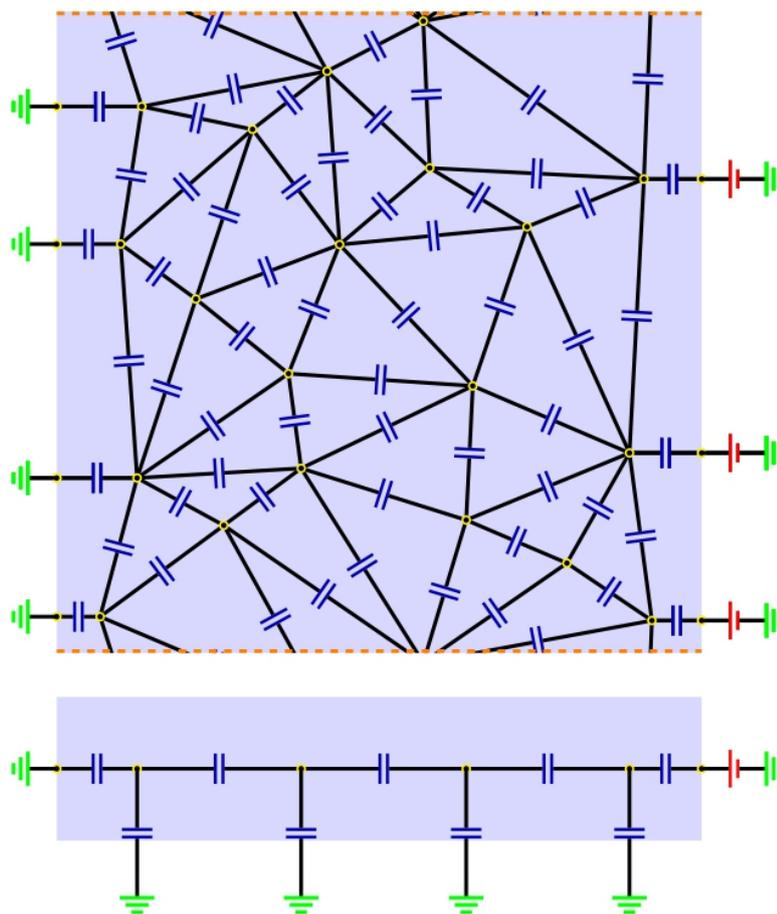


Figura 2.6: Arriba dibujamos el esquema de la red de condensadores bidimensional. Abajo presentamos su sección transversal, con las conexiones a los condensadores C_0 .

Las cargas de cada sitio corresponderán a la suma de la carga en las plaquetas

de los condensadores con los que esté conectado. Siendo esta carga $Q_i = \sum_j q_{ij}$, donde q_{ij} es la carga en las plaquetas del condensador que conecta los sitios i y j , y que cumplen

$$q_{ij} = \sum_j C_{ij}(V_i - V_j). \quad (2.22)$$

Podemos construir un vector de cargas \mathbf{Q} y un vector de diferencias de potencial \mathbf{V} , y proceder mediante el formalismo de matrices, de forma similar a como se ha procedido con la red de resistencias aleatorias.

En este caso, la relación entre \mathbf{Q} y \mathbf{V} la podemos escribir como $\mathbf{Q} = \mathcal{C}\mathbf{V}$ donde definimos la matriz de capacitancias

$$[\mathcal{C}]_{ij} = \left(\sum_{k \neq i} C_{ik} \right) \delta_{ij} - C_{ij}. \quad (2.23)$$

Entonces la energía electrostática total viene dada por

$$H = \frac{1}{2} \mathbf{Q} \mathcal{C}^{-1} \mathbf{Q}^T. \quad (2.24)$$

Además, con este modelo podemos calcular la energía de transición de una carga de un sitio a otro, que viene dada por la siguiente expresión

$$\Delta_{ij} = V_j - V_i - C_{ij}^{-1} + \frac{1}{2} [C_{ii}^{-1} + C_{jj}^{-1}]. \quad (2.25)$$

Las energías Δ_{ij} pueden utilizarse en un método de Monte Carlo, tal y como hemos visto en la sección anterior.

Capítulo 3

Dinámica de vórtices en redes de uniones Josephson

En el presente capítulo hemos centrado nuestra atención en la dinámica de vórtices en redes de uniones Josephson bajo la acción de una corriente que los empuja. Las redes de uniones Josephson están conformadas por uniones de islas superconductoras susceptibles de que se formen defectos topológicos en su interior. El carácter discreto de este tipo de redes nos permite introducirlas de manera muy natural en un modelo para realizar cálculos. En las redes de uniones, bajo ciertas condiciones, pueden aparecer vórtices, que se mueven empujados por el efecto de una corriente eléctrica externa. Podemos ver esta fuerza de empuje como una fuerza de Lorentz. A medida que aumenta la corriente externa, aparecen inestabilidades en el movimiento de los vórtices que generan nuevos pares vórtice-antivórtice en la muestra. La aparición continua de más y más vórtices termina rompiendo el control que teníamos sobre las diferencias de fase entre islas superconductoras a lo largo de la muestra. En el estudio de las inestabilidades durante el movimiento de los defectos topológicos se ha encontrado una riqueza de escenarios posibles, donde la proliferación de vórtices en cascada depende fuertemente de los parámetros de las redes involucradas. Concluimos este capítulo con un diagrama de fases de los diferentes patrones que nos permite tener una imagen global del comportamiento de este tipo de sistemas en el límite a partir del cual los defectos topológicos empiezan

a autorreplicarse en el sistema.

Este tipo de fenómenos pueden aportar información no solo sobre redes de uniones Josephson, sino también sobre sistemas muy diferentes pero donde resulta relevante la dinámica de defectos topológicos. Por ejemplo, los patrones que se forman para las inestabilidades de vórtices pueden relacionarse con la dinámica de defectos en redes cristalinas. En el caso de las redes cristalinas la fuerza de empuje vendría dada por la tensión y los defectos pueden ser dislocaciones, vacantes o la presencia de átomos intersticiales.

3.1. Estado estacionario

Tal y como se ha descrito en el capítulo anterior, una vez generado y controlado un vórtice en la red de uniones Josephson, es posible estudiar su movimiento cuando se encuentra empujado por una corriente externa. Hemos calculado las velocidades de vórtices aislados para diferentes valores de los parámetros de las redes de uniones Josephson y de la corriente externa. Para corrientes pequeñas, menores que un valor crítico, el vórtice se encuentra anclado en la red, dado que su energía no rebasa la energía de desanclaje de la red. Existe un cierto valor de la corriente externa para la que el vórtice empieza a moverse. Llamamos a este valor crítico corriente de desanclaje (i_d), y lo definimos como el valor mínimo de la corriente externa para que un vórtice anclado en la muestra empiece a moverse. Otro valor crítico relevante para la corriente externa es la corriente de inestabilidad (i_s). A medida que se aumenta la corriente externa y esta llega a la corriente de inestabilidad, el vórtice inicial se vuelve inestable y empieza a generar pares vórtice-antivórtice que se organizan a lo largo de la muestra en distintos patrones que estudiaremos a continuación.

En las gráficas de las figuras 3.1 y 3.2 representamos la velocidad del vórtice en función de la corriente normalizada simulada para diferentes valores de los parámetros de la red. Para obtener los perfiles de velocidad hemos aplicado una rampa de corriente continua con una pendiente suficientemente baja como para que no

provoque inestabilidades no deseadas en el movimiento del vórtice.

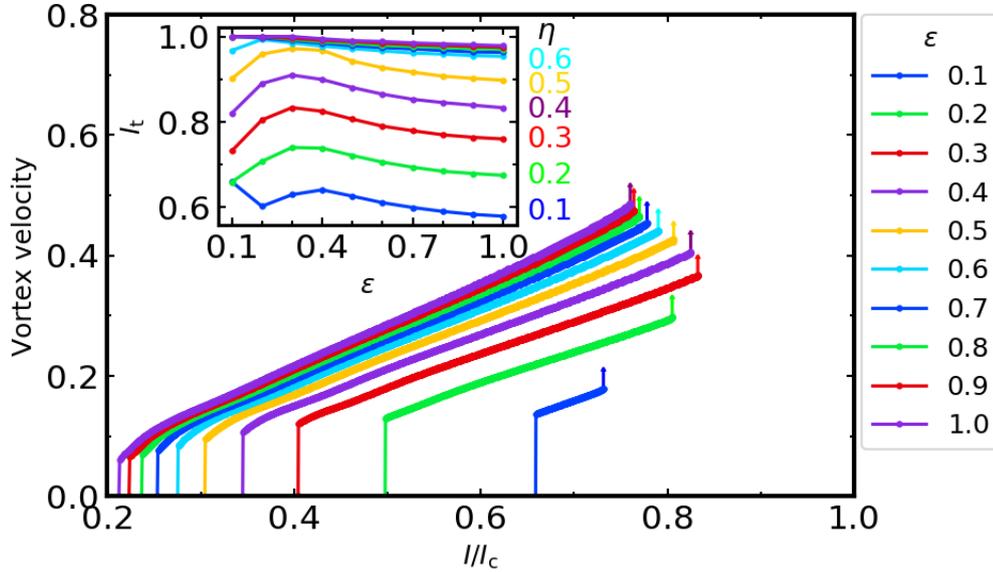


Figura 3.1: Velocidad del vórtice en función de la corriente i para diferentes valores de ϵ y $\eta = 0,3$. Cada curva empieza en la corriente de desanclaje i_d y termina en la corriente crítica i_s , marcada con una flecha vertical que indica la transición a un estado dinámico sin orden de largo alcance. En la gráfica interior hemos representado los valores de la corriente externa a partir de la cual el vórtice se vuelve inestable para diferentes valores de los parámetros de la red η y ϵ .

En la figura 3.1 presentamos la velocidad del vórtice inicial en función de la corriente externa para diferentes valores de la inductancia de las uniones y manteniendo el amortiguamiento constante. Vemos que las corrientes de desanclaje aumentan progresivamente al disminuir la inductancia de la red. Una vez desanclados, los vórtices se mueven a una velocidad constante y que crece progresivamente a medida que aumentamos la corriente externa. En este punto en el que podemos obtener una medida de la velocidad del vórtice, decimos que se encuentra en estado de propagación estable. Para cierto valor de la corriente externa, la corriente de inestabilidad (i_s), apreciamos que las curvas de velocidad se interrumpen. En este punto el vórtice alcanza una inestabilidad que provoca la creación de nuevos pares

vórtice-antivórtice producto del movimiento del defecto inicial. Esta inestabilidad se manifiesta con un aumento repentino de la velocidad del vórtice, que hemos ilustrado con una flecha vertical en la gráfica. La creación de nuevos pares junto al efecto de la corriente provoca que los vórtices con la misma carga topológica que el inicial se acumulen, aumentando la fuerza de empuje ejercida por la corriente externa. A partir de este punto, al aparecer nuevos defectos topológicos en la red, el método de monitorización de la velocidad del vórtice deja de ser efectivo. La gráfica interior en la figura 3.1 muestra los valores de i_s en función tanto de la inductancia como del amortiguamiento. Aunque apreciamos que la velocidad a la que empiezan las inestabilidades sube con la inductancia, encontramos también una no monotonía respecto a la intensidad externa a la que estas inestabilidades aparecen.

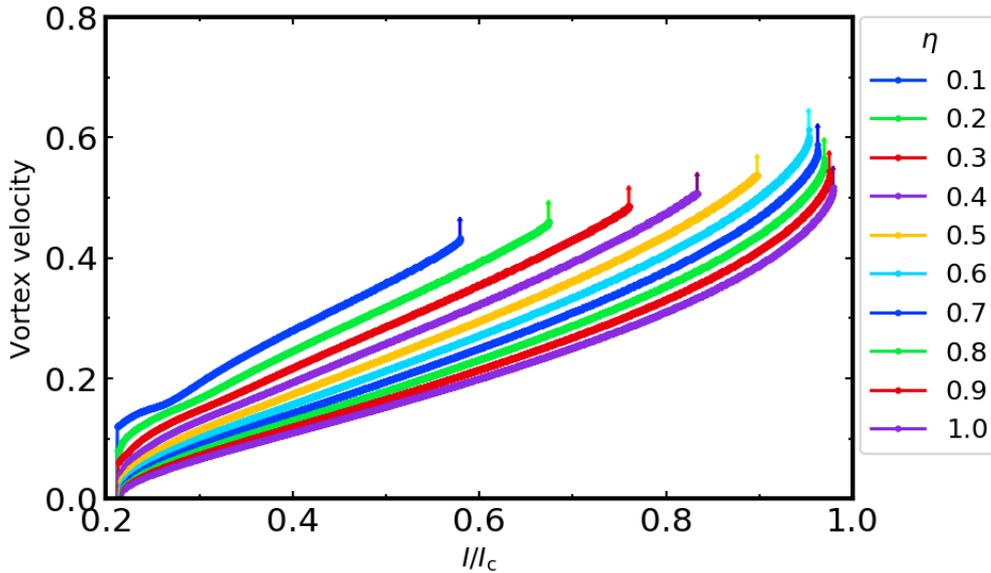


Figura 3.2: Velocidad del vórtice en función de la corriente externa i para diferentes valores de η y $\varepsilon = 0,3$. El valor de corriente en el que empiezan las curvas en el eje de abscisas corresponde a la corriente de desanclaje i_d . Las curvas terminan en el punto en que se alcanza la corriente crítica i_s . La flecha vertical indica que se están generando nuevos pares vórtice-antivórtice en la muestra, con el consecuente aumento brusco de velocidad.

La figura 3.2 incluye curvas de velocidad en función de la corriente externa. En

este caso se ha mantenido constante la inductancia y se han recogido curvas de velocidad para diferentes valores del amortiguamiento de la red. Se aprecia que las intensidades de desanclaje no dependen del amortiguamiento. La interpretación de los perfiles de la velocidad de los vórtices debe ser la misma que hemos explicado para los perfiles en función de la inductancia de la red. Para amortiguamiento constante apreciamos que las corrientes de inestabilidad crecen de forma constante a medida que aumentamos el amortiguamiento de la muestra. En este caso, aunque la intensidad para la que el vórtice se vuelve inestable crezca monótonamente, el pico de velocidad que alcanza empieza creciendo para, llegado a cierto punto, disminuir. Los comportamientos no monótonos que encontramos en las figuras 3.1 y 3.2 serán comentados con más detalle en secciones posteriores.

En la figura 3.2 apreciamos que existe un máximo de velocidad del vórtice para un valor intermedio del amortiguamiento, en concreto $\eta = 0,6$. A partir de este punto la velocidad máxima a la que puede llegar el vórtice empieza a bajar y las curvas se juntan. Este resultado indica que existen combinaciones de parámetros de la red que pueden optimizar esta velocidad máxima y también está relacionado con el comportamiento de la red de uniones más allá de los saltos de velocidad de las figuras 3.1 y 3.2.

El movimiento del vórtice a través de la red manifiesta tres situaciones diferentes que describimos a continuación y que se pueden distinguir en las figuras 3.1 y 3.2. Para corrientes suficientemente pequeñas la velocidad del vórtice es nula, es decir, el vórtice se encuentra anclado en uno de los pozos de potencial de la red. Una vez alcanzada la corriente de desanclado, el vórtice se empieza a mover de forma estable. A medida que aumenta la corriente externa, el vórtice gana velocidad progresivamente. En este punto, en función de las condiciones de la red, se puede producir una cola de radiación Cherenkov en el vórtice. Finalmente, el sistema llega a la corriente de inestabilidad, donde el vórtice empieza a emitir nuevos pares vórtice-antivórtice en la muestra. Esta generación de nuevos vórtices se puede dar de diferentes maneras en función de las condiciones de la red, procederemos a estudiarlas a continuación.

Una forma de estudiar qué está pasando en el interior del sistema es prestando atención a la componente z del campo magnético, como ilustramos en la figura 2.2. Con los datos del campo magnético apreciamos que, a medida que aumentamos la corriente externa, aparece en la cola del vórtice un haz de radiación Cherenkov, que ha sido comentado en trabajos anteriores (Malishevskii et al., 2006, 2009; Alfimov et al., 2014). En los perfiles del campo magnético, obtenidos a partir de nuestras simulaciones, aparece una dependencia en la intensidad de la radiación Cherenkov emitida en función de los parámetros de la red.

De forma alternativa a las medidas del campo magnético, las oscilaciones relativas a la radiación Cherenkov en la cola del vórtice se manifiestan también en el perfil de las diferencias de fase verticales de la fila en la que se mueve el vórtice a lo largo del eje x , que mostramos en la figura 3.3.

En la figura 3.3 hemos representado los valores de las diferencias de fase verticales de la fila horizontal central en la que inicialmente se mueve el vórtice. Los puntos azules representan los valores de las diferencias de fase, mientras que la línea continua naranja representa un ajuste a los datos mediante *splines*. El salto brusco en la mitad derecha de la gráfica es el defecto topológico que estamos estudiando y que se mueve de izquierda a derecha. En la parte posterior de este salto brusco emerge una oscilación amortiguada que corresponde con la radiación Cherenkov producida por el movimiento del vórtice. Después de que pase el vórtice, en la mitad izquierda de la muestra, vemos que las diferencias de fase se mantienen otra vez en un valor constante. La diferencia entre el valor constante antes de que pase el defecto y después es 2π , como esperamos.

A medida que aumentamos el amortiguamiento η de la red desaparece progresivamente el perfil de la radiación, de manera que dejamos de apreciarla aproximadamente para valores de amortiguamiento $\eta > 0,5$. La radiación generada por el movimiento del vórtice, si cuenta con la energía suficiente, puede excitar nuevos defectos topológicos a lo largo de la red de uniones Josephson. La generación de los nuevos vórtices estará fuertemente condicionada por los parámetros de las uniones que conforman nuestra red, como veremos en la siguiente sección.

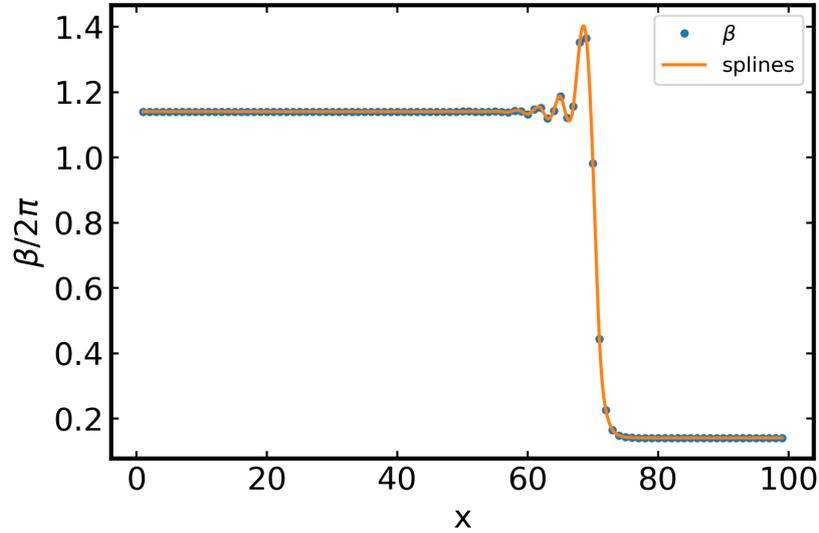


Figura 3.3: Perfil de las diferencias de fase verticales a lo largo del eje x de la red, para condiciones $\eta = 0,3$ y $\varepsilon = 1,0$. La diferencia entre las diferencias de fase a la izquierda y a la derecha contiene el salto de 2π que caracteriza al defecto topológico. En este perfil apreciamos la oscilación en las diferencias de fase asociada a la presencia de radiación Cherenkov.

En la siguiente sección estudiamos los detalles de lo que ocurre en la red cuando el vórtice inicial rebasa la corriente de inestabilidad (i_s). Así como la presencia de radiación Cherenkov, las inestabilidades que encontramos para el vórtice inicial pueden ser muy diferentes y estarán fuertemente condicionadas por las características de la red. Ya en los perfiles de velocidad de las figuras 3.1 y 3.2 se puede comprobar que en función de las condiciones de la red, el sistema llega de forma diferente a la inestabilidad del vórtice inicial. A continuación analizaremos las diferentes situaciones en cuanto a la distribución del campo magnético y la producción de defectos topológicos que se generan a partir de la inestabilidad del vórtice en función de los parámetros que caracterizan la red.

3.2. Tipos de inestabilidad

Atendiendo a los diferentes patrones de formación de nuevos pares vórtice-antivórtice a lo largo de la muestra, así como a su dependencia en función de los parámetros de la red, podemos clasificar las diferentes inestabilidades para tratar de entender mejor qué ocurre en la red. Como hemos visto en la sección anterior, las figuras 3.1 y 3.2, donde presentamos los perfiles de velocidad en función de los parámetros de la red, muestran comportamientos diversos. Por un lado podemos apreciar que ciertos valores en las gráficas se comportan de forma monótona. En la figura 3.1 vemos como las corrientes de desanclaje aumentan progresivamente a medida que disminuimos el parámetro de inductancia de la red, de la misma manera, los valores máximos de la velocidad de los vórtices antes de llegar a la inestabilidad crecen a medida que aumentamos ε . De la misma forma, en la figura 3.2 nos encontramos con valores de la intensidad crítica que aumentan con el amortiguamiento η de la red. Por otro lado, hay ciertos valores que se comportan de manera no monótona en las figuras 3.1 y 3.2, en la primera esto ocurre con la corriente de inestabilidad y en la segunda con la velocidad máxima. Estas no monotonías se encuentran relacionadas con los diferentes tipos de inestabilidad a los que llega el sistema y para el estudio de los cuales necesitamos más información sobre lo que ocurre en la red.

Si nos fijamos en los perfiles de la componente z del campo magnético para apreciar lo que está ocurriendo en la red alrededor del vórtice inicial, nos encontramos que estas no monotonías están asociadas a diferentes comportamientos del campo magnético que generan las inestabilidades. En la figura 3.4 presentamos los diferentes patrones que hemos encontrado bajo las condiciones de las redes estudiadas. Las tres imágenes corresponden a inestabilidades producidas por un vórtice inicial empujado por una corriente externa, justo después de rebasar la corriente de inestabilidad i_s y antes de que los defectos topológicos que se mueven en dirección contraria a la del vórtice inicial salgan del sistema. La escala de color es la componente z del campo magnético y las líneas cerradas representan máximos en

las circulaciones de las diferencias de fase. Concretamente la figura 3.4a se obtiene bajo condiciones $\eta = 0,5$, $\varepsilon = 1,0$ e $i = 0,898$, la figura 3.4b con $\eta = 1,0$, $\varepsilon = 1,0$ e $i = 0,99$ y, por último, la figura 3.4c a $\eta = 0,1$, $\varepsilon = 1,0$ e $i = 0,579$.

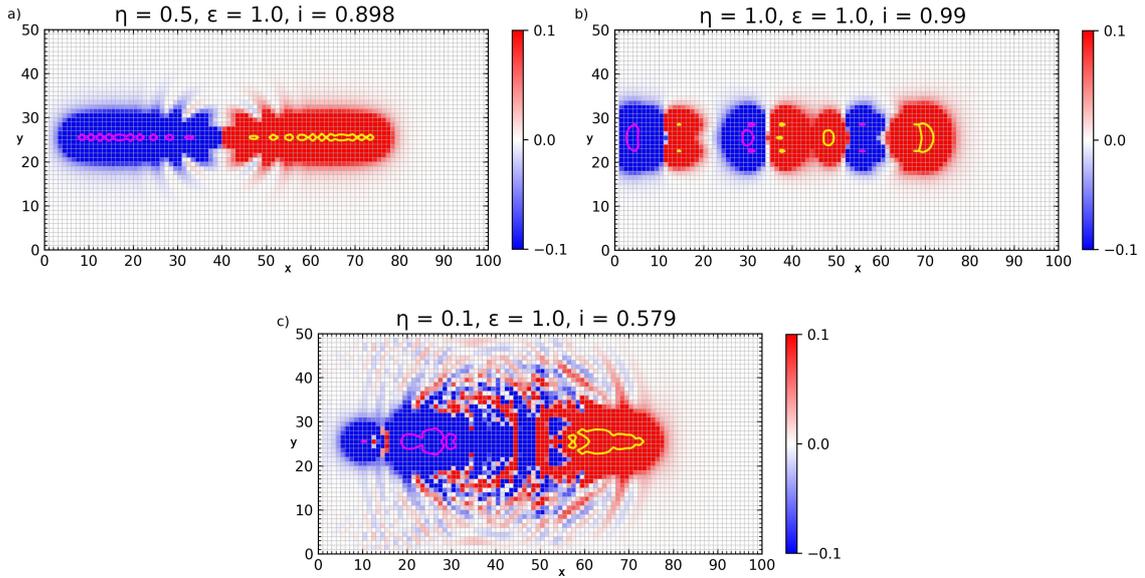


Figura 3.4: Esta figura representa los tres tipos de inestabilidad que aparecen en la muestra cuando se rebasa la intensidad crítica, para diferentes parámetros de la red de uniones Josephson. La escala de color representa la componente z del campo magnético, y las líneas identifican los centros de los vórtices. a) Producción de pares a lo largo de la dirección de movimiento, calculada para $\eta = 0,5$, $\varepsilon = 1,0$ e $i = 0,898$. b) Inestabilidad en condiciones de mayor amortiguamiento, donde los pares se generan en los extremos inferior y superior del vórtice inicial, para condiciones $\eta = 1,0$, $\varepsilon = 1,0$ e $i = 0,99$. c) Ramificación transversal respecto la dirección del movimiento del vórtice inicial, para condiciones de red infra-amortiguada $\eta = 0,1$, $\varepsilon = 1,0$ e $i = 0,579$.

Para el caso de bajo amortiguamiento y baja inductancia en la red, se produce una generación de pares vórtice-antivórtice en la misma línea en la que se mueve el vórtice inicial y en la cola de este, como se muestra en la figura 3.4a. En esta figura vemos claramente las dos cadenas de vórtices y antivórtices consecutivas, en

la línea central de la red, sin propagación transversal al movimiento. En momentos previos a esta inestabilidad apreciamos una cola de radiación Cherenkov detrás del vórtice inicial. Este tipo de inestabilidad, donde los pares se generan únicamente en la línea de movimiento del vórtice inicial, nos lleva a ver la red como una unión unidimensional, donde la inestabilidad solo juega un papel en las diferencias de fase de esta fila a lo largo del eje x . La inestabilidad producida por la generación de pares vórtice-antivórtice en la cola de un vórtice principal a lo largo de una unión unidimensional ha sido reportada en trabajos anteriores (Sheikhzada y Gurevich, 2015). Es posible hacer una comparación de los perfiles de las diferencias de fase β a lo largo de la fila horizontal central, en la que se mueve el vórtice principal, notando que en nuestro caso tenemos una sucesión discreta de diferencias de fase, como en la figura 3.3. Si solo consideramos las diferencias de fase verticales de la fila central horizontal y llevamos la red al límite continuo, es decir, al caso en el que las distancias entre uniones son mucho más pequeñas que cualquier otra distancia involucrada en el sistema, mapeamos exactamente un unión Josephson unidimensional.

En la figura 3.5 representamos las diferencias de fase verticales respecto a la posición a lo largo de la fila central de la red, en la que se mueve el vórtice inicial. La línea amarilla es un ajuste a los datos de las diferencias de fase mediante *splines*. Se han recogido los datos de las diferencias de fase para las condiciones $\eta = 0,3$, $\varepsilon = 1,0$ e $i = 0,775$. Vemos en la figura 3.5 los saltos discretos en forma de escalera, con escalones múltiplo de 2π , que representan vórtices y antivórtices moviéndose en direcciones opuestas. En las dos figuras 3.4a, con el perfil de la componente vertical del campo magnético después de la inestabilidad, y 3.5, con las diferencias de fase a lo largo de la fila central de la muestra, toda la diferencia de fases se acumula en la fila en la que se mueve el vórtice inicial y la información del fenómeno se encuentra encapsulada en la fila central de la muestra.

En la figura 3.6 incluimos seis perfiles bidimensionales de la componente z del campo magnético, donde se presenta una composición de la evolución dinámica de la red a lo largo del tiempo. Los dos primeros fotogramas muestran una tenue

cola de radiación Cherenkov que se propaga en dirección contraria al movimiento del vórtice. En el fotograma 3^o de la figura 3.6 empezamos a ver cómo se genera, poco a poco, un nuevo vórtice de carga topológica inversa a la del inicial. Esta evolución lleva asociada de inmediato la generación de nuevos pares que se van acumulando progresivamente en la misma fila en la que se mueve el vórtice inicial. Como se aprecia en el último fotograma de la figura 3.6, la generación de pares de este modo continúa tanto como el tamaño de la muestra permita. Para una red infinita esta estructura se mantendría en propagación estable sin desordenar el resto de diferencias de fase del sistema.

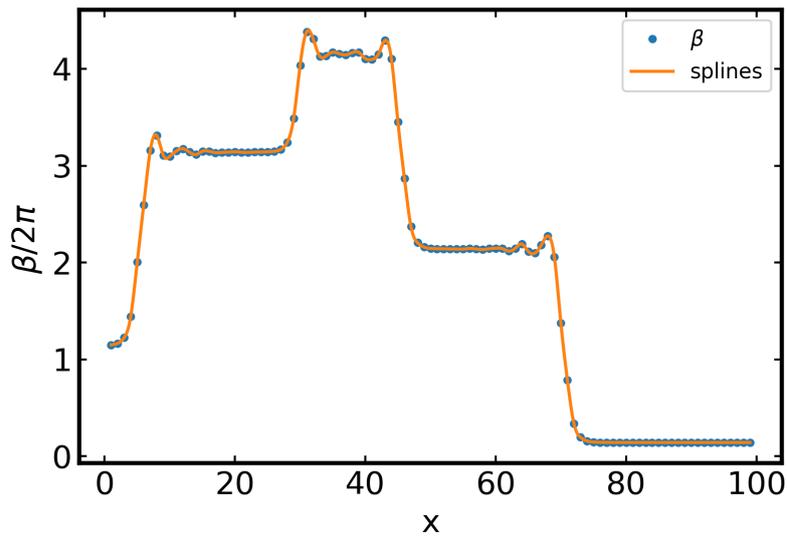


Figura 3.5: Perfil de la diferencia de fases. Captura de la diferencia de fases $\beta_{x,L/2}$ en la fila de uniones en la que se produce la propagación de pares vórtice-antivórtice. Cada paso ascendente en β_x a lo largo del eje x corresponde a un paquete de carga topológica negativa y cada paso descendente a un paquete de carga topológica positiva, siendo la diferencia de fases total igual a un múltiplo de 2π , conservando la carga topológica inicial. Cálculo realizado en condiciones $\eta = 0,3$, $\varepsilon = 1,0$ e $i = 0,775$.

Para amortiguamientos de la red más bajos, nos encontramos con colas Cherenkov más largas, como la que se muestra detrás del vórtice inicial en movimiento

de la figura 2.2. Al bajar el amortiguamiento, la red no es capaz de contener la inestabilidad en la fila central de la muestra, de forma que aparece una generación de defectos topológicos en cascada que se distribuye en todas las direcciones. Bajo estas condiciones aparece la inestabilidad que se propaga en todas las direcciones de la figura 3.4c. Cuando el amortiguamiento de la red es suficientemente bajo, las perturbaciones en las uniones generadas por la radiación Cherenkov del vórtice inicial no solo afectan a la línea central, sino que provocan la aparición de nuevos defectos topológicos en las filas colindantes. Las ramificaciones de las inestabilidades para bajas amortiguaciones tienen una similitud destacable con la propagación de roturas en sólidos cristalinos, donde los defectos topológicos relevantes son dislocaciones (Hirth, J. P., Lothe, 1982).

Los fotogramas recogidos en la figura 3.7 muestran cómo se llega a la configuración de campo magnético presentada en la figura 3.4c. En el primer fotograma apreciamos el intenso cono de radiación Cherenkov como el que presentamos en la figura 2.2. A medida que avanza el tiempo, y con él la intensidad de corriente externa, apreciamos como emerge una cascada de pares vórtice-antivórtice que se propaga en todas las direcciones, a diferencia de el caso presentado en la secuencia de fotogramas de la figura 3.6. El bajo amortiguamiento hace que las ondas se propaguen con facilidad a lo largo de la muestra, de manera que con la generación de nuevos pares aparecen ondas en la dirección transversal al movimiento del vórtice inicial. Bajo las condiciones presentadas en la figura 3.4c ($\eta = 0,1$, $\varepsilon = 1,0$ e $i = 0,579$) la inestabilidad no puede contenerse en la fila central de la red, de manera que los pares propagados en todas las direcciones llenan progresivamente la muestra, rompiendo el orden de largo alcance.

Por último, a medida que aumentamos el amortiguamiento, las inestabilidades aparecen a intensidades aplicadas mayores. Pero existe un punto en el que el patrón de propagación lineal desaparece para dar paso a una nueva configuración de vórtices después de la inestabilidad. Cuando el amortiguamiento y la corriente externa son suficientemente grandes, los nuevos pares vórtice-antivórtice que se generan en la muestra no lo hacen de ninguna de las dos maneras que acabamos de comentar.

Bajo estas condiciones los pares vórtice-antivórtice aparecen de forma controlada en las filas adyacentes a la fila en la que se mueve el vórtice inicial. La evolución del sistema resulta en la formación de estructuras verticales de vórtices que emiten pares en las filas colindantes hasta que se rellena el espacio vertical disponible. Podemos visualizar este tipo de patrones mediante las imágenes del campo magnético, como se puede apreciar en la figura 3.4b. Este tipo de inestabilidad parece que no se encuentra mediado por la radiación Cherenkov, ya que al aumentar el amortiguamiento en la red la amplitud de la radiación decrece hasta hacerse imperceptible. Bajo las condiciones de la figura 3.4b no se aprecia ningún indicio de radiación Cherenkov en la red.

En el montaje de la figura 3.8 podemos apreciar cómo evoluciona el vórtice bajo las condiciones de la configuración mostrada en la figura 3.4b ($\eta = 1,0$, $\varepsilon = 1,0$ e $i = 0,99$). En esta situación, vemos que el primer fotograma no presenta emisión de radiación de ningún tipo. Para una intensidad de corriente externa suficientemente elevada, muy cercana a la intensidad crítica de la red, el vórtice inicial empieza a emitir pares, pero de forma diferente a como hemos visto anteriormente. Este caso se caracteriza porque los vórtices, como vemos a partir del fotograma 2 de la figura 3.8, aparecen en las filas colindantes a la fila del movimiento del vórtice inicial, de manera que el vórtice inicial se ensancha. A medida que evoluciona la inestabilidad, el vórtice inicial se va ensanchando y en su cola se forman estructuras de defectos resultantes de las interacciones de los pares generados. Esta proliferación de nuevos pares, por tanto, se genera tanto en el eje de movimiento del vórtice inicial como en el transversal, de manera que los pares tenderán a llenar la muestra con el tiempo. En esta configuración nos encontramos, consecuentemente, con que la inestabilidad puede llegar a descontrolar todas las diferencias de fase de la red.

Los fotogramas de las figuras 3.6, 3.7 y 3.8 han sido extraídas de animaciones en las que se puede comprobar como el sistema llega a estas configuraciones a partir de la inestabilidad de un vórtice aislado. Se pueden encontrar las animaciones accediendo a la información adicional de nuestro artículo (Estellés-Duart et al., 2018). Este abanico de comportamientos en las inestabilidades y su dependencia

con los parámetros de la red nos permite agruparlos bajo un diagrama de fases. Una visión compacta de las diferentes respuestas nos puede ayudar a entender mejor la dinámica de vórtices en redes de uniones Josephson de forma general.

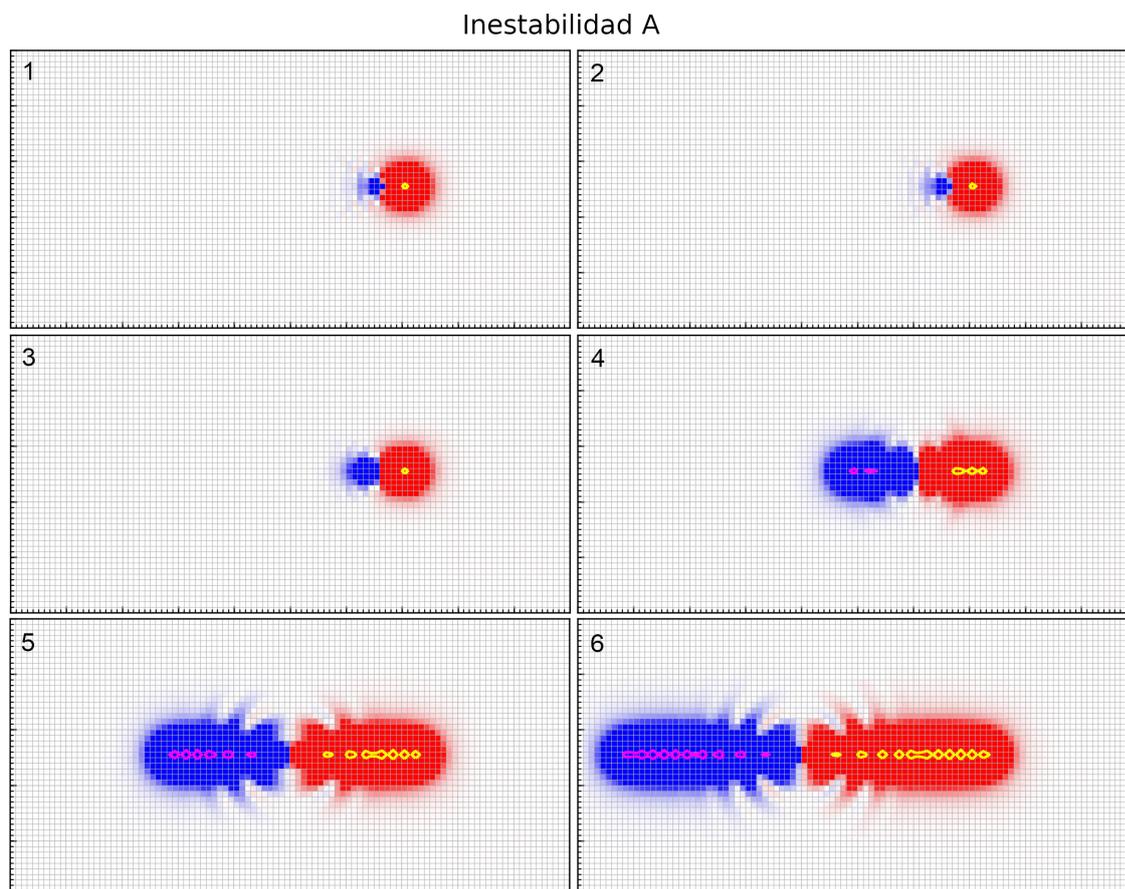


Figura 3.6: Secuencia de fotogramas ordenados en el tiempo, del 1 al 6, que muestran la evolución dinámica de la componente vertical del campo magnético para el movimiento de un vórtice inicial que finaliza con la configuración presentada en la figura 3.4a. Apreciamos a partir del segundo fotograma cómo emergen nuevos pares vórtice-antivórtice en la misma fila en la que se propaga el vórtice inicial hasta llegar al extremo de la muestra. El cálculo fue realizado para las siguientes condiciones de la red $\eta = 0,5$, $\varepsilon = 1,0$ e $i = 0,898$.

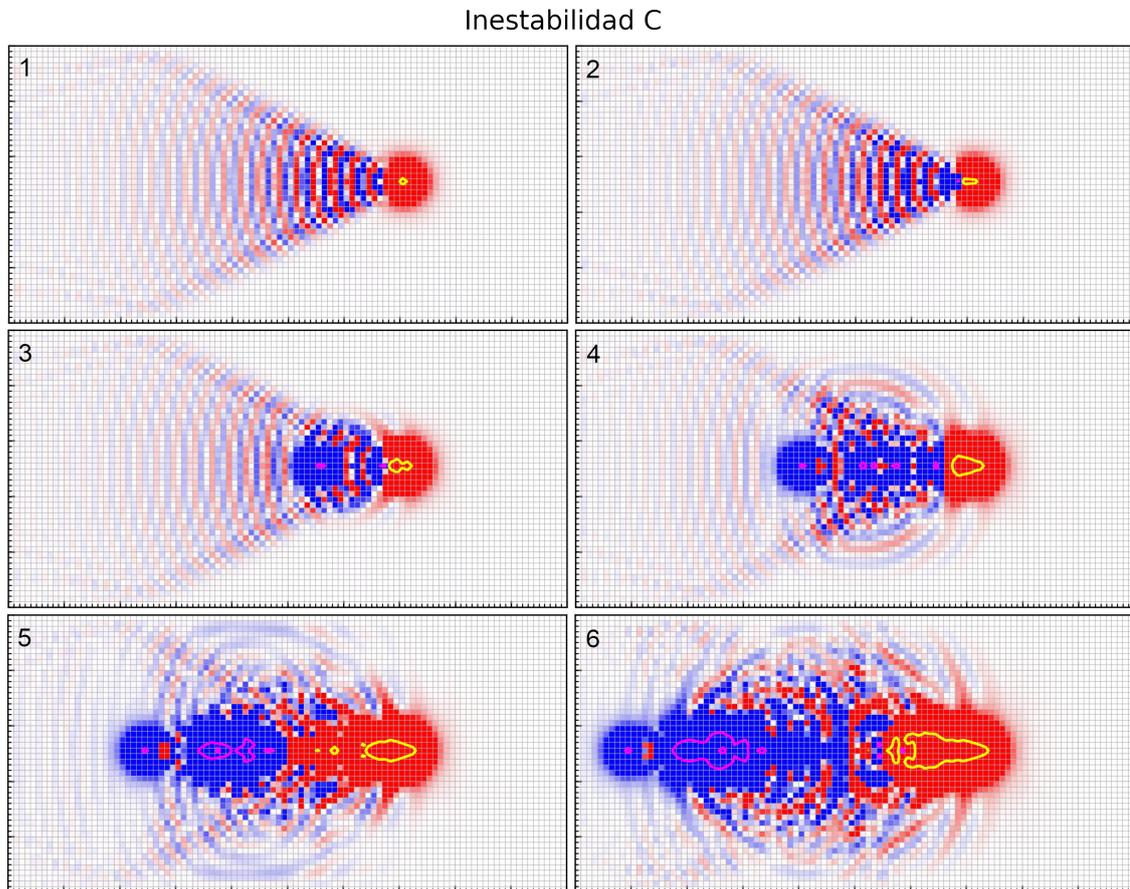


Figura 3.7: Secuencia de fotogramas de la componente vertical del campo magnético de la simulación realizada para condiciones de la red $\eta = 0,1$, $\varepsilon = 1,0$ e $i = 0,579$. En los dos primeros fotogramas apreciamos una intensa cola de radiación Cherenkov provocada por el movimiento del vórtice inicial. A partir del segundo fotograma empieza la generación de nuevos pares vórtice-antivórtice que se multiplican tanto en la dirección del movimiento como en la dirección transversal. La inestabilidad avanza de manera progresiva, llenando la muestra de defectos topológicos y rompiendo el control que se tenía sobre las diferencias de fase.

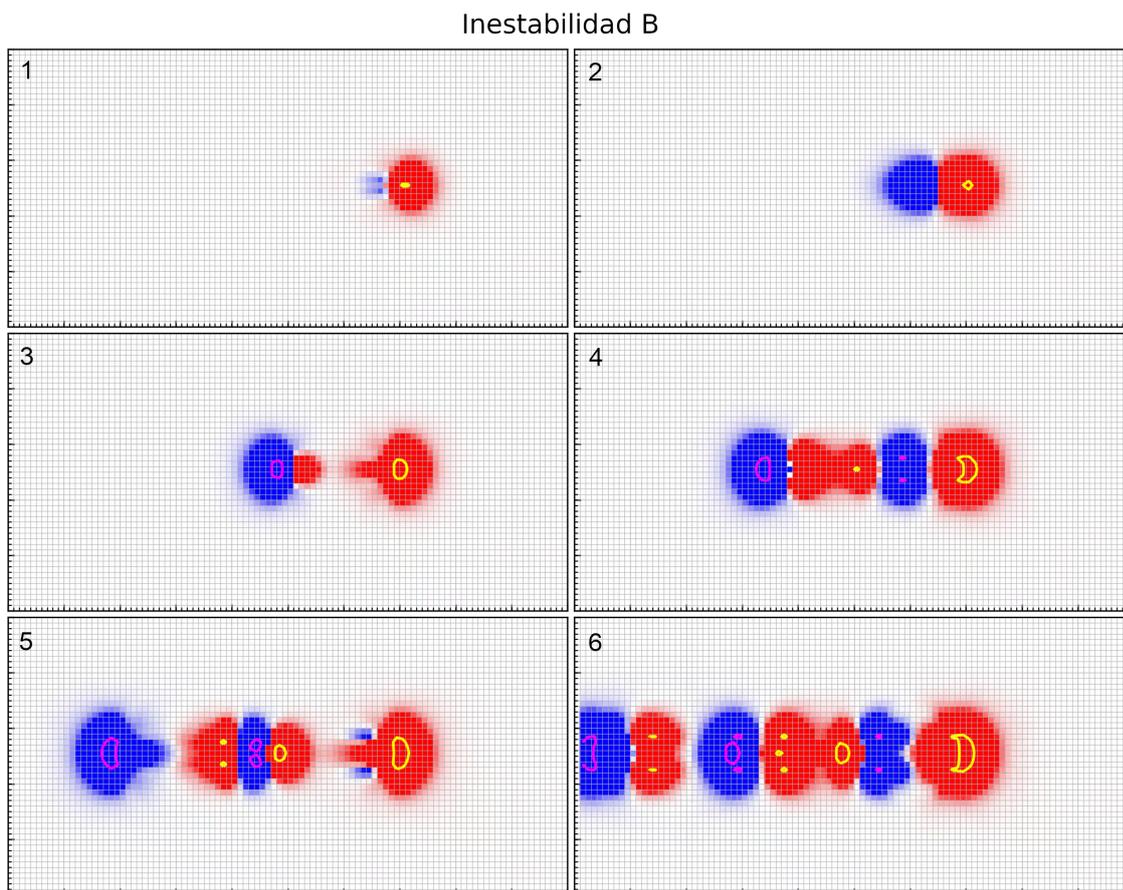


Figura 3.8: Secuencia de fotografías de la componente vertical del campo magnético. Se presenta la evolución dinámica de la inestabilidad de un vórtice para condiciones de la red $\eta = 1,0$, $\varepsilon = 1,0$ e $i = 0,99$, muy cerca de la intensidad crítica. En estas circunstancias no existe evidencia de radiación Cherenkov en la muestra. Los pares vórtice-antivórtice se generan en las las colindantes a la que se mueve el vórtice inicial, de manera que el vórtice inicial se ensancha en dirección transversal al movimiento.

3.3. Diagrama de fases

Con las clasificaciones que se han introducido en el apartado anterior, es posible construir un diagrama de fases en función de los tres parámetros con los que cuenta nuestro problema: la corriente externa i , el parámetro de inducción ε y el de amortiguamiento η . A partir de este diagrama de fases podemos interpretar todos los fenómenos que hemos comentado en apartados anteriores de una forma unificada.

Presentamos el diagrama de fases en la figura 3.9, donde condensamos los resultados obtenidos sobre los puntos de desanclaje (i_d) e inestabilidad (i_s) en función del amortiguamiento de la red y para una inductancia fija $\varepsilon = 1,0$. A la izquierda tenemos la zona de corrientes externas bajas, coloreada en rojo. Bajo estas condiciones el vórtice se encuentra anclado en la red hasta que rebasamos la corriente de desanclaje, que hemos representado como la línea vertical azul. A partir de este punto el vórtice se mueve de forma estacionaria y a velocidad constante, emitiendo radiación Cherenkov para amortiguamientos η suficientemente bajos. La zona en la que el vórtice se mueve de forma estable está coloreada en amarillo, donde puede haber o no formación de radiación Cherenkov y que resulta complicado de distinguir, ya que depende muy suavemente de los parámetros.

A medida que aumentamos la corriente, el sistema llega a su valor crítico, donde forma pares vórtice-antivórtice a través de los diferentes patrones que se han comentado en la sección anterior. La línea verde de la figura 3.9 representa el punto de corriente a partir del cual los vórtices presentan inestabilidades. Por un lado, en el caso de bajo amortiguamiento aparece una fuerte cola Cherenkov con un comportamiento crítico de generación de pares en la misma línea en la que se mueve el vórtice inicial. Por otro, cuando aumentamos el amortiguamiento, la intensidad y longitud de la cola Cherenkov se acorta, y el comportamiento crítico responde a la formación de pares en las filas adyacentes a la del movimiento del vórtice inicial. Estas dos diferentes respuestas que asociamos a bajo y alto amortiguamiento han sido coloreadas en rosa y azul respectivamente. Entre ellas no hay una zona de separación clara, sino que se trata de una franja de transición suave que hemos

representado mediante un degradado entre las dos regiones en el diagrama de fases de la figura 3.9.

Las tres estrellas representan los puntos donde se han calculado las inestabilidades de la figura 3.4, donde mostramos los tres diferentes patrones de formación de pares que se pueden encontrar en la red. Para amortiguamientos más bajos (estrella verde) la inestabilidad presenta la propagación asociada a la figura 3.4c. En este punto la muestra se llena de defectos topológicos rápidamente, perdiendo el control sobre las diferencias de fase. Los otros dos puntos (estrella azul y roja) presentan inestabilidades donde aparecen cascadas de vórtice-antivórtice pero que llegan a formar estructuras relativamente estables. Bajo las condiciones de la estrella azul, donde se forma una cadena de defectos en la línea de movimiento del vórtice inicial, no apreciamos ninguna perturbación en la dirección transversal al movimiento. En el caso de la roja, donde los vórtices nuevos no se generan por la presencia de radiación Cherenkov, las estructuras verticales se mueven de forma estable aunque las interacciones entre los nuevos vórtices que aparecen en la muestra pueden llevar al sistema a nuevas reacciones en cadena.

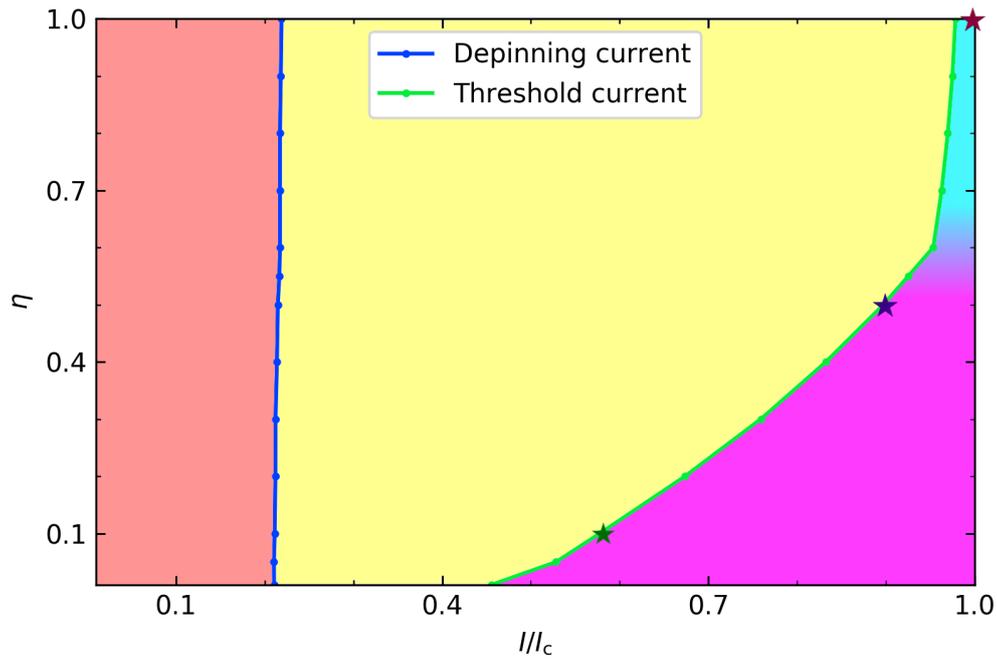


Figura 3.9: Diagrama de fases de las distintas configuraciones dinámicas que podemos encontrar en la red en función del amortiguamiento η y para $\varepsilon = 1,0$. En la zona roja el vórtice se encuentra anclado en la red. En la zona amarilla el vórtice se mueve a velocidad constante empujado por la corriente externa. A partir de la línea de inestabilidad (verde) se empiezan a generar pares vórtice-antivórtice en las proximidades del vórtice inicial. Las zonas azul y morada representan diferentes configuraciones en la aparición de nuevos vórtices. Las tres estrellas representan las condiciones para las inestabilidades de la Fig. 3.4. La azul corresponde a la a), la roja a la b) y la verde a la c).

Capítulo 4

Conducción en sistemas desordenados

El núcleo del presente capítulo son las simulaciones de la conducción en sistemas de electrones desordenados. En primer lugar presentamos un modelo analítico para la situación tridimensional sin interacción basado en teoría de percolación. Con este modelo, además de deducir la ley de Mott, podemos obtener terminos adicionales en el exponente. A continuación presentamos los resultados obtenidos con nuestras simulaciones tanto de la ley de Mott en tres dimensiones, que abordamos con profundidad, y en dos dimensiones, de la ley de Efros-Shklovskii y del régimen activado. Se concluye con una discusión sobre los valores para el factor pre-exponencial y las temperaturas características de las expresiones de la conductividad en sistemas de electrones desordenados obtenidos a través de simulaciones y que pueden resultar útiles para el ajuste de datos experimentales.

4.1. Modelo analítico de conducción de Mott

El modelo RRN y el marco teórico de percolación, como hemos visto, aportan un punto de vista teórico desde el que estudiar el VRH. Uno de los aspectos más relevantes al llevar la teoría de percolación al ámbito de la conductividad en sistemas desordenados es cómo introducimos todos los parámetros físicos que determinan

el comportamiento de nuestro sistema percolativo. Para estudiar el VRH de una manera rigurosa a través de teoría de percolación, en nuestro caso, partimos de las premisas que llevan a Shklovskii y Efros (1984) a la obtención del parámetro T_0 mediante sus simulaciones. En el presente capítulo tratamos de extender esta metodología con el objetivo de obtener una dependencia en el prefactor de VRH propia del fenómeno percolativo.

El punto de partida de nuestro estudio se encuentra en los conceptos introducidos sobre teoría de percolación que tratamos en la sección 1.2.2. Consideremos la función $F(\omega, r)$ que definimos de manera tal que $4\pi F(\omega, r)r^2 dr d\omega$ sea la probabilidad de encontrar, por unidad de volumen, un par de sitios la separación de los cuales se encuentra en el intervalo $(r, r + dr)$ y su transición energética en $(\omega, \omega + d\omega)$. En virtud de los argumentos introducidos por la teoría de percolación, un par dado se encuentra enlazado si satisface la desigualdad

$$\frac{2r_{ij}}{\xi} + \frac{ij}{kT} \leq \zeta_c, \quad (4.1)$$

donde ζ_c es el exponente crítico de percolación. Si consideramos los dos sitios de la red enlazados como polos de una esfera de radio $r/2$ e introducimos la cantidad Θ como el cociente entre el volumen ocupado por estas esferas frente al volumen total del sistema, entonces podemos escribir la siguiente expresión

$$\Theta = \int F(\omega, r) \theta \left(\zeta_c - \frac{\omega}{kT} - \frac{2r}{\xi} \right) \frac{\pi r^3}{6} d^3 r d\omega, \quad (4.2)$$

donde θ es la función escalón de Heaviside. Podemos considerar el valor de Θ en el límite de percolación, que lo llamamos Θ_c , como un invariante. Mediante cálculos geométricos de percolación se obtiene un valor en tres dimensiones $\Theta_c = 0,23$. Sin tener en cuenta la interacción entre los pares de sitios (Shklovskii y Efros, 1984), la expresión de F viene dada por la siguiente ecuación

$$F(\omega, r) = \int \int_{-\infty}^{\infty} g(\epsilon_1) g(\epsilon_2) \delta[\epsilon_{12}(r) - \omega] d\epsilon_1 d\epsilon_2, \quad (4.3)$$

donde g es la densidad de estados y hemos situado el nivel de Fermi en $\mu = 0$. En la figura 4.1 hemos representado gráfica la función $F(\omega)$ para $W = 2$.

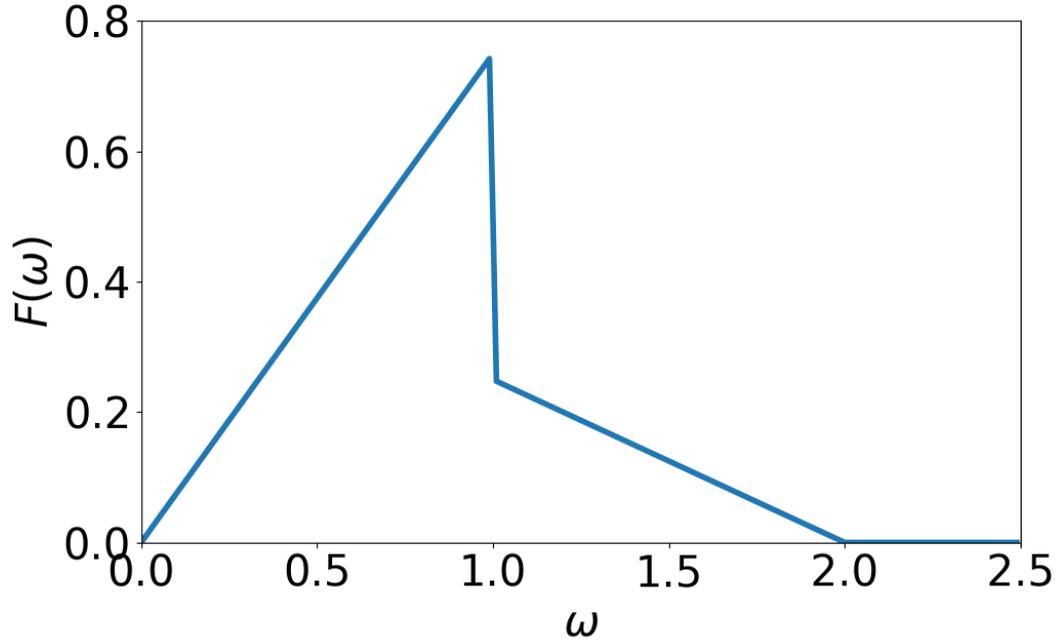


Figura 4.1: Función $F(\omega)$ para $W = 2$.

Para el caso sin interacción, la función ϵ_{12} es independiente de r

$$\epsilon_{ij} = \begin{cases} |\epsilon_j - \epsilon_i| & \epsilon_i \epsilon_j < 0 \\ \max[|\epsilon_i|, |\epsilon_j|] & \epsilon_i \epsilon_j > 0. \end{cases}$$

Con estos ingredientes, conocida F mediante la expresión (4.3), nos podemos plantear cual es la relación entre ζ_c y T . Desde aquí es posible obtener una expresión para la resistividad, ya que

$$\rho = \frac{e^{\zeta(\Theta)} \lambda(\Theta)}{L}, \quad (4.4)$$

donde $\lambda(\Theta) \propto (\Theta - \Theta_c)$ es una longitud de correlación de la que podríamos esperar términos adicionales de la forma

$$\lambda(\Theta) = C(\Theta_c - \Theta)^{-\nu} (1 + A(\Theta_c - \Theta)^\alpha). \quad (4.5)$$

En cuanto al procedimiento para obtener $\zeta(\Theta)$ nos centraremos en el caso no interactuante. Para este caso concreto, mediante la resolución de la ecuación para

Θ que recuperamos de la expresión (4.2) se obtiene la siguiente dependencia para el exponente de percolación ζ , en consonancia con la dependencia $\log \sigma \propto T^{-1/4}$ característica de la ley de Mott

$$\zeta = 2(42\Theta)^{1/8} \left(\frac{W}{\pi T} \right)^{1/4}, \quad (4.6)$$

para $a = 1$ y $k = 1$. Rescatando la expresión para la resistividad que se ha introducido posteriormente en la ecuación (4.4), sustituyendo en la expresión (4.6) y aplicando logaritmos, se obtiene

$$\ln \rho = \frac{\Theta^{1/8}}{x} - \nu(\Theta_c - \Theta) + C \quad (4.7)$$

donde, por simplicidad, hemos definido $x = 2 \cdot 42^{1/8} \left(\frac{W}{\pi T} \right)^{1/4}$ y C es una constante que depende del tamaño de la muestra. Minimizar esta función respecto a Θ aporta un argumento físico que nos fuerza a ir más allá del valor crítico de percolación para obtener un perfil realista de la resistividad ρ , como sugiere Pasveer et al. (2005), con vistas de ser comparado con los resultados provenientes de las simulaciones así como de los diversos experimentos que se han llevado a cabo con materiales que responden con una conducción por VRH.

Uno de los detalles que debemos destacar de esta minimización es su fuerte dependencia con la temperatura. En la figura 4.2 representamos la función $\partial \log R / \partial \Theta$ para valores $T = 0,02$ y $W = 2$. Hemos marcado el valor en el que se anula la derivada y que corresponde al mínimo de la resistividad con un punto rojo, así como el valor de percolación, donde obtenemos el comportamiento crítico asintótico en la línea vertical. En esta gráfica podemos comprobar que la función $\partial \log R / \partial \Theta$ contiene un par de asíntotas verticales. Teniendo en cuenta donde se sitúa el punto rojo de la gráfica que representa un extremo en la función $\log R(\Theta)$, nos interesa en especial cómo se acerca de rápido esta función al punto 0. En virtud de su definición, Θ no puede rebasar la unidad, mientras que a medida que aumentamos la temperatura, el valor de Θ que anula la derivada se acerca muy rápido a valores cada vez más grandes de Θ .

La minimización de la función (4.7) conduce a la siguiente relación recurrente

$$\frac{\Theta^{-7/8}}{8x} = \frac{\nu}{\Theta - \Theta_c}. \quad (4.8)$$

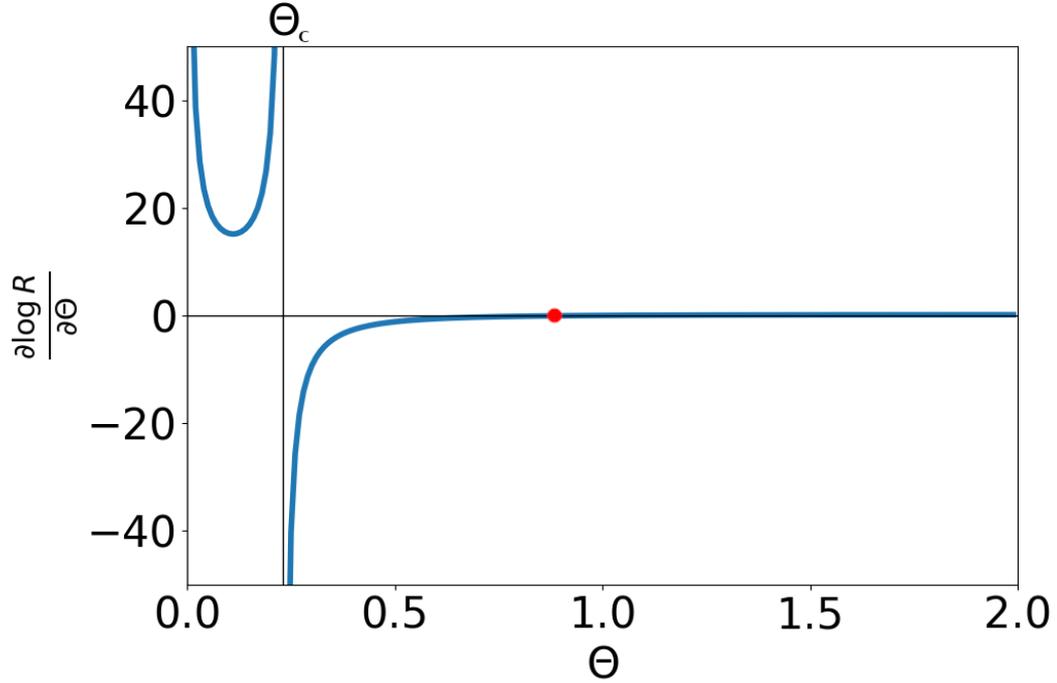


Figura 4.2: Función $\partial \log R / \partial \Theta$ para valores $T = 0,02$ y $W = 2$. El punto rojo representa el valor en el que se anula la derivada. El valor de percolación de Θ_c está marcado por la línea vertical.

A primer orden en el desarrollo del exponente en el límite $W \gg T$, podemos reescribirlo como

$$-\left(\frac{T_M}{T}\right)^{1/4} - C \left(\frac{T}{T_M}\right)^{1/4} \quad (4.9)$$

De esta forma, es posible reinterpretar la curvatura como una modificación de la temperatura de Mott con la temperatura. Es muy difícil distinguir en los datos de conductividad si es más probable que la curvatura provenga de la dependencia de T_M con la temperatura o de un factor pre-exponencial. Así lo comentan en el reciente artículo de Agam y Aleiner (2014).

En este punto resulta de vital importancia conocer la relevancia del prefactor frente a las posibles modificaciones de la temperatura de Mott en vistas a una posible comparación con resultados experimentales.

Se ha de destacar, que estos dos modelos para $\zeta(\Theta)$ como para $\lambda(\Theta)$, funcionan

en el límite para temperaturas bajas. Mediante una comprobación rápida de la eq. 4.8 se evidencia que este mínimo se puede encontrar en valores demasiado altos en Θ , teniendo Θ sentido físico únicamente para valores inferiores a 1. Por un lado, es posible plantearse una primera modificación con motivación física para la expresión de $\lambda(\Theta)$ de la forma

$$\lambda(\Theta) = (\Theta - \Theta_c)^{-\nu}(1 - \Theta), \quad (4.10)$$

forzando la tendencia esperada cuando $\Theta = 1$. Esta adaptación, para funcionar, debe venir acompañada de una modificación en $\zeta(\Theta)$ con sentido físico y que contenga la obtención del mínimo deseado.

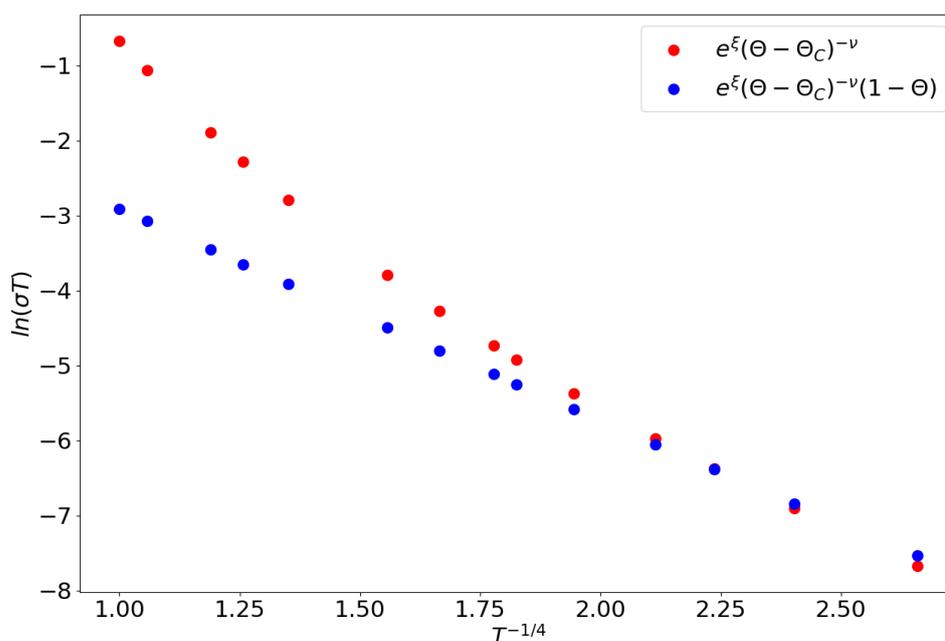


Figura 4.3: Cálculos numéricos de la conductividad en función de la temperatura. Los puntos rojos han sido calculados mediante la ecuación (4.8). Para los azules se ha añadido el término $(1 - \Theta)$.

En la figura 4.3 se presentan los datos obtenidos calculando la conductividad para dos expresiones diferentes de $\lambda(\Theta)$. Por un lado, en rojo hemos aplicado una dependencia crítica habitual en Θ_c con el exponente crítico de percolación. Por otro,

hemos incorporado una pequeña modificación de orden superior a esta tendencia. En esta figura podemos ver como se suaviza la curvatura al incorporar el término adicional hasta prácticamente desaparecer.

4.2. Simulaciones anteriores

El campo de las simulaciones ha sido, de forma paralela al teórico, un campo sumamente fructífero para el estudio de sistemas electrónicos desordenados. Podemos encontrar en la bibliografía numerosas simulaciones focalizadas en el problema de los vidrios de Coulomb desde diversas técnicas. En este apartado trataremos de dar un breve resumen de los trabajos que hasta ahora existen en la bibliografía y de las técnicas de cálculo numérico que hasta ahora se han utilizado. El enorme desarrollo que se ha dado en el mundo de la computación, desde los años 60, ha hecho que a día de hoy contemos con un potencial de cálculo insospechado en el momento de nacimiento de las teorías con las que trabajamos. En principio, podemos clasificar las técnicas de simulación por la cantidad de efectos que pueden tener en cuenta. Es decir, algunas técnicas tienen en cuenta más parámetros que las otras, o se acercan más a como nos imaginamos que ocurren las cosas en la naturaleza.

Los modelos que hemos visto hasta ahora, como la RRN de Miller-Abrahams o la teoría de percolación, tienen sus limitaciones en cuanto a que tratan de llevar el problema al plano analítico para que podamos describirlo mediante ciertas leyes matemáticas. Con las simulaciones podemos *imitar* los procesos naturales tal y como creemos que ocurren para ver hasta qué punto podemos aplicar estos modelos. Podemos hablar de simulaciones de RRN, campo medio, resolución de la ecuación maestra o simulaciones del tipo Monte Carlo. En el primer caso reducimos los saltos entre sitios a resistencias en una red, en el segundo reducimos el efecto del resto de electrones a un promedio de los más próximos, para la ecuación maestra podemos incluir correlaciones para intentar tener en cuenta el efecto de los demás electrones y, por último, en las técnicas de Monte Carlo intentamos replicar el movimiento de los electrones dentro de la red de la forma más realista posible, teniendo en

cuenta la probabilidad de cada salto individual. El peso de los saltos colectivos ha sido motivo de debate durante el desarrollo de este campo de investigación (Pollak, 2019) y sigue siendo una cuestión abierta en la que no vamos a ahondar en este trabajo.

Uno de los primeros trabajos en comparar cálculos numéricos y analíticos en el campo de la conducción en semiconductores desordenados es el de Kirkpatrick (1973), aunque Pike y Seager (1974a,b) se centran más explícitamente en la cuestión de las simulaciones, en especial en la técnica Monte Carlo. En el momento en el que se publican estos artículos, aunque existe un planteamiento del problema, las simulaciones se limitan a tratar de reproducir los puntos críticos de percolación, donde el problema se simplifica y parece ser posible describirlo mediante una red de resistencias. Hay que destacar que, aún así, las simulaciones de redes de resistencias siguen teniendo un interés crucial para entender el comportamiento de sistemas desordenados. Tanto es así que pueden encontrarse trabajos posteriores que siguen esta cuestión de cerca (Derrida et al., 1983, 1984; Tyč y Halperin, 1989; Strelniker et al., 2005; Knudsen y Fazekas, 2006). Por su simpleza y generalidad, la red de resistencias aleatorias tiene un gran potencial en distintos marcos. Una de las técnicas propuestas se basa en el formalismo de matrices para resolver el problema, mientras que el trabajo más actual de Knudsen y Fazekas (2006) plantea el “método de eliminación gaussiana” para optimizar el problema.

4.2.1. Simulaciones recientes

Otra posibilidad es la de tratar con simulaciones del VRH, ya no mediante una red de resistencias aleatorias, sino tratando el problema teniendo en cuenta más complejidad en el sistema. Se introduce por parte de Tsigankov y Efros (2002) un Monte Carlo dinámico, en el que se tiene en cuenta el tiempo físico que transcurre en cada prueba Monte Carlo en el sistema. Mientras que originalmente la técnica de Monte Carlo trata de encontrar configuraciones de equilibrio, con el método dinámico podemos emular una evolución temporal. En este trabajo de Tsigankov y Efros (2002) se estudia la conductividad por VRH de un sistema bidimensional,

tanto para el caso no interactuante como para el interactuante. Se trata de una simulación mediante un Monte Carlo dinámico con una ligera modificación para aumentar la eficiencia del algoritmo, tal y como se ha explicado en la sección 2.2. Tsigankov y Efros (2002) también reportan los pocos casos que se encuentran en la literatura para el problema en tres dimensiones y que manifiesta su complejidad (Díaz-Sánchez et al., 1999). Para Efros y Tsigankov, con esta simulación concluyen el debate acerca de la relevancia de los saltos simultáneos.

Más recientemente encontramos, en el trabajo de Pasveer et al. (2005), otra técnica de simulación que se basa en el formalismo de la ecuación maestra. El coste computacional de esta técnica es sensiblemente inferior al Monte Carlo dinámico utilizado por Tsigankov y Efros (2002), por lo que realizan simulaciones tanto de sistemas bidimensionales como tridimensionales. Con esta técnica los autores llegan a tamaños de $50 \times 50 \times 50$ en tres dimensiones. Pasveer et al. (2005) manifiestan que son conscientes de que no se han realizado simulaciones más realistas que las de RRN, simuladas en los 70, en contextos computacionales muy distintos (McInnes y Butcher, 1979).

El impulso que recientemente encontramos en cuanto a las simulaciones de este tipo de sistemas se encuentra en el estudio de la conductividad en materiales orgánicos, que cuentan con un gran interés en cuanto a sus aplicaciones. Por ello podemos encontrar revisiones que se centran en el estado de las simulaciones específicamente para este tipo de materiales. En el trabajo de Groves (2017) se explicitan los tipos de simulación que se hallan en la literatura y que hemos comentado con anterioridad, aplicados al caso de materiales orgánicos. La diferencia fundamental que se da en este tipo de simulaciones es que utilizan una densidad de estados exponencial (Nenashev et al., 2015), mientras que en el caso inorgánico tendemos a utilizarla plana o constante. Podemos encontrar con trabajos muy recientes, como el de Marinov et al. (2020), que se centran en la cuestión del VRH en materiales orgánicos desde el prisma de las simulaciones, pero siguen conscientes de las problemáticas que existen en la fundamentación de las leyes de conductividad comentadas.

Una de las cuestiones más relevantes en el campo de las simulaciones es la di-

ficultad que encontramos para imitar sistemas suficientemente complejos como los que queremos tratar. Las técnicas de simulación de las que hemos hablado, RRN, ecuación maestra o Monte Carlo dinámico tienen sus pros y sus contras. El mayor inconveniente de las técnicas de Monte Carlo se encuentra en que necesitamos velocidad de cálculo para realizar las sucesivas pruebas aleatorias necesarias para apreciar la evolución del sistema. El carácter aleatorio de esta técnica también requiere repetir los cálculos las veces necesarias para obtener estadística suficientemente buena que nos permita extraer resultados aceptables. Además, si consideramos sistemas tridimensionales suficientemente grandes como para asumir que simulamos un sistema en volumen, es decir, que los efectos de borde sean despreciable, emerge el problema de la memoria. Con estos comentarios queremos enfatizar que la poca presencia en la literatura de simulaciones de VRH tridimensionales no resulta azarosa, además del problema físico que hemos comentado en el apartado anterior, nos encontramos también con un problema computacional de primer orden.

En este estudio nos hemos centrado en la simulación del Monte Carlo dinámico, mediante el cual obtenemos numéricamente conductividades de muestras tridimensionales desordenadas, tanto en energías como en la posición de los sitios. Hemos aplicado la modificación en la técnica mediante la cual elegimos los pares en función de su probabilidad en distancias (Tsigankov y Efros, 2002), con el objetivo de, gracias a la capacidad de computación que disponemos en la actualidad, llegar a tiempos y tamaños mayores que nos permitan una mejor verificación de los detalles asociados a las leyes de conducción de Mott y de Efros-Shklovskii. Además, nos apoyamos de simulaciones paralelas de la RRN para comparar y corroborar la validez de los resultados obtenidos en ambos métodos. En este apartado describiremos las simulaciones y presentaremos los resultados que se han obtenido con ellas.

4.3. Ley de Mott en sistemas tridimensionales

Para el caso de las simulaciones tridimensionales y sin interacción mediante la técnica de Monte Carlo, esperamos que el logaritmo de la conductividad total de las

muestras que se han simulado, de la manera en la que se ha calculado en la sección 2.3.1, se comporte de forma proporcional a $T^{-1/4}$. En cuanto a la resolución de la red de resistencias aleatorias, tal y como hemos explicado en la sección 2.4, también esperamos el comportamiento típico de la ley de Mott. En esta sección veremos como los datos se ajustan a esta tendencia y si es posible plantear alternativas en la dirección de un factor pre-exponencial dependiente de la temperatura o de añadir dependencias adicionales en el argumento de la exponencial. Posteriormente trataremos de relacionar los resultados obtenidos con el resto de medidas que se presentarán en esta sección.

En la figura 4.4 se han representado todos los valores de conductividad que se han simulado mediante las dos diferentes técnicas introducidas en el capítulo 2. Los cuadrados representan los datos obtenidos con la resolución de la red de resistencias aleatorias mientras que los círculos representan los calculados con el método de Monte Carlo. Los diferentes colores de los círculos indican los tres desórdenes que se han utilizado en las simulaciones. La línea sólida azul es la curva de ajuste para la que se ha utilizado la expresión de la ley de Mott añadiéndole un factor adicional dependiente de la temperatura en forma de un exponente como parámetro del ajuste

$$\sigma T = AT^\alpha \exp \left[- \left(\frac{T_M W}{T} \right)^{1/4} \right]. \quad (4.11)$$

Notemos que en la ecuación (4.11) se ha introducido el parámetro de desorden W para tener en cuenta el escalado que se realiza en la figura 4.4. La línea roja discontinua ajusta, en el rango de temperaturas que consideramos conveniente, la ley de Mott

$$\sigma T = A \exp \left[- \left(\frac{T_M W}{T} \right)^{1/4} \right], \quad (4.12)$$

a la que deberían responder los valores de conductividad a temperaturas bajas. En la gráfica superior derecha se muestran los datos de conductividad calculados mediante el método de Monte Carlo sin escalar con el desorden.

Una de las principales características a destacar de la figura 4.4 es la apreciable curvatura de los datos en el rango de temperaturas que estamos estudiando. El ajuste de la ley de Mott ilustra cómo una recta no contiene parámetros suficientes

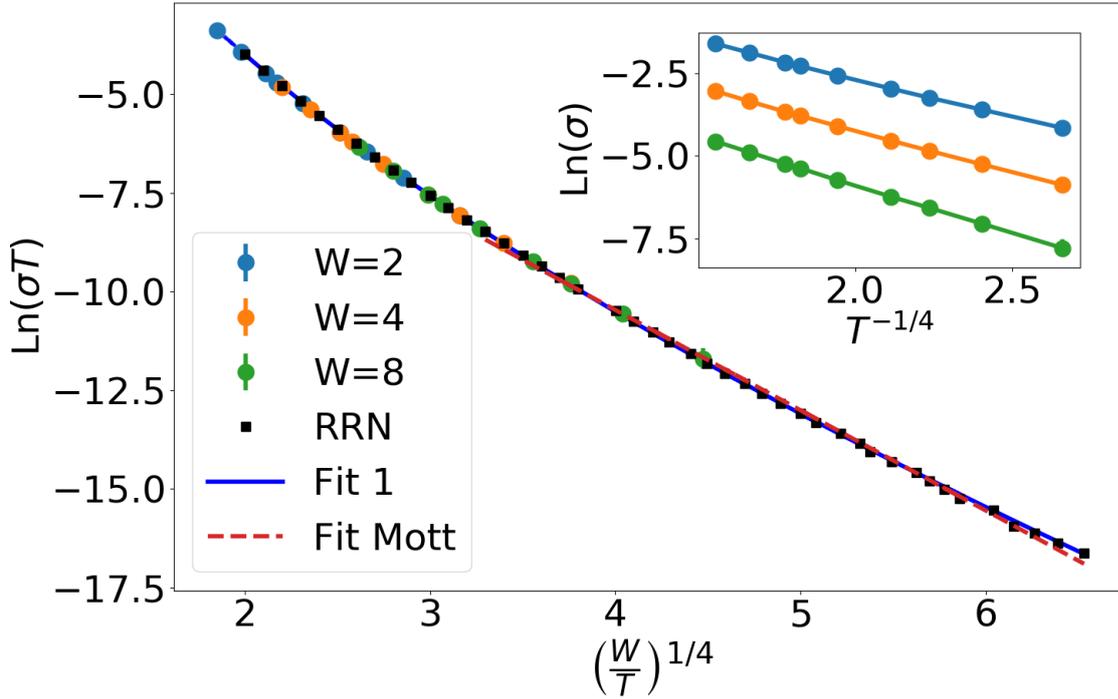


Figura 4.4: Conductividad escalada con la temperatura en escala logarítmica en función de $(W/T)^{1/4}$. Identificamos mediante círculos los resultados obtenidos con el método Monte Carlo y los cuadrados mediante el método RRN. Los colores que identifican los datos del Monte Carlo incluyen diferentes desordenes, $W = 2$ en color azul, $W = 4$ en naranja y $W = 8$ en verde. Representamos con las dos líneas los diferentes ajustes que se han llevado a cabo de los datos. “Fit 1” corresponde a la ecuación (4.11) y “Fit Mott” corresponde a la ecuación (4.12) Arriba a la derecha hemos representado los datos obtenidos mediante el Monte Carlo sin escalar, es decir el logaritmo de la conductividad frente a $T^{-1/4}$ y para los mismos valores del desorden.

para ajustar bien los puntos de las simulaciones. En cambio, el ajuste mediante la ecuación (4.11) se ciñe de manera razonable a los puntos de las simulaciones.

Con los resultados de la conductividad obtenidos en las simulaciones realizadas sin interacción, hemos probado diferentes ajustes. El primero es la ley de Mott pura, la de la ecuación (4.12) El segundo es el que presentamos en la ecuación (4.11), al que le asignamos un prefactor libre, por lo que contamos con tres parámetros

libres en el ajuste. Para el tercero nos hemos basado en nuestro modelo analítico, que presentamos en secciones posteriores de este capítulo y que se basa en los resultados de teoría de percolación. Se han tenido en cuenta tres desórdenes para la simulación mediante el Monte Carlo. Los parámetros de obtenidos con los ajustes para las diferentes funciones se presentan en la tabla 4.1.

De los resultados de los ajustes presentados en la tabla 4.1 podemos determinar que el mejor ajuste para los datos de nuestras simulaciones se obtienen para la expresión con prefactor, la que hemos llamado “Ajuste 2”. De todos modos, como se comenta en Agam y Aleiner (2014), la ambigüedad entre un posible prefactor y una contribución adicional en el exponente impide que este resultado sea confirme rotundamente la existencia del prefactor.

4.3.1. Efecto de tamaño finito

La finitud de las muestras simuladas hace que exista una dependencia entre el tamaño de las muestras y las magnitudes físicas que en ellas medimos. Es importante tener en cuenta el efecto que produce esta finitud de las muestras en las medidas y como varía con el tamaño. Conocido con detalle el efecto de tamaño finito, podemos tratar de extrapolar los resultados para tamaños infinitos o no condicionados por el efecto de tamaño finito. Por un lado, necesitamos comprobar que las muestras simuladas son suficientemente grandes como para que los bordes no estén afectando demasiado a las medidas, y que no encontremos conductividades que dependan del tamaño de la muestra. Por otro, las dependencias de las magnitudes medidas en función del tamaño de la muestra nos pueden informar acerca de las diferentes longitudes relevantes que juegan papel físico en nuestro problema. En este sentido, si prestamos atención a la teoría de percolación presentada en la sección 1.2.2, podemos explotar este análisis como primera vía para obtener la longitud asociada a la posible red de percolación que determina la conductividad del sistema.

En nuestro caso esperamos tres longitudes que pueden tener un papel crucial en las simulaciones: por un lado tenemos el tamaño de la muestra, que denotaremos como L , por otro la longitud media de salto \bar{r} y por último el tamaño a partir del

$\tilde{T} = \frac{T}{W}$	L=20, b=2, 4, 8				
	A	α_3	γ	B	χ^2
Ajuste 1	22 ± 3	159 ± 9	—	—	140
Ajuste 2	11.23 ± 0.07	1.85 ± 0.11	1.477 ± 0.011	—	0.18
Ajuste 3	16 ± 730	2 ± 14	0.45 ± 6	2 ± 373	0.14

$\tilde{T} = \frac{T}{W}$	L=20, b=2				
	A	α_3	γ	B	χ^2
Fit 1	10.5 ± 1.2	112 ± 6	—	—	21000
Fit 2	12.54 ± 0.09	3.06 ± 0.18	1.395 ± 0.014	—	63.5
Fit 3	16 ± 730	2 ± 14	0.45 ± 6	2 ± 373	0.14

Ajuste 1	$A \exp\left(-\left(\frac{\alpha_3}{T}\right)^{1/4}\right)$
Ajuste 2	$A\tilde{T}^\gamma \exp\left(-\left(\frac{\alpha_3}{T}\right)^{1/4}\right)$
Ajuste 3	$A\tilde{T}^\gamma \exp\left[-\left(\frac{\alpha_3}{T}\right)^{1/4} - B\left(\frac{\tilde{T}}{\alpha_3}\right)^{1/4}\right]$

Tabla 4.1: Valores del ajuste para los datos del logaritmo de la conductividad por la temperatura, escalados con el desorden. En la tabla de arriba presentamos los parámetros relativos a la simulación mediante el método de Monte Carlo. En la tabla de en medio se encuentran los parámetros de los ajustes a los datos obtenidos mediante el método de la red de resistencias aleatorias. En la última tabla se encuentra la leyenda con las funciones utilizadas para los distintos ajustes en ambos casos.

cual nuestro sistema responde acorde con la ley de Ohm, ℓ .

Mediante el argumento de Mott se puede realizar una estimación de la longitud media de salto \bar{r} relevante en la conducción por *hopping*. De este modo obtenemos la siguiente expresión para esta magnitud

$$\bar{r} = \xi \left(\frac{T_M}{T} \right)^{1/4}, \quad (4.13)$$

donde T_M es la temperatura de Mott y ξ la longitud de localización. Esta magnitud nos aporta un valor útil para dilucidar en que régimen de conducción se encuentra el sistema. Aunque no es suficiente para determinar los efectos de tamaño finito. La existencia y formación de una red de percolación tridimensional es la responsable de que, para tamaños pequeños, no funcione la ley de Ohm, por lo que será el parámetro de red de este fenómeno el determinante en cuanto al efecto de tamaño finito.

La primera forma de abordar esta cuestión se basa en realizar medidas de conductividad en función del tamaño de la muestra. En la figura 4.5 presentamos los valores de la conductividad en función del tamaño del sistema para tres valores diferentes de la temperatura y para un desorden $W = 2$. Para poder compararlos bien los hemos normalizado respecto al valor de la conductividad para la temperatura más alta representada, $T = 0,1$, para el tamaño más grande que hemos simulado, $L = 20$. En esta figura podemos apreciar como la conductividad se empieza a estabilizar en valores próximos a $L = 10$. En este caso hemos obtenido las conductividades representadas mediante las simulaciones Monte Carlo. Uno de los hechos que llama la atención al observar la tendencia de la conductividad frente al tamaño de la muestra es que las tres curvas representadas saturan para el mismo valor del tamaño de la muestra. Esperamos que el tamaño de la muestra al que se llega al valor de la conductividad en volumen aumente a medida que la temperatura baja, pero no ocurre así. Bajo las condiciones que hemos simulado podemos apreciar que el tamaño al que se llega al valor de la conductividad en volumen es aproximadamente el mismo para las tres temperaturas comparadas.

Para llegar a obtener valores de la conductividad a temperaturas más bajas hemos

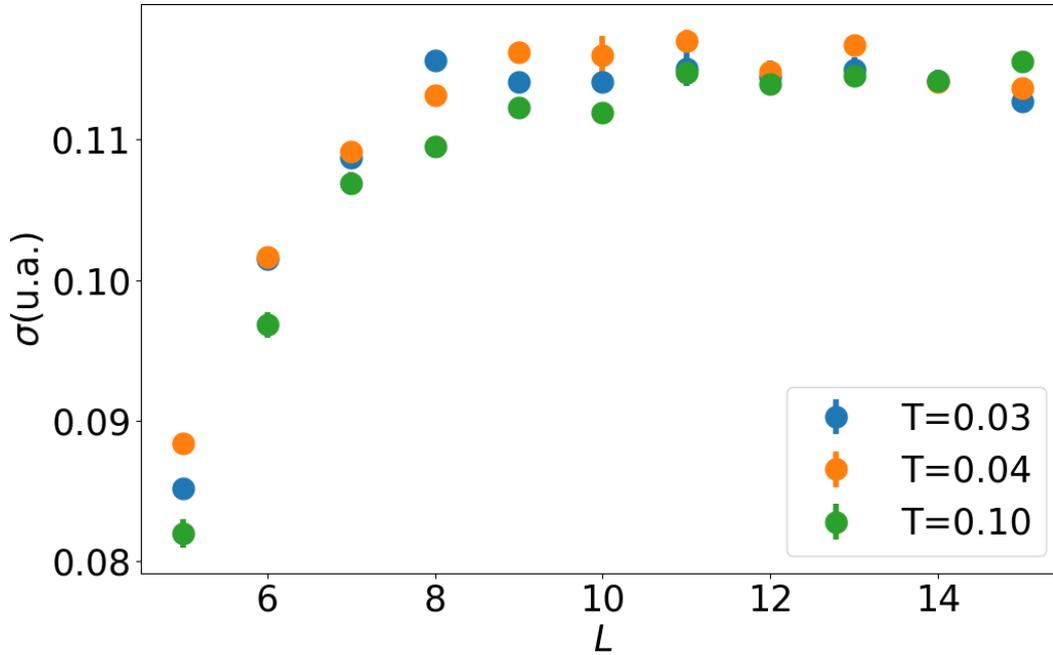


Figura 4.5: Conductividad en función de la longitud de lado de la muestra para tres temperaturas diferentes para un desorden $W = 2$, normalizadas para el valor de la conductividad obtenida para tamaño 20 y a temperatura $T = 0,1$. Los datos de conductividad se han obtenido mediante simulaciones Monte Carlo.

realizado simulaciones de la red de resistencias aleatorias. Con esta técnica de simulación sí se han encontrado variaciones relevantes de las curvas de la conductividad en función de la temperatura del sistema. En la figura 4.6 también representamos valores de la conductividad en función del tamaño de la muestra, pero en este caso utilizando la técnica de la red de resistencias aleatorias y para valores de la temperatura mucho más bajos. En esta figura se muestran tres temperaturas diferentes, que hemos simulado hasta tamaños de $L = 20$. El valor del desorden se ha mantenido constante en $W = 2$. Los datos se encuentran normalizados para el valor de conductividad del tamaño más grande y la temperatura más alta $T = 0,006$. En la figura aparece un máximo de conductividad que aumenta su valor relativo a medida que disminuye la temperatura de la simulación. Mientras que el máximo

parece coincidir para el mismo valor del tamaño de la muestra, debido a la magnitud relativa del máximo, para temperaturas más bajas se llega más tarde al valor de la conductividad en volumen. Estas dos tendencias encontradas en el caso de bajas temperaturas remiten a la existencia de dos longitudes involucradas en el proceso. La primera de las longitudes se manifiesta para tamaños pequeños, hasta un valor de $L \sim 9$, y puede estar relacionada con la longitud de localización que se introduce como parámetro en nuestras simulaciones. La segunda se manifiesta a tamaños más grandes y la relacionamos con la longitud característica de la red de percolación que se constituye en la muestra.

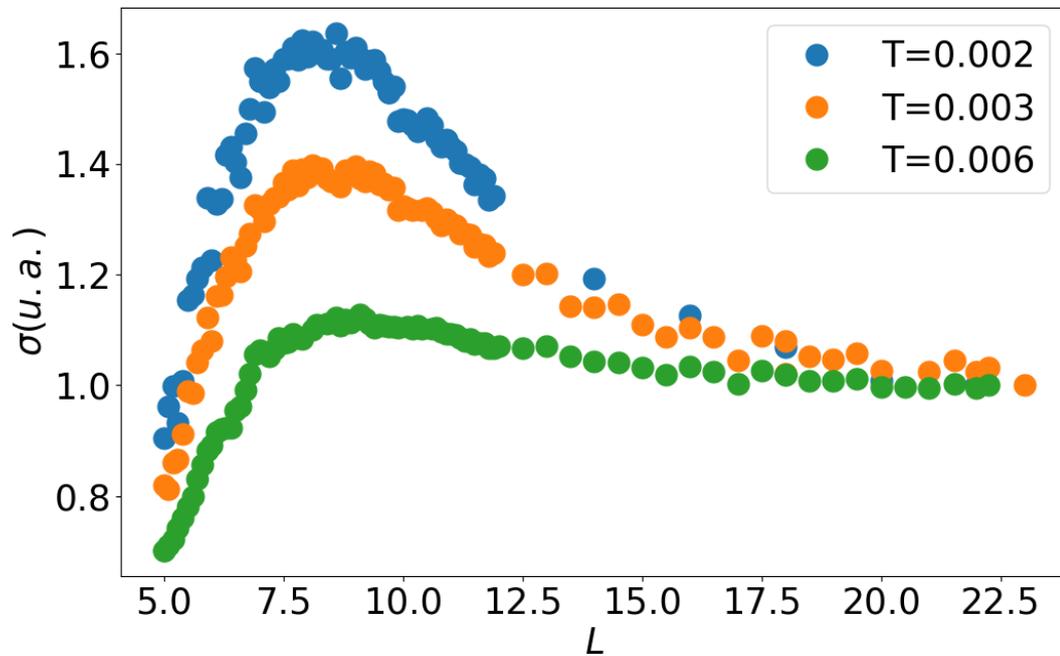


Figura 4.6: Conductividad en función de la longitud de lado de la muestra para tres temperaturas diferentes para un desorden $W = 2$, normalizadas para el valor de la conductividad obtenida para tamaño $L = 23$ y a temperatura $T = 0,006$. Los datos de conductividad se han obtenido mediante simulaciones de la red de resistencias aleatorias.

Otra forma de abordar la cuestión del efecto de tamaño finito es estudiando la varianza de las conductividades en función del tamaño de la muestra. En el caso

de encontrarnos en el régimen óhmico, cuando la conductividad no depende del tamaño de la muestra, esperamos que la varianza de la conductividad decaiga con el tamaño de la muestra de la forma

$$\text{Var}(\sigma) \propto \left(\frac{\ell}{L}\right)^3, \quad (4.14)$$

donde ℓ es una cierta longitud característica del sistema.

Si en el sistema se forma una red de percolación más grande que el tamaño de la muestra, esto repercutirá en la varianza de la conductividad, de modo que los valores de la conductividad para diferentes muestras no responderán a una distribución normal. En la figura 4.7 se representan, en escala logarítmica, las varianzas entre la conductividad al cuadrado frente al tamaño de la muestra, también en escala logarítmica. La dirección de la flecha negra indica temperaturas ascendentes de los datos. Hemos ajustado las partes finales de las curvas, donde los datos se empiezan a comportar de manera lineal, a rectas con pendiente -3 , tal y como describe la ecuación (4.14). De estos ajustes se puede obtener una ordenada en el origen que aporte información sobre la longitud crítica que estamos buscando. Añadimos también un gráfico interior en la figura 4.7 donde se han escalado los datos teniendo en cuenta los datos de la recta de ajuste.

De las ordenadas en el origen que obtenemos de los ajustes es posible obtener una longitud crítica, ya que, aplicando logaritmos a la ecuación 4.14 obtenemos

$$\ln\left(\frac{\text{Var } \sigma}{\sigma^2}\right) \propto 3 \ln \ell - 3 \ln L. \quad (4.15)$$

Así, podemos obtener una longitud característica que depende exponencialmente de la temperatura. Para determinar su exponente, de nuevo, podemos representarla en escala logarítmica, ajustar a una recta y quedarnos con la pendiente.

En la figura 4.8 representamos diferentes valores de la ordenada en el origen de los ajustes de las varianzas para dos valores diferentes del desorden. Los valores de la figura 4.8 se han obtenido mediante simulaciones de la técnica de Monte Carlo. Del ajuste de los datos obtenemos una pendiente $-1,64 \pm 0,08$, del que deducimos un exponente para la temperatura $-0,55 \pm 0,03$, teniendo en cuenta el factor 3 delante de la longitud crítica en la ecuación (4.15).

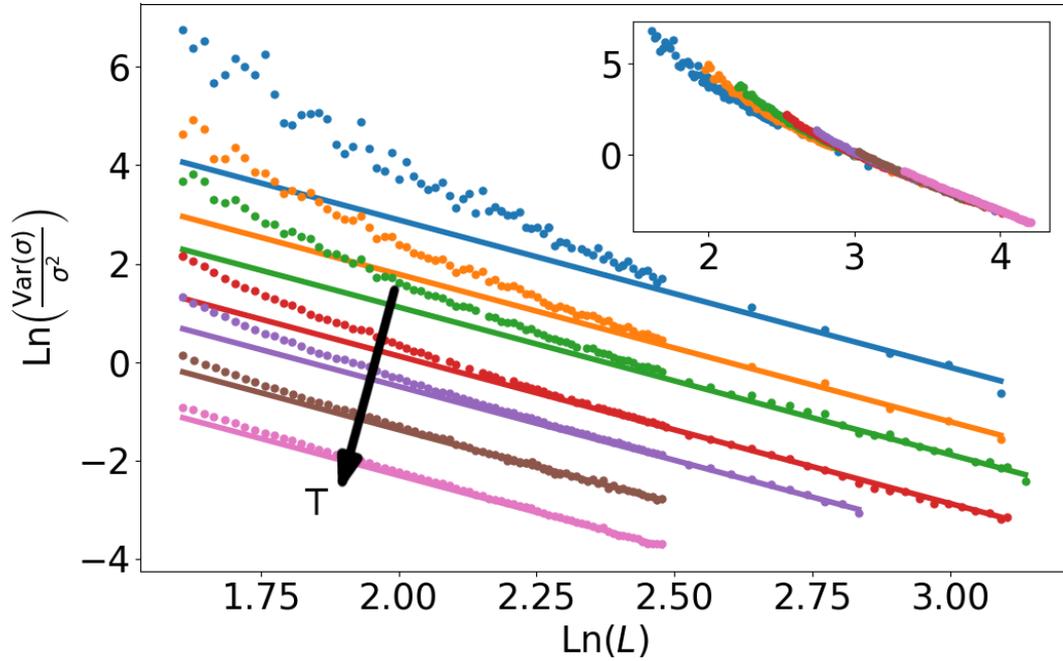


Figura 4.7: El logaritmo de la varianza de la conductividad entre la conductividad al cuadrado en función del logaritmo del tamaño de la muestra. Los diferentes colores representan diferentes valores para la temperatura. Las rectas de ajuste responden a una pendiente -3 de acuerdo con la teoría, en la zona en la que los datos se comportan de forma lineal. La flecha negra indica la dirección en la que aumenta la temperatura. En la gráfica interior se muestran los mismos datos pero escalados en base a los datos obtenidos de las rectas de ajuste.

Que el ajuste mediante la sugerencia presentada en la ecuación (4.14) no sea suficiente para describir los datos, apunta a que quizás no exista solo una longitud crítica en nuestro sistema, tal y como apreciamos en las anteriores medidas del efecto de tamaño finito que se presentan en la figura 4.6. Una sugerencia adicional podría ser la inclusión de un término de orden superior en la varianza de la conductividad en función de la muestra, de la forma

$$\frac{\text{Var}(\sigma)}{\sigma^2} = \left(\frac{\ell_1}{L}\right)^3 \left(1 + \left(\frac{\ell_2}{L}\right)^3\right). \quad (4.16)$$

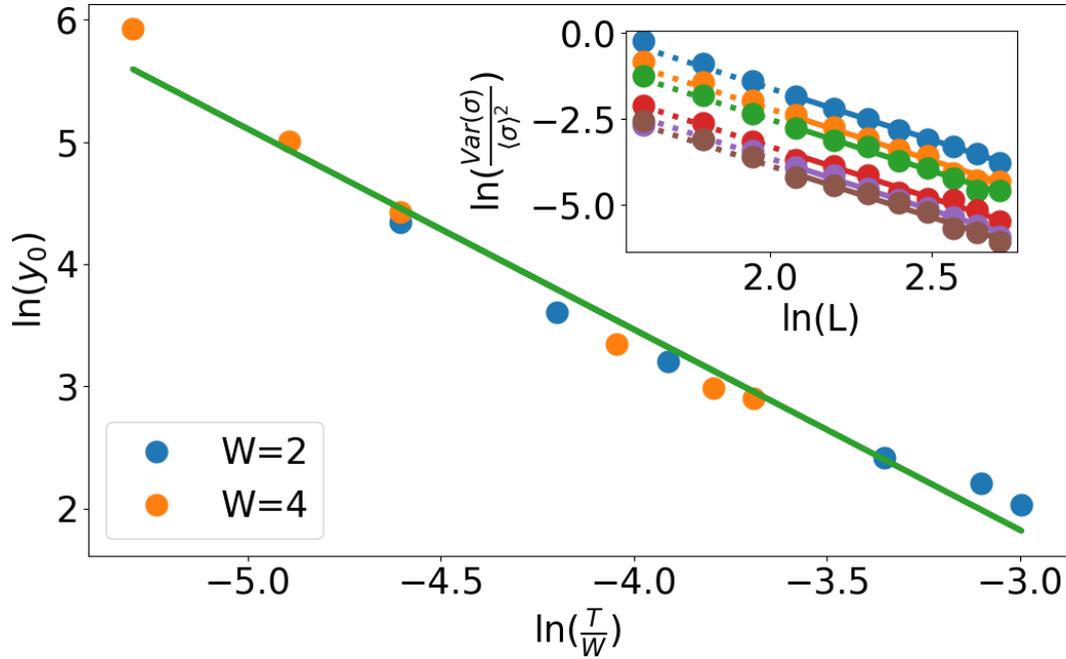


Figura 4.8: El logaritmo de la ordenada en el origen que se ha extraído de los ajustes lineales del logaritmo de la varianza frente al logaritmo del tamaño de la muestra. Representamos valores obtenidos de ajustes para datos obtenidos de simulaciones del método de Monte Carlo para dos valores del desorden diferentes. La recta corresponde a un ajuste lineal de los datos de donde se obtiene una pendiente $-1,64 \pm 0,08$. En la gráfica interior mostramos los datos de la varianza frente a la temperatura que hemos ajustado para obtener las y_0 .

Para un valor de temperatura arbitrario, podemos comprobar la eficacia de la ecuación (4.16) para el ajuste de los datos de la varianza. En la figura 4.9 mostramos la dependencia de la varianza de la conductividad, normalizada respecto la conductividad al cuadrado, con el tamaño de la muestra para una temperatura $T = 0,0064$. Para el ajuste de los datos se ha utilizado la ecuación (4.16). Se puede apreciar que las dos longitudes ℓ_1 y ℓ_2 parecen coincidir y que la ecuación (4.16) ajusta fielmente los datos.

Los resultados obtenidos hasta ahora para las longitudes críticas los podemos

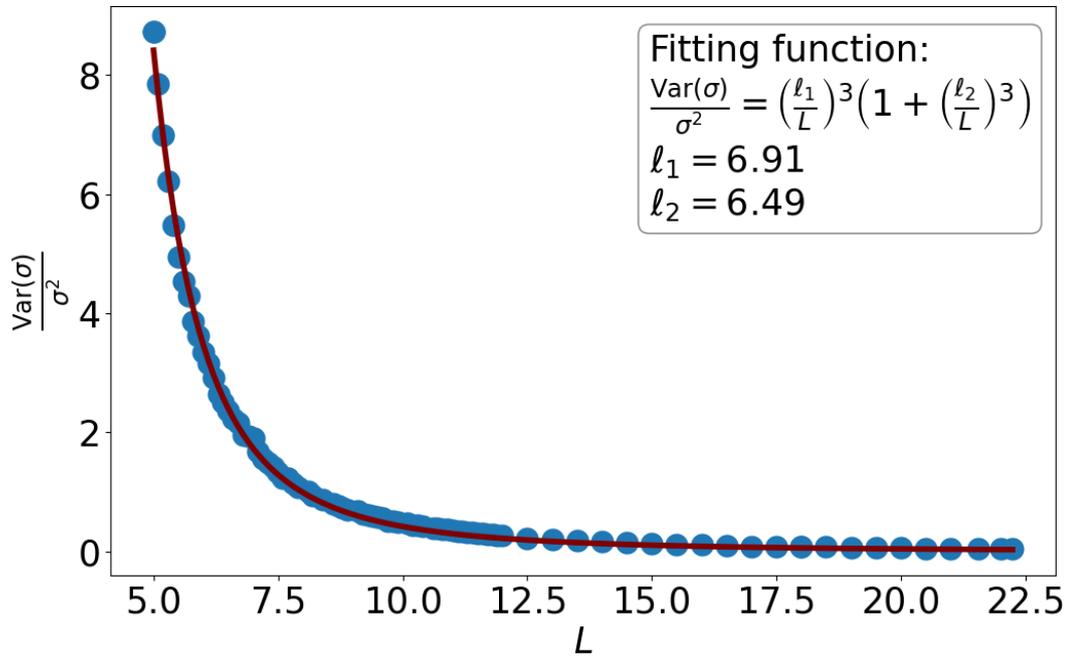


Figura 4.9: La varianza de la conductividad entre la conductividad al cuadrado en función del tamaño de la muestra en escala lineal para una temperatura de $T = 0,0064$. Donde hemos utilizado para el ajuste la expresión 4.16.

sinetizar para tratar de ver sus tendencias en función de la temperatura. En la figura 4.10 comparamos los diferentes valores de las longitudes relevantes que pueden manifestarse en el sistema. En esta figura podemos ver como, a partir de una cierta temperatura, los valores de las longitudes críticas empiezan a tomar un comportamiento lineal con una pendiente diferente a la de la ley de Mott en tres dimensiones, en concreto $\sim -0,4 \pm 0,1$.

Otra forma de investigar las longitudes relevantes involucradas en el sistema es utilizando métodos que exploten las posibles propiedades fractales en las muestras. El hecho de suponer la existencia de una red con un parámetro de red mayor que la distancia de separación media entre los sitios de nuestra muestra nos sugiere la existencia de fractalidad en el sistema. Para este propósito necesitamos medidas microscópicas, es decir, debemos conocer la estructura de las diferentes transiciones

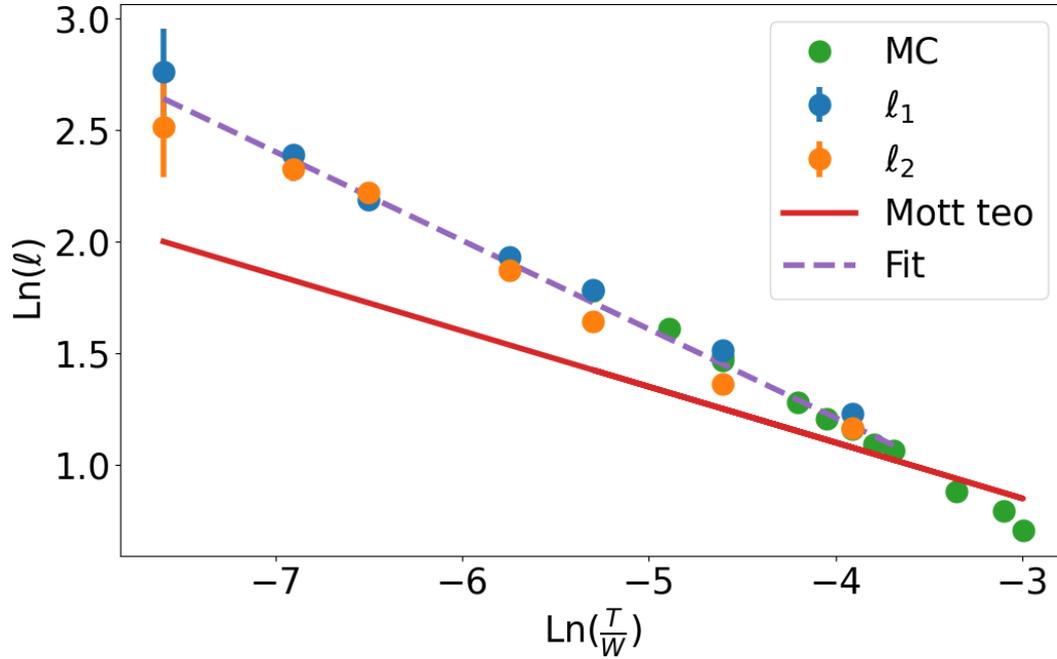


Figura 4.10: El logaritmo de las longitudes críticas obtenidas junto en función del logaritmo de la temperatura T entre el desorden W . En azul y naranja se muestran las parejas de l_1 y l_2 que se han resuelto ajustando con la ecuación 4.16 para las temperaturas bajas simuladas con la RRN. En verde mostramos las longitudes críticas extraídas mediante el ajuste con la ecuación 4.14 de las simulaciones a temperaturas más altas que realizamos con la técnica de Monte Carlo. La línea morada discontinua representa un ajuste lineal sobre los datos de las parejas l_1 y l_2 . La línea roja continua corresponde a la pendiente $-1/4$ relativa a la ley de Mott.

entre sitios que realizan los electrones en la red. Hasta ahora hemos visto fundamentalmente promedios que nos permiten obtener valores de la conductividad de la muestra en su conjunto. Para estudiar la fractalidad se necesita toda la información espacial de los saltos, mientras que hasta ahora solo hemos utilizado las distancias en el eje del campo eléctrico para calcular la conductividad, como vimos en la ecuación (2.9).

4.3.2. Medidas microscópicas

Para las simulaciones en tres dimensiones y no interactuantes mediante la técnica Monte Carlo hemos tratado de entender que ocurre a escala microscópica en el interior de las muestras. Hemos estudiado la contribución a la conductividad total que aporta cada enlace de la muestra, siendo estas

$$c_i = q_i \Delta x_i, \quad (4.17)$$

donde el subíndice i denota el enlace en cuestión, Δx es la proyección de la distancia entre los puntos en el eje x y q la carga neta que ha cruzado el enlace.

Para obtener un buen promedio en las medidas de c_i mediante la ecuación (4.17) es necesario realizar simulaciones suficientemente largas. Hay que tener en cuenta que para este tipo de medidas no es posible realizar promedios en muestras, por lo que hemos simulado unas pocas muestras a diferentes temperaturas.

En la figura 4.11 presentamos un dibujo tridimensional de los 500 primeros enlaces que más contribuyen a la corriente total de la muestra, a una temperatura $T = 0,02$ y $T = 0,1$, para tamaño de la muestra $L = 20$ y desorden $W = 2$. El diferente grueso de los segmentos indica la contribución de corriente de cada enlace. Se han coloreado los enlaces en función de su relación con el nivel de Fermi, si atraviesan el nivel de Fermi le asignamos el negro, si los dos sitios quedan por encima del nivel de Fermi lo coloreamos en rojo y reservamos el azul para los pares de sitios que se encuentran por debajo del nivel de Fermi. Una primera representación gráfica de los enlaces que más contribuyen a la corriente no aporta demasiada información sobre la conducción del sistema, ya que en las figuras tridimensionales somos incapaces de distinguir caminos preferentes para la conducción. De todas formas sí es posible apreciar las diferencias entre las longitudes típicas de salto entre las dos temperaturas. Para la temperatura más baja tenemos más saltos largos que para la alta, tal y como cabe esperar.

El hecho de distinguir los enlaces por su relación con el nivel de Fermi se encuentra motivado por el trabajo de Agam y Aleiner (2014), que aprecian que la proporción de corriente que llevan los enlaces que cruzan el nivel de Fermi frente

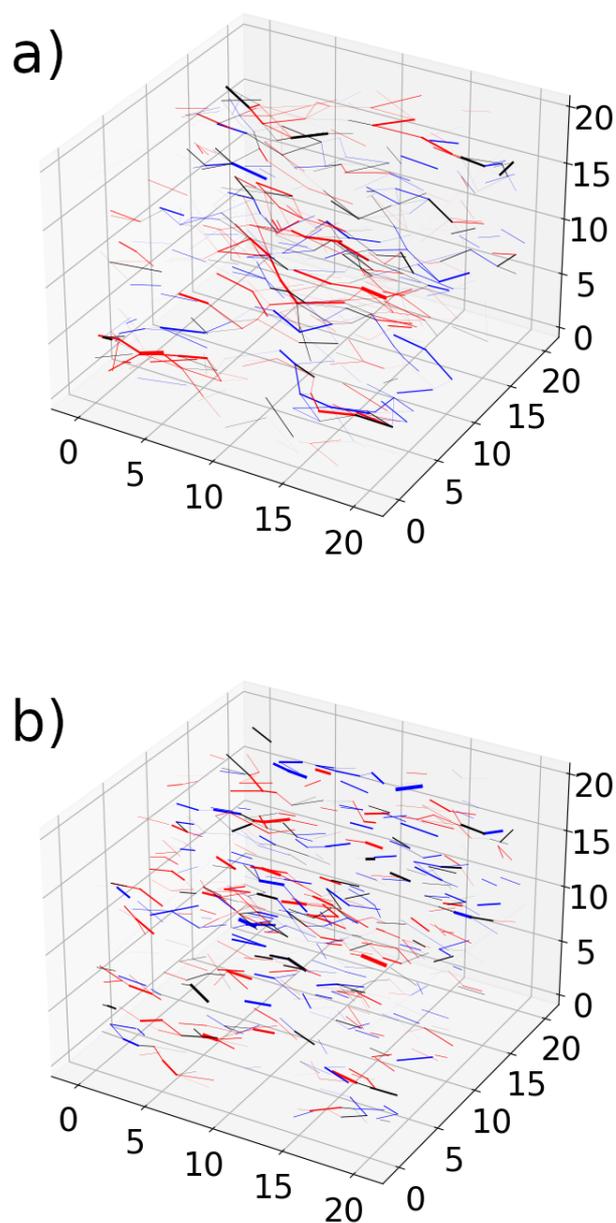


Figura 4.11: Representación tridimensional los 500 enlaces que más contribuyen a la corriente, para una muestra a $T = 0,02$ (arriba) y $T = 0,1$ (abajo), $L = 20$ y $W = 2$. El azul representa las transiciones por debajo de la energía de Fermi, el rojo por encima y en negro las que la atraviesan. El grueso de las líneas representa las diferentes contribuciones de los enlaces a la corriente total de la muestra.

a la corriente total del sistema baja de forma brusca con la temperatura. En este trabajo los autores proponen la existencia de dos tipos de redes de percolación, una asociada a las transiciones por encima del nivel de Fermi y otra asociada a las transiciones por debajo, asumiendo que puede haber una pequeña proporción de enlaces, que atraviesan el nivel de Fermi y que actúen como puente entre estas dos redes de percolación. Como concluyen que la proporción de corriente que llevan los enlaces que cruzan el nivel de Fermi es cada vez más pequeña al disminuir la temperatura, pueden tratar las dos redes de forma independiente en el límite de percolación. Podemos probar esta afirmación sobre los datos de las simulaciones realizadas representando la ratio entre la parte de corriente que pasa por enlaces que cruzan el nivel de Fermi respecto al total de la corriente (ρ_k), en función de la temperatura.

En la figura 4.12 representamos la fracción de la corriente que transportan los enlaces que atraviesan el nivel de Fermi respecto a la corriente total que transporta el sistema en función de la temperatura. Estos datos han sido recogidos para una muestra de tamaño $L = 20$ y desorden $W = 2$.

Según los resultados de nuestras simulaciones mediante el método de Monte Carlo podemos apreciar que, en el rango de temperaturas en el que trabajamos, la fracción de corriente que atraviesa el nivel de Fermi es aproximadamente un 30%. Existe un cambio de tendencia, aproximadamente en $T = 0,1$, a partir de la cual se acrecienta la bajada de ρ_k al disminuir la temperatura. Este resultado puede sugerir que las temperaturas a las que hemos realizado las simulaciones guardando los datos de cada enlace sean demasiado altas para posicionarnos en la suposición de Agam y Aleiner (2014).

Otra cuestión de interés respecto a la información que podemos extraer mediante este tipo de simulaciones es la cuestión de cómo se distribuye la corriente en el sistema. Además de la distribución espacial que hemos presentado en la figura 4.11, donde dibujamos los enlaces en tres dimensiones, puede resultar interesante el análisis de la distribución de las corrientes en función de las distancias de salto y de las diferencias de energía entre los sitios. Una posibilidad consiste en representar cada

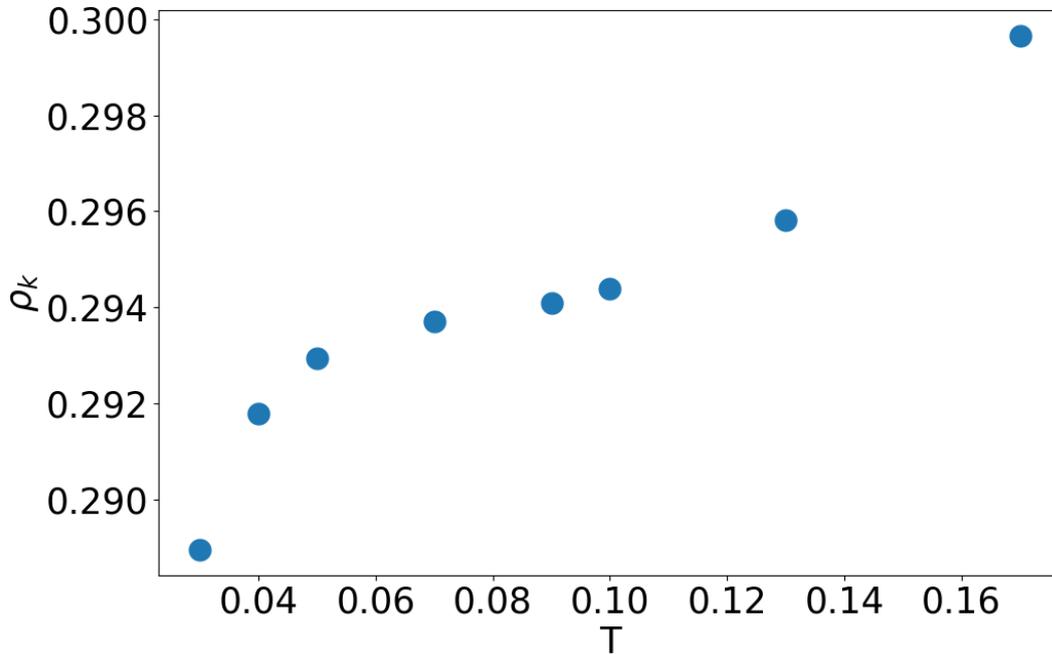


Figura 4.12: Fracción de corriente que atraviesa el nivel de Fermi en función de la temperatura, para una muestra con $L = 20$ y $W = 2$.

enlace como un punto en un plano delimitado por un eje que represente la distancia entre los sitios (horizontal) y otro que represente la diferencia de energía entre los sitios (vertical). La corriente se puede representar como el peso de cada uno de los puntos en una superficie de nivel. Para visualizar esta distribución hemos hecho uso de la aproximación *kernel-density estimation* (KDE), que nos permite suavizar los datos para realizar una mapa de nivel de la distribución de corriente.

En la figura 4.13 presentamos un mapa bidimensional de la intensidad de corriente de los diferentes enlaces, en función de la distancia de salto y de la diferencia de energía entre los sitios. En particular, esta gráfica ha sido calculada para una temperatura $T = 0,02$, un tamaño de la muestra $L = 20$ y un desorden $W = 2$. En este plano bidimensional cada enlace se situaría en un punto, pero hemos promediado los datos más cercanos para obtener una función continua, donde la escala de color representa la intensidad relativa que portan los enlaces bajo esas caracte-

terísticas. El punto blanco representa el valor medio de la longitud de salto y de la diferencia de energías, es decir, donde debería encontrarse el máximo de nuestro perfil de conductividad. El punto negro sería este mismo valor teniendo en cuenta teoría de percolación. La línea negra diagonal representa el valor crítico para la resistencia, es decir, según teoría de percolación ese valor corresponde a la resistencia máxima que contribuye a la corriente, por lo que no deberíamos esperar enlaces más allá de esta.

Nuestros datos, representados en la figura 4.13, contienen un máximo en la conductividad que no ajusta ni con el máximo predicho por la ley de Mott, ni con el máximo reproducido por la ley de percolación. De hecho, en este caso, el máximo se encuentra desplazado a la izquierda pero reposa sobre la recta que maximiza la conductividad -que sale del origen de coordenadas y pasa por los puntos obtenidos de la relación de Mott -con la que obtenemos los saltos típicos de Mott. Los dos máximos, el de Mott por un lado, escrito en la ecuación (1.15), y el de percolación por otro, en la ecuación (1.28), están calculados de la manera propuesta en la sección 1.2.1.1, con la única diferencia de los vecinos preferentes que incluimos. Por un lado en la ley de Mott constatamos que la integral de la densidad de estados entre 0 y ΔE es $1/R^3$, mientras que en el caso de percolación tenemos en cuenta que esta integral es igual a $2,3/R^3$, siendo 2,3 el valor de las conexiones promedio que se obtiene en una red cuadrimensional aleatoria en el límite de percolación (Pike y Seager, 1974a).

Estas mismas gráficas las encontramos en el trabajo de Pasveer et al. (2005), para los casos bidimensional y tridimensional. En este trabajo se utilizan para comprobar las propiedades de escalado de los datos, pero también podemos observar que, en el caso tridimensional existe una mayor proporción de resistencias que se salen del límite de percolación, comparado con el caso bidimensional. Para nuestras simulaciones podemos apreciar una dependencia en la temperatura en la que, a medida que aumenta, aumenta también la proporción de resistencia que cae fuera del límite establecido por teoría de percolación. Así, como esperábamos, encontramos que la aproximación que hemos introducido en la sección 4.1, basada teoría de

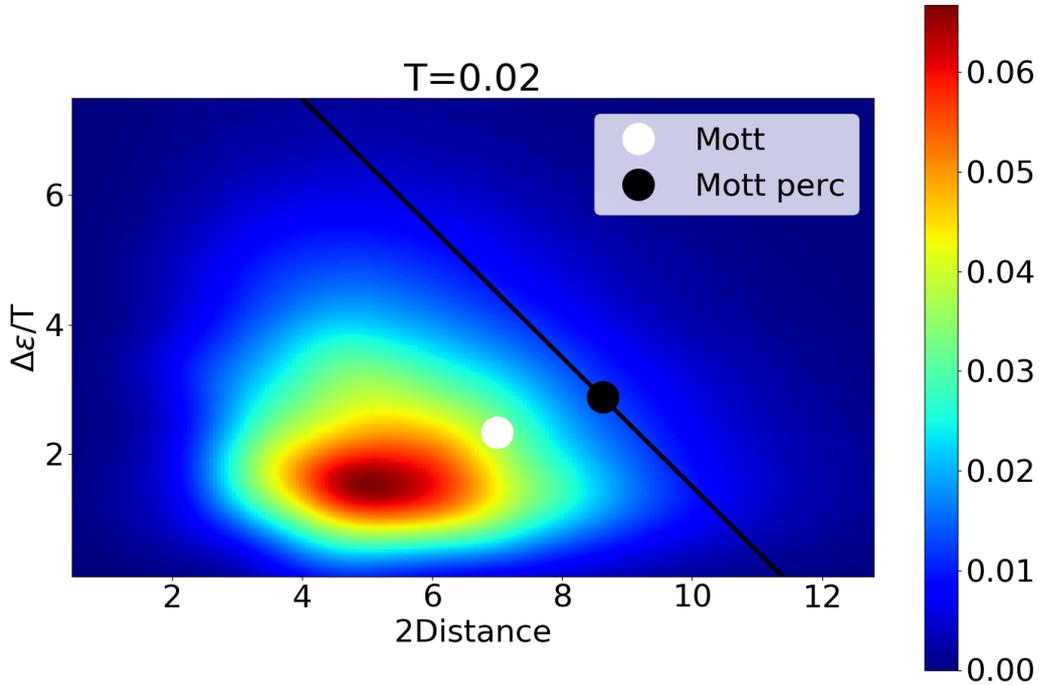


Figura 4.13: Mapa de la distribución de corriente en función de la distancia de salto y de la diferencia de energía de los sitios, para una muestra a $T = 0,02$, $L = 20$ y $W = 2$. La escala de colores representa promedios de la contribución a la corriente total de la muestra, en unidades arbitrarias. El punto blanco representa el máximo de corriente calculado mediante la ley de Mott, mientras que para el punto negro hemos utilizado teoría de percolación. La línea negra representa la resistencia crítica de percolación.

percolación, gana validez a bajas temperaturas.

Otra de las herramientas que se han usado para el estudio de las longitudes relevantes que manifiesta el sistema es el estudio de la posible dimensión fractal que pueda aparecer en la red. Tal y como se ha introducido en la sección 1.2.3, hemos aplicado una variación del método *box counting* para calcular las propiedades fractales de nuestro sistema. El hecho de estudiar datos asociados a conductividad por enlaces complica esta cuestión, ya que en las regiones límite podemos encontrar enlaces que las crucen.

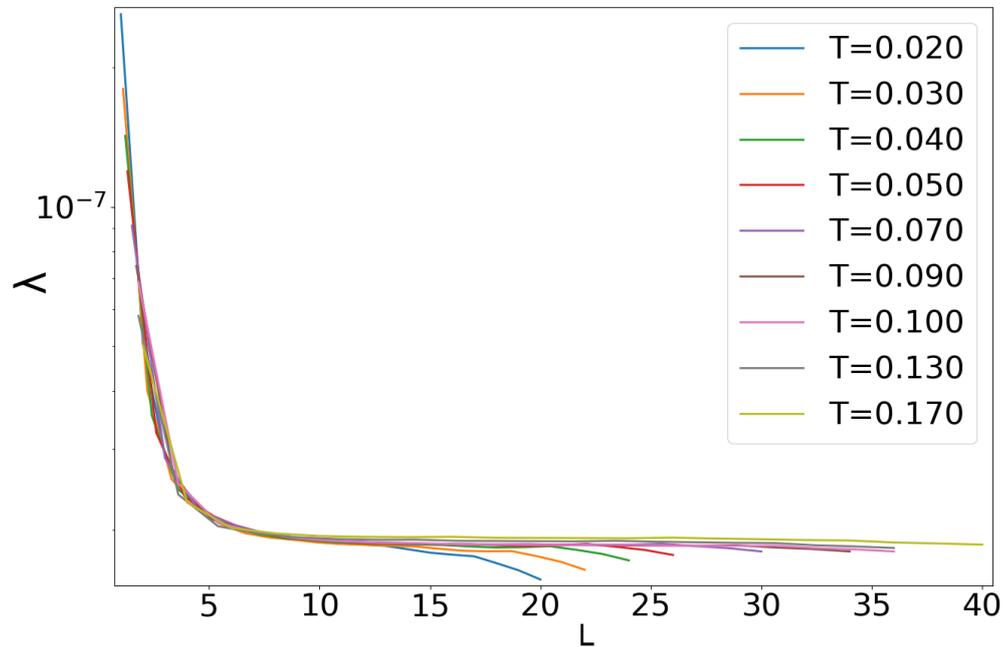


Figura 4.14: Conductividades calculadas para diferentes tamaños de los cubos en el interior de la muestra. Las curvas para diferentes temperaturas han sido escaladas para hacer coincidir el codo con la curva de temperatura $T = 0,02$. Así, los ejes vertical y horizontal se ven modificados un cierto factor para cada valor de la temperatura.

Para atajar el problema del corte de los enlaces se ha calculado la contribución a la corriente de cada sitio y se ha procedido a calcular las corrientes para diferentes volúmenes en el interior de la muestra. Nos hemos basado en los cálculos del *index participation ratio* que se utilizan para identificar el grado de localización de las funciones de onda en mecánica cuántica. En nuestro caso, calculamos el cuadrado de la fracción de conductividad de cada caja de la L respecto a la total, sumamos los valores de todas las cajas y lo normalizamos también respecto al volumen total V . Si la corriente estuviese totalmente localizada en un punto de la red obtendríamos

un valor del parámetro $\lambda = 1/V$. Entonces, la expresión de λ viene dada por

$$\lambda = \frac{1}{V} \left(\sum_L \sigma_{norm}(L)^2 \right) \quad (4.18)$$

donde $\sigma_{norm}(L)$ es la media de la conductividad de los puntos dentro de una caja de lado L , normalizada a la conductividad total de la muestra, V es el volumen de la muestra y el sumatorio en L representa la suma de las corrientes normalizadas para todas las cajas de longitud L que caben en la muestra. El parámetro λ en función de la distancia de muestreo L puede dar información sobre la existencia de longitudes relevantes en la muestra. En particular va a ser útil representarlo en función de las longitudes de las diferentes cajas que se han utilizado.

En la figura 4.14 representamos la media del cuadrado de las conductividades que atraviesan una caja concreta, en función de los diferentes tamaño de las cajas. Los colores indican las temperaturas para las que se han obtenido los datos. Hemos realizado cálculos para un conjunto de nueve temperaturas diferentes. Los datos representados en la figura 4.14 han sido simulados mediante el método de Monte Carlo. En esta representación se han introducido factores a mano para escalar las curvas y que los codos para todas las temperaturas coincidan. Podemos comprobar que el escalado funciona bastante bien para este tipo de datos. Los factores obtenidos para escalar las gráficas de diferentes temperaturas aportan también información acerca de la distribución de corrientes que hay en la muestra. En particular, el factor sobre el eje horizontal debe estar relacionado con una distancia característica. Aunque su valor absoluto no aporte información, su comparación con los valores que obtenemos del resto de temperaturas sí puede ser relevante.

De la misma forma que hemos estudiado la fractalidad para los datos obtenidos de la simulación con el método de Monte Carlo, también podemos hacerlo para la simulación de la red de resistencias aleatorias. En este caso, el método mediante el cual obtenemos la conductividad y que hemos presentado en la sección 2.4 no contiene de manera obvia la información sobre cómo se distribuyen las corrientes a través de la muestra. Tenemos que añadir una pequeña modificación al programa para estudiar la corriente de los diferentes enlaces. Para extraer las corrientes de

cada enlace simplemente tendremos que tener en cuenta la probabilidad de salto de las transiciones y las diferencias de potencial entre la muestra, de manera que

$$C_{ij} = \Gamma_{ij}(V_i - V_j - V_0), \quad (4.19)$$

donde V_i es el potencial en el punto i y V_0 es la diferencia de potencial de extremo a extremo de la muestra. Hay que tener en cuenta que el potencial V_0 solo interviene en la ecuación cuando los dos puntos atraviesan la superficie conectada por las condiciones de contorno. Con los datos de las corrientes de la ecuación (4.19) realizamos el mismo procedimiento para obtener la posible fractalidad en la muestra para diferentes temperaturas.

En la figura 4.15 representamos también las medias de los cuadrados de las intensidades que pasan por cada enlace, incluidos en el interior de una caja de longitud L , tal y como viene en la ecuación (4.18). En este caso hemos utilizado los datos de siete temperaturas simuladas mediante la red de resistencias aleatorias y los datos han sido escalados de la misma manera que en la figura 4.14. Puede apreciarse que con este método hemos sido capaces de bajar más la temperatura que con el Monte Carlo, ya que se trata de una simulación mucho más sencilla.

Podemos obtener las distancias características a partir de los parámetros del escalado y compararlas en ambos casos, para la simulación mediante el método de Monte Carlo que hemos presentado en la figura 4.14 y mediante la red de resistencias aleatorias plasmadas en la figura 4.15. Las distancias tal y como se presentan en las figuras escaladas a mano 4.14 y 4.15¹ necesitan una referencia para poder ser comparadas a lo largo del rango de temperatura. Como la información relevante de las longitudes que obtenemos de los escalados reside en su dependencia con la temperatura más que en su valor absoluto, podemos mover los datos arbitrariamente a lo largo del eje vertical para clarificar su representación gráfica.

En la figura 4.16 representamos, en escala logarítmica, los factores de distancia que hemos utilizado en las figuras escaladas 4.14 y 4.15 frente a la temperatura.

¹En esta gráfica se presentan dos factores de forma implícita: uno, que multiplica a la distancia, en la horizontal y otro en la vertical.

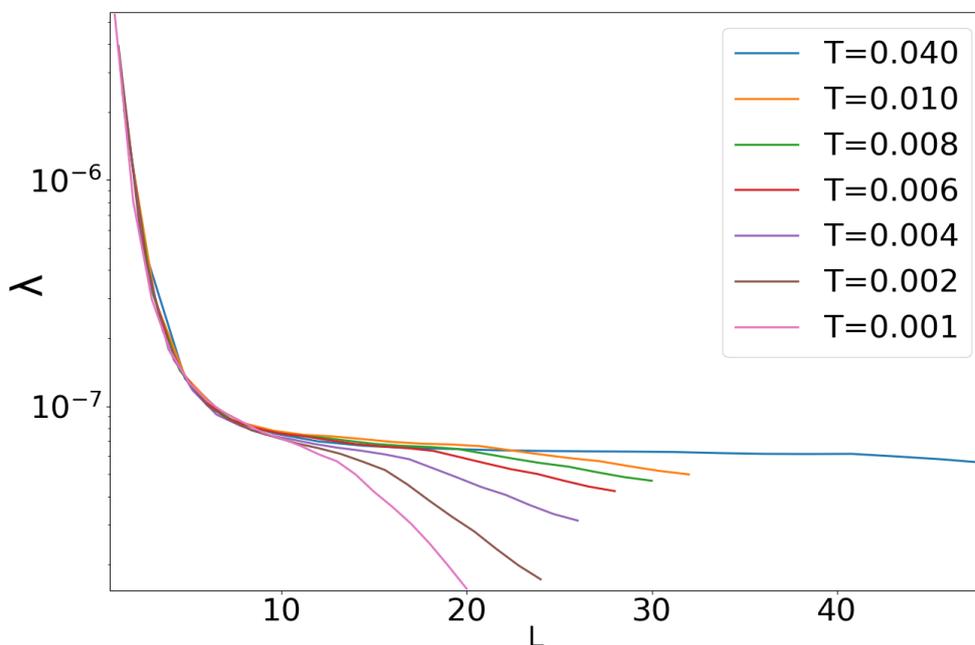


Figura 4.15: Conductividades calculadas para diferentes tamaños de los cubos en el interior de la muestra. Las curvas para diferentes temperaturas han sido escaladas para hacer coincidir el codo con la curva de temperatura $T = 0,001$. De la misma forma que para la figura 4.14 los ejes vertical y horizontal se ven modificados un cierto factor para cada valor de la temperatura.

Los valores absolutos de la distancia han sido elegidos de manera que coincidan para una temperatura $T = 0,02$, para la que hemos cogido como referencia una de las longitudes obtenidas mediante métodos presentados en secciones anteriores. Las líneas continuas representan ajustes mediante los que podemos comprobar que a bajas temperaturas se obtiene una mayor pendiente negativa. Estos ajustes verifican también, en este rango de temperaturas, el comportamiento exponencial de las longitudes características en función de la temperatura. Del par de ajustes podemos obtener el coeficiente que determina el decaimiento exponencial de esta longitud característica. En cuanto a las gráficas interiores de la figura 4.16, arriba a la derecha tenemos los datos crudos obtenidos mediante la técnica de Monte Carlo y abajo a la

izquierda presentamos un detalle del escalado de los mismos puntos, comprobando que forman un codo muy preciso.

Como vemos en la figura 4.16, los datos se han ajustado de manera que se puede apreciar fácilmente la diferencia de pendiente entre las dos curvas. El ajuste lineal en la escala logarítmica en la que se encuentran los datos supone una tendencia exponencial de la longitud característica con la temperatura de la forma $\ell \propto T^\alpha$. Del ajuste de los datos obtenidos de la simulación de la red de resistencias aleatorias podemos extraer los siguientes valores del parámetro α , por un lado $\alpha_{\text{RRN}} = -0,2398$ y por otro $\alpha_{\text{MC}} = -0,3266$. El valor para temperaturas bajas, asociado a la red de resistencias aleatorias, es cercano a la dependencia de la longitud media de salto con la temperatura según el argumento de Mott. Para el caso de temperaturas relativamente altas, la dependencia se aleja del valor anterior para acercarse al $1/3$. De todas formas, estos datos tienen un carácter puramente orientativo. La metodología de obtención de las longitudes críticas no es excesivamente rigurosa, por lo que la intención de este tipo de cálculos es ver las diferentes tendencias que se obtienen en los dos tipos de simulaciones que abordamos, así como la posibilidad de que los datos puedan ser escalados en la zona en la que los datos se curvan.

Otra propiedad interesante de la información de la corriente de los enlaces en nuestras muestras es su distribución de corrientes ordenada. Un ordenamiento de enlaces que más contribuyen a enlaces con menor contribución nos puede ayudar a entender como está de repartida la corriente en la muestra. Es decir, estos datos nos pueden decir si la mayor parte de corriente la llevan pocos enlaces, de manera que la corriente de la muestra se encontraría muy concentrada, o si la llevan un conjunto grande de enlaces con poca corriente, donde tendríamos una situación con la corriente muy repartida a lo largo del volumen de la muestra. Según teoría de percolación esperamos que la media de la diferencia entre el logaritmo de las resistencias de cada enlace sea aproximadamente la unidad (Shklovskii y Efros, 1984). Hay que destacar que al trabajar con teoría de percolación lo hacemos suponiendo una distribución exponencial de resistencias y es este exponente, que en nuestro caso hemos asociado a la probabilidad de salto de la ecuación 1.10, el que determina

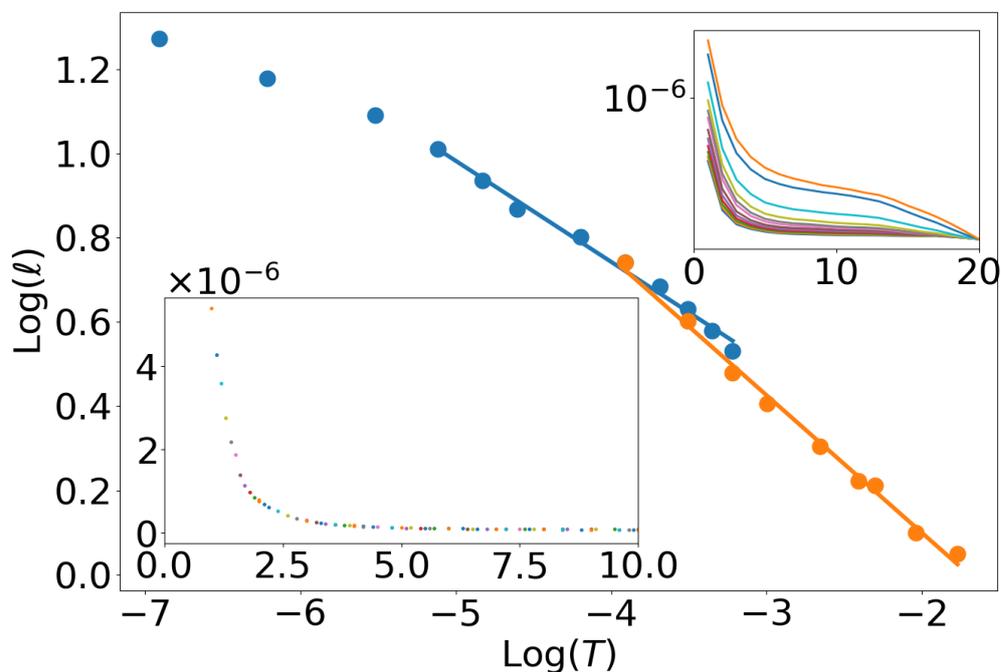


Figura 4.16: Logaritmo del factor de distancias, extraído del escalado de la figura 4.14 y de la figura 4.15, frente al logaritmo de la temperatura. Se han ajustado los datos para que coincidan los factores para la temperatura $T = 0,02$. En color azul representamos los valores para bajas temperaturas realizados mediante la simulación de la RRN y en naranja para temperaturas relativamente altas, obtenidos con el método Monte Carlo. En el la gráfica superior derecha representamos los datos crudos en doble escala logarítmica, mientras que en la gráfica inferior izquierda tenemos los datos escalados, en escala semilogarítmica.

la conductividad del sistema.

En la figura 4.17 presentamos la corriente ordenada que porta cada enlace en la dirección en la que medimos la corriente de la muestra, para tres temperaturas diferentes. Se han representado los datos en escala logarítmica en el eje vertical para apreciar mejor el comportamiento. Una de las conclusiones que podemos sacar de estas representaciones es que a medida que bajamos la temperatura tenemos más y

más enlaces que conducen muy poco. Es decir, a temperaturas altas la conductividad de la muestra se encuentra más fuertemente determinada por los enlaces que más conducen.

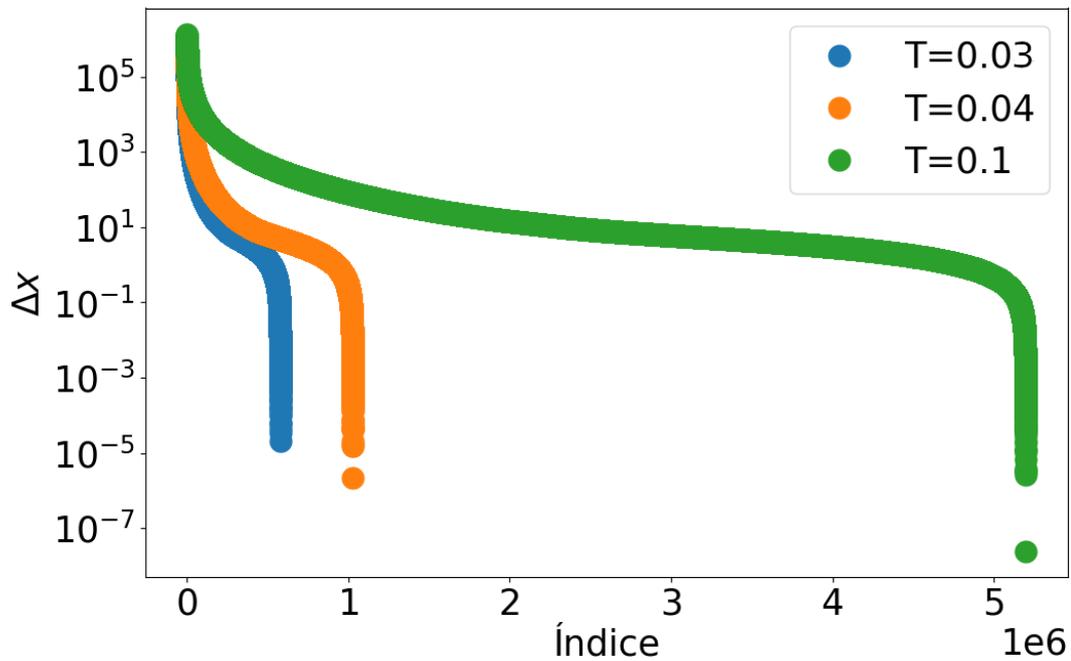


Figura 4.17: Distribución de enlaces ordenados en función del desplazamiento de carga acumulado para diferentes temperaturas $T = 0,03$, $T = 0,04$ y $T = 0,1$ en escala logarítmica. Para diferentes temperaturas vemos como, aunque la cantidad de enlaces que contribuyen en mayor medida a la corriente, hay una fuerte dependencia para los enlaces que llevan poca corriente.

Estos resultados contribuyen a una comprensión conjunta de las propiedades de conducción del sistema a estudio y han de ser necesariamente conjugados con los macroscópicos. En suma, apreciamos que bajo las condiciones en las que nos encontramos, aunque existen indicios que apuntan a comportamientos relacionados con teoría de percolación, podemos afirmar que el sistema no está gobernado por un comportamiento únicamente reducible al límite de percolación. A continuación comentaremos los resultados obtenidos hasta ahora para la ley de Mott en sistemas tridimensionales y seguiremos abordando otras tres situaciones complementarias: la

ley de Mott para sistemas de dos dimensiones, la ley de Efros-Shklovskii tridimensional y el régimen activado.

4.3.3. Prefactor en la ley de Mott en tres dimensiones

Dentro del campo de estudio de la conductividad eléctrica en sistemas desordenados existen algunas problemáticas que a día de hoy siguen abiertas. Para las expresiones de la conductividad que se han presentado con anterioridad, una de las cuestiones que permanece en debate es la forma del posible factor preexponencial que se encuentra en estas dos leyes: Mott para el caso sin interacción (ecuación (1.17)) y Efros-Shklovskii para el caso con interacción coulombiana (ecuación (1.25)). A lo largo de los múltiples estudios que se hallan en la literatura, este tema es tratado con relativa o escasa profundidad en algunos de ellos, lo que pone de manifiesto la dificultad que el problema entraña.

La existencia y forma de un posible factor preexponencial se ha abordado de diferentes maneras en la literatura. En la descripción de la conductividad por VRH son muchos los fenómenos que pueden contribuir a la forma que ha de tener este prefactor. La complejidad de una teoría que tenga en cuenta todos los fenómenos nos lleva a tener que realizar algunas simplificaciones para poder trabajar con el sistema (Brodsky y Gambino, 1972). Uno de los elementos que contribuye a la existencia de un prefactor se encuentra en la distribución energética de los fonones en la red. La competición entre los dos parámetros que determinan el tipo de sistemas desordenados que estamos tratando y que constituyen nuestro hamiltoniano, el desorden y la longitud de localización, también influyen de manera decisiva en la forma de la conductividad de nuestro sistema.

Podemos encontrar dos teorías fundamentales a partir de las cuales es posible deducir una expresión para la conductividad y que se han presentado en capítulos anteriores, a saber, la red de resistencias aleatorias y la teoría de percolación.

Las primeras propuestas teóricas que sugieren la existencia de un factor dependiente de la temperatura para el caso no interactuante vienen dadas por Mott

(1972) y Miller y Abrahams (1960). Allen y Adkins (1972) comparan tres formas diferentes del prefactor para ajustar sus datos experimentales con germanio dopado. Si se mantiene constante la contribución de los fonones y se consideran solo la RRN de Abrahams y Miller se obtiene únicamente la dependencia $\exp[-(T_M/T)^{1/4}]$. La primera de las contribuciones al prefactor se deducen a partir de los resultados que obtienen Miller y Abrahams (1960), basadas en las interacciones electrón-fonón, y con ellas se llega a una dependencia de la temperatura de la forma

$$\sigma(T) \propto \begin{cases} T^{-1/2} \exp[-(T_M/T)^{1/4}] & \text{para } qR \gtrsim 1 \\ T^{1/2} \exp[-(T_M/T)^{1/4}] & \text{para } qR \ll 1, \end{cases} \quad (4.20)$$

donde q es el número de onda del electrón y R es la distancia de salto. Asumiendo de nuevo la red de Abrahams y Miller pero haciendo diferentes consideraciones físicas, Mott (1972) deduce una nueva dependencia del prefactor como

$$\sigma(T) \propto \begin{cases} T^{1/4} \exp[-(T_M/T)^{1/4}] & \text{para } qR \gtrsim 1 \\ T^{5/4} \exp[-(T_M/T)^{1/4}] & \text{para } qR \ll 1. \end{cases} \quad (4.21)$$

En cuanto a las dos primeras propuestas, la de Miller y Abrahams (1960) y la de Mott (1972), los prefactores dependen de la distribución y del acoplamiento que consideremos para los fonones de nuestro sistema.

En años posteriores se ha tratado de abordar la problemática del prefactor mediante la teoría de percolación. Podemos encontrar en la bibliografía tanto simulaciones como trabajos experimentales que hacen referencia a ella. Un primer trabajo con una propuesta de prefactor contemporáneo a los anteriores citados es el de Pollak (1972), que utiliza teoría de percolación para proponer

$$\sigma(T) = T^{-1/4} \exp[-(T_M/T)^{1/4}], \quad (4.22)$$

dada una densidad de estados constante. Pike y Seager (1974a) y Pike y Seager (1974b) estudian de forma amplia el problema de la conducción mediante percolación y simulaciones computacionales. Pike y Seager sugieren un prefactor $T^{1/2}$ para un correcto ajuste de los resultados de conductividad de sus simulaciones. A su vez,

relacionando la T_M de Mott con el exponente crítico de percolación obtienen valores numéricos para este parámetro.

Shklovskii y Efros (1984) recogen algunas propuestas basadas en teoría de percolación. En este caso el prefactor exponencial se encuentra relacionado con los exponentes críticos para redes desordenadas tridimensionales. En referencias a trabajos anteriores mencionan las sugerencias $\sigma_M \sim T^{-(\nu-2)/4}$ y $\sigma_M \sim T^{-(\nu+2)/4}$ en función de las características de los materiales estudiados. Asumiendo que el prefactor de las resistencias de la red es constante, los autores proponen un prefactor $\sigma_M \sim T^{-\nu/4}$.

Otra contribución relevante en el campo es la de Pasveer et al. (2005). Estos autores inciden en la extensión necesaria que hay que realizar en teoría de percolación para que los resultados de esta puedan tener validez para describir la conducción. La necesidad de extender teoría de percolación se debe a que esta teoría nos permite trabajar solo en el límite de percolación. Al estudiar la conductividad de una red de electrones desordenados nos encontramos lejos de la situación donde la densidad de enlaces coincide con la densidad crítica que aporta teoría de percolación. Pasveer et al. (2005) optan por calcular la conductividad del sistema a partir de la ecuación maestra

$$\sum_{j \neq i} [W_{ij} n_i (1 - n_j) - W_{ji} (1 - n_i)] = 0, \quad (4.23)$$

donde W_{ij} son las probabilidades de transición entre un sitio i y otro j , y n_i las probabilidades medias de ocupación en el sitio i . Encuentran distribuciones de corriente que manifiestan que es necesario ir más allá del límite de percolación para describir la conductividad completa de la muestra.

Por último resulta conveniente comentar el trabajo de Agam y Aleiner (2014), donde se estudia el efecto de las correlaciones en la corriente y como estas modifican los resultados que se obtienen únicamente mediante teoría de percolación. Proponen una idea original que consiste en dividir el sistema en dos redes de percolación diferentes (*two-color percolation problem*). Al tener en cuenta las correlaciones sugieren

que la conductividad por *variable-range hopping* entonces ha de escribirse como

$$\sigma(T) = B(T) \exp \left[- \left(\frac{T_M}{T} \right)^{1/(d+1)} + \alpha_d \left(\frac{T_M}{T} \right)^{\mu_d} \right], \quad (4.24)$$

donde μ_d depende de los exponentes críticos de percolación y en el caso tridimensional aportan el valor $\mu_3 \simeq 0,095$. Los autores concluyen que este término adicional puede ser confundido con un prefactor grande. A su vez, se sugiere que este resultado justificaría las dificultades que existen para distinguir un factor pre-exponencial potencia de T en la conductividad. Según sus resultados, obtienen una potencia de T compatible con el termino adicional en el exponente tal que $B(T) = AT^{0,8}$.

El conjunto de resultados teóricos que se han aportado en esta sección muestra que la cuestión de la forma del factor preexponencial en las leyes que describen la conductividad por saltos de rango variable no es un asunto trivial. Las aportaciones al factor preexponencial que se han incluido en esta sección los hemos recogido en la tabla 4.2. En la actualidad no contamos con un análisis teórico que resuelva las cuestiones a las que nos hemos referido, de la misma forma que no hay buena evidencia experimental que confirme un valor concreto.

Referencia	Prefactor
Miller y Abrahams (1960)	$T^{-1/2}, T^{1/2}$
Mott (1972)	$T^{1/4}, T^{5/4}$
Pollak (1972)	$T^{1/4}$
Shklovskii y Efros (1984)	$T^{-\nu/4}$
Agam y Aleiner (2014)	$T^{0,8}$

Tabla 4.2: Prefactores sugeridos en trabajos teóricos anteriores.

Términos adicionales en el exponente

Como hemos visto, la cuestión teórica del factor pre-exponencial ha sido abordada a través de numerosas vías, en vistas de tratar de explicar las desviaciones experimentales. A parte de los posibles términos incorporados por la densidad de

fonones en el medio y por la interacción electrón fonón, nos planteamos cuales son los efectos intrínsecos al desorden y la dimensionalidad del sistema. En ese sentido la teoría de percolación, como hemos ido viendo hasta ahora juega un papel fundamental, ya que se restringe a los efectos mencionados. Para describir un escenario realista esta debería ser la base sobre la que se añaden el resto de fenómenos deseados, ya sea interacción electrón-electrón, electrón-fonón, etc.

Hemos visto que Agam y Aleiner (2014) proponen una modificación de la ley de Mott que vendría a incorporar términos en el argumento de la exponencial de la siguiente manera

$$\sigma(T) = B(T) \exp \left[- \left(\frac{T_M}{T} \right)^{1/(d+1)} + \alpha_d \left(\frac{T_M}{T} \right)^{\mu_d} \right], \quad (4.25)$$

motivado por la existencia de dos redes de percolación diferentes que juegan su papel en el sistema. También sugieren en su trabajo que este término adicional puede comportarse como un prefactor a efectos prácticos. En la línea de añadir términos a la exponencial también se encuentra nuestra propuesta fundamentada en extender teoría de percolación para considerar aquellos enlaces que se salen del límite de percolación. Tal y como derivamos en la siguiente sección 4.1, extendiendo teoría de percolación obtenemos la siguiente expresión para la conductividad

$$\sigma(T) = B(T) \left[- \left(\frac{T_M}{T} \right)^{1/4} - C \left(\frac{T}{T_M} \right)^{1/4} \right]. \quad (4.26)$$

Con todo ello hemos ajustado los datos que obtenemos de las simulaciones a la contribución en el factor pre-exponencial como a la sugerencia del término adicional en el exponente. En cuanto a los ajustes realizados los resultados son claros. Las pruebas para diferentes funciones recogidas en la tabla 4.1 dejan de manifiesto que en cualquier caso el mejor ajuste a la desviación de los datos es el de la contribución mediante un factor pre-exponencial que depende como una potencia de la temperatura. Así, dadas las investigaciones existentes, nos decantamos por la presencia de un posible factor pre-exponencial que podría venir determinado por la generación de subredes críticas de percolación en el sistema, determinando su conductividad.

4.4. Ley de Mott en sistemas bidimensionales

A parte de la comprobación tanto de la ley de Efros y Shklovskii como la de Mott en tres dimensiones, hemos simulado el caso no interactuante en dos dimensiones. El escenario bidimensional puede resultar especialmente útil para comprobar que, en esta situación de relativamente baja complejidad, la ley de Mott se cumple rigurosamente, de manera que no es necesario profundizar en los detalles de la teoría de percolación que hemos abordado en las dos secciones anteriores. Por estas razones las simulaciones en dos dimensiones se encuentran con mayor frecuencia en la bibliografía, en especial las encontramos en el período entre 2002 y 2006.

El trabajo de Tsigankov et al. (2003) estudia el caso de la ley de Mott bidimensional para compararla con la ley de Efros-Shlovskii. Otro grupo que estudia la conductividad por *hopping* en sistemas bidimensionales desordenados es Pasveer et al. (2005); Pasveer y Michels (2006), tanto en dos como en tres dimensiones. Y por último, en cuanto a simulaciones relevantes para la cuestión de este apartado, nos encontramos con las simulaciones de Kinkhabwala et al. (2006). Tanto el método numérico, como los valores de α_2 y la dependencia del prefactor con la temperatura, son presentados previamente en este trabajo, concretamente en la tabla 4.4.

En este apartado, de la misma manera que para el anterior, calculamos la conductividad para un sistema bidimensional desordenado sin interacción y comprobamos en que medida responde a la ley de Mott. En la figura 4.18 presentamos, en escala semilogarítmica, el producto σT frente a $(\frac{W}{T})^{1/3}$. En la representación gráfica se puede apreciar que en el caso bidimensional los datos de la conductividad, representados mediante puntos azules, se ajustan de manera correcta a una línea recta, que responde según los ejes que hemos elegido, a la ley de Mott en dos dimensiones. Los resultados numéricos de este ajuste han sido presentados en la tabla 4.4.

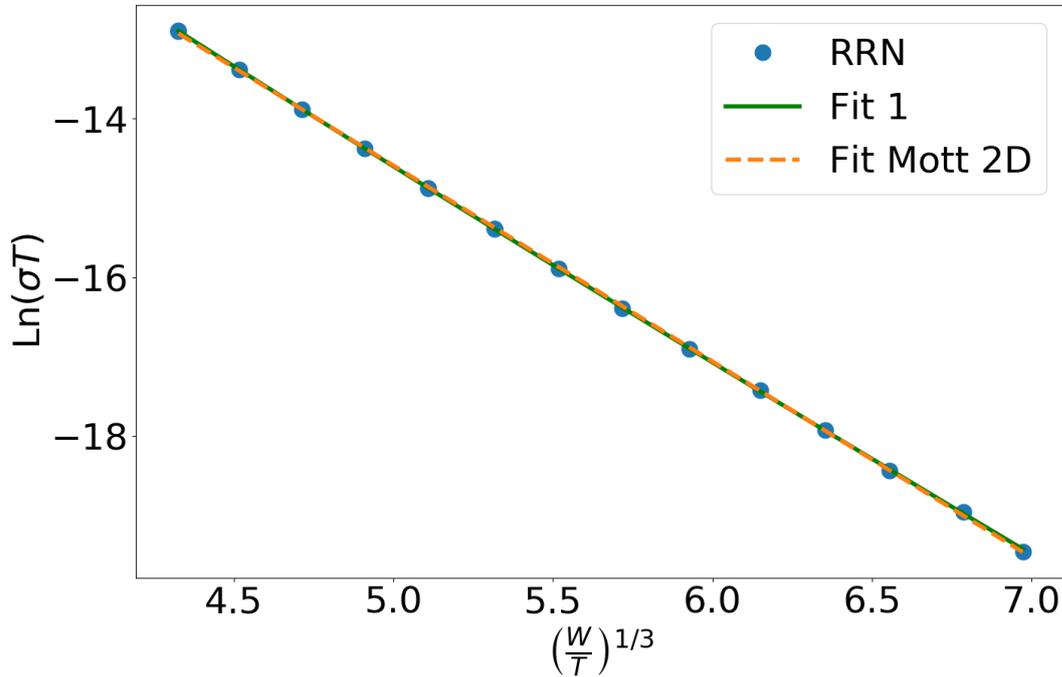


Figura 4.18: Logaritmo del producto de la conductividad por la temperatura en función de $(W/T)^{1/3}$. Los puntos azules representan los valores de la conductividad obtenidos mediante la simulación, a los que hemos ajustado una recta que, en esta escala, corresponde a la ley de Mott en dos dimensiones.

4.5. Ley de Efros-Shklovskii

Se han simulado muestras de diferentes tamaños a diferentes temperaturas para tratar de encontrar la ley de Efros-Shklovskii en 3D. Estas simulaciones se han llevado a cabo mediante un Monte Carlo dinámico para tamaño de la muestra $L = 20$, donde L es la medida de un lado de la muestra y la medimos en unidades de distancia media entre sitios. Los datos de tamaño finito ponen de manifiesto que necesitaríamos tamaños más grandes para temperaturas a partir de $T = 0,02$. Se han simulado temperaturas entre 1 y 0,02 en estos tamaños de las muestras, de manera que podemos corroborar que nos encontramos en un rango en el que nuestros

datos no se encuentran influenciados por efectos de tamaño finito. De acuerdo con las posibles desviaciones de la conductividad respecto la ley de Efros-Shklovskii nos proponemos ajustar los datos incorporando un factor pre-exponencial que dependa como una potencia de la temperatura

$$\sigma T^{1-\alpha} = A e^{-\left(\frac{T_{\text{ES}}}{T}\right)^{1/2}}. \quad (4.27)$$

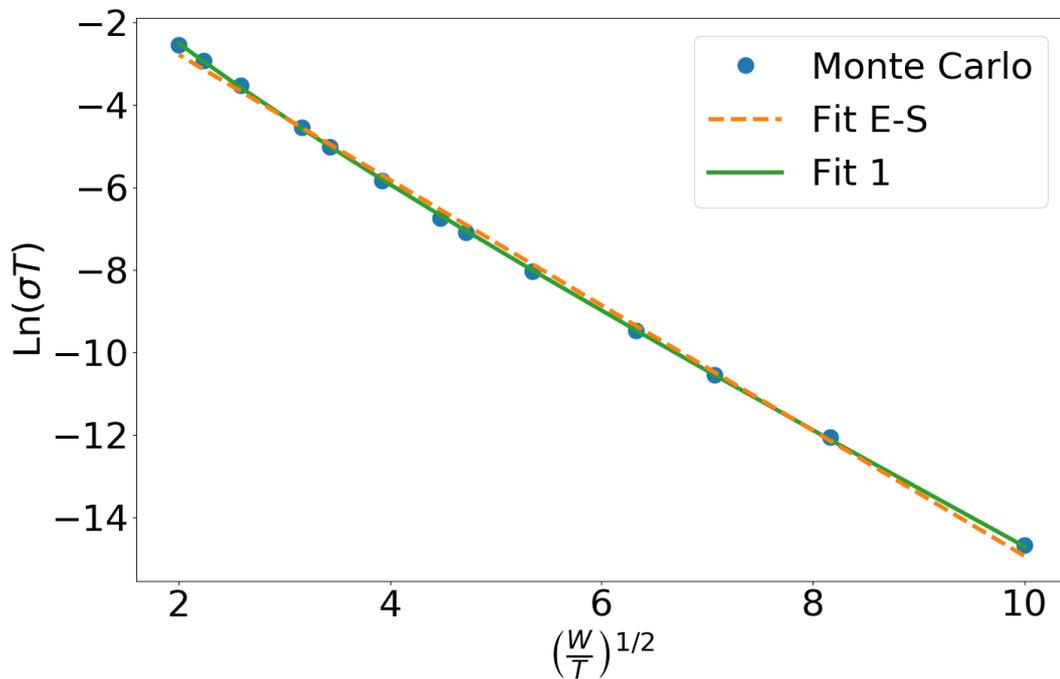


Figura 4.19: Curva de conductividad en función de la temperatura promediada para diversos tamaños de la muestra. La línea continua representa el ajuste de la ley de Efros y Shklovskii sin modificación alguna, tal y como la escribimos en la ecuación (1.25). La línea discontinua representa el ajuste obtenido mediante una expresión con prefactor exponencial, tal y como la introducimos en la ecuación (4.27).

En la figura 4.19 presentamos los valores de la conductividad en función de la temperatura en escala semilogarítmica y teniendo en cuenta el factor T proveniente del campo magnético. Los valores han sido obtenidos promediando los datos de las

simulaciones para diferentes tamaños de la muestra. Estos datos han sido ajustados por un lado a la ley de Efros y Shklovskii que corresponde a una recta en la escala en la que nos encontramos. Por otro lado hemos ajustado los valores de la simulación a la ley de Efros y Shklovskii añadiendo un prefactor dependiente de la temperatura tal y como se menciona en la ecuación (4.27), a la que hemos llamado “Fit 1” en la figura 4.19.

El ajuste de la línea continua de la figura 4.19 nos permite apreciar la curvatura que aparece en los datos de conductividad obtenidos mediante la simulación del Monte Carlo. A su vez, incorporar un factor antes de la exponencial permite un ajuste mucho más fino, para el que se obtiene un valor del α de la expresión (4.27) tal que $\alpha = -0,35$.

4.5.1. Representación de Zabrodskii

Hasta ahora hemos estado suponiendo que la ley de Efros-Shklovskii se cumple, de manera que estamos trabajando con el exponente en la exponencial de temperaturas $1/2$. Ya que estamos estudiando posibles desviaciones de los datos obtenidos en las simulaciones respecto las leyes de conductividad, una buena prueba debe consistir en ver hasta que punto los datos ajustan fielmente a este exponente. Para este propósito planteamos la llamada representación de Zabrodskii, donde representamos $\omega(T)$ frente al logaritmo de la conductividad. Definimos $\omega(T) = d \ln \sigma / d \ln T$. Si no hay dependencia del factor preexponencial con la temperatura, esta gráfica mostrará una línea recta, la pendiente de la cual corresponderá al exponente de la temperatura arriba de la exponencial.

En la figura 4.20 representamos el parámetro ω frente al logaritmo de la conductividad. Para obtener esta gráfica hemos calculado las derivadas discretas provenientes de los datos representados en la gráfica 4.19. Mediante el método del punto medio obtenemos entonces la derivada en el punto medio $\omega(T) = (\ln \sigma_{i+1} - \ln \sigma_i) / (\ln T_{i+1} - \ln T_i)$ y el punto medio del logarítmico de la conductividad $(\ln \sigma_{i+1} + \ln \sigma_i) / 2$. Donde σ_i y T_i son cada valor representado en la figura 4.20. De la pendiente de la línea de ajuste representada obtenemos el valor del exponente $0,52 \pm 0,2$. Podemos compa-

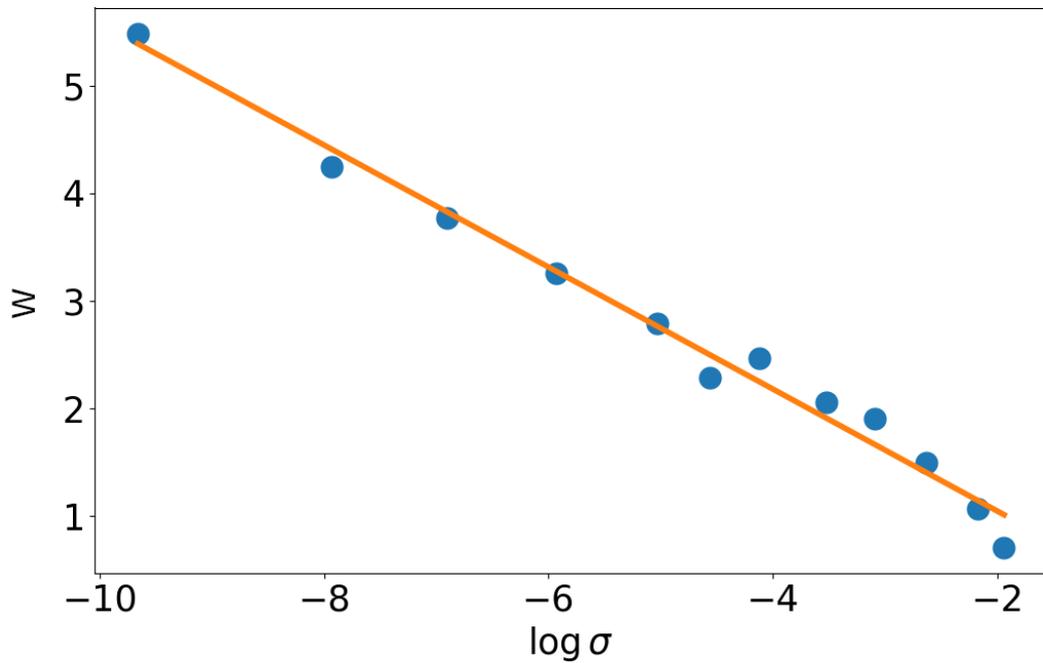


Figura 4.20: Parámetro ω en función del logaritmo de la conductividad obtenido a partir de los datos de la figura 4.19. Del ajuste de la línea recta obtenemos un valor de la pendiente $0,52 \pm 0,02$.

rar este resultado con un ajuste a los datos de la simulación dejando el exponente de la temperatura como parámetro del ajuste con el que obtenemos $0,573 \pm 0,019$. Apreciamos que los valores son próximos entre ellos y cercanos al $1/2$ previsto por la teoría.

Nuestros resultado son compatibles con la ley de Efros-Shklovskii, aunque también apuntan en la dirección de una densidad de estados más empinada, tal y como obtienen Möbius et al. (2009).

4.6. Régimen activado

En la literatura encontramos el trabajo de Kaplan et al. (2003), donde simulan una red de electrones con tensión y que puede mapear con un sistema bidimensional

con interacción logarítmica. En este trabajo se sugiere un parámetro $\gamma_2 = 1,1$. En nuestras simulaciones obtenemos también una respuesta acorde con el régimen activado.

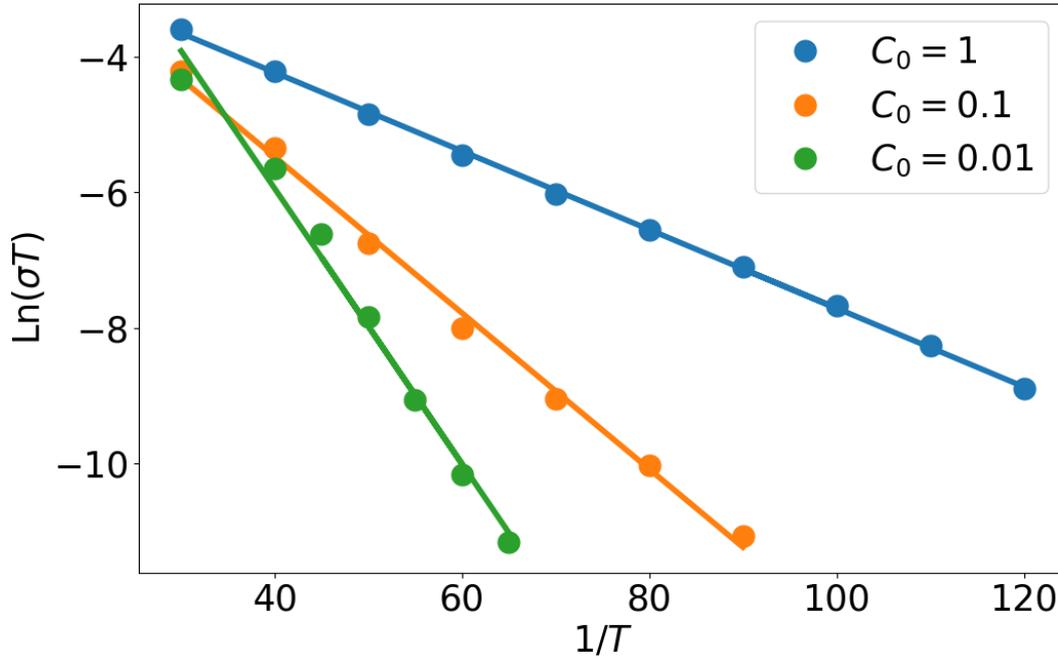


Figura 4.21: Logaritmo de la conductividad por la temperatura en función de la inversa de la temperatura para un sistema bidimensional con interacción logarítmica y para tres valores diferentes de C_0 representados mediante tres colores diferentes. Los puntos son los valores obtenidos mediante las simulaciones y las rectas son ajustes del comportamiento activado para los datos.

En la figura 4.21 representamos los datos de conductividad frente a la temperatura obtenidos para las simulaciones Monte Carlo utilizando las diferencias de energía que se deducen del formalismo matricial de la red de condensadores, para tres valores diferentes de C_0 . Las barras de error asociadas al error estadístico en esta representación son menores que el tamaño de los puntos representados. Podemos apreciar que la energía de activación crece a medida que disminuimos C_0 y aumenta la longitud de apantallamiento. De estos resultados podemos obtener la

siguiente expresión para el parámetro $\gamma_2 = 0,9$.

En el escenario presentado es posible añadir desorden asignando cargas fijas aleatorias a los sitios, formando consecuentemente un potencial aleatorio a lo largo de los sitios de la red. La presencia de un desorden puede llegar a apantallar el largo alcance de la interacción, resultando en una reducción de la energía de activación (Ortuño et al., 2015).

Una buena estimación intermedia entre los valores para el parámetro γ_2 que hemos introducido es $\gamma_2 \approx 1,0 \pm 0,1$.

4.7. Discusión de los resultados

El conjunto de los resultados obtenidos en las simulaciones realizadas para el caso tridimensional no interactuante aportan información nueva que puede arrojar luz sobre la comprensión del régimen VRH y su relación con teoría de percolación, así como con otras propuestas teóricas que se han comentado a lo largo del trabajo.

Las medidas microscópicas, motivadas en mayor medida por los trabajos de Agam y Aleiner (2014) y Pasveer et al. (2005), nos dan un componente adicional que contribuye a la meta de entender el sistema de electrones desordenados en su conjunto, ya sea en el caso interactuante o no interactuante. De la distribución espacial, tal y como la hemos representado, no aporta información más allá de verificar aquello que va implícito en la construcción del sistema: a medida que disminuimos la temperatura ganan importancia los saltos más largos. Por otro lado, en nuestro caso apreciamos que la porción de corriente que atraviesa el nivel de Fermi baja con la temperatura, aunque aun nos encontramos en un escenario en que esta fracción es importante, encontrándose en un $\sim 30\%$. La enorme cantidad de enlaces activos hace también que sea difícil distinguir posibles caminos o redes de percolación que se hayan formado en el sistema y tengan un papel importante en el transporte de corriente. La perspectiva que aporta la representación propuesta por Pasveer et al. (2005) nos ayuda a justificar que necesitamos que se incluya, al menos en el desarrollo de la ley de Mott mediante teoría de percolación, el aporte a la

conductividad generado por los enlaces que quedan fuera del límite de percolación. Es decir, tenemos enlaces que, de manera efectiva, juegan un papel relevante para la conductividad y que no se están teniendo en cuenta en los desarrollos clásicos de las leyes que describen la conductividad por VRH.

Una cuestión relevante del estudio que estamos realizando y que ha sido abordada mediante dos perspectivas diferentes es la presencia de longitudes características para la conductividad de las muestras. En la justificación de este propósito tiene un papel central teoría de percolación, que supone que existe una red crítica que determina la conductividad del sistema. Hemos visto que las medidas de tamaño finito nos permiten obtener distancias críticas de nuestro sistema, mientras que mediante la extracción de longitudes críticas a partir de los cálculos de fractaliada obtenemos solo la dependencia de estas con la temperatura. En todo caso, lo que nos interesa es ver como cambian las longitudes críticas con la temperatura y comprobar si pueden jugar un papel relevante en la dependencia de la conductividad con la temperatura. Las dos gráficas que condensan la información relativa a estas longitudes en ambos casos son las figuras 4.10 y 4.16. En común, en todos los casos podemos decir que queda verificado el comportamiento exponencial de las longitudes críticas con la temperatura. En relación con el parámetros del ajuste, es decir, el exponente de la hipotética expresión $\ell = T^\gamma$, aunque no encontramos compatibilidad completa entre los diferentes valores obtenidos, si que podemos dar unas cotas orientativas. Con las medidas del efecto de tamaño finito obtenemos un valor $\gamma = -0,4 \pm 0,1$, mientras con los datos de fractalidad se obtiene $\gamma_{MC} = -0,3266$ y $\gamma_{RRN} = -0,2398$. De nuevo, estos valores apuntan a una desviación importante respecto de la ley de Mott en el rango de temperaturas para el que simulamos mediante el método de Monte Carlo, mientras que el exponente para el rango más bajo de temperaturas, al que llegamos con la RRN, se ajusta más a un Mott puro. Podemos relacionar este resultado con la evolución en función de la temperatura que se da para el mapa de color presentado en la figura 4.13.

En la figura 4.22 representamos los mapas de la conductividad por enlace en función de las distancias y las diferencias de energía para cuatro temperaturas di-

ferentes. También hemos representado mediante puntos los cien enlaces que más conducen en cada caso. La línea diagonal indica el límite de percolación y se han escalado los ejes para comparar las diferentes temperaturas apropiadamente. Apreciamos que el comportamiento que aparece en la figura 4.22 es compatible con los resultados obtenidos con las longitudes críticas. De la misma manera, podemos apreciar que el lóbulo que sobresale del límite de percolación aumenta su superficie a medida que aumentamos la temperatura, por lo que las correcciones respecto teoría de percolación deben de ser más importantes.

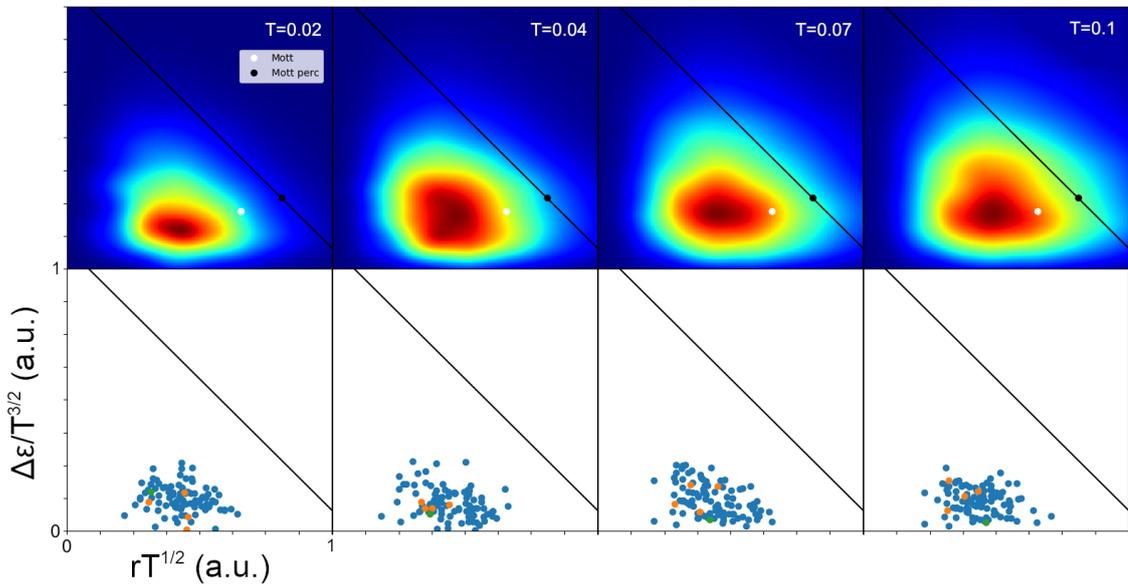


Figura 4.22: Composición con cuatro mapas de nivel para diferentes temperaturas. En la línea de arriba se representa la distribución de intensidades en función de la distancia entre los sitios y su diferencia de energías. En la línea de abajo se han dibujado los 100 enlaces que transportan más corriente, los 5 que transportan más corriente en naranja y el enlace que más corriente transporta en verde. La línea inclinada representa el límite de percolación. Los ejes se han escalado con la temperatura para poder compararlas adecuadamente.

Con estos resultados en mente, cabe preguntarse cómo corregimos estas desviaciones respecto las leyes de conducción por VRH conocidas. Para este propósito

necesitamos fijarnos en las medidas macroscópicas de la conductividad y comprobar cómo varían exactamente las leyes de conducción en los rangos de temperatura que hemos utilizado en nuestras simulaciones. Más allá de los casos realizados por completitud, como es el caso de la simulación del caso interactuante y el de la ley de Mott bidimensional, nos hemos centrado en el caso más sencillo para el escenario tridimensional: la ley de Mott tridimensional. Los datos de las simulaciones de la ley de Efros-Shklovskii apuntan a que en el caso tridimensional también existe una ligera desviación de la ley que sería necesario estudiar más a fondo. Con el caso del Mott bidimensional apreciamos que no se distingue curvatura en este escenario, de manera que las desviaciones encontradas en el caso tridimensional se encuentran determinados por el aumento de complejidad que aporta añadir una dimensión espacial adicional al sistema.

Los datos de la conductividad para la ley de Mott simulada mediante el método de Monte Carlo y la red de resistencias aleatorias revelan que existe una curvatura y que se sostienen los resultados que acabamos de comentar y que apuntan en esa dirección. El debate entonces reside en cual debe ser esta modificación de la ley de Mott y como la justificamos teóricamente. Así como a través de simulaciones, en la sección de recopilación de trabajos experimentales queda de manifiesto que muchos de estos trabajos aceptan la existencia de esa desviación y asumen una curvatura en la ley de conductividad.

Tanto los resultados más relevantes de la bibliografía como los originales presentados en este trabajo los presentamos en la tabla 4.4. En la tabla de arriba presentamos los resultados obtenidos para sistemas bidimensionales y en la de abajo para sistemas tridimensionales. En la primera columna indicamos el régimen simulado, en la segunda el valor de los parámetros de las temperaturas características para cada ley, en la tercera el prefactor que se ha utilizado para estudiar los datos, en la cuarta el método numérico utilizado para realizar la simulación, en la quinta el tamaño máximo simulado en cada caso y, por último, en la sexta columna la referencia. La tercera tabla es la leyenda de referencias.

Como primera consideración se puede apreciar que las simulaciones bidimensio-

nales son más frecuentes que las tridimensionales debido al aumento de complejidad que entrañan para ser simuladas. Necesitamos tamaños grandes, que derivan en la necesidad de grandes cantidades de memoria, tiempos largos y muchos promedios para obtener valores lo suficientemente precisos y que nos permitan llegar a una conclusión sobre las leyes de conducción. En concreto, encontramos una buena contribución en cuanto a las simulaciones bidimensionales de la conductividad en sistemas desordenados entre 2002 y 2006. La primera simulación que podríamos llamar moderna, la realizan Tsigankov y Efros (2002) y encuentran un valor $\alpha_3 = 13,0$ asumiendo un prefactor T^{-1} . Aportan un método pionero para optimizar la eficacia de las pruebas de la simulación de Monte Carlo, que necesita que guardemos los pares con el consecuente coste en memoria. Pasveer et al. (2005) utilizan el método de la ecuación maestra en sus simulaciones sin tener en cuenta las correlaciones entre electrones. Sus resultados cumplen la ley de Mott pero únicamente aportan cotas superiores para los parámetros característicos de la temperatura de Mott tales que $\alpha_2 < 6,04$ y $\alpha_3 < 10,24$. Su trabajo se centra en aportar una teoría de escalado para la distribución de corrientes de los enlaces en función de las distancias de salto y las diferencias de energía. Kinkhabwala et al. (2006) realizan también una simulaciones de la que obtienen los siguientes valores para la ley de Mott $\alpha_2 = 2,0 \pm 0,2$ con un prefactor $T^0,68$. Estas simulaciones incluyen diferencias notables con las nuestras ya que consideran una dependencia del prefactor τ_0 de las probabilidades de salto con la energía. En el presente trabajo hemos calculado la conductividad en el caso bidimensional y no interactuante utilizando la red de resistencias aleatorias. Para nuestra simulación comprobamos una buena concordancia con la ley de Mott y obtenemos un valor de $\alpha_2 = 7,52 \pm 0,06$. Consideramos que para sistemas bidimensionales no interactuantes los mejores valores obtenidos para la ley de Mott los aportan Tsigankov y Efros (2002), ya que las simulaciones de la ecuación maestra y las de la red de resistencias aleatorias obvian las posibles correlaciones entre electrones. Aun así, si nos fijamos en los ajustes realizados por Tsigankov y Efros (2002) apreciamos cierta curvatura en los datos respecto a la ley de Mott. Eliminando puntos de alta temperatura es posible afinar su ajuste, procedimiento

con el que hemos obtenido un valor de $\alpha_2 = 10,6 \pm 0,4$, valor que consideramos el mejor hasta la fecha a falta de nuevas simulaciones que lleguen a temperaturas mas bajas.

Para el caso interactuante en dos dimensiones contamos también con la simulación de Tsigankov y Efros (2002), donde se confirma la ley de Efros-Shklovskii y aportan un valor de $\beta_2 = 5,8$, con un prefactor T^{-1} , de acuerdo a los valores predichos por teoría de percolación. Somoza et al. (2006) aportan un nuevo enfoque mediante teoría de percolación aplicándola al espacio de configuraciones de sistemas bidimensionales e interactuantes. Este procedimiento permite incluir los saltos simultáneos de dos electrones. Para comparar con el resto de simulaciones que hemos introducido, debemos comparar el valor de β_2 que obtienen para el caso en el que consideran únicamente saltos de un electrón. Para este caso obtienen $\beta_2 = 7,2$. Otra simulación de esta situación que encontramos en la bibliografía es la de Duc Nguyen et al. (2006), donde obtienen un valor $\beta_2 = 6,5 \pm 1$ para la ley de Efros-Shklovskii. Kinkhabwala et al. (2006) también simulan el caso interactuante y obtienen $\beta_2 = 2,8 \pm 0,6$ con un prefactor $T^{1,02}$.

Para las simulaciones del régimen activado tenemos el ejemplo en la bibliografía de Kaplan et al. (2003), con el que llegan mediante un Método Monte Carlo a una constante de proporcionalidad $\gamma_2 = 0,9$. En el presente trabajo hemos realizado simulaciones en redes de condensadores bidimensionales, donde hemos obtenido un comportamiento activado. De los resultados de la simulación obtenemos el parámetro $\gamma = 0,9 \ln(\Lambda/0,2)$.

La complejidad de las simulaciones de sistemas en tres dimensiones hace que encontremos menos material en la bibliografía. Las primera simulaciones modernas para la ley de Mott, como hemos comentado antes las aportan Pasveer et al. (2005) dando cotas superiores para los parámetros α_2 y α_3 . En el presente trabajo hemos realizado las simulaciones más grandes y en rango de temperatura más amplio para la ley de Mott en tres dimensiones. Hemos obtenido un valor para $\alpha_3 = 3,6 \pm 0,2$ considerando un prefactor $T^{0,36}$, difícil de explicar con la teoría disponible actualmente. Consideramos que, en este escenario, nuestra simulación de Monte Carlo es

con la que podemos obtener los mejores valores para los parámetros de la ley.

En cuanto a los sistemas interactuantes en tres dimensiones encontramos la simulación de Roca-Gonzalez et al. (2018) mediante un método de Monte Carlo con el que obtienen $\beta_2 = 3,40 \pm 0,02$ y un prefactor $T^{-0,56}$. Nosotros realizamos también una simulación tridimensional de la ley de Efros-Shklovskii para un tamaño $20 \times 20 \times 20$ y en un amplio rango de temperatura. De nuestras simulaciones obtenemos los valores $\beta_2 = 3,2 \pm 0,2$ y un exponente 0,65 en la exponencial. La representación de Zabrodskii nos informa de que efectivamente nos encontramos en un comportamiento del tipo Efros-Shklovskii. La nuestra es, por el momento, la simulación más fiable mediante la que podemos obtener valores de los parámetros de la ley de Efros-Shklovskii.

2D					
Régimen	$\alpha / \beta / \gamma$	Prefactor	Método	Tamaño	Ref.
Mott	13,0	T^{-1}	Monte Carlo	200×200	1
	$< 6,04$	-	Ecuación maestra	100×100	2
	$2,0 \pm 0,2$	$T^{0,68}$	Monte Carlo	80×50	3
	$7,52 \pm 0,06$	T^{-1}	RRN	100×100	4
E-S	5,8	T^{-1}	Monte Carlo	200×200	1
	7,2	-	Percolación	50×50	5
	$6,5 \pm 1,0$	-	Monte Carlo	160×160	6
	$1,4 \pm 0,3$	$T^{1,02}$	Monte Carlo	80×50	3
Activado	1.1	-	Monte Carlo	50×50	9
	0.9	-	Monte Carlo	50×50	4

3D					
Régimen	α / β	Prefactor	Método	Tamaño	Ref.
Mott	$< 10,24$	-	Ecuación maestra	$50 \times 50 \times 50$	2
	$3,6 \pm 0,2$	$T^{0,36}$	Monte Carlo y RRN	$20 \times 20 \times 20$	7
E-S	$3,40 \pm 0,02$	$T^{-0,56}$	Monte Carlo	2000	8
	$3,2 \pm 0,2$	$T^{-0,35}$	Monte Carlo	$20 \times 20 \times 20$	4

Índice de referencias

1	Tsigankov y Efros (2002)
2	Pasveer et al. (2005)
3	Kinkhabwala et al. (2006)
4	Review
5	Somoza et al. (2006)
6	Duc Nguyen et al. (2006)
7	Artículo
8	Roca-Gonzalez et al. (2018)
9	Kaplan et al. (2003)

Tabla 4.3: Resultados principales de las simulaciones numéricas. De izquierda a derecha tenemos el tipo de ley de conductividad, el valor de las constantes α y β , el prefactor exponencial, el método numérico empleado, el tamaño más grande simulado y, por último, la referencia.

Conclusiones

Las conclusiones más importantes que hemos extraído en este trabajo son las siguientes:

- En cuanto a la dinámica de vórtices en redes de uniones Josephson bidimensionales, hemos corroborado la presencia de radiación Cherenkov provocada por el movimiento de un vórtice inducido por una corriente externa. Comprobamos como el parámetro de amortiguamiento influye de forma drástica en la propagación de la radiación a través de la red.
- Hemos encontrado las velocidades máximas en movimiento estable que puede alcanzar un vórtice. Para valores fijos de la inductancia existe un valor del amortiguamiento que maximiza esta velocidad máxima.
- La generación de nuevos pares vórtice-antivórtice en la cola del vórtice en movimiento explica los saltos bruscos en los perfiles de velocidad.
- Se han caracterizado tres tipos de inestabilidades diferentes que pueden ser controladas por el parámetro de amortiguamiento η : para amortiguamientos bajos tenemos una inestabilidad que se propaga en todas las direcciones, para amortiguamientos intermedios una inestabilidad unidimensional y para amortiguamientos altos la formación de pares en la dirección transversal.
- Planteamos un diagrama de fases, figura 3.9, que condensa la información relativa a los diferentes estados dinámicos encontrados en la red. Los puntos máximos de velocidad en función del amortiguamiento de la red coinciden con

la discontinuidad en la derivada de la curva asociada a la transición inestable que presentamos en el diagrama de fases.

- En cuanto a la dinámica de sistemas de electrones desordenados, hemos realizado las simulaciones más grandes y para un mayor rango de temperaturas hasta la fecha en el caso no interactuante en tres dimensiones mediante un método de Monte Carlo dinámico.
- Se han simulado sistemas de electrones desordenados no interactuantes en dos dimensiones mediante el método de la red de resistencias aleatorias (RRN) y no encontramos desviaciones considerables respecto la ley de Mott.
- Hemos estudiado la ley de Efros-Shklovskii en sistemas de electrones desordenados en tres dimensiones. Mediante la representación de Zabrodskii hemos obtenido un valor del exponente de la temperatura compatible con el de la ley de Efros-Shklovskii.
- Con el modelo bidimensional de la red de condensadores hemos sido capaces de simular el régimen activado. Se ha obtenido un valor para el parámetro $\gamma = 0,9$.
- Las medidas microscópicas y de tamaño finito constatan que existen longitudes características que pueden ser determinantes en la respuesta macroscópica de la conductividad del sistema.
- Se ha visto que el modelo percolativo solo tiene validez a temperaturas muy bajas. En el rango de temperaturas de nuestra simulación los enlaces con mayor conductividad no coinciden con los de Mott ni con los de percolación.
- Comprobamos que la aproximación de la ley de resistencias aleatorias coincide, en buena medida, con el método de Monte Carlo en nuestro rango de temperaturas.
- Hemos comprobado que la proporción de corriente a través de enlaces que cruzan el nivel de Fermi es mayor que la propuesta de Agam y Aleiner (2014).

Aunque dicha proporción puede disminuir a temperaturas más bajas que las simuladas.

- Presentamos una propuesta analítica mediante la que obtener la ley de Mott que da lugar a términos adicionales dependientes de la temperatura en el argumento de la exponencial.
- Hemos extraído los valores más aceptables para las temperaturas características de las distintas leyes de conducción, que resumimos en la siguiente tabla:

Ley	3D	2D
Mott	$\alpha_3 = 3,6 \pm 0,2$	$\alpha_2 = 10,6 \pm 0,4$
Efros y Shklovskii	$\beta_3 = 3,3 \pm 0,2$	$\beta_2 = 5,8$
Activado	-	$\gamma = 1$

Tabla 4.4: Constantes de proporcionalidad de las temperaturas características de Mott y Efros-Shklovskii para sistemas en dos y tres dimensiones. La última fila de la tabla corresponde a la temperatura característica del régimen activado en dos dimensiones.

Bibliografía

- ABRIKOSOV, A. A. The magnetic properties of superconducting alloy. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, vol. 2(3), páginas 199–208, 1957. ISSN 00223719.
- AGAM, O. y ALEINER, I. L. Memory effects, two color percolation, and the temperature dependence of Mott variable-range hopping. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 89(22), páginas 1–8, 2014. ISSN 1550235X.
- ALFIMOV, G. L., MALISHEVSKII, A. S. y MEDVEDEVA, E. V. Discrete set of kink velocities in Josephson structures: The nonlocal double sine-Gordon model. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, vol. 282, páginas 16–26, 2014. ISSN 01672789.
- ALLEN, F. R. y ADKINS, C. J. Electrical conduction in heavily doped germanium. *Philosophical Magazine*, vol. 26(4), páginas 1027–1042, 1972. ISSN 00318086.
- ALTSHULER, B. L., KRAVTSOV, V. E., LERNER, I. V. y ALEINER, I. L. Jumps in current-voltage characteristics in disordered films. *Physical Review Letters*, vol. 102(17), páginas 1–4, 2009. ISSN 00319007.
- AMIR, A., OREG, Y. y IMRY, Y. Variable range hopping in the Coulomb glass. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 80(24), páginas 1–7, 2009. ISSN 10980121.
- AOKI, N., NARA, K. y OCHIAI, Y. Coulomb gap energy in amorphous SixGe1-x films. *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, vol. 218(1), páginas 5–9, 2000. ISSN 03701972.

- APSEY, N., DAVIS, E. A., YOFFE, A. D. y TROUP, A. P. Electronic properties of ion-bombarded evaporated germanium and silicon. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, vol. 11(24), páginas 4983–4996, 1978. ISSN 00223719.
- APSEY, N. y HUGHES, H. P. Temperature- and field-dependence of hopping conduction in disordered systems. *Philosophical Magazine*, vol. 30(5), páginas 963–972, 1974. ISSN 03054608.
- ASWATHI, K. y VARMA, M. R. Structural , transport and magnetic properties of Pr₂CoMnO₆ Structural , Transport and Magnetic properties of. vol. 110035(May), 2020.
- BÄSSLER, H. Charge Transport in Disordered Organic Photoconductors a Monte Carlo Simulation Study. *Physica Status Solidi (B)*, vol. 175(1), páginas 15–56, 1993. ISSN 15213951.
- BERDIYOROV, G. R., MILOŠEVIĆ, M. V. y PEETERS, F. M. Kinematic vortex-antivortex lines in strongly driven superconducting stripes. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 79(18), páginas 1–8, 2009. ISSN 10980121.
- BHATT, R. N., SIMONIAN, D., KRAVCHENKO, S. V. y SARACHIK, M. P. Hopping conduction in uniaxially stressed si:b near the insulator-metal transition. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 60(4), páginas 2286–2291, 1999. ISSN 1550235X.
- BINDER, K. *The Monte Carlo Method in Condensed Matter Physics*. 1992. ISBN 9783662028575.
- BOOTH, N. E. y GOLDIE, D. J. Superconducting particle detectors. *Superconductor Science and Technology*, vol. 9(7), páginas 493–516, 1996. ISSN 09532048.
- BOUZIDI, S., GDAIEM, M. A., DHAHRI, A., DHAHRI, J. y HLIL, E. K. Charge transport mechanism and percolation model in La_{0.75}Ca_{0.25-x}NaxMnO₃ manga-

- rites. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, vol. 31(14), páginas 11548–11559, 2020. ISSN 1573482X.
- BRIGGS, A., GULDNER, Y., VIEREN, J. P., VOOS, M., HIRTZ, J. P. y RAZEGHI, M. Low-temperature investigations of the quantum Hall effect in $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ - InP heterojunctions. *Physical Review B*, vol. 27(10), 1983.
- BRODSKY, M. H. y GAMBINO, R. J. Electrical conduction in evaporated amorphous silicon films. *Journal of Non-Crystalline Solids*, vol. 8-10(C), páginas 739–744, 1972. ISSN 00223093.
- BUSCH, G. y LABHART, H. UBER DEN MECHANISMUS DER ELEKTRISCHEN LEITFAHIGKEIT DES SILICIUMCARBIDS. *HELVETICA PHYSICA ACTA*, vol. 19(6-7), páginas 463–492, 1946.
- BUTKO, V. Y., DiTUSA, J. F. y ADAMS, P. W. Coulomb gap: How a metal film becomes an insulator. *Physical Review Letters*, vol. 84(7), páginas 1543–1546, 2000. ISSN 10797114.
- CASTNER, T. Hopping Conduction in the Critical Regime Approaching the Metal-Insulator Transition. En *Hopping transport in solids* (editado por M. Pollak y B. Shklovskii), capítulo 1, páginas 1–47. Elsevier Science, 1991.
- CHAUHAN, L., KUMAR, S., SREENIVAS, K. y SHUKLA, A. K. Variable range hopping and modulus relaxation in NiFe_2O_4 ceramics. *Materials Chemistry and Physics*, vol. 259(December 2020), página 124135, 2021. ISSN 02540584.
- CHEN, Y. F., HOVER, D., SENDELBACH, S., MAURER, L., MERKEL, S. T., PRITCHETT, E. J., WILHELM, F. K. y McDERMOTT, R. Microwave photon counter based on Josephson junctions. *Physical Review Letters*, vol. 107(21), páginas 1–5, 2011. ISSN 00319007.
- CIRIA, J. C. y GIOVANNELLA, C. Single-vortex dynamics in resistively shunted Josephson junction arrays. *Journal of Physics Condensed Matter*, vol. 9(12), páginas 2571–2583, 1997. ISSN 09538984.

- CIRIA, J. C. y GIOVANNELLA, C. Vortex dynamics in classical Josephson junction arrays: models and recent experimental developments. *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 10(7), página 1453, 1998. ISSN 09538984.
- DEKIC, M., JURIC, I., DOMINKO, D., SALCINOVIC FETIC, A., STARESINIC, D. y BILJAKOVIC, K. Variable range hopping conductivity in nanocrystalline films of K_{0.3}MoO₃. *Thin Solid Films*, vol. 591, páginas 210–214, 2015. ISSN 00406090.
- DELAHAYE, J., GRENET, T. y GAY, F. Coexistence of anomalous field effect and mesoscopic conductance fluctuations in granular aluminium. *European Physical Journal B*, vol. 65(1), páginas 5–19, 2008. ISSN 14346028.
- DERRIDA, B., STAUFFER, D., HERRMANN, H. J. y VANNIMENUS, J. Transfer Matrix Calculation of Conductivity in Three-Dimensional Random Resistor Networks At Percolation Threshold. *Journal de physique. Lettres*, vol. 44(17), páginas 701–706, 1983. ISSN 0302072X.
- DERRIDA, B., ZABOLITZKY, J. G., VANNIMENUS, J. y STAUFFER, D. A transfer matrix program to calculate the conductivity of random resistor networks. *Journal of Statistical Physics*, vol. 36(1-2), páginas 31–42, 1984. ISSN 00224715.
- DEVORET, M. H. y SCHOELKOPF, R. J. Superconducting Circuits for Quantum Information: An Outlook. *Science*, vol. 339(6124), páginas 1169–1174, 2013. ISSN 0036-8075.
- DÍAZ-SÁNCHEZ, A., ORTUÑO, M., POLLAK, M., PÉREZ-GARRIDO, A. y MÖBIUS, A. Dielectric susceptibility of the coulomb glass. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 59(2), páginas 910–914, 1999. ISSN 1550235X.
- DIETRICH STAUFFER, A. A. Introduction to percolation theory. 1994.
- DUC NGUYEN, V., LIEN NGUYEN, V. y TOI DANG, D. Variable range hopping in the Coulomb gap and gate screening in two dimensions. *Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics*, vol. 349(5), páginas 404–410, 2006. ISSN 03759601.

- DULT, M., KUNDU, R. S., MURUGAVEL, S., PUNIA, R. y KISHORE, N. Conduction mechanism in bismuth silicate glasses containing titanium. *Physica B: Condensed Matter*, vol. 452, páginas 102–107, 2014. ISSN 09214526.
- EBERT, G., VON KLITZING, K., PROBST, C., SCHUBERTH, E., PLOOG, K. y WEIMANN, G. Hopping conduction in the Landau level tails in GaAs-Al_xGa_{1-x}As heterostructures at low temperatures. *Solid State Communications*, vol. 45(7), páginas 625–628, 1983. ISSN 00381098.
- EFROS, A. L. y SHKLOVSKII, B. I. Coulomb gap and low temperature conductivity of disordered systems. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, vol. 8(4), 1975. ISSN 00223719.
- EMBO, L., ANAHORY, Y., JELIĆ, Z. L., LACHMAN, E. O., MYASOEDOV, Y., HUBER, M. E., MIKITIK, G. P., SILHANEK, A. V., MILOŠEVIĆ, M. V., GUREVICH, A. y ZELDOV, E. Imaging of super-fast dynamics and flow instabilities of superconducting vortices. *Nature Communications*, vol. 8(1), 2017. ISSN 20411723.
- ESTELLÉS-DUART, F., ORTUÑO, M., SOMOZA, A. M., VINOKUR, V. M. y GUREVICH, A. Current-driven production of vortex-antivortex pairs in planar Josephson junction arrays and phase cracks in long-range order. *Scientific Reports*, vol. 8(1), páginas 1–7, 2018. ISSN 20452322.
- FRITZSCHE, H. Electrical Properties of Germanium Semiconductors at Low Temperature. *Physical Review*, vol. 99(2), páginas 406–419, 1955. ISSN 1098-6596.
- GIVAN, U. y OVADYAHU, Z. Compositional disorder and transport peculiarities in the amorphous indium oxides. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 86(16), 2012. ISSN 10980121.
- GOSAR, P. Many-Electron Hopping. *Phys. Status Solidi B*, vol. 118, páginas 853–860, 1983.

- GROVES, C. Simulating charge transport in organic semiconductors and devices: A review. *Reports on Progress in Physics*, vol. 80(2), 2017. ISSN 00344885.
- GU, H., ZHANG, H., LIN, J., SHAO, Q., YOUNG, D. P., SUN, L., SHEN, T. D. y GUO, Z. Large negative giant magnetoresistance at room temperature and electrical transport in cobalt ferrite-polyaniline nanocomposites. *Polymer*, vol. 143, páginas 324–330, 2018. ISSN 00323861.
- GUPTA, A. y SRIVASTAVA, S. K. Paramagnetism, hopping conduction, and weak localization in highly disordered pure and Dy-doped Bi₂Se₃ nanoplates. *Journal of Applied Physics*, vol. 127(24), página 244302, 2020. ISSN 0021-8979.
- GUPTA, R., RAWAT, R. y PRAMANIK, A. K. Electronic properties in itinerant ferromagnet SrRu_{1-x}Ti_xO₃. *Journal of Physics Condensed Matter*, vol. 32(28), 2020a. ISSN 1361648X.
- GUPTA, S., DESHPANDE, S. K., SATHE, V. G. y SIRUGURI, V. Effect of scandium substitution on magnetic and transport properties of the M-type barium hexaferrites. *Journal of Alloys and Compounds*, vol. 815, página 152467, 2020b. ISSN 09258388.
- GUREVICH, A. V. y MINTS, R. G. Self-heating in normal metals and superconductors. *Reviews of Modern Physics*, vol. 59(4), páginas 941–999, 1987. ISSN 00346861.
- HASANLI, N., SCRIMSHIRE, A., BINGHAM, P. A., PALGRAVE, R. G. y HAYWARD, M. A. Structure and magnetism of the Rh⁴⁺-containing perovskite oxides La_{0.5}Sr_{0.5}Mn_{0.5}Rh_{0.5}O₃ and La_{0.5}Sr_{0.5}Fe_{0.5}Rh_{0.5}O₃. *Dalton Transactions*, vol. 49(32), páginas 11346–11353, 2020. ISSN 1477-9226.
- HEINZ, B., MERZ, M., WIDMAYER, P. y ZIEMANN, P. Tuning the hopping conductivity of WO₃ films by ion bombardment at different temperatures. *Journal of Applied Physics*, vol. 90(8), páginas 4007–4018, 2001. ISSN 00218979.
- HIRTH, J. P., LOTHE, J. *Theory of dislocations*. Krieger, 1982.

- HIZI, W., RAHMOUNI, H., GASSOUMI, M., KHIROUNI, K. y DHAHRI, S. Transport properties of La_{0.9}Sr_{0.1}MnO₃ manganite. *European Physical Journal Plus*, vol. 135(6), páginas 1–13, 2020. ISSN 21905444.
- HUNG, C. S. y GLIESSMAN, J. R. Resistivity and hall effect of germanium at low temperatures. *Physical Review*, vol. 96(5), páginas 1226–1236, 1954. ISSN 0031899X.
- IMRAN, M. M. y LAFI, O. A. Electrical conductivity, density of states and optical band gap in Se₉₀Te₆Sn₄ glassy semiconductor. *Physica B: Condensed Matter*, vol. 410(1), páginas 201–205, 2013. ISSN 09214526.
- ITOH, K. M., HALLER, E. E., BEEMAN, J. W., HANSEN, W. L., EMES, J., REICHERTZ, L. A., KREYSA, E., SHUTT, T., CUMMINGS, A., STOCKWELL, W., SADOULET, B., MUTO, J., FARMER, J. W. y OZHOGIN, V. I. Hopping conduction and metal-insulator transition in isotopically enriched neutron-transmutation-doped ⁷⁰Ge:Ga. *Physical Review Letters*, vol. 77(19), páginas 4058–4061, 1996. ISSN 10797114.
- JEON, J. W., JANG, H.-S., JUNG, W. T. y KIM, B. H. Charge transport in pyroprotein-based electronic yarns. *Physical Chemistry Chemical Physics*, páginas 26910–26916, 2020. ISSN 1463-9076.
- JOSÉ, J. y TORRES, M. Localized excitations in Josephson arrays : Part I : Theory and modeling. vol. 1, 2003.
- KAISER, A. B. y SKÁKALOVÁB, V. Electronic conduction in polymers, carbon nanotubes and graphene. *Chemical Society Reviews*, vol. 40(7), páginas 3786–3801, 2011. ISSN 14604744.
- KALOS, M. y WITHLOCK, P. A. *Monte Carlo Methods*. second edición, 2004.
- KAPLAN, D. M., SVERDLOV, V. A. y LIKHAREV, K. K. Coulomb gap, Coulomb blockade, and dynamic activation energy in frustrated single-electron arrays. *Phy-*

- sical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 68(4), páginas 453211–453216, 2003. ISSN 01631829.
- KARACHEVTSEV, V. A. y KURNOSOV, N. V. The temperature dependence of electron transport in a composite film of graphene oxide with single-wall carbon nanotubes: An analysis and comparison with a nanotube film. *Low Temperature Physics*, vol. 45(10), páginas 1109–1116, 2019. ISSN 1063777X.
- KAUTZ, R. L. Noise, chaos, and the Josephson voltage standard. *Reports on Progress in Physics*, vol. 59(8), páginas 935–992, 1996. ISSN 00344885.
- KHARKWAL, K. C., ROY, R., KUMAR, H., BERA, A. K., YUSUF, S. M., SHUKLA, A. K., KUMAR, K., KANUNGO, S. y PRAMANIK, A. K. Structure, magnetism, and electronic properties in 3d-5d based double perovskite (Sr_{1-x}Cax)₂FeIrO₆. *Physical Review B*, vol. 102(17), páginas 1–18, 2020. ISSN 24699969.
- KHONDAKER, S. I., SHLIMAK, I. S., NICHOLLS, J. T., PEPPER, M. y RITCHIE, D. A. Crossover phenomenon for two-dimensional hopping conductivity and density-of-states near the Fermi level. *Solid State Communications*, vol. 109(12), páginas 751–756, 1999a. ISSN 00381098.
- KHONDAKER, S. I., SHLIMAK, I. S., NICHOLLS, J. T., PEPPER, M. y RITCHIE, D. A. Two-dimensional hopping conductivity in a δ -doped GaAs/Al_xGa_{1-x}As heterostructure. *Physical Review B*, vol. 59(7), páginas 4580–4583, 1999b. ISSN 0163-1829.
- KINKHABWALA, Y. A., SVERDLOV, V. A. y LIKHAREV, K. K. A numerical study of Coulomb interaction effects on 2D hopping transport. *Journal of Physics Condensed Matter*, vol. 18(6), páginas 2013–2027, 2006. ISSN 09538984.
- KIRKPATRICK, S. Percolation and Conduction. *Reviews of Modern Physics*, vol. 45(4), páginas 574–588, 1973. ISSN 00346861.

- KNOTEK, M. L. Temperature and thickness dependence of low temperature transport in amorphous silicon thin films: A comparison to amorphous germanium. *Solid State Communications*, vol. 17(11), páginas 1431–1433, 1975. ISSN 00381098.
- KNOTEK, M. L., POLLAK, M., DONOVAN, T. M. y KURTZMAN, H. Thickness dependence of hopping transport in amorphous-Ge films. *Physical Review Letters*, vol. 30(18), páginas 853–856, 1973. ISSN 00319007.
- KNUDSEN, H. A. y FAZEKAS, S. Robust algorithm for random resistor networks using hierarchical domain structure. *Journal of Computational Physics*, vol. 211(2), páginas 700–718, 2006. ISSN 10902716.
- KOWAL, D. y OVADYAHU, Z. Scale dependent superconductor-insulator transition. *Physica C: Superconductivity and its Applications*, vol. 468(4), páginas 322–325, 2008. ISSN 09214534.
- KUMAR, R., YOSHIDA, A., MEHRA, R. M. y SHIMAKAWA, K. Multiphonon hopping of carriers on defect clusters in an amorphous Ge-Sb-Se system. *Phys. Rev. B*, vol. 43(5), páginas 4174–4178, 1991.
- LEE, M. y MASSEY, J. Evidence for many-electron composite charge excitations in a Coulomb glass. *Phys. Rev. B*, vol. 62(20), páginas 270–273, 2000.
- LIU, H., SUNG CHOE, H., CHEN, Y., SUH, J., KO, C., TONGAY, S. y WU, J. Variable range hopping electric and thermoelectric transport in anisotropic black phosphorus. *Applied Physics Letters*, vol. 111(10), 2017. ISSN 00036951.
- LIU, Z., LUO, B., HU, J. y XING, C. Transport mechanism in amorphous molybdenum silicide thin films. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, vol. 149(June 2020), página 109818, 2021. ISSN 00223697.
- MA, H. J. y SCOTT, J. F. Non-Ohmic Variable-Range Hopping and Resistive Switching in SrTiO₃ Domain Walls. *Physical Review Letters*, vol. 124(14), página 146601, 2020. ISSN 10797114.

- MADDISON, D. S. y TANSLEY, T. L. Variable range hopping in polypyrrole films of a range of conductivities and preparation methods. *Journal of Applied Physics*, vol. 72(10), páginas 4677–4682, 1992. ISSN 00218979.
- MALISHEVSKII, A. S., SILIN, V. P., URYUPIN, S. A. y USPENSKII, S. G. On the possibility of experimental observation of Cherenkov losses effect on the Josephson vortex induced motion. *Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics*, vol. 348(3-6), páginas 361–364, 2006. ISSN 03759601.
- MALISHEVSKII, A. S. A. A. J., ALFIMOV, G. L., S, A., ABDUMALIKOV, A. A., ALFIMOV, G. L., MALISHEVSKII, A. S. A. A. J., ALFIMOV, G. L., S, A., S, A., ABDUMALIKOV, A. A., ALFIMOV, G. L., MALISHEVSKII, A. S. A. A. J., ALFIMOV, G. L. y S, A. Nonlocal electrodynamics of Josephson vortices in superconducting circuits. *Superconductor Science and Technology*, vol. 22(2), página 23001, 2009. ISSN 09532048.
- MANDAL, B. y MITRA, P. Interpretation of electrical conduction mechanism by Godet's VRH model in TiO₂ incorporated MnCo₂O₄ host matrix. *Journal of Alloys and Compounds*, vol. 812, página 152129, 2020. ISSN 09258388.
- MANSFIELD, R. Hopping Conduction in III-V Compounds. En *Hopping transport in solids* (editado por M. Pollak y B. Shklovskii), capítulo 10, páginas 349–380. Elsevier Science, 1991.
- MARINOV, O., DEEN, M. J., JIMÉNEZ-TEJADA, J. A. y CHEN, C. H. Variable-range hopping charge transport in organic thin-film transistors. *Physics Reports*, vol. 844, páginas 1–105, 2020. ISSN 03701573.
- MCINNES, J. A. y BUTCHER, P. N. Numerical calculations of d . c . hopping conductivity. *Philosophical Magazine Part B*, vol. 39(1), páginas 1–11, 1979.
- MEIR, Y. Universal crossover between efros-shklovskii and mott variable-range-hopping regimes. *Physical Review Letters*, vol. 77(26), páginas 5265–5267, 1996. ISSN 10797114.

- MERMIN, N. D. The topological theory of defects in ordered media. *Reviews of Modern Physics*, vol. 51(3), páginas 591–648, 1979. ISSN 00346861.
- MILLER, A. y ABRAHAMS, E. Impurity conduction at low concentrations. *Physical Review*, vol. 120(3), páginas 745–755, 1960. ISSN 0031899X.
- MINTS, R. G. y SNAPIRO, I. B. Josephson-vortex Cherenkov radiation. *Physical Review B*, vol. 52(13), páginas 9691–9696, 1995. ISSN 01631829.
- MÖBIUS, A. The metal-semiconductor transition in three-dimensional disordered systems-reanalysis of recent experiments for and against minimum metallic conductivity. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, vol. 18(24), páginas 4639–4670, 1985. ISSN 00223719.
- MÖBIUS, A., KARMANN, P. y SCHREIBER, M. Coulomb gap revisited - A renormalisation approach. *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 150(2), páginas 0–4, 2009. ISSN 17426596.
- MOLLAH, S., MANDAL, P., SK, T., HALDAR, S. y GHOSH, A. K. On the low temperature conduction mechanism of $\text{Ba}_{1-x}\text{KxBiO}_3$. *3Rd International Conference on Condensed Matter and Applied Physics (Icc-2019)*, vol. 2220(May), página 110044, 2020.
- MOREIRA, H. S., SAMPAIO, J. F., ALVES, E. S. y DE OLIVEIRA, A. G. Electron concentration dependence of the coulomb gap in AlGaAs:Si . *Physical Review Letters*, vol. 80(8), páginas 1706–1709, 1998. ISSN 10797114.
- MOTT, N. F. Conduction in glasses containing transition metal ions. *Journal of Non-Crystalline Solids*, vol. 1(1), páginas 1–17, 1968. ISSN 00223093.
- MOTT, N. F. Introductory talk; Conduction in non-crystalline materials. *Journal of Non-Crystalline Solids*, vol. 8-10(C), páginas 1–18, 1972. ISSN 00223093.
- MOTT, N. F. y DAVIS, E. A. *Electronic Processes in Non-Crystalline Materials*. Oxford, second edición, 1979. ISBN 9780199645336.

- NAKAJIMA, K. y SAWADA, Y. Numerical analysis of vortex motion in two-dimensional array of Josephson junctions. *Journal of Applied Physics*, vol. 52(9), páginas 5732–5743, 1981. ISSN 00218979.
- NAKAYAMA, T. y YAKUBO, K. *Fractal concepts in condensed matter physics*. Springer, Berlin, Heidelberg, 1 edición, 2003.
- NENASHEV, A. V., OELERICH, J. O. y BARANOVSKII, S. D. Theoretical tools for the description of charge transport in disordered organic semiconductors. *Journal of Physics Condensed Matter*, vol. 27(9), página 93201, 2015. ISSN 1361648X.
- NIEVES, C. A., MARTINEZ, L. M., MELÉNDEZ, A., ORTIZ, M., RAMOS, I., PINTO, N. J. y ZIMBOVSKAYA, N. Temperature-dependent charge transport mechanisms in carbon sphere/polyaniline composite. *AIP Advances*, vol. 7(12), 2017. ISSN 21583226.
- ORTUÑO, M., SOMOZA, A. M., VINOKUR, V. M. y BATURINA, T. I. Electronic transport in two-dimensional high dielectric constant nanosystems. *Scientific Reports*, vol. 5, página 9667, 2015. ISSN 2045-2322.
- OVADIA, M., SACÉPÉ, B. y SHAHAR, D. Electron-phonon decoupling in disordered insulators. *Physical Review Letters*, vol. 102(17), páginas 1–4, 2009. ISSN 00319007.
- OVADYAHU, Z. Electron glass in a three-dimensional system. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 90(5), páginas 1–8, 2014. ISSN 1550235X.
- PAES, V. Z., MOSCA, D. H., DE OLIVEIRA, A. J. y VARALDA, J. Non-conventional ferromagnetism and high bias magnetoresistance in TiO_{2-x}: A simple phenomenological approach. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 497(October 2019), página 166068, 2019. ISSN 03048853.
- PARK, T. E., SUH, J., SEO, D., PARK, J., LIN, D. Y., HUANG, Y. S., CHOI, H. J., WU, J., JANG, C. y CHANG, J. Hopping conduction in p-type MoS₂

- near the critical regime of the metal-insulator transition. *Applied Physics Letters*, vol. 107(22), 2015. ISSN 00036951.
- PASVEER, W. F., BOBBERT, P. A., HUININK, H. P. y MICHELS, M. A. Scaling of current distributions in variable-range hopping transport on two- and three-dimensional lattices. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 72(17), páginas 1–6, 2005. ISSN 10980121.
- PASVEER, W. F. y MICHELS, M. A. Understanding Mott's law from scaling of variable-range-hopping currents and intrinsic current fluctuations. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 74(19), páginas 1–8, 2006. ISSN 10980121.
- PEDERSEN, N. F. y USTINOV, A. V. Fluxons in Josephson transmission lines: New developments. *Superconductor Science and Technology*, vol. 8(6), páginas 389–401, 1995. ISSN 09532048.
- PIGNATEL, G. y SANGUINETTI, S. Coulomb gap measurement in non-compensated Si : As. *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 5, páginas 191–198, 1993.
- PIKE, G. E. y SEAGER, C. H. Percolation and conductivity: A computer study. I. *Phys. Rev. B*, vol. 10(4), páginas 1421–1434, 1974a. ISSN 01631829.
- PIKE, G. E. y SEAGER, C. H. Percolation and conductivity: A computer study. II. *Phys. Rev. B*, vol. 10(4), páginas 1435–1446, 1974b.
- POLLAK, M. Effect of carrier-carrier interactions on some transport properties in disordered semiconductors. *Discussions of the Faraday Society*, vol. 50(052), páginas 13–19, 1970. ISSN 03669033.
- POLLAK, M. A percolation treatment of dc hopping conduction. *Journal of Non-Crystalline Solids*, vol. 11(1), páginas 1–24, 1972. ISSN 00223093.
- POLLAK, M. A theory for many-electron hopping rates. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, vol. 14(21), páginas 2977–2993, 1981. ISSN 00223719.

- POLLAK, M. *Electrons in Anderson-Mott insulators*. 2019.
- POLLAK, M. y KNOTEK, M. Evidence for correlated hopping in impurity conduction at moderate impurity concentrations. vol. 21(2), páginas 183–184, 1977.
- POLLAK, M., ORTUÑO, M. y FRYDMAN, A. *The Electron Glass*. 2013. ISBN 978-0-521-19552-2.
- PRESS, W. H., TEUKOLSKY, S. A., VETTERLING, W. T. y FLANNERY, B. P. *Numerical Recipes in Fortran 90*. 1996. ISBN 0521574390.
- RAGHAV, D. S., KUMARI, S., SINGH, H. K. y VARMA, G. D. Structure, magnetism and electrical transport of sol-gel derived La_{0.30}Pr_{0.30}Ca_{0.40}MnO₃: Elucidating consequences of size effect. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 497(March 2019), página 166003, 2020. ISSN 03048853.
- RAWAL, I. y GOYAL, P. K. Effect of Ammonia Based Deprotonation on the variable range hopping conduction in Polypyrrole Nanotubes. *Solid State Sciences*, vol. 99(July 2019), página 105984, 2020. ISSN 12932558.
- RENTZSCH, R. y IONOV, A. N. Electron correlation effects at variable-range hopping in doped GaAs, CdTe, Ge and Si. *Philosophical Magazine B: Physics of Condensed Matter; Statistical Mechanics, Electronic, Optical and Magnetic Properties*, vol. 81(9), páginas 1065–1081, 2001. ISSN 13642812.
- ROCA-GONZALEZ, J. L., CARAVACA, M. y SOTO-MECA, A. Extension of percolation theory to determine the three-dimensional variable-range hopping conductivity in glassy chalcogenides. *Chalcogenide Letters*, vol. 15(5), páginas 261–266, 2018. ISSN 15848663.
- ROGATCHEV, A. y MIZUTANI, U. Hopping conductivity and specific heat in insulating amorphous T_xSi_{100-x} alloys. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 61(23), páginas 15550–15553, 2000. ISSN 01631829.

- ROSENBAUM, R., LIEN, N. V., GRAHAM, M. R. y WITCOMB, M. A useful Mott - Efros - Shklovskii resistivity crossover formulation for three-dimensional films. vol. 6247, 1997.
- ROY, A. y GHOSH, A. K. Variable range hopping conduction and superconductivity in Ru-1222. *Physica C: Superconductivity and its Applications*, vol. 505, páginas 100–103, 2014. ISSN 09214534.
- ROY, A. S., HOEKSTRA, A. F., ROSENBAUM, T. F. y GRIESEN, R. Quantum Fluctuations and the Closing of the Coulomb Gap in a Correlated Insulator. *Physical Review Letters*, vol. 89(27), páginas 2–5, 2002. ISSN 10797114.
- RUDRA, M., TRIPATHI, H. S., DUTTA, A. y SINHA, T. P. Existence of nearest-neighbor and variable range hopping in Pr₂ZnMnO₆ oxygen-intercalated pseudo-capacitor electrode. *Materials Chemistry and Physics*, vol. 258(September 2020), página 123907, 2021. ISSN 02540584.
- SAMBANDAMURTHY, G., ENGEL, L. W., JOHANSSON, A. y SHAHAR, D. Superconductivity-Related Insulating Behavior. *Physical Review Letters*, vol. 92(10), páginas 10–13, 2004. ISSN 00319007.
- SANDOW, B., GLOOS, K., RENTZSCH, R., IONOV, A. N. y SCHIRMACHER, W. Electronic correlation effects and the Coulomb gap at finite temperature. *Physical Review Letters*, vol. 86(9), páginas 1845–1848, 2001. ISSN 00319007.
- SARKAR, A., BIN RAHAMAN, A., CHAKRABORTY, K., PAL, T., GHOSH, S. y BANERJEE, D. ZnTe dispersed in RGO matrix: Investigation of electrical transport processes, magnetic properties and their synergistic effect. *Applied Surface Science*, vol. 493(July), páginas 279–286, 2019. ISSN 01694332.
- SHAHAR, D. y OVADYAHU, Z. Superconductivity near the mobility edge. *Phys. Rev. B*, vol. 46(17), páginas 917–923, 1992.
- SHANTE, V. K. S. y KIRKPATRICK, S. *An introduction to percolation theory*, vol. 20. 1971. ISBN 0001873710010.

- SHARMA, V., VERMA, D., OKRAM, G. S., CHOUDHARY, R. J., KUMAR, D. y DESHPANDE, U. Dominant role of trioctylphosphine on the particle size and various properties of CoO nanoparticles. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 497, página 166000, 2020. ISSN 03048853.
- SHEIKHZADA, A. y GUREVICH, A. Fragmentation of Fast Josephson Vortices and Breakdown of Ordered States by Moving Topological Defects. *Nature Publishing Group*, (December), páginas 1–8, 2015. ISSN 2045-2322.
- SHENG, P., ABELES, B. y ARIE, Y. Hopping conductivity in granular systems. *Phys. Rev. Lett.*, vol. 31(1), páginas 44–47, 1973. ISSN 07223277.
- SHI, X., FU, H., SHI, J. R., CHEAH, L. K., TAY, B. K. y HUI, P. Electronic transport properties of nitrogen doped amorphous carbon films deposited by the filtered cathodic vacuum arc technique. *Journal of Physics Condensed Matter*, vol. 10(41), páginas 9293–9302, 1998. ISSN 09538984.
- SHKLOVSKII, B. y EFROS, A. Electronic Properties of Doped Semiconductors (Springer Series in Solid-State Sciences). 1984.
- SHKLOVSKII, B. I. y EFROS, A. L. Percolation Theory and Conductivity of Strongly Inhomogeneous Media. *Soviet Physics - Uspekhi*, vol. 18(11), páginas 845–862, 1975. ISSN 21695296.
- SHLIMAK, I., FRIEDLAND, K. J. y BARANOVSKII, S. D. Hopping conductivity in gated δ -doped GaAs: universality of prefactor. *Solid State Communications*, vol. 112(1), páginas 21–24, 1999. ISSN 00381098.
- SHLIMAK, I. y NIKULIN, E. Conductivity of Doped Germanium at Infralow Temperatures. *JETP Letters-USSR*, vol. 15(1), página 20, 1972.
- SIVAKOV, A. G., GLUKHOV, A. M., OMELYANCHOUK, A. N., KOVAL, Y., MÜLLER, P. y USTINOV, A. V. Josephson behavior of phase-slip lines in wide superconducting strips. *Physical Review Letters*, vol. 91(26), páginas 2–5, 2003. ISSN 10797114.

- SOMOZA, A. M., ORTUÑO, M. y POLLAK, M. Collective variable-range hopping in the Coulomb gap: Computer simulations. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 73(4), páginas 1–6, 2006. ISSN 10980121.
- SOURI, D., TAHAN, Z. E. y SALEHIZADEH, S. A. DC electrical conductivity of Ag₂O-TeO₂-V₂O₅ glassy systems. *Indian Journal of Physics*, vol. 90(4), páginas 407–415, 2016. ISSN 09749845.
- SOURI, M., CONNELL, J. G., NICHOLS, J., TERZIC, J., CAO, G. y SEO, A. Crossover between Mott and Efros-Shklovskii variable-range hopping in Sr₂IrO₄ epitaxial thin films by misfit strain and isovalent doping. *Journal of Applied Physics*, vol. 126(18), 2019. ISSN 10897550.
- STAVROPOULOS, S. G., SANIDA, A. y PSARRAS, G. C. A comparative study on the electrical properties of different forms of carbon allotropes - Epoxy nanocomposites. *Express Polymer Letters*, vol. 14(5), páginas 477–490, 2020. ISSN 1788618X.
- STRELNIKER, Y. M., HAVLIN, S., BERKOVITS, R. y FRYDMAN, A. Resistance distribution in the hopping percolation model. *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, vol. 72(1), páginas 12–14, 2005. ISSN 15393755.
- SUI, J. X., WANG, X. X., ZHANG, X. T., HAN, W. P., SONG, C., YU, J., QI CHEN, J., HUAN LIU, H., YUAN, F. y LONG, Y. Z. Variable-range hopping conduction with positive and negative magnetoresistance transformation in reduced graphene oxide mesostructures. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 498, página 166107, 2020. ISSN 03048853.
- THOULESS, D., KOSTERLITZ, M. J. y HALDANE, F. D. M. Topological Phase Transitions and Topological Phases of Matter. *Royal Swedish Academy of Sciences*, vol. 50005(50005), páginas 1–26, 2016.

- TSIGANKOV, D. N. y EFROS, A. L. Variable Range Hopping in Two-Dimensional Systems of Interacting Electrons. *Physical Review Letters*, vol. 88(17), página 4, 2002. ISSN 10797114.
- TSIGANKOV, N., PAZY, E., LAIKHTMAN, D. y EFROS, L. Long-time relaxation of interacting electrons in the regime of hopping conduction. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 68(18), páginas 1–10, 2003. ISSN 1550235X.
- TYČ, S. y HALPERIN, B. I. Random resistor network with an exponentially wide distribution of bond conductances. *Physical Review B*, vol. 39(1), páginas 877–880, 1989. ISSN 01631829.
- V. AMBEGAOKAR, B. I. HALPERIN, J. S. L. Hopping Conductivity in Disordered Systems. *Physical Review B*, vol. 4, páginas 2612–2620, 1971.
- VAN KEULS, F., HU, X. y JIANG, H. Screening of the Coulomb interaction in two-dimensional variable-range hopping. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 56(3), páginas 1161–1169, 1997. ISSN 1550235X.
- VENUGOPAL, G., SIVALINGAM, Y., SUNDHARAM, S., MURUKANAHALLY KEMPAIAH, D., KIM, S. J. y ZOLTÁN, K. Temperature-Dependent Electrical Transport Properties of Single-Walled Carbon Nanotube Thin Films Prepared by Electrohydrodynamic Atomization Technique. *Physica Status Solidi (A) Applications and Materials Science*, vol. 217(15), 2020. ISSN 18626319.
- VINOKUR, V. M., BATURINA, T. I., FISTUL, M. V., MIRONOV, A. Y., BAKLONOV, M. R. y STRUNK, C. Superinsulator and quantum synchronization. *Nature*, vol. 452(7187), páginas 613–615, 2008. ISSN 1476-4687.
- WALSH, E. D., EFETOV, D. K., LEE, G. H., HEUCK, M., CROSSNO, J., OHKI, T. A., KIM, P., ENGLUND, D. y FONG, K. C. Graphene-based josephson-junction single-photon detector. *Physical Review Applied*, vol. 8(2), páginas 1–11, 2017. ISSN 23317019.

- YAO, Y., BO, B. y LIU, C. The hopping variable range conduction in amorphous InAs thin films. *Current Applied Physics*, vol. 18(12), páginas 1492–1495, 2018. ISSN 15671739.
- YOON, C. O., REGHU, M., MOSES, D., HEEGER, A. J., CAO, Y., CHEN, T. A., WU, X. y RIEKE, R. D. Hopping transport in doped conducting polymers in the insulating regime near the metal-insulator boundary: polypyrrole, polyaniline and polyalkylthiophenes. *Synthetic Metals*, vol. 75(3), páginas 229–239, 1995. ISSN 03796779.
- ZAMBRZYCKI, M., ŁOŚ, S. y FRACZEK-SZCZYPTA, A. Structure and electrical transport properties of carbon nanofibres/carbon nanotubes 3D hierarchical nanocomposites: Impact of the concentration of acetylacetonate catalyst. *Ceramics International*, vol. 47(3), páginas 4020–4033, 2021. ISSN 02728842.
- ZHANG, J., CUI, W., JUDA, M., MCCAMMON, D., KELLEY, R. L., MOSELEY, S. H., STAHL, C. K. y SZYMKOWIAK, A. E. Hopping conduction in partially compensated doped silicon. *Physical Review B*, vol. 48(4), páginas 2312–2319, 1993. ISSN 01631829.
- ZHOU, G., GU, X., YANG, X., GAO, X., WANG, K., PENG, J., ZHANG, F. y WU, X. S. Structure, magnetism, and transport properties for Ca doping in Sr₂IrO₄. *AIP Advances*, vol. 7(5), 2017. ISSN 21583226.
- ZHU, J., LIU, X., ZHOU, X. y YANG, Q. Strengthening effect of graphene-edge dislocation interaction in graphene reinforced copper matrix composites. *Computational Materials Science*, vol. 188(December 2020), página 110179, 2021. ISSN 09270256.