

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS  
INSTITUTO DE FÍSICA

José Leandro Lúcio dos Santos

Localização e espectro de absorção em sistemas eletrônicos com  
correlação tipo exponencial alongada na distribuição da desordem

Maceió  
2013

José Leandro Lúcio dos Santos

Localização e espectro de absorção em sistemas eletrônicos com correlação tipo exponencial alongada na distribuição da desordem

*Dissertação apresentada ao Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, como parte dos créditos para a obtenção do título de Mestre em Física.*

*Orientador: Prof. Dr. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura*

Maceió  
2013

*À minha família.*

## AGRADECIMENTOS

- A minha esposa (Maria Márcia da Silva Lúcio) pela força, confiança e paciência;
- A minha mãe, por tudo;
- Ao Professor Dr. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura do IF-UFAL, pela espetacular orientação e dedicação para o desenvolvimento deste trabalho, pela amizade que construímos durante o período do mestrado e claro, pelos conselhos transmitidos na hora do cafezinho;
- Aos Professores Dr. Marcelo L. Lyra, Dr. Iram M. Gléria e Dr. Tiago H. M. do Nascimento do IF-UFAL, pelos conhecimentos transmitidos através das disciplinas Mecânica Estatística, Eletrodinâmica I e Mecânica Quântica I, respectivamente;
- A todos os componentes da minha Família, em especial: Francisca, Ernesto, Tel, Marcelo, Márcio, Fran, Bia e Marcela, pela ajuda de todos dias e pelo grande laço afetivo de amizade que nos uniram ao longo da vida.
- A todos os amigos que fiz fora e dentro do IF-UFAL, em especial ao Messias de Oliveira Sales pela grande ajuda dada no processo de meu trabalho;
- A todos os professores que fizeram parte de minha formação;
- A Capes, ao CNPQ, e a Fapeal pelo apoio financeiro.

## RESUMO

Neste trabalho, estudamos o problema da localização de um elétron e o espectro de absorção óptica em sistemas unidimensionais com desordem correlacionada. Os cálculos foram realizados em cadeias com correlações exponenciais alongadas na distribuição de desordem diagonal. Aplicamos um procedimento de diagonalização numérica exata para calcular o número de participação e o espectro de absorção óptica. Os métodos numéricos utilizados neste trabalho fornecem uma estimativa precisa da dependência do comprimento de localização com as propriedades do sistema com desordem correlacionada. Em geral, o comprimento de localização aumenta à medida que o comprimento de correlação efetivo aumenta. Os resultados obtidos referente ao espectro de absorção óptica revelam uma dependência interessante do perfil de absorção com a distribuição de desordem correlacionada. Estes resultados revelam que, quanto mais correlacionada for a distribuição da desordem, menor será a intensidade da absorção óptica. Utilizando um argumento heurístico explicamos este comportamento em detalhes. Obtemos uma relação simples entre a intensidade de absorção óptica e o comprimento de localização em torno dos autoestados com maior força do oscilador. Nossos cálculos numéricos estão em boa concordância com os argumentos analíticos.

**Palavras-chave:** Desordem correlacionada. Espectro de absorção. Localização.

## ABSTRACT

In this work, we study the problem of one-electron localization and optical absorption spectrum in  $1d$  systems with correlated disorder. Our calculations were carried on chains with stretched exponential correlations on the disorder distribution. We perform exact numerical diagonalization to compute the participation number and the optical absorption spectrum. Our formalism provides an accurate estimate for the dependence of the localization length with the correlated disorder properties. In general lines, the localization length increases as the effective correlation length is increased. Our results about the optical absorption spectra reveal a interesting dependence of the absorption profile with the correlated disorder distribution. Our results suggest that as the disorder distribution becomes more correlated the absorption intensity is decreased. By using heuristic arguments we will explain this behavior in details. We obtain a simple relation between the optical absorption intensity and the localization length around the specific eigenmodes with largest oscillator strength. Numerical calculations of the optical absorption and the localization length gives support to our heuristic arguments.

**Keywords:** Correlated disorder. Absorption spectrum. localization.

## LISTA DE FIGURAS

|      |  |    |
|------|--|----|
| 2.1  | Potencial periódico típico de um cristal, com os núcleos dos íons representados pelos círculos fechados. . . . .   | 23 |
| 2.2  | 1, 2 e 3 representam diferentes bandas de energia completamente ocupadas. 4 representa uma banda de valência que pode estar parcialmente ou completamente desocupada. . . . .  | 25 |
| 2.3  | Representação esquemática da ocupação eletrônica nas bandas de energia para isolante, metal e semicondutor. A parte mais escura dos retângulos representa a ocupação dos elétrons. . . . .   | 26 |
| 2.4  | Representação esquemática de uma rede cristalina com átomos que consistem de somente um único elétron. . . . .   | 28 |
| 2.5  | a e b representam previsões diferentes em torno das alterações energéticas devido a transição de ativação. . . . .   | 29 |
| 2.6  | Exposição esquemática para a transição de Mott. (a) Quando a interação entre os elétrons $U$ é satisfatoriamente menor que a largura da banda de energia num cristal, tem-se um sistema com energia favorável como num metal. (b) Quando a interação entre os elétrons $U$ é satisfatoriamente maior que a largura da banda de energia num cristal, tem-se um sistema com baixa mobilidade dos elétrons que caracteriza um isolante. . . . . | 30 |
| 2.7  | Representação esquemática de uma estrutura quadrada bidimensional com alguns tipos de desordem. a) Representa a rede de um cristal perfeito; b) Representa uma rede com vacâncias; c) Representa uma rede distorcida; d) Representa uma distribuição não periódica de diferentes átomos. . . . .   | 30 |
| 2.8  | Representação do estado eletrônico estendido e localizado: a) Representa a função de onda no estado estendido na transição de Bloch; (b) Representa a função de onda localizado na transição de Anderson. . . . .  | 31 |
| 2.9  | Representação esquemática da transição de Anderson. Em (a) tem-se um potencial aleatório com uma largura da desordem $W$ . Já em (b) tem-se um potencial cristalino com $B$ representado a largura da banda, ao qual é permitida a o elétron. A existência da localização dar-se ao momento em que $W$ é maior que $B$ . . . . .   | 33 |
| 2.10 | Ilustração da banda da densidade de energia, na qual apresenta uma região de estados localizados e uma outra região com estados estendidos, separados pelo mobility edge $E_c$ . . . . .   | 34 |
| 2.11 | Ilustração esquemática de um sistema unidimensional de sítio $i$ . . . . .   | 36 |
| 2.12 | Ilustração da teoria de escala da condutância generalizada com o fator de escala $b$ . . . . .   | 44 |
| 2.13 | Representação qualitativa do comportamento da função de escala $(\beta(g))$ em relação as dimensões $d = 1, 2$ e $3$ perante a teoria de escala mostrada por [9]. . . . .  | 45 |

- 3.1 Para uma cadeia finita com 500000 sítios e  $\gamma = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8$  e 1 (a) Ilustra o comportamento da função de autocorrelação para  $\zeta = 1$ . (b) ilustra o comportamento da função de autocorrelação para  $\zeta = 10$ . . . . . 51
- 3.2 Representação esquemática do (a) éxciton de Frenkel, e do (b) éxciton de Wannier-Mott. . . . . 54
- 3.3 Número de participação no centro da banda ( $E = 0$ ) versus  $\gamma$  para  $\zeta = 0.1, 1, 10$  e 20. Para  $\zeta = 0,1$  estamos lidando com um potencial desordenado com correlações fracas, logo,  $\xi(E = 0)$  é independente de  $\gamma$ . Para o caso correlacionado  $\zeta = 1, 10$  e 20, observamos um comportamento interessante e não monotônico. Para  $\gamma$  compreendido no intervalo  $[0.12(2), 0.40(2)]$  o número de participação aumenta à medida que  $N$  aumenta. A análise de tamanho finito (ver *inset*) demonstrou que, embora o comprimento de localização seja grande, no limite termodinâmica este comprimento é finito. . . . . 55
- 3.4 A transformada de Fourier integrada (*IFT*) versus  $\gamma$  para  $\zeta = 1, 10$  e 20. *IFT* é definido por  $IFT = \int_0^{k_{max}} \epsilon_k dk$ , onde  $\epsilon_k$  representar a transformada de Fourier da distribuição de desordem no sítio  $\epsilon_n$ . Observamos que o *IFT* apresenta uma diminuição no intervalo  $[\gamma_1, \gamma_2]$  indicando dessa forma, a um decréscimo efetivo na intensidade da desordem e, conseqüentemente, o aumento do comprimento de localização. . . . . 56
- 3.5 Em (a-b) temos espectro de absorção  $A(E)$  versus a energia  $E$  para  $\gamma = 0.35$  (painel (a)) e  $\gamma = 1$  (à direita (b)). Os cálculos foram realizados em um sistema constituído por  $N = 2000$  sítios, 1200 realizações de desordem e  $\zeta = 0.01, 0.1, 0.3, 0.5$  e 0,7. Para  $\zeta = 0,01$  observamos um único pico em torno de  $E = 2$  da rede periódica. Este resultado mostra-se de acordo com os resultados de  $A$  em sistemas  $1d$  com desordem diagonal não correlacionada e *hopping* onde somente os maiores estados da banda pode contribuir para a banda de absorção. Observamos que quando  $\zeta$  é aumentado a banda de absorção  $A(E)$  torna-se mais alargada, já a sua intensidade diminui. (c) O desvio padrão  $\sigma$  do espectro de absorção  $A(E)$  versus o comprimento de correlação  $\zeta$ . . . . . 58
- 3.6 (a) comprimento de localização  $\lambda$  versus  $E$  para  $\gamma = 1$  e  $\zeta = 0.1, 0.5$  e 1. Observamos que  $\lambda$  diminui em torno de  $E = 2$  à medida que o comprimento de correlação  $\zeta$  é aumentado, com isso ocorre um alargamento na banda de absorção em torno de  $E = 2$ . b) A média de comprimento de localização em torno  $E = 2$  ( $\lambda(E \approx 2)$ ) versus o comprimento de correlação  $\zeta$ . c) A intensidade máxima da banda de absorção  $A_{max}$  versus o comprimento de correlação  $\zeta$ . d) combinando (b) e (c) obtemos a dependência linear da intensidade do espectro de absorção  $A_{max}$  versus a média do comprimento de localização  $\lambda(E \approx 2)$ . . . . . 59
- 3.7 Ilustração pedagógica de um estado localizado na forma de *sino* com largura  $\lambda$ . Este tipo de estado contribui efetivamente para o espectro de absorção. . . . . 61

## SUMÁRIO

|          |   |           |
|----------|---|-----------|
| <b>1</b> | <b>INTRODUÇÃO</b>   | <b>9</b>  |
| <b>2</b> | <b>MODELOS DE CONDUÇÃO</b>  | <b>14</b> |
| 2.1      | Introdução aos primeiros modelos de condução . . . . .  | 14        |
| 2.2      | O modelo de condução de Drude . . . . .   | 15        |
| 2.3      | O modelo de condução de Sommerfeld . . . . .  | 19        |
| 2.3.1    | Os autoestados dos elétrons livres . . . . .  | 19        |
| 2.3.2    | Calor específico do gás de elétrons . . . . .   | 21        |
| 2.4      | O potencial periódico e o modelo de condução de Bloch . . . . .   | 22        |
| 2.5      | Níveis de energia e a superfície de Fermi . . . . .   | 25        |
| 2.6      | Interação elétron-elétron e efeitos de Desordem . . . . .   | 26        |
| 2.6.1    | Correlações entre elétrons e a transição de Mott . . . . .  | 27        |
| 2.6.2    | Sistemas com desordem e a transição de Anderson . . . . .   | 31        |
| 2.7      | O Modelo de Anderson . . . . .  | 34        |
| 2.8      | Medida do grau de localização . . . . .   | 37        |
| 2.9      | Teoria de escala na transição de Anderson . . . . .   | 41        |
| 2.10     | Desordem correlacionada no modelo de Anderson . . . . .   | 47        |
| <b>3</b> | <b>ESPECTRO DE ABSORÇÃO E LOCALIZAÇÃO EM SISTEMAS<br/>COM CORRELAÇÕES TIPO EXPONENCIAL ALONGADA NA<br/>DISTRIBUIÇÃO DE DESORDEM</b> | <b>49</b> |
| 3.1      | Introdução . . . . .  | 49        |
| 3.2      | Modelo de Anderson com correlação exponencial alongada . . . . .  | 50        |
| 3.2.1    | Propriedades . . . . .  | 52        |
| 3.3      | Resultados . . . . .  | 54        |
| 3.3.1    | Número de participação . . . . .  | 54        |
| 3.3.2    | Análise numérica da transformada de Fourier integrada . . . . .   | 57        |
| 3.3.3    | Espectro de absorção óptica . . . . .   | 57        |
| <b>4</b> | <b>CONCLUSÕES</b>   | <b>63</b> |
|          | <b>REFERÊNCIAS</b>  | <b>65</b> |

# 1

## INTRODUÇÃO

A descoberta do elétron em 1897 por Joseph John Thomson originou um impacto de forma imediata nas teorias da época sobre a estrutura da matéria e propôs um novo mecanismo para o transporte de cargas nos metais. Esta descoberta, deu-se através da análise do comportamento dos raios catódicos, com isso, Thomson concluiu que os raios luminosos no interior do tubo catódico são constituídos por cargas negativas (elétrons). As mudanças de perspectiva ocorridas após descoberta do elétron foram as primeiras grandes revoluções que envolveram revisões radicais de conceitos na física. Dessa forma, a descoberta do elétron mostra-se como um passo decisivo no desenvolvimento da física. Como parte deste desenvolvimento, três anos após a descoberta do elétron (1900) surge a primeira tentativa para descrever o comportamento do elétron nos sólidos, proposto por Paul Drude [1, 2]. Neste modelo de transporte eletrônico clássico, Drude considerou os íons do material como sendo fixos, os elétrons que encontram-se nas camadas mais internas estando fortemente ligado aos núcleos e os elétrons da camada mais externa (camada de valência) estando livres para se movimentarem perante todo o material, formando um gás (gás de elétrons livres). Embora seja considerado simples, o modelo de Drude obteve alguns pontos positivos (êxito) ao explicar propriedades referentes aos aspectos elétricos e ópticos, como a dedução da lei de Ohm da condução elétrica, assim como apresentou alguns pontos negativos (falhas), como a dependência errada entre a condutividade elétrica e a temperatura.

Ainda no ano de 1900, Max Planck propôs que um corpo aquecido emite radiação eletromagnética em pacotes discretos de energia [3] e não em fluxo contínuo como considerado até o momento. Estes pacotes discreto de energia que um corpo pode emitir ou absorver, Planck chamou de "quanta". Diante deste fato, Planck acabara de inaugurar uma nova física (física quântica) que até então era desconhecida pela comunidade científica. Passados cinco anos (1905) da teoria quântica apresentada por Max Planck, Albert Einstein propõe um trabalho conhecido por efeito fotoelétrico [4]. Neste trabalho, Einstein baseou-se nas ideias propostas por Planck para demonstrar que a incidência de um feixe de luz na superfície de um metal origina uma emissão de elétrons, onde a energia é independente da intensidade da luz e aparenta aumentar de acordo com o aumento da frequência da

---

luz incidente. Estes conceitos quânticos apresentados por Max Planck e Albert Einstein podem ser considerados como alguns dos principais pilares para o surgimento da física quântica. Os conceitos da mecânica quântica começaram a ganhar força por volta da década de 20 do século passado, com o reconhecimento da comunidade científica sobre as primeiras teorias da estrutura do átomo e as suas partículas elementares (elétron, próton e nêutron). Com o desenvolvimento da mecânica quântica novas abordagens teóricas foram propostas, como o princípio da exclusão de Pauli e a estatística de Fermi-Dirac. Com base na então atual teoria quântica, Arnold Sommerfeld em 1927 propõe o seu modelo de transporte eletrônico [5]. Neste estudo semiclássico de condução, Sommerfeld considerou praticamente as mesmas ideias de do modelo de Drude, entretanto, aplicou a estatística de Fermi-Dirac e a exclusão de Pauli em seu modelo e reinterpretou todos os resultados já obtidos por Drude. Este modelo de transporte eletrônico mostrou-se com muitos pontos positivos (êxito), mais apresentou algumas falhas, principalmente ao não explicar a distinção entre isolantes, condutores e semicondutores. A explicação para sólidos isolantes, semicondutores e condutores só foi apresentada através do modelo de condução proposta em 1928 por Felix Bloch [6]. Em seu modelo quântico de condução, Bloch já buscou uma descrição mais realística dos sólidos cristalinos. Ele considerou o elétron na presença de um potencial periódico, os íons como sendo fixos, porém não leva em conta a interação Coulombiana entre os elétrons (elétrons independentes) e nem a interações causada pela desordem que o sólido apresenta.

A natureza apresenta em geral, sólidos compostos por uma distribuição atômica não periódica (desordem). Mesmo os sólidos produzidos em laboratórios, apresentam algum tipo de desordem em sua distribuição atômica. Durante o intervalo de tempo compreendido entre a década de 30 e o final da década de 50, pensava-se que o efeito da desordem no estado de elétrons em sólidos pode ser descrito, em nível semiclássico, em termos de teoria de perturbação de ordem baixa. Até que surge em 1958 o célebre conceito de localização de elétrons causado pela desordem proposto por Philip W. Anderson [7]. Em seu modelo, Anderson estudou um modelo *tight binding* de um elétron em uma rede com potenciais aleatórios. Ele argumentou que o elétrons com uma certa energia estaria localizado se a quantidade de desordem fosse suficientemente grande. A desordem de um sólido leva o sistema a profundas modificações em suas propriedades físicas. Os estudos referentes aos sólidos com desordem têm atraído o interesse de pesquisadores da área da física da matéria condensada em todo mundo. Dessa forma, um dos modelos que satisfazem estas características é justamente o modelo de localização de Anderson, que nos últimos 50 anos tornou-se um paradigma para as investigações de transporte eletrônico na presença de desordem estática [7, 8]. No entanto, estudos recentes têm motivado cada vez mais a inclusão de correlações na desordem do sistema.

Em linhas gerais P. W. Anderson e colaboradores demonstraram que em sistemas de baixa dimensionalidade com desordem não correlacionada não existem estados eletrônicos

---

estendidos. Os autores obtiveram este resultado através da aplicação do formalismo da teoria de escala [9, 8, 10]. Durante cerca de 40 anos [7] a comunidade acreditou que todos os estados eletrônicos em sistemas unidimensionais desordenados são exponencialmente localizados para qualquer intensidade de desordem. Recentemente, os modelos unidimensionais com desordem correlacionada tem despertado muito interesse. Isto, deve-se ao fato de que as correlações no potencial aleatório têm se mostrado como uma ferramenta que pode alterar as propriedades de localização eletrônica. Por conseguinte, houve uma grande procura por potenciais aleatórios com correlações específicas. Esta procura se deu a partir do final dos anos 80, no qual vários estudos foram realizados demonstrando que os sistemas desordenados de baixa dimensionalidade pode consistir de estados estendidos ou de uma transição localização-delocalização na presença de correlações de curto ou de longo alcance na distribuição da desordem [11, 12, 13, 14]. O modelo de dímeros se apresenta como um dos pioneiros da compreensão de correlações de curto alcance, pois através deste tipo de correlações foi possível mostrar que autoestados estendidos podem emergir para valores discretos de energia [15]. Esta demonstração serviu como objeto de atração na forma de investigação da existência de transição metal-isolante em sistemas unidimensionais com desordem. Um outro resultado importante que também cooperou para esta crescente procura é : os efeitos das correlações de curto alcance foi evidenciada numa aplicação prática do modelo de dímero em super-redes semicondutoras [16]. Outros modelos que estudam as correlações de curto alcance foram analisadas nas referências [17, 18, 19], em conexão com averiguações realizadas em modelos de super-redes semicondutoras (ver também as discussões nas referências [20, 21]). Já sob o ponto de vista experimental, os pesquisadores V. Bellani [16] e U. Kuhl [22] estudaram o efeito de correlações de curto e de longo alcance, respectivamente, sobre as propriedades de transporte de sistemas desordenados de baixa dimensionalidade. Além disso, foi sugerido que um algoritmo apropriado para a geração de sequências aleatórias correlacionadas com *mobility edges* adequado pode ser utilizado na produção de filtros para sinais ópticos ou eletrônicos [23, 24]. Ademais, a previsão teórica descrita na localização Anderson em um filtro de múltiplas camadas aleatória [25, 26] abriu um amplo campo de investigações sobre os efeitos de desordem correlacionada em sistemas ópticos.

Por fim, mesmo com a existência de muitos resultados tanto teórico como experimental sobre sistemas de baixa dimensionalidade com desordem correlacionada, há muitos problemas em aberto para serem estudados, como por exemplo, tem-se as propriedades apresentadas em sistemas com correlações tipo exponencial na desordem. Além disso, muitos trabalhos vêm tentando compreender o efeito de desordem correlacionada sobre as propriedades ópticas em sistemas de baixa dimensionalidade [27, 28, 29]. Normalmente, é bem conhecido que a espectroscopia óptica falha na detecção de transições localização-deslocalização. No entanto, em 2005 E. Díaz e colaboradores [30], mostraram um comportamento anômalo do espectro de absorção em uma estrutura  $1d$  com correlação de

longo alcance na desordem diagonal. O espectro de absorção de duplo pico encontrado é a única ferramenta espectroscópica para monitorar a transição de Anderson. Além disso, Thaíla F. Assunção e colaboradores [31] no ano de 2011, apresentaram um espectro de absorção de duplo-pico através de observação numérica em estrutura  $1d$  com correlação de longo alcance na desordem fora da diagonal. Já no ano de 2010, A. Eisfeld e colaboradores [32] fizeram um estudo detalhado sobre as propriedades ópticas em modelos  $1d$  através da utilização de uma distribuição de desordem tipo Lévy de cauda longa (heavy-tailed). Os autores encontraram um alargamento na banda de absorção óptica e uma escala não universal do comprimento de localização na distribuição dos éxcitons. O alargamento da banda de absorção óptica e a não universalidade do comprimento de localização dentro de modelos com distribuição de desordem tipo Lévy foi revisto em [29].

Diante de tudo que foi apresentado nos parágrafos anteriores, o nosso objetivo principal é apresentar novos progressos referentes a sistemas unidimensionais com correlações tipo exponencial alongada na distribuição da desordem. Nesta dissertação, vamos estudar o problema da localização de um elétron e o espectro da absorção óptica em sistemas  $1d$  com desordem correlacionada. Os cálculos foram realizados em cadeias com correlações exponenciais alongadas na distribuição da desordem. Executamos uma diagonalização numérica exata para calcular o número de participação e o espectro de absorção óptica. Os métodos numéricos utilizados fornecem uma estimativa precisa para a dependência do comprimento de localização com as propriedades de desordem correlacionadas. Em geral, o comprimento de localização aumenta à medida que o comprimento de correlação efetivo aumenta. Os resultados obtidos referentes ao espectro de absorção óptica revelam uma dependência interessante do perfil de absorção com a distribuição de desordem correlacionada. Os resultados adquiridos mostram que, quando a distribuição de desordem fica mais correlacionado a intensidade de absorção diminui. Utilizando um argumento heurístico, explicamos este comportamento em detalhes. Obtemos uma relação simples entre a intensidade de absorção óptica e o comprimento de localização em torno dos autoestados específicos com a maior intensidade do oscilador. Os cálculos numéricos obtidos da absorção óptica e do comprimento de localização foram validados através de argumentos heurístico.

Este trabalho está organizado da seguinte forma:

- No capítulo 2 é apresentado uma breve revisão teórica sobre os primeiros e mais importantes modelos de condução eletrônica, partindo da descrição do modelo de Drude, passando pelos modelos de Sommerfeld, Bloch, Mott até o modelo de transição de Anderson. Mostrando a evolução conceitual e o porquê destes modelos serem tão relevantes na construção dos atuais modelos de condução;
- No capítulo 3 é mostrado o estudo das propriedades ópticas realizadas através de um

sistema unidimensional com correlações tipo exponencial alongada na distribuição da desordem. Também é mostrado a utilização da diagonalização numérica exata para calcular o número de participação e o espectro de absorção óptica, bem como a dependência do comprimento de localização com as propriedades da desordem correlacionada. Os resultados apresentados neste capítulo foram submetidos para publicação em *J. Phys.: Condens. Matter.*;

- E por fim, no capítulo 4 é apresentado as conclusões referente ao trabalho.

# 2

## MODELOS DE CONDUÇÃO

### 2.1 Introdução aos primeiros modelos de condução

No contexto do estado sólido existem muitas propriedades físicas de interesse, como por exemplo as propriedades de transporte eletrônico que têm chamado a atenção da comunidade científica desde o fim do século XIX. Em um sólido metálico temos internamente um agregado denso com uma grande quantidade de átomos ligados quimicamente, sendo estas ligações fundadas pela deformação das núvens eletrônicas destes átomos. A evidência deste efeito é mais manifestada em casos no qual o estado eletrônico tem menor intensidade de ligação entre os átomos, ao ponto de considerar que apenas estes estados são efetivos nas ligações, porém este tratamento é incorreto. Se bem que na maioria das aplicações pode ser desprezado. Os elétrons que se enquadram nestes estados são conhecidos como elétrons de valência e podem se mover no metal.

Os materiais metálicos, com o passar do tempo, vêm ganhando cada vez mais destaque no contexto da física da matéria condensada. Isto é uma consequência advinda das propriedades que estes tipos de materiais apresentam. Dentre várias propriedades importantes dos metais, podemos referenciar: excelente condutividade elétrica, alta densidade de massa, uma boa refletividade óptica, entre outras. As origens destas propriedades serviram como combustível inicial para a compreensão da atual teoria dos sólidos. O interesse de entender estas e outras propriedades apresenta-se como a origem do desenvolvimento da teoria de condução moderna.

A tentativa de elaborar um modelo de condução que satisfaça as propriedades apresentadas pelos materiais metálicos, tanto a forma qualitativa quanto a quantitativa, já perdura a mais de um século. Durante este intervalo de tempo, os resultados positivos (êxitos) e os resultados negativos (falhas) têm feito parte do mesmo contexto. Vários modelos de condução iniciais, mesmo apresentando inconsistências em alguns aspectos, são utilizados como ferramenta de estudos iniciais para a compreensão do desenvolvimento dos modelos atuais. Dentre estes modelos iniciais, encontra-se o modelo de condução de Paul Drude de 1900 [1, 2], que também é conhecido como o modelo do elétron livre e tem como base a teoria clássica.

Por volta de 1920, a teoria quântica começou a ser aplicada com mais frequência em pesquisas voltados aos materiais, levando a compreensão da teoria de bandas eletrônicas. Com isso, novos modelos de condução surgiram, como os modelos de Sommerfeld [5] e Bloch [6]. De modo que, o surgimento de novos procedimentos experimentais possibilitou descrever as propriedades dos materiais isolantes, semicondutores e dos metais, isto é, as propriedades de transporte. De forma que, a compreensão da disposição dos átomos de uma estrutura pode ser determinada por meio destas novas técnicas experimentais junto a configuração dos átomos dos materiais. Um caso particular destes arranjos atômicos é o cristal, que consiste de um arranjo periódico dos átomos. Entretanto, a natureza apresenta, em geral, sólidos bem mais complexos que o sólido cristalino.

Com o passar do tempo, vários outros modelos de condução surgiram corrigindo algumas falhas apresentadas pelos modelos mencionados nos parágrafos acima. Dentre estes vamos destacar dois modelos mais realísticos:

- O modelo de Mott que leva em consideração as interações elétron-elétron [33, 34, 35, 36, 37];
- O modelo de Anderson que leva em consideração o efeito de imperfeições topológicas, presença de impurezas no material ou mesmo uma composição atômica assimétrica. O modelo de Anderson possibilitou estudar as propriedades de transporte em sólidos desordenados [7].

Neste capítulo, vamos descrever resumidamente os modelos de condução citados nos parágrafos anteriores.

## 2.2 O modelo de condução de Drude

Logo após a descoberta do elétron por Joseph J. Thomson em 1897, Paul Drude propôs o seu modelo de condução para os metais baseado na teoria clássica [1, 2]. Drude em seu modelo, cogitou que um metal obedeceria a teoria cinética dos gases, qualificando dessa forma, os elétrons de condução de um metal como um gás de elétrons livres. Embora os sólidos metálicos sejam constituídos por, ao menos, dois diferentes tipos de partículas, diferentemente de um gás que apresenta apenas um tipo.

Em sua teoria de condução, Drude considerou os elétrons "colidindo" unicamente com os íons da rede desprezando as colisões elétron-elétron. Este modelo, em seu formato mais modesto, considera as moléculas do gás como esferas estáveis e idênticas, movendo-se retilineamente até que ocorra "colisões". Imediatamente após as "colisões", os elétrons emergem movimentando-se com direção aleatória tendo, dessa forma, velocidade média nula. De forma que, a velocidade de movimento  $v$  é representada pela distribuição de

Maxwell-Boltzmann, que no equilíbrio térmico é expressa por:

$$f_{MB}(v) = n_e \left( \frac{m_e}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} * \exp \left( -\frac{m_e v^2}{2k_B T} \right), \quad (2.1)$$

onde  $n_e$  representa o número de elétrons por unidade de volume,  $m_e$  é a massa do elétron,  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  representa a temperatura.

Para um estudo voltado a condutividade elétrica, vamos considerar um campo elétrico uniforme  $E$  num metal, dessa forma, os elétrons presente no mesmo adquirem um aumento em sua velocidade, esta velocidade adicional causada pela presença do campo elétrico é chamada de velocidade de deriva. Drude em seu modelo, considerou que a energia cinética adquirida pelos elétrons, devido a presença do campo elétrico, é completamente dissipada por conta das "colisões" existente no presente modelo. Paul Drude em seu modelo, considera que os elétrons livres em um metal têm movimento aleatório, como as moléculas que compõem um gás ideal, de forma que a velocidade média é igual a zero, isto é, como os elétrons manifestam-se com direções aleatórias imediatamente após a "colisão", então a velocidade média é nula.

Os elétrons livres na presença de um campo elétrico  $\mathbf{E}$  provam a ação de uma força elétrica  $\mathbf{F}$  dado por:

$$\mathbf{F} = -e\mathbf{E}. \quad (2.2)$$

De forma que, os elétrons aceleram com a presença do campo elétrico, para somente devido a "colisão", e em seguida, volta a acelerar novamente. Este movimento pode ser considerado, de forma aproximada, como um movimento uniforme. A segunda lei de Newton, mostra que a velocidade aumenta com uma aceleração constante ( $a = \mathbf{F}/m$ ), dessa forma a expressão 2.2 pode ser escrita por:

$$\frac{\mathbf{F}}{m} = -\frac{e\mathbf{E}}{m_e}. \quad (2.3)$$

Considerando que no tempo médio entre as colisões  $\tau$  os elétrons adquiram uma velocidade de deriva  $\mathbf{v}$ , em consequência da equação 2.3, obtém-se

$$\mathbf{v} = -\frac{e\mathbf{E}\tau}{m_e}. \quad (2.4)$$

Agora vamos considerar um material metálico composto por  $n_e$  elétrons livres por unidade de volume, movendo-se com uma velocidade  $\mathbf{v}$  na presença de um campo elétrico  $\mathbf{E}$  uniforme. Como os elétrons tem carga negativa ( $-e$ ), a carga que passa por uma seção transversal com área  $a$  num intervalo de tempo  $dt$  é  $-nevadt$ . Dessa forma, a corrente

elétrica que flui no metal é dado por:

$$i = n_e e v a. \quad (2.5)$$

Já a densidade de corrente por unidade de área ( $j = i/a$ ) pode ser expressa na forma vetorial da seguinte forma:

$$\mathbf{j} = -n_e e \mathbf{v}. \quad (2.6)$$

Combinando as expressões 2.4 com 2.6, obtemos

$$\mathbf{j} = \frac{n_e e^2 \tau}{m_e} \mathbf{E}. \quad (2.7)$$

Ainda no contexto da condução eletrônica, George S. Ohm [38] diante de observações experimentais, verificou que num condutor existem resistores ao qual a diferença de potencial entre as extremidades e a corrente que o atravessa se mantinham em uma relação proporcional (lei de Ohm), que pode expresso matematicamente por

$$V = IR \quad (2.8)$$

onde  $V$  representa o potencial,  $I$  é a corrente e  $R$  é a resistência referente ao condutor. A verdade é que a expressão 2.8 representa a definição da resistência e não a lei de Ohm que por sua vez pode ser enunciada da seguinte forma: O valor de  $R$ , para alguns materiais, não depende da intensidade ou da polaridade da tensão aplicada. Estes materiais são conhecidos como ôhmicos. Porém, a resistência depende unicamente de sua geometria, como mostra a seguinte expressão

$$R = \rho \frac{L}{A}, \quad (2.9)$$

onde  $L$  representa o comprimento do condutor,  $A$  é a área da secção transversal do condutor e  $\rho$  simboliza a resistividade elétrica do material.

Da lei de Ohm ( $R = V/i$ ), a expressão 2.9 pode ser escrita como:

$$\frac{V}{l} = \rho \frac{i}{a}. \quad (2.10)$$

Com a presença do campo elétrico uniforme  $E$  no interior de um material metálico, podemos estudar, nos extremos do mesmo, a diferença de potencial através do produto entre o campo elétrico  $E$  e o comprimento do condutor  $l$  ( $V = El$ ). E definindo a densidade de corrente  $j$  como sendo a corrente elétrica por unidade de área, obtemos:

$$\mathbf{E} = \rho \mathbf{j}. \quad (2.11)$$

Como a condutividade elétrica  $\sigma$  é inverso da resistividade  $\rho$  ( $\sigma = 1/\rho$ ), então a equação 2.11 é dada por:

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}. \quad (2.12)$$

Logo, podemos ver que ao comparar as expressões 2.12 e 2.7, a condutividade de Drude é dada por:

$$\sigma = \frac{n_e e^2 \tau}{m_e}. \quad (2.13)$$

A lei de Ohm num material isotrópico 2.12 mostra que a densidade de corrente  $j$  é diretamente proporcional ao campo elétrico  $E$ . Para que esta relação seja satisfeita, é necessário que a condutividade  $\sigma$  seja uma constante independente de  $E$ . De fato, pois na expressão 2.13 nota-se que  $n_e$ ,  $e$  e  $m_e$  são constantes independentes do campo elétrico. Diante das "colisões" dos elétrons com os íons, qualquer variação que ocorrer referente ao campo elétrico, produzirá um efeito ao qual é desprezível no tempo médio de "colisão" de um elétron com os íons. Dessa forma, o tempo médio de "colisão"  $\tau$  entre os elétrons e os íons é de fato independente do campo elétrico, logo, a condutividade  $\sigma$  é uma constante independente de  $E$  e portanto, o modelo de Drude satisfaz a lei de Ohm da condutividade elétrica.

Em linhas gerais, apresentamos nesta seção apenas um ponto positivo (êxito) deste modelo, referente a lei de Ohm da condução elétrica. Porém, este modelo mostra algumas inconsistências, bem como, alguns outros sucessos, como:

- O modelo de Drude fornece uma explicação razoável para a lei empírica de Wiedemann-Franz através da conexão entre a condutividade elétrica e térmica [1, 2]. Esta conexão dar-se ao afirmar que a razão entre a condutividade térmica  $\kappa$  e a condutividade elétrica  $\sigma$  é proporcional a temperatura absoluta  $T$  ( $\frac{\kappa}{\sigma} \propto T$ );
- Este modelo falha ao prevê a dependência entre a condutividade elétrica e a temperatura de forma errada;
- Prevê de forma errada a contribuição dos elétrons para a capacidade calorífica, dada por  $c = (3/2)n_e k_B$ ;
- Falha também, ao não descrever a diferença que há entre condutor, semicondutor e isolante.

As falhas no modelo de Drude se apresentam devido a utilização da teoria clássica para descrever a conduta dos elétrons nos metais, através da distribuição de Maxwell-Boltzmann. Sendo que, a compreensão do comportamento eletrônico começa ser determinada, de forma mais clara, com o surgimento da teoria quântica, dessa forma, a distribuição de Maxwell-Boltzmann teve que ser substituída pela distribuição de Fermi-Dirac, devido ao princípio de exclusão de Pauli. Assim, vamos descrever, de forma resumida, o

modelo de transporte eletrônico de Sommerfeld.

## 2.3 O modelo de condução de Sommerfeld

Nesta seção, vamos inicialmente considerar que as "colisões" ocorrem uma vez a cada, em média,  $\tau$ , os elétrons se movem livremente, e seu movimento é descrito pela teoria clássica do modelo de Drude. Sendo que, no intuito de obter uma melhor resultado do comportamento eletrônico nos sólidos, vamos levar em conta a natureza quântica dos elétrons.

Com o surgimento da teoria quântica, a condução eletrônica passa ser descrita com base na mesma, e não mas pela descrição da teoria clássica. As principais alterações referentes ao modelo clássico têm origem nas propriedades estatísticas dos sistemas quânticos, especificamente, a classe no qual o elétron se enquadra, os férmions, que são constituídos por spin semi-inteiro e satisfaz o princípio de exclusão de Pauli. Por satisfazer este princípio, os férmions não pode ser descrito pela distribuição de Maxwell-Boltzmann (caso clássica), mas sim pela distribuição de Fermi-Dirac (caso quântico), que no equilíbrio térmico é expressa por:

$$f_{FD}(E,T) = \frac{1}{\exp[(E - \mu)/k_B T] + 1}, \quad (2.14)$$

onde  $E$  representa a energia cinética,  $T$  é a temperatura,  $\mu$  é o potencial químico e  $k_B$  representa a constante de Boltzmann.

Arnold J. W. Sommerfeld, em seu modelo de condução proposto em 1927 [5], aplicou o princípio de exclusão de Pauli ao gás de elétrons livres dos metais, com isso foi solucionado as inconsistências térmicas advindas do modelo de Drude. A grosso modo, o modelo de condução de Sommerfeld nada mais é que o modelo de Drude para o gás de elétrons livres, sendo que, ao invés da utilização da teoria, neste modelo é aplicado a teoria quântica como será mostrado na sequência.

### 2.3.1 Os autoestados dos elétrons livres

Para determinar os autoestados de um sistema composto por  $N$  elétrons, podemos estudar a equação de Schrödinger da seguinte forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i^N \nabla_i^2 \psi(\mathbf{r}_i) = E\psi(\mathbf{r}_i), \quad \text{com } i = 1, \dots, N. \quad (2.15)$$

Sendo que, a função de onda  $\psi(r)$  descreve os estados eletrônicos. De forma que, se os elétrons são não interagentes entre si, então, a função de onda satisfaz a equação de

Schrödinger independente do tempo que pode ser escrita por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (2.16)$$

Para estudarmos as propriedades referentes ao transporte de carga e de energia, vamos utilizar as condições periódicas de contorno (Born-von Kármán) de uma caixa retangular de lados  $L_x$ ,  $L_y$  e  $L_z$  e, conseqüentemente, volume  $V = L_xL_yL_z$  na qual os elétrons estão confinados e que pode ser expressa por:

$$\begin{aligned} \psi(L_x, y, z) &= \psi(0, y, z), \\ \psi(x, L_y, z) &= \psi(x, 0, z), \\ \psi(x, y, L_z) &= \psi(x, y, 0). \end{aligned} \quad (2.17)$$

Diante destas condições de contorno, podemos utilizar soluções da equação Schrödinger 2.16 na forma de ondas planas, que pode ser escrita como:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{V}}, \quad (2.18)$$

com a autoenergia correspondente expressa por:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m_e}, \quad \text{com } \mathbf{k}^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2. \quad (2.19)$$

Um conjunto de vetores de onda no espaço discreto satisfaz as condições de contorno representadas pelas expressões 2.18, dessa forma, o espectro de energia é quantizada. Logo, apenas os vetores de onda  $\mathbf{k}$  são permitidos e as suas componentes satisfazem as seguintes expressões:

$$k_x = \frac{2\pi}{L_x}n_x, \quad k_y = \frac{2\pi}{L_y}n_y, \quad k_z = \frac{2\pi}{L_z}n_z, \quad (2.20)$$

onde  $n_x$ ,  $n_y$  e  $n_z$  representam valores inteiros.

Para estudar algumas propriedades do gás de elétrons, podemos utilizar alguns métodos da mecânica estatística, isto é, vamos fazer uma soma em todos os estados que estão ocupados. Macroscopicamente, a soma dos estados  $\mathbf{k}$  pode ser substituída por uma integral, da seguinte forma:

$$\sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}) \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int g(\mathbf{k}) d\mathbf{k}, \quad (2.21)$$

onde  $V$  é o volume do sistema. Se o integrando  $\mathbf{k}$  tiver uma dependência apenas com a energia  $E(\mathbf{k})$ , então podemos estudar o número de estados eletrônicos por unidade de

volume, através da seguinte expressão:

$$g(E)dE = \frac{2}{(2\pi)^3}4\pi k^2 dk. \quad (2.22)$$

Através da expressão 2.19, obtemos

$$dE = \frac{\hbar^2 k}{m_e} dk. \quad (2.23)$$

Combinando as equações 2.23 e 2.22, ficamos com

$$g(E) \left( \frac{\hbar^2 k}{m_e} \right) = \frac{2}{(2\pi)^3}4\pi k^2, \quad (2.24)$$

ou ainda,

$$g(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} \right) \sqrt{E}. \quad (2.25)$$

### 2.3.2 Calor específico do gás de elétrons

Para averiguar o calor específico de um gás ideal de elétrons livres, vamos considerar um sistema de elétrons livres com temperatura finita, daí podemos estudar a energia interna total  $U$  deste sistema em termos da densidade de estado  $g(E)$ , expressa no espaço discreto por:

$$U = 2 \sum_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) f_{FD}(E_{\mathbf{k}}). \quad (2.26)$$

Já no espaço contínuo a expressão 2.26 é reescrita da seguinte forma:

$$\frac{U}{V} = \int E f_{FD} g(E) dE. \quad (2.27)$$

onde  $f_{FD}$ ,  $g(E)$  e  $E$  já foram definidos anteriormente. Resolvendo a integral da expressão 2.27 através da expansão de Sommerfeld, obtemos

$$\frac{U}{V} = \int_0^{E_F} E g(E) dE + \frac{\pi^2}{6} k_B^2 T^2 g(E). \quad (2.28)$$

Para obtermos o calor específico  $c$  deste sistema, vamos derivar a equação 2.28 em relação a temperatura, assim:

$$c = \frac{\pi^2}{3} g(E_F) k_B^2 T, \quad (2.29)$$

onde  $E_F$  representa a energia de Fermi. Considerando a densidade de estado dos elétrons para a energia  $E_F$  como sendo  $g(E_F) = m_e k_F / (\pi \hbar)^2$  e escrevendo  $k_F$  em termos do número de elétrons  $n_e$  e  $E_F$ , o calor específico fica da seguinte forma:

$$c = \frac{\pi^2}{2E_F} n_e k_B^2 T. \quad (2.30)$$

No modelo clássico de Drude, o calor específico é dado por  $c = \frac{3}{2} n_e k_B$ , ou seja, o calor específico 2.30 encontrado com a utilização da teoria quântica é menor por um fator  $\pi^2 k_B T / 3E_F$ .

Em linhas gerais, apresentamos nesta seção 2.3 apenas alguns pontos positivos do presente modelo. Porém, este modelo mostra alguns outros pontos positivos:

- Demonstra uma relação entre a condutividade térmica e a condutividade elétrica de acordo com a lei de Wiedemann-Franz;
- Estuda o espalhamento dos elétrons, através de um mecanismo de espalhamento não explícito.

Em contrapartida, o modelo proposto por Sommerfeld apresenta algumas inconsistências em vários aspectos, tais como:

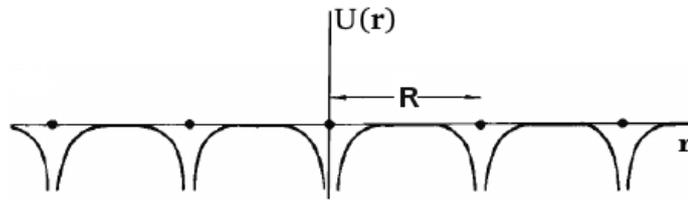
- Não descreve corretamente a dependência da temperatura na condutividade elétrica;
- Em alguns condutores, a condutividade depende da orientação do campo elétrico, efeito não observado na teoria de elétrons livres;
- Não explica o porquê de alguns sólidos serem condutores e outros não condutores.

Uma das principais origens das contrariedades do modelo de Sommerfeld, bem como a do modelo de Drude, é o fato da aproximação do elétron livre, na qual ignora o efeito dos íons na interação de um elétron entre "colisões". Não descreve a função dos íons como causa de "colisões". e desconhece a contribuição dos íons como entidades dinâmicas individuais nas propriedades físicas, como a condutividade térmica e a capacidade calorífica. Para corrigir estas contrariedades presentes nos modelos de Drude e Sommerfeld, as interações entre os elétrons de condução e os íons têm que ser levadas em consideração, pois os elétrons em um sólido não são livres, eles movimentam-se em um potencial atômico.

## 2.4 O potencial periódico e o modelo de condução de Bloch

Os modelos anteriores, baseados em uma teoria de elétrons livres, são irrealistas. Desta forma, é necessário levar em conta situações que apresentem algum tipo de interação elétron-íon, por exemplo. Vamos inicialmente considerar um sólido cristalino. Em um cristal, o arranjo interno dos átomos, íons ou moléculas é disposto de forma ordenada. Um potencial periódico pode ser usado para descrever a interação de um elétron com os íons de um cristal. Felix Bloch, em seu modelo de condução de 1928 [6], propôs que os elétrons se movimentavam em um condutor metálico com um potencial periódico, sendo

Figura 2.1: Potencial periódico típico de um cristal, com os núcleos dos íons representados pelos círculos fechados.



Fonte: C. Kittel, 1976 [39]

a energia cinética dos elétrons muito menor que a interação do potencial. De modo que, o grande salto qualitativo de F. Bloch deu-se ao demonstrar que o efeito dessa periodicidade alterava a solução de uma onda plana ( $\psi(\mathbf{r}) = Ae^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ ), por uma modulação periódica na função de onda, de forma que, no lugar da amplitude constante  $A$ , tem-se uma amplitude variável ou função periódica do cristal  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ , dada pela seguinte expressão

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (2.31)$$

com

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}), \quad (2.32)$$

onde  $\mathbf{R}$  é o vetor da rede de Bravais e  $\mathbf{k}$  é o vetor de onda. A expressão 2.31 é conhecida como função de onda de Bloch, ou teorema de Bloch.

Os estados estacionários de um único elétron em função de um potencial periódico ( $U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ ) podem ser obtidos através da equação de Schrödinger expressa por

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + U(\mathbf{r})\psi = E\psi, \quad (2.33)$$

onde o potencial  $U(\mathbf{r})$  tem periodicidade exposto na figura 2.1. Os elétrons independentes que obedecem a expressão 2.33 são conhecidos como elétrons de Bloch. Quando o potencial periódico for identicamente zero ( $U(\mathbf{r}) = 0$ ) a equação de Schrödinger fica da seguinte forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = E\psi, \quad (2.34)$$

onde esta equação representa um caso particular da equação 2.33, é o caso para o elétron livre, ao passo que os elétrons de Bloch tornam-se elétrons livres neste caso.

As soluções da equação de Schrödinger 2.33 com um potencial periódico são represen-

tadas como soluções de ondas planas, que pode ser expressa da seguinte forma

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (2.35)$$

com

$$u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}), \quad (2.36)$$

o índice  $n$  representa múltiplas soluções referente a equação de Schrödinger para um dado  $\mathbf{k}$ . Relacionando as expressões 2.35 e 2.36, tem-se a seguinte equação

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \quad (2.37)$$

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \quad (2.38)$$

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}, \quad (2.39)$$

onde esta expressão representa uma forma alternativa do teorema de Bloch. Com isso, a equação de autovalores de energia apresenta-se da seguinte forma

$$H\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{n,\mathbf{k}}\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.40)$$

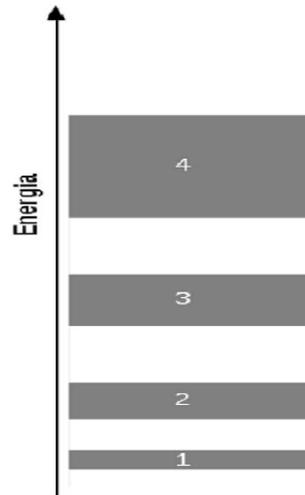
onde  $H$  é a hamiltoniana de um único elétron e expressa por

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} + U(\mathbf{r}). \quad (2.41)$$

Quando  $U(\mathbf{r}) \rightarrow \infty$  o vetor de onda  $\mathbf{k}$  tende a uma variação contínua. Por conseguinte,  $E_{n,\mathbf{k}} \rightarrow E_n(\mathbf{k})$ . Para cada valor de  $n$ , o conjunto de níveis eletrônicos representados por  $E_n(\mathbf{k})$  é conhecido como banda de energia, desse modo  $n$  é o índice de banda. Cada  $E_n(\mathbf{k})$  apresenta periodicidade e continuidade em  $\mathbf{k}$ , isto garante que existirá um limite mais alto e um limite mais baixo denominando assim, a estrutura de banda. Sendo que, todos os níveis de eletrônicos apresentam-se na banda de energia entre estes limites.

O estudo dos níveis de energia de uma partícula em um único poço de potencial quântico é uma das questões elementares da física quântica. Da mesma forma que, um dos problemas elementares da utilização do teorema de Bloch é a compreensão da banda de energia ao qual uma partícula encontra-se em movimento em um arranjo periódico de poços quânticos. O modelo de poços quadrados de potencial quântico com repetição periódica foi introduzido por R. Kronig e W. Penney em 1931 [40].

Figura 2.2: 1, 2 e 3 representam diferentes bandas de energia completamente ocupadas. 4 representa uma banda de valência que pode estar parcialmente ou completamente desocupada.



Fonte: autor, 2013

## 2.5 Níveis de energia e a superfície de Fermi

A energia de uma gás de elétrons livre é obtida pela seguinte expressão

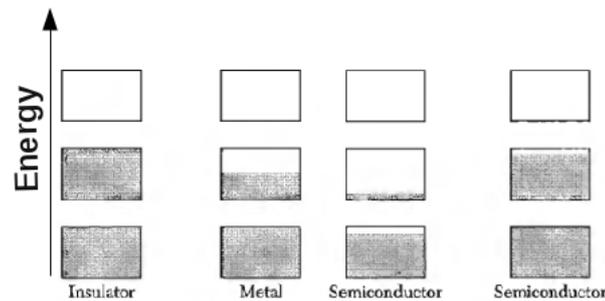
$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (2.42)$$

onde para cada banda de energia, os estados devem ser "ocupados" por  $\mathbf{k}$  de tal forma que seja equivalente a baixos valores energéticos. À medida que os estados estão sendo ocupados pelos elétrons, em níveis de energia cada vez maior, chega-se a um ponto que todos os elétrons estão distribuídos, de forma esférica, nos estados permitidos. Como cada nível de energia forma uma superfície de distribuição eletrônica esférica, o último nível de energia forma uma superfície conhecida como superfície de Fermi. Desse modo, a superfície de Fermi determina o limite entre os níveis de energia ocupados e desocupados.

No modelo esférico da superfície de Fermi,  $\mathbf{k}_F$  representa o vetor de onda de Fermi, ou raio da superfície de Fermi, e que é essencial para o estudo da energia de Fermi  $E_F$ . Já os elétrons de Bloch têm, em geral, uma distribuição com configuração mais complexa em relação a superfície de Fermi, mas que devem satisfazer a simetria de uma rede recíproca.

A possibilidade de ocupação dos níveis energéticos de uma banda por elétrons é de grande importância para o estabelecimento das propriedades de um sólido como, por exemplo, nas particularidades da estrutura de banda. Como elétrons são partículas fermiônicas, logo obedecem a estatística de Fermi-Dirac, de forma que todos os estados em todas as bandas de menor energia são totalmente ocupados, ao passo que todos os estados das bandas de maior energia estão desocupados. Com isso, os elétrons que estão numa banda completamente ocupada não devem contribuir no transporte eletrônico. Isto se

Figura 2.3: Representação esquemática da ocupação eletrônica nas bandas de energia para isolante, metal e semicondutor. A parte mais escura dos retângulos representa a ocupação dos elétrons.



Fonte: C. Kittel, 1976 [39]

deve a o efeito do princípio da exclusão de Pauli. Sob a presença de um campo elétrico aplicado, um elétron deve ser capaz de se mover. Este movimento produz uma modificação na continuidade no momento do elétron e por consequência no vetor de onda, mas como não há estados desocupados de diferente  $\mathbf{k}$  em uma banda totalmente ocupada, então o elétron não pode se mover. Por isso, os elétrons em uma banda de energia totalmente ocupada não podem contribuir o transporte eletrônico. Em uma banda totalmente desocupada, os elétrons também não pode contribuir para no transporte eletrônico. Com isso, a contribuição eletrônica para a condução só ocorrerá em bandas de energia parcialmente ocupadas. A configuração eletrônica na banda de energia em cristais pode ser observada na Figura 2.3. A distinção conceitual de condutor, semicondutor e isolante foi proposto inicialmente por Alan H. Wilson em 1931 [42].

Felix Bloch, através de modelo de condução, deu uma importante contribuição conceitual para melhor compreendermos o universo da física do estado sólido, ao explicar várias propriedades referentes aos materiais cristalino, já mencionado nesta seção, com a utilização da teoria quântica. Sendo que, este modelo de condução descreve o elétron em um cristal perfeito. Como nenhum sólido real é um cristal perfeito, então deve-se levar em consideração a existência de impurezas e a interação entre os elétrons apresentados neste tipo de sólido. Na próxima seção, analisaremos as propriedades de condução com os efeitos da interação elétron-elétron e de sistemas com a presença de desordem.

## 2.6 Interação elétron-elétron e efeitos de Desordem

O modelo de condução de Bloch, explicado anteriormente, descreve a teoria dos metais, isolantes e transição entre os mesmos, considerando a ausência de interação entre os elétrons. Este modelo diferencia, de forma geral, os metais dos isolantes na temperatura zero absoluto com base na ocupação eletrônica nas bandas de energia. Nos isolantes o nível de maior energia está completamente ocupado. Já para os metais, este nível está parcialmente ocupado. Devido a ausência de interação entre os elétrons, a formação da

estrutura de bandas é totalmente dependente da periodicidade da rede atômica. Entretanto, existe uma grande quantidade de materiais que não atende a estes conceitos. Em geral, precisamos considerar os efeitos provenientes da interação elétron-elétron e também da desordem atômica do material. Nesta seção, descreveremos modelos que consideram a desordem dos íons em uma rede (Modelo de Anderson) e o efeito da interação elétron-elétron (transição Mott).

### 2.6.1 Correlações entre elétrons e a transição de Mott

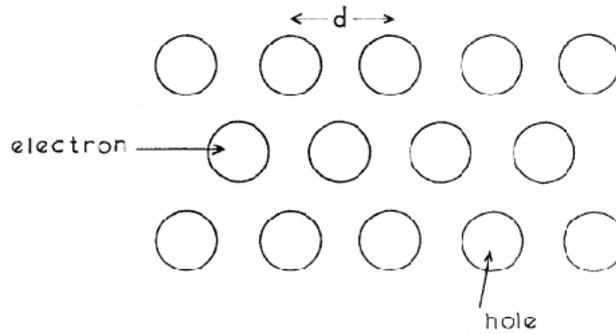
Peierls [43] percebeu que o comportamento isolante de um certo material poderia ter origem devido o movimento dos elétrons ser obstruído por causa da interação coulombiana entre os mesmos, reforçando o modelo proposto por Mott [33]. Dessa forma, uma nova área de pesquisa acabara de ser lançada para estudos voltados a elétrons fortemente correlacionados, sendo que esta área vem ganhando cada vez mais adeptos até os dias atuais. Uma das questões que a interação entre os elétrons introduz na teoria de bandas é entender como um dado material com banda de energia parcialmente ocupada pode ser um isolante. Outro aspecto importante é entender de que forma um isolante poderia passar a ser um metal.

A partir da segunda metade do século passado, um grande esforço tem sido feito na busca de uma melhor compreensão do papel das correlações entre os elétrons nas propriedades eletrônicas dos sólidos. Quem primeiro introduziu modelos que descrevem de forma teórica um estado isolante através de interação entre elétrons foi Nevill F. Mott [34, 35, 36], de forma que posteriormente estes modelos receberam o seu nome. Mott conseguiu explicar este estado isolante considerando que cada sítio, de uma estrutura de rede, consiste de apenas um orbital eletrônico. Ele dividiu o sistema em uma banda de energia inferior e uma outra banda de energia superior. Sendo que, os elétrons que ocuparam um sítio desocupado compõem a banda inferior e os elétrons que ocuparam um sítio deixado pelo outro elétron compõem a banda superior, de forma que cada sítio tenha apenas um elétron. Um sistema é isolante, quando a banda de energia inferior estiver totalmente ocupada.

Numa estrutura de rede de um sólido cristalino se não existir interação entre os elétrons, então há apenas um espaçamento de comprimento  $d$  nesta rede, como mostra a Figura 2.4. Entretanto, o raio de Bohr  $a_B$  surge como um novo espaçamento em consequência da interação elétron-elétron, sendo que este é o raio de Bohr da interação coulombiana. Através do raio de Bohr, Mott considera que:

- Se  $d \gg a_B$ , então tem-se um isolante;
- Se  $d \ll a_B$ , então tem-se um metal.

Figura 2.4: Representação esquemática de uma rede cristalina com átomos que consistem de somente um único elétron.



Fonte: Mott,1968 [37]

Mas devendo existir um ponto crítico em  $d = d_0$  onde a transição metal isolante ocorra à temperatura zero, de forma que:

- quando  $d < d_0$ , temos um metal;
- quando  $d > d_0$ , temos um isolante.

Nevill F. Mott [37] estudou estes efeitos a partir da relação entre a energia de ionização  $I$  e a afinidade dos elétrons num átomo de uma rede cristalina  $E$  que pode ser expressa da seguinte forma

$$\epsilon = I - E, \quad (2.43)$$

se não houver interação entre os elétrons, então

$$\epsilon = 0, \quad (2.44)$$

ou seja,

$$I = E. \quad (2.45)$$

Na presença de interação entre os elétrons, tem-se

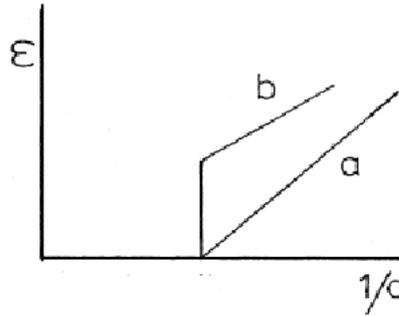
$$I - E > 0 \quad (2.46)$$

com

$$I > E. \quad (2.47)$$

A Figura 2.5 mostra o comportamento das duas maneiras de  $\epsilon$  em função de  $\frac{1}{d}$  como sugerido por Mott:

Figura 2.5: a e b representam previsões diferentes em torno das alterações energéticas devido a transição de ativação.



Fonte: Mott, 1968 [37]

À medida que  $\epsilon$  diminui, *a* apresenta uma transição de fase contínua. Ao passo que,  $\epsilon$  diminui *b* descreve uma transição de fase de primeira ordem. N. Mott [33] explicou que esta descontinuidade era devido a energia de ligação discreta que ocorria em consequência da atração Coulombiana entre o elétron e o buraco, sendo este tipo energia, maior que a energia de ativação da fase isolante.

Para um melhor entendimento da transição metal-isolante de Mott, vamos considerar um sistema composto por  $N$  átomos com apenas um elétron condução em cada átomo. De forma que, a energia média de um elétron localizado sobre um único orbital é a energia de ligação entre o orbital e o elétron que será escolhida como sendo igual a zero. Para o caso cristalino, estes  $N$  elétrons vão dar origem a uma banda de largura  $B$ , como mostra a Figura 2.6.

A banda de energia gerada pelos  $N$  elétrons, tem um intervalo que varia entre  $-B/2$  e  $B/2$ , uma vez que a energia média de um elétron de valência tem valor aproximado a  $-B/2$  [45]. Como num material metálico os elétrons têm grande mobilidade e podem ocupar qualquer orbital deste sistema, então as duplas ocupações são possibilidades de criação.

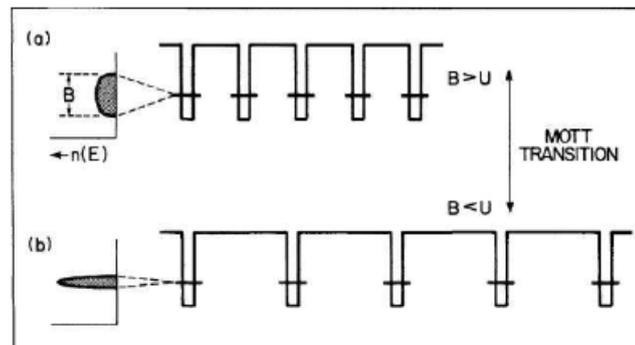
Para que dois elétrons ocupem o mesmo orbital atômico é necessário de uma energia dada por

$$U = \left\langle \frac{e^2}{r_{12}} \right\rangle, \quad (2.48)$$

sendo  $U$  o custo de energia para que um mesmo orbital seja ocupado por dois elétrons,  $r_{12}$  representa a distância entre o elétron 1 e o elétron 2 na órbita do átomo e a carga elementar do elétron é representada por  $e$ .

A probabilidade de encontrar um orbital desocupado, contando com um ou dois elétrons são  $\frac{1}{4}$ ,  $\frac{1}{2}$  e  $\frac{1}{4}$  respectivamente.  $\frac{U}{4}$  representa o custo da energia média para o caso

Figura 2.6: Exposição esquemática para a transição de Mott. (a) Quando a interação entre os elétrons  $U$  é satisfatoriamente menor que a largura da banda de energia num cristal, tem-se um sistema com energia favorável como num metal. (b) Quando a interação entre os elétrons  $U$  é satisfatoriamente maior que a largura da banda de energia num cristal, tem-se um sistema com baixa mobilidade dos elétrons que caracteriza um isolante.



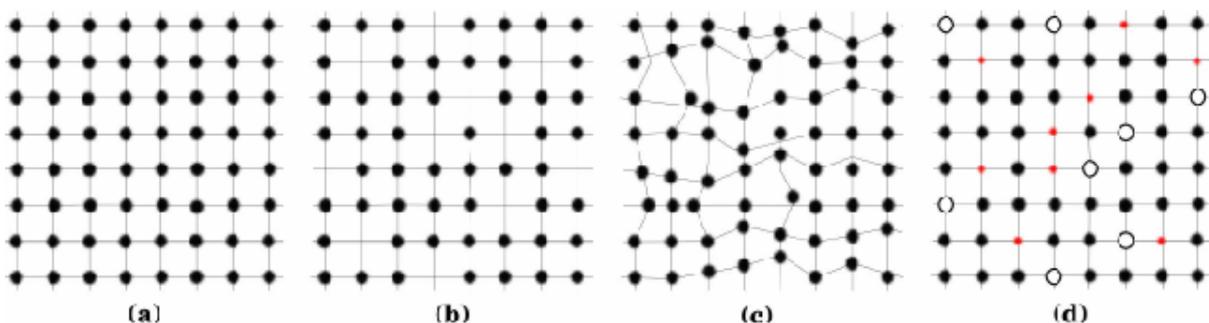
Fonte: R. Zallen, 1983 [45]

das duas ocupações. Quando a energia média de um elétron localizado for menor que  $-\frac{B}{4} + \frac{U}{4}$ , então este é um caso na qual a configuração energética é desfavorável. Onde  $-\frac{B}{4} + \frac{U}{4}$  é a energia média de um elétron delocalizado. A competição entre a diminuição média da energia ( $\frac{B}{4}$ ) é motivada pela delocalização e da correlação ( $\frac{U}{4}$ ) dos elétrons, de forma que esta competição consiste da transição metal-isolante induzida pela correlação elétron-elétron, como mostra a Figura 2.6. Depois dos estudos destes efeitos, podemos deduzir que a condição de localização induzida por interação elétron-elétron é expressa de forma aproximada por:

$$U > B. \quad (2.49)$$

O modelo teórico de Mott para a transição metal-isolante, descreve os elétrons for-

Figura 2.7: Representação esquemática de uma estrutura quadrada bidimensional com alguns tipos de desordem. a) Representa a rede de um cristal perfeito; b) Representa uma rede com vacâncias; c) Representa uma rede distorcida; d) Representa uma distribuição não periódica de diferentes átomos.



Fonte: W. S. Dias, 2011 [46]

temente correlacionados, porém não leva em conta a desordem que existe nos sólidos reais. Na próxima subseção 2.6.2, vamos descrever a transição metal-isolante em sistemas desordenados, este modelo é conhecido por Modelo de Anderson.

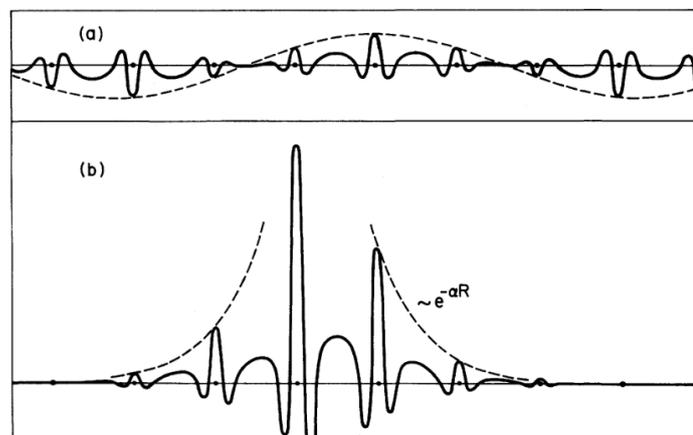
### 2.6.2 Sistemas com desordem e a transição de Anderson

Neste trabalho já descrevemos modelos referentes a transição metal-isolante em sistema cristalino (transição de Bloch) e induzida por correlação elétron-elétron (transição de Mott). Nesta seção vamos inicialmente estudar, qualitativamente, um modelo que considera o efeito da desordem nos sólidos e que pode apresentar uma transição metal-isolante, chamado de transição de Anderson. Em geral os sólidos reais, mesmo os produzidos em laboratório, possuem algum tipo de desordem em sua estrutura. Os materiais que apresentam desordem em sua estrutura são chamados de materiais amorfos. O estudo de sistemas com desordem é de grande relevância para a compreensão das propriedades de transporte eletrônico, de modo que este tratamento nos leva a modelos mais reais. A desordem de um sistema é caracterizado pela distribuição estrutural dos átomos de forma espacial não periódica, ou pela presença de diferentes átomos da rede principal, como mostra a figura 2.7 .

Os estados estacionários de um elétron num material cristalino sem a presença de desordem, podem ser determinados através da equação de Schrödinger [47]:

$$H\psi = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right] \psi = E\psi, \quad (2.50)$$

Figura 2.8: **Representação do estado eletrônico estendido e localizado:** a) Representa a função de onda no estado estendido na transição de Bloch; (b) Representa a função de onda localizado na transição de Anderson.



Fonte: R. Zallen, 1983 [45]

Tabela 2.1: Exposição esquemática com as transições de Bloch, Mott e Anderson.

| Transição | Função de Onda |               | Energia Característica   | Mudança na Transição M → I   | Localização |
|-----------|----------------|---------------|--|--|-------------|
|           | Lado Metálico  | Lado Isolante |  |  |             |
| Bloch     | Estendida      | Estendida     | Largura de Banda <b>B</b>  | Bandas parcialmente preenchidas<br>↓<br>Bandas completamente preenchidas ou vazias | —           |
| Mott      | Estendida      | Localizada    | Energia de Interação Elétron-Elétron<br>$U \sim \left(\frac{e^2}{r_{ij}}\right)$ | Localização Induzida pela Interação Elétron-Elétron                                | $U > B$     |
| Anderson  | Estendida      | Localizada    | Largura $W$ da Distribuição das energias aleatórias dos sítios                   | Localização Induzida por Desordem  | $W > B$     |

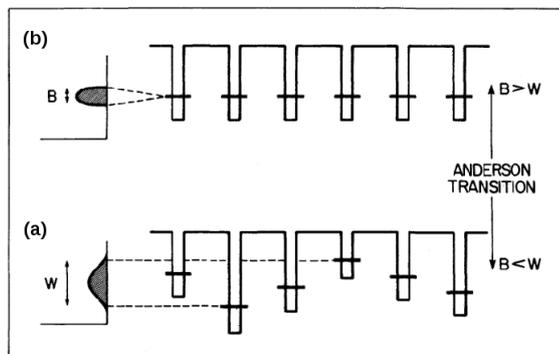
Fonte: W. S Oliveira e R. Zallen, 1983 [44, 45]

com  $U(\mathbf{r})$  representando o potencial periódico e que pode ser expresso por

$$U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r} + \mathbf{R}), \quad (2.51)$$

onde  $\mathbf{R}$  é o vetor de Bravais típico da rede. As soluções da equação 2.50, representadas pelas funções de onda de Bloch, são estendidas em todo espaço, dessa forma, o elétron pode se locomover por toda a estrutura da rede conduzindo energia e carga. Já as energias correspondentes são divididas em bandas que são separadas por *gap* de energia, região que não apresenta estados eletrônicos. Philip. W. Anderson [7] notou que a função de onda pode sofrer uma transição localizada-estendida. Em uma pequena região da rede, as amplitudes de uma função de onda localizada têm valores não nulos. De forma qualitativa, vamos descrever a natureza da desordem quanto aos estados eletrônicos localizados. A desordem está relacionada a estrutura da rede de um material cristalino, caracterizando uma distribuição atômica espacial não periódica. Considerando o modelo dos elétrons independentes com  $U(\mathbf{r}) = 0$ , temos para este caso um problema de elétron livre. Ao introduzir apenas uma barreira de potencial, uma onda incidente ao deparar-se com a mesma, será parte refletida e parte transmitida. Se esta onda incidente agora deparar-se com várias barreiras de potencial, então será parcialmente refletida várias vezes. Estas várias barreiras de potencial produzem ondas incidentes, bem como, ondas refletidas que devem admitir interferências, podendo ser construtivas ou destrutivas. Se houver potenciais aleatórios representados por barreiras de potencial em posições aleatórias na estrutura da rede, a função de onda será parcialmente refletida várias vezes sem coerência de fase. Conseqüentemente, ocorrerá uma localização do tipo exponencial da função de onda in-

Figura 2.9: Representação esquemática da transição de Anderson. Em (a) tem-se um potencial aleatório com uma largura da desordem  $W$ . Já em (b) tem-se um potencial cristalino com  $B$  representado a largura da banda, ao qual é permitida a o elétron. A existência da localização dar-se ao momento em que  $W$  é maior que  $B$ .



Fonte: R. Zallen, 1983 [45]

duzida por interferências destrutivas, como mostra a figura 2.8. Este é o caso em que a desordem do sistema é forte. Porém, se a desordem do sistema for fraca, a função de onda permanece estendida em todo o sistema, mas a medida que múltiplas reflexões ocorrem, a função de onda perde coerência de fase. Segundo B. Kramer e A. MacKinnon [8], a função de onda tem um decaimento tipo exponencial em grandes distâncias se comparado a escalas interatômica.

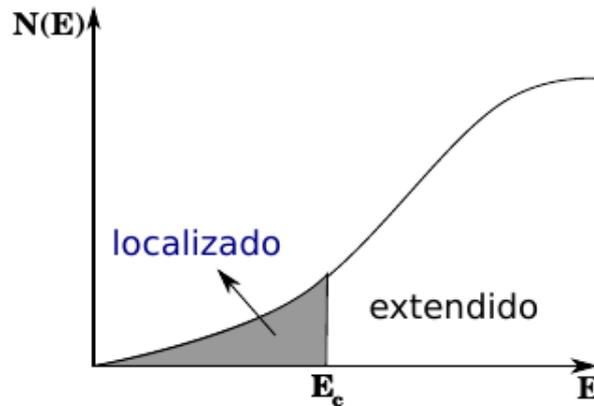
Uma das transições mais relevante para os sólidos amorfos é a transição de Anderson [7]. Aqui, a fase isolante da transição não corresponde ao estado estendido em bandas de energia ocupadas, como na transição de Bloch mostrada na figura 2.8 (a), mas sim em estados representados por elétrons localizados, como exposto na figura 2.8 (b). A função de onda fica localizada em torno do centro que é composto por alguns átomos, e tem uma amplitude insignificante em outras posições do sólido. Isto é, fora desta pequena região a amplitude espacial decai exponencialmente com a distância. Este comportamento é mostrado na figura 2.8 (b), que decai com  $e^{-\alpha R}$  em grandes distâncias  $R$  do centro da localização, e  $\alpha$  é um parâmetro que representa o inverso do comprimento da localização.

A tabela 2.1 mostra os três modelos de transição metal-isolante já mencionados neste trabalho. Apenas o primeiro modelo de transição é descrito na teoria de bandas em sólidos cristalinos.

O mecanismo da transição de Anderson pode ser observada na figura 2.9. Os poços de potenciais representam os sítios atômicos que apresentam-se com mesma separação espacial. A intensidade dos potenciais varia de forma aleatória e tem distribuição de probabilidade com largura  $W$ , como mostra a figura 2.9 (b). Já a figura 2.9 (a) mostra uma representação para o caso sem desordem, onde a banda de energias possíveis tem largura  $B$ .

Philip W. Anderson em 1958 [7] mostrou que se a relação  $\frac{W}{B}$ , parâmetro de desordem, for suficientemente grande, então todos os estados da banda de valência são localizados.

Figura 2.10: Ilustração da banda da densidade de energia, na qual apresenta uma região de estados localizados e uma outra região com estados estendidos, separados pelo mobility edge  $E_c$ .



Fonte: W. S. Dias, 2011 [46]

A existência da localização induzida por desordem pode ser dado através do critério qualitativo em que  $W > B$ . Porém, se a desordem for intermediária ( $\frac{W}{B} \approx 1$ ), então podemos ter estados localizados e estendidos dentro da banda. Já para o caso em que  $W = 0$ , temos como resultado as funções de Bloch estendidas em toda rede. O valor da energia dentro da banda que demarca a fronteira entre os estados localizados e estendidos é chamado de *mobility edges* [48]. A existência da *mobility edges* implica na possibilidade de transições entre as fases isolante (estados localizados) e metálica (estados estendidos). Por simplicidade, vamos assumir que existe apenas um *mobility edge*  $E_c$  em um dado sistema eletrônico com desordem: Para  $E < E_c$ , todos os estados são localizados; Para  $E > E_c$ , todos os estados eletrônicos são estendidos, como ilustra a figura 2.10. Quando a energia de Fermi  $E_F$  dos elétrons é menor que a mobility edge ( $E_F < E_c$ ), o sistema encontra-se na fase isolante, uma vez que nenhum estado estendido esteja nas proximidades do nível de Fermi. Supondo que é possível ajustar o grau de desordem no sistema podemos modificar a energia de Fermi de forma que ( $E_F > E_c$ ), desta forma o sistema passa a ser um metal. Esta transição metal-isolante é chamado de transição de Anderson [49]. Vamos apresentar agora uma descrição mais detalhada da teoria de Anderson.

## 2.7 O Modelo de Anderson

O modelo de Anderson [7, 9, 45, 52, 8] é amplamente utilizado nos estudos do fenômeno da localização dos estados eletrônicos em material com desordem. Este modelo é baseado em um hamiltoniano *tight binding*. Este hamiltoniano possui um termo cinético que descreve o *hopping* do elétron entre átomos (sítios) vizinhos e um termo potencial que descreve a energia de ligação do elétron em um dado átomo (sítio) da rede. O hamiltoniano

de Anderson pode escrito como

$$H = \sum_i \epsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{i \neq j} t_{ij} |i\rangle\langle j|, \quad (2.52)$$

onde  $t_{ij}$  representa o *hopping* responsável pela parte cinética entre os sítios  $i$  e  $j$ ,  $\epsilon_i$  é o potencial aleatório no sítio  $i$ .  $|i\rangle$  é o estado que representa o orbital atômico centrado no sítio  $i$ . O parâmetro *hopping*  $t_{ij}$  diminui de forma rápida à medida que a distância entre os sítios  $|i - j|$  aumenta. A energia potencial  $\epsilon_i$  tem valores aleatórios escolhidos dentro do intervalo de largura  $W$ . O parâmetro  $W$  é conhecido como a intensidade ou a largura de desordem do sistema. No modelo de Anderson tridimensional a transição metal-isolante é dada quando  $W = W_c$ , se  $W < W_c$  o sistema encontra-se na fase metálica. De forma que  $W_c$  representa o valor crítico da largura da desordem  $W$ .

O hamiltoniano de Anderson unidimensional (1d) na forma matricial  $N \times N$  pode ser expresso como

$$H = \begin{bmatrix} \epsilon_1 & t_{12} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ t_{21} & \epsilon_2 & t_{23} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & t_{32} & \epsilon_3 & t_{34} & \dots & 0 \\ 0 & 0 & t_{43} & \epsilon_4 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & t_{N-1,N} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & t_{N,N-1} & \epsilon_N \end{bmatrix}.$$

A expansão dos autoestados na base dos orbitais  $|i\rangle$  pode ser representado por

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |i\rangle, \quad (2.53)$$

onde  $c_i$  é a amplitude da função de onda no sítio  $i$ . Podemos calcular os autoestados e as autoenergias através da equação de Schrödinger que é dada por

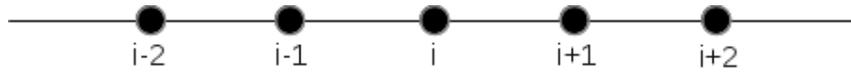
$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle. \quad (2.54)$$

Fazendo uma troca de variáveis no segundo termo e usando um ket  $|i\rangle$ , a expressão 2.52 fica da seguinte forma

$$H|i\rangle = \epsilon_i |i\rangle + \sum_{j \neq i} t_{ji} |j\rangle. \quad (2.55)$$

Combinando as equações 2.53 e 2.54, temos

$$H|\psi\rangle = \sum_i c_i H|i\rangle. \quad (2.56)$$

Figura 2.11: Ilustração esquemática de um sistema unidimensional de sítio  $i$ .

Fonte: autor, 2013

Agora combinando as expressões 2.55 e 2.56, ficamos com

$$H|\psi\rangle = \sum_i \epsilon_i c_i |i\rangle + \sum_{j \neq i} t_{ji} c_j |j\rangle, \quad (2.57)$$

de forma que, ao fazermos uma nova mudança de variável no segundo termo da equação 2.57, temos

$$H|\psi\rangle = \sum_i \left( \epsilon_i c_i + \sum_{i \neq j} t_{ij} c_j \right) |i\rangle. \quad (2.58)$$

Como

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \quad (2.59)$$

então

$$E \sum_i c_i |i\rangle = \sum_i \left( \epsilon_i c_i + \sum_{i \neq j} t_{ij} c_j \right) |i\rangle, \quad (2.60)$$

que acarreta no seguinte resultado

$$E c_i = \epsilon_i c_i + \sum_j t_{ij} c_j. \quad (2.61)$$

Ao considerarmos um sistema unidimensional como ilustrado na figura 2.11, podemos utilizar o *hopping* deste sistema como sendo constante e diferente de zero entre os primeiros vizinhos, dessa forma que a expressão 2.61 apresenta-se como

$$E c_i = \epsilon_i c_i + t \sum_{j=i-1}^{j=i+1} c_j, \quad (2.62)$$

ou ainda

$$E c_i = \epsilon_i c_i + t (c_{i-1} + c_{i+1}). \quad (2.63)$$

Já para o caso de um sistema cristalino, em que não existe desordem ( $W = 0$ ) e com

todas as energias  $\epsilon_i$  iguais, a equação 2.63 com  $\epsilon_i = 0$ , fica da seguinte forma

$$Ec_i = t(c_{i-1} + c_{i+1}). \quad (2.64)$$

Equações com desta forma, pode ter solução do tipo exponencial complexa, dada por

$$c_n = c_0 e^{ink}, \quad (2.65)$$

mas que satisfaz a equação 2.64 se

$$E = 2t \cos(k), \quad (2.66)$$

onde esta relação 2.66 representa a dispersão obtida para o modelo de Bloch, energia potencial  $\epsilon_i = 0$  em cada sítio do sistema unidimensional, que corresponde a banda de energia permitida dada por  $-2t < E < +2t$ . Logo, para este tipo de sistema ( $z = 2$ ) a largura da banda de energia permitida é  $B = 4t$ . De forma geral, esta largura é dada por  $B = 2zt$ , onde  $z$  representa o número de coordenação de uma rede de dimensão  $d$ .

Um caso mais complexo em que  $W$  e  $t$  são não nulos foi estudado por P. Anderson [7]. Ele conseguiu solucionar este problema através da teoria de perturbação. Anderson provou que um sólido que não possui desordem na sua estrutura, tem todos os estados eletrônicos estendidos por todo o sistema, igual a onda de Bloch. Já para um sólido que apresente desordem em sua estrutura, a função de onda pode ser ou não transmitida, a depender de quão grande é a desordem no sistema.

No contexto das propriedades de transporte eletrônico, o modelo de Anderson é bastante utilizado e tem atraído muita atenção durante várias décadas, impulsionado pela descoberta do fenômeno quântico conhecido como localização eletrônica induzida pela desordem. A quantidade de trabalhos nesta área vem aumentando significativamente em consequência da disponibilidade de métodos teórico e computacional, assim como as novas técnicas experimentais.

## 2.8 Medida do grau de localização

A essência de uma transição metal-isolante em um determinado sistema é representado pela alteração da natureza de estendidos ou localizados dos autoestados do hamiltoniano. De forma qualitativa, é fundamental que o caráter de um estado localizado ou estendido seja descrito somente por um número. Por simplicidade, esta descrição pode ser obtida ao resolver a equação de Schrödinger averiguando os autoestados  $|\psi_i\rangle$ , expressa por

$$H|\psi_i\rangle = E|\psi_i\rangle. \quad (2.67)$$

Porém, a existência da desordem no hamiltoniano torna o estudo analítico da equação de Schrödinger mais complicado. Uma forma para tornar este estudo mais simples, é aplicar uma expansão dos autoestados  $|\psi_i\rangle$  nos orbitais atômicos, representado por

$$|\psi_i\rangle = \sum_{j=1}^N c_j^{(i)} |j\rangle, \quad (2.68)$$

na equação de Schrödinger, com isso podemos representar o operador hamiltoniano na forma matricial, diagonalizar  $H$  numericamente na base em estudo e em seguida, avaliar um número que tenha o papel de medir o grau de localização dos autoestados  $|\psi_i\rangle$ . Este número é conhecido como a razão de participação  $\xi$  [8]:

$$\xi = \frac{\sum_j |c_j|^2}{\sum_j |c_j|^4}. \quad (2.69)$$

A compreensão com a qual a participação está relacionada com o grau de localização é dado ao analisar o caso de um sistema puro, na qual todos os autoestados são estendidos com amplitude  $c_j$  constante. O numerador da equação 2.69 é igual a 1, pois dessa forma mantem a normalização dos autoestados do hamiltoniano, assim

$$\sum_j |c_j|^2 = 1, \quad (2.70)$$

onde o somatório nos fornece

$$N|c_j|^2 = 1, \quad (2.71)$$

logo,

$$|c_j| = \frac{1}{\sqrt{N}}. \quad (2.72)$$

Substituindo a expressão 2.72 em 2.69, ficamos com

$$\xi = \frac{1}{\sum_j \frac{1}{N^2}}, \quad (2.73)$$

ou seja,

$$\xi = N. \quad (2.74)$$

Logo, a equação 2.74 mostra que  $\xi$  representa o número de sítios onde as amplitudes  $c_j$  constante da função de onda são não nulas. No limite termodinâmico, onde as funções de onda são localizadas em uma determinada região do espaço,  $\xi$  é finito [8].

Outra ferramenta comum na medida do parâmetro de localização, é dado através do comprimento de localização  $\lambda$ , que pode ser definido por meio da atuação assintótica da função de onda [8, 52]. Esta função de onda apresenta um decaimento tipo exponencial para grandes distâncias, que pode ser expresso por

$$\psi(r) \propto e^{-\frac{|r|}{\lambda}}, \quad (2.75)$$

sendo  $r$  a distância ao centro da localização. O comprimento  $\lambda$  em estados eletrônicos estendidos tende ao infinito ( $\lambda \rightarrow \infty$ ). O comprimento  $\lambda$  pode ser calculado por meio de vários métodos, entre os quais evidenciamos o de grupo de renormalização e o de matriz de transferência, ao qual utilizaremos apenas o último método neste trabalho.

Agora já podemos descrever o formalismo da matriz de transferência unidimensional para demonstrar as evidências analíticas da existência das energias ressonantes em cadeias binárias [79]. Para isto, vamos considerar um modelo *tight binding* unidimensional com desordem somente na diagonal, de forma que o hamiltoniano pode ser expresso por

$$H = \sum_n \epsilon_n |n\rangle \langle n| + t \sum_n [|n\rangle \langle n+1| + |n\rangle \langle n-1|], \quad (2.76)$$

onde  $|n\rangle$  representa o orbital atômico centrado no sítio  $n$  e com  $\epsilon_n$  sendo o potencial aleatório. Combinando uma expansão da função de onda na base discreta, dada por

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle, \quad (2.77)$$

com a equação de Schrödinger, expressa por

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \quad (2.78)$$

ficamos com

$$T(c_{n+1} + c_{n-1}) = (E - \epsilon_n) c_n, \quad (2.79)$$

ou ainda

$$E c_n = \epsilon_n c_n + T(c_{n+1} + c_{n-1}), \quad (2.80)$$

onde  $c_n$  é a amplitude da função de onda no sítio  $n$ .

Utilizando a técnica de matriz de transferência, podemos expressar a equação 2.80 na

forma matricial que pode ser escrita como

$$\begin{pmatrix} c_{n+1} \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{(E-\epsilon_n)}{t_{n,n+1}} & -\frac{t_{n-1,n}}{t_{n,n+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_n \\ c_{n-1} \end{pmatrix}. \quad (2.81)$$

Fazendo uma redefinição de variáveis em 2.81, ficamos com

$$C_{n+1} = T_n C_n, \quad (2.82)$$

sendo que,

$$C_{n+1} = \begin{pmatrix} c_{n+1} \\ c_n \end{pmatrix} \quad (2.83)$$

e  $T_n$  representa a matriz de transferência que é definida como

$$T_n = \begin{pmatrix} \frac{(E-\epsilon_n)}{t_{n,n+1}} & -\frac{t_{n-1,n}}{t_{n,n+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.84)$$

Dessa forma,  $C_n$  pode ser escrito por

$$C_n = T_{n-1} C_{n-1}, \quad (2.85)$$

que substituindo 2.85 em 2.82, temos

$$C_{n+1} = T_n T_{n-1} C_{n-1}. \quad (2.86)$$

Já para  $C_{n-1}$ , temos o seguinte

$$C_{n-1} = T_{n-2} C_{n-2}, \quad (2.87)$$

que ao substituir em 2.86, a expressão fica como

$$C_{n+1} = T_n T_{n-1} T_{n-2} C_{n-2}. \quad (2.88)$$

Logo,  $C_{n+1}$  pode ser obtido de uma forma recursiva. Considerando uma condição inicial na forma

$$C_0 = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_0 \end{pmatrix}, \quad (2.89)$$

podemos escrever a equação 2.82 através de um produtório da matriz de transferência, que pode ser escrita por

$$C_{n+1} = \prod_{l=0}^n T_l C_0. \quad (2.90)$$

O comprimento de localização pode ser definido em termos de  $C_n$  da seguinte forma

$$\lambda^{-1} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln |C_n|. \quad (2.91)$$

Ou, definindo o expoente de Lyapunov como

$$\gamma = \lambda^{-1}, \quad (2.92)$$

temos

$$\gamma = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln |C_n|. \quad (2.93)$$

Um estado eletrônico é localizado se no limite termodinâmico o expoente de Lyapunov for finito, isto se uma função de onda for igualmente finita. Se o expoente  $\gamma$  tender a zero ao tomarmos o limite termodinâmico, então o estado eletrônico é estendido.

É importante salientar que o comportamento dinâmico de um sistema com desordem pode indicar que no sistema há estados estendidos. Considerando o modelo de Anderson unidimensional como exemplo e estabelecendo que no instante de tempo igual a zero ( $t = 0$ ) um elétron é posto no sítio  $m$  de forma que  $|c_m(t = 0)|^2 = 1$ , e  $c_i(t = 0) = 0$  para  $i \neq m$ . A equação de Schrödinger dependente do tempo para este problema pode ser escrita como

$$i\hbar \frac{dc_j(t)}{dt} = \epsilon_j c_j + t_{j-1,j} c_{j-1}(t) + t_{j,j+1} c_{j+1}(t), \quad \text{com } j = 1, 2, \dots, N, \quad (2.94)$$

Vamos analisar  $c_m(t)$  para o caso em que  $t \rightarrow \infty$  [53]. Quando a probabilidade de encontrar o elétron no sítio  $m$ , após decorrido um longo intervalo de tempo, for zero  $|c_m(t \rightarrow \infty)|^2 = 0$ , então o elétron é itinerante pela cadeia (indício de estados eletrônicos estendidos). Já para o fato em que  $c_m(t \rightarrow \infty) \neq 0$ , o elétron não propaga-se por toda a rede e deve ser encontrado somente nas vizinhanças do sítio inicial  $m$ . A quantidade  $|c_m(t)|^2$  é conhecida como a probabilidade de retorno ao ponto de partida. Uma forma de obter  $|c_m(t)|^2$  consiste na resolução numérica do conjunto de equações de movimento usando métodos tradicionais como o método de Runge-Kutta [54, 55, 56]

## 2.9 Teoria de escala na transição de Anderson

Uma grande parte do progresso na compreensão da transição de Anderson só foi possível devido ao surgimento da teoria de escala, proposto inicialmente por Abrahams, Anderson, Licciardello e Ramakrishnan [9]. Baseando-se no trabalho proposto por Thouless, que descreve a condução quântica em fios finos [57]. A ideia básica desta teoria de escala é determinada pela condutância generalizada  $g$ , única quantidade característica, exercendo o controle na transição do estado eletrônico localizado para o estendido na temperatura

absoluta  $T = 0$ . A teoria de escala foi aplicada em uma reformulação do modelo de Anderson [58], seguindo os seguintes conceitos:

- Os sítios  $i$  do Modelo de Anderson corresponderão a um "bloco" com volume  $L^d$  composto por vários sítios, com  $L$  representando o lado do "bloco" e  $d$  a dimensão.
- As energias  $W$  e  $t$  características do modelo de Anderson são mapeadas em outras duas grandezas. A largura da desordem  $W$  corresponderá ao espaçamento médio entre os níveis de energia no interior do bloco  $\Delta E$  e deve satisfazer a seguinte relação

$$\Delta E \approx \frac{W}{N}. \quad (2.95)$$

O *hopping*  $t$  corresponderá ao deslocamento  $\delta E$  causado pelas alterações nas condições de contorno do bloco;

- A razão entre a largura da desordem  $W$  e o *hopping*  $t$  ( $\frac{W}{t}$ ) do modelo de Anderson é mapeado na razão entre o espaçamento médio entre os níveis de energia  $\Delta E$  e o deslocamento  $\delta E$  ( $\frac{\Delta E}{\delta E}$ ), que representa uma característica de parâmetro da desordem.

Considerando que um elétron executa um movimento Browniano no interior de uma caixa, podemos escrever que

$$T_D = \frac{L^2}{D}, \quad (2.96)$$

com  $D$  representando a constante de difusão e  $T_D$  é o tempo necessário para um pacote de onda eletrônica difundir até os contornos de uma caixa de lado  $L$ . Por meio de um argumento eurístico, fundado no princípio da incerteza ( $\delta T \delta E \geq \hbar$ ), temos uma expressão dada por

$$\delta E = \frac{\hbar}{T_D}. \quad (2.97)$$

Através da relação de Einstein entre a condutância  $\sigma$  e as propriedades de difusão, temos

$$\sigma = e^2 D n(E), \quad (2.98)$$

onde  $n(E)$  representa a densidade de estados média. Combinando as equações 2.96, 2.97 e 2.98, ficamos com

$$\delta E = \frac{\sigma \hbar}{e^2 L^2 n(E)}, \quad (2.99)$$

isto é, no limite macroscópico podemos expressar  $\delta E$  em função da condutividade  $\sigma$ . Já a

densidade de estados média  $n(E)$  pode ser escrita em função do espaçamento médio entre os níveis de energia  $\Delta E$ , da seguinte forma

$$n(E) = \frac{1}{L^d \Delta E}. \quad (2.100)$$

Substituindo 2.100 em 2.99, temos

$$\frac{\delta E}{\Delta E} = \frac{\hbar \sigma}{e^2} L^{d-2}, \quad (2.101)$$

onde a razão  $\frac{\delta E}{\Delta E}$  agora pode ser representada como sendo uma medida na intensidade da desordem no sistema, conforme a relação  $\frac{W}{t}$  do modelo de Anderson original. De forma que, os estados eletrônicos estendidos e localizados estão vinculados a sensibilidade dos níveis de energia à mudança nas condições de contorno, a saber que:

- Os estados eletrônicos estendidos são sensíveis à mudança nas condições de contorno, isto é  $\delta E > \Delta E$ ;
- Os estados eletrônicos localizados não são sensíveis à mudança nas condições de contorno, isto é  $\delta E < \Delta E$ .

Podemos definir a condutância generalizada  $g(L)$  da seguinte forma

$$g(L) \equiv \frac{\delta E}{\Delta E}. \quad (2.102)$$

Substituindo 2.102 em 2.101, ficamos com a seguinte equação

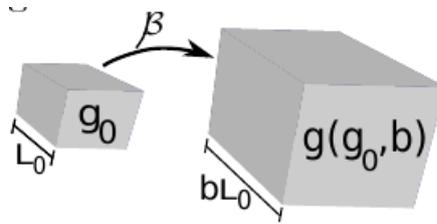
$$g(L) = \frac{\sigma \hbar}{e^2} L^{d-2}. \quad (2.103)$$

A expressão 2.103 é utilizada somente para estados estendidos no limite macroscópico, de forma que a expressão 2.99 seja satisfeita neste limite. A condutância  $\sigma$  de um cubo de lado  $L$  com  $d$  dimensões é representado por  $\sigma L^{d-2}$ . Já  $g(L)$  pode ser representado como a condutância generalizada expressa em termos de unidades como  $\frac{e^2}{h}$ . Além disto,  $g(L)$  é uma função de escala que será examinada de acordo com a sua dependência em relação ao comprimento de escala aplicada. Agora vamos considerar  $g_0$  como sendo a condutância generalizada de um sistema constituído por caixas acopladas com volume  $L_0^d$ , dessa forma, podemos expressar  $g_0$  da seguinte forma

$$g_0 = g(L_0) = \frac{\delta E(L_0)}{\Delta E(L_0)}. \quad (2.104)$$

Dada uma condutância generalizada  $g_0$  numa escala de comprimento  $L_0$ , a teoria de escala assume que podemos obter uma condutância generalizada  $g$  numa escala de comprimento

Figura 2.12: Ilustração da teoria de escala da condutância generalizada com o fator de escala  $b$ .



Fonte: W. S. Dias, 2011 [46]

maior, que pode ser dada por

$$L = bL_0, \quad (2.105)$$

como ilustra a figura 2.12. Nesta nova escala de comprimento  $bL_0$ , a condutância generalizada  $g$  é inteiramente determinada pelas quantidades  $g_0$  e  $b$ , de modo que este último representa o fator de escala.

É conveniente averiguar uma função de escala  $\beta$  que apresenta limites assintóticos ao estudar-se  $\ln g$ . Numa transição, a função de escala  $\beta$  tende a zero, pois no ponto crítico o comprimento de correlação torna-se infinito (comprimento de localização  $\lambda$ ). Ou seja, a função de escala  $\beta$  é finita mesmo com o comprimento de escala tendendo ao infinito, embora longe do ponto crítico o comprimento de correlação diminua. Estes comportamentos são conhecidos, na teoria de escala, como ponto fixo instável e que pode ser expresso por

$$\beta(g) = \frac{d \ln g(L)}{d \ln L}. \quad (2.106)$$

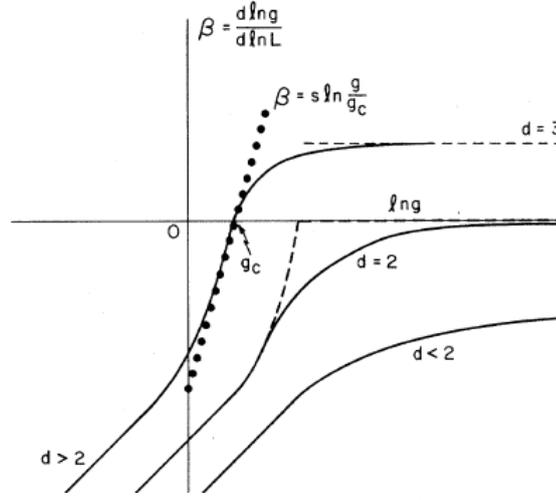
Podemos notar da expressão 2.106, que quando  $\beta$  for positivo ( $\beta > 0$ ),  $L$  cresce com o crescimento de  $g$ , enquanto que para  $\beta$  negativo ( $\beta < 0$ ),  $g$  decresce com o crescimento de  $L$ . De forma qualitativa, a figura 2.13 ilustra o comportamento de  $\beta(g)$  para  $d = 1, 2$  e 3. O comportamento mostrado na figura 2.13 foi proposto por Abrahams, Anderson, Licciardello e Ramakrishnan [9]. Aplicando os limites assintóticos  $g \rightarrow 0$  e  $g \rightarrow \infty$  na expressão 2.106, podemos fazer uma melhor análise do comportamento qualitativo da função  $\beta(g)$  mostrado na figura 2.13.

Para uma condutância generalizada  $g$  suficientemente grande ( $g \rightarrow \infty$ ), isto é, no limite de um forte acoplamento e um baixo grau de desordem, a função  $g(L)$  é dada pela teoria macroscópica de Thouless. Averiguando a expressão 2.106, temos

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \beta(g) \approx d - 2, \quad (2.107)$$

a saber que,  $g$  aumenta com o crescimento de  $L$ , como podemos notar na equação 2.103.

Figura 2.13: Representação qualitativa do comportamento da função de escala ( $\beta(g)$ ) em relação as dimensões  $d = 1, 2$  e  $3$  perante a teoria de escala mostrada por [9].



Fonte: Abrahams , 1979 [9]

Dessa forma,  $\beta(g)$  tem comportamento mostrado na figura 2.13 e pode ser avaliado da seguinte forma:

- Para  $d = 3$ ,  $\beta(g \rightarrow \infty) \approx +1$ ;
- Para  $d = 2$ ,  $\beta(g \rightarrow \infty) \approx 0$ ;
- Para  $d = 1$ ,  $\beta(g \rightarrow \infty) \approx -1$ .

Para o caso em que a condutância seja suficientemente pequena ( $g \rightarrow 0$ ), isto é, no limite de uma forte desordem e um fraco acoplamento, o teorema de Anderson prevê que os estados eletrônicos estão localizados e tem um decaimento exponencial com a distância. A amplitude da função de onda no contorno de uma caixa de tamanho linear  $L$  de um elétron localizado nesta caixa é da ordem de  $e^{-\gamma L}$ , com  $\gamma$  representando o inverso do comprimento de localização e é conhecido como expoente de Lyapunov. O acoplamento entre as caixas também tem um decaimento exponencial com  $L$ , de forma que

$$g(L) \propto e^{-\gamma L}. \quad (2.108)$$

Estudando a equação 2.106 no limite em que  $g \rightarrow 0$ , temos

$$\lim_{g \rightarrow 0} \beta(g) \approx \ln g. \quad (2.109)$$

A medida que  $g$  se aproxima de zero,  $\beta(g)$  se aproxima de  $-\infty$  independentemente da dimensão. Considerando que a função  $\beta(g)$  tenha uma evolução lenta e monoatômica

entre os limites assintótico  $g \rightarrow 0$  e  $g \rightarrow \infty$ , então é notório que nosso estudo reproduz o comportamento qualitativo da figura 2.13. Ademais, o comportamento de  $\beta(g)$ , mostrado na figura 2.13, nos mostra que a transição de Anderson tem dependência com a dimensão do sistema. De forma que, não há transição metal-isolante em  $1d$  e  $2d$ , com a condutividade tendendo a zero ( $g \rightarrow 0$ ) quando  $L \rightarrow \infty$ . Já para um sistema em  $3d$  existe a transição metal-isolante. Isto é, há um ponto crítico  $g_c$  que separa a fase isolante ( $\beta < 0$ ) da fase metálica ( $\beta > 0$ ). Um estudo detalhado sobre o ponto crítico  $g_c$  e a região nas proximidades do mesmo é mostrado com detalhes na referência [58].

A teoria de um parâmetro de escala deriva um comportamento crítico sobre a transição metal-isolante que é compreendido através das funções de escalas perante as vizinhanças entre o ponto crítico e o ponto crítico propriamente dito. Especificamente, é estudado a forma com a qual a função  $\beta$  comporta-se em  $g = g_c$  e a eventualidade de uma ocorrência ou não da transição de Anderson. Diante destes fatos, é de grande relevância a compreensão do conceito de expoentes críticos, que são responsáveis pelo comportamento das funções na região crítica. A condutividade em uma corrente contínua  $\sigma_{DC}$  e o comprimento de localização  $\lambda$  em conformidade às teorias de transições de fase de segunda ordem, nas proximidades da energia crítica de transição (mobility edge) tem um comportamento tipo lei de potência, que pode ser expresso por

$$\sigma_{DC} \propto (E - E_c)^s \quad (2.110)$$

$$\lambda \propto (E - E_c)^{-\nu}, \quad (2.111)$$

onde  $s$  e  $\nu$  representam os expoentes críticos de condutividade e de localização, respectivamente. Estes expoentes são responsáveis por descrever o comportamento da condutividade e do comprimento de localização em torno do mobility edge  $E_c$ . A estimativa para o qual  $s = \nu = 1$ , foi obtido através de procedimentos numéricos com a utilização de uma expansão em  $d + \epsilon$  por Wegner [59], assim como também por técnicas de escala diagramática por Vollhard e Wölfle[8]. Recentemente, alguns trabalhos têm destacado-se devido a contribuições significativas voltadas à obtenção do expoente crítico com maior precisão numérica [60, 61, 62, 63].

Os estudos voltados a teoria de escala não levam em conta as interações entre as partículas. A observação de uma transição metal-isolante sobre uma superfície de silício, que é um sistema com representação espacial bidimensional com interação forte e fraca na desordem com a ausência de acoplamento spin-órbita, foi proposto inicialmente por T. N. Zavaritskaya e É. I. Zavaritskaya [64], de forma que a transição foi ainda confirmada em diferentes materiais por S. V. Kravchenko e M. P. Sarachik [65]. Além disso, atualmente a transição supercondutor-isolante de um sistema com desordem bidimensional tem chamado bastante atenção, devido a um conjunto sequencial de experimentos de transporte surpreendente e intrigante, especialmente na fase isolante da transição [66, 67]. Apesar

da existência e do desenvolvimento de muitos trabalhos teóricos voltados a esta área de pesquisa, ainda há necessidade de uma melhor compreensão à natureza destas transições. Para solucionar os problemas descritos nesta seção devemos estudar uma teoria de localização que considere interações entre as partículas.

## 2.10 Desordem correlacionada no modelo de Anderson

A existência dos estados eletrônicos localizados em 1d e 2d é prevista pela teoria de escala do modelo de Anderson original, para qualquer que seja a quantidade de desordem, e em sistemas 3d faz a descrição de uma transição metal-isolante (transição de Anderson) para um determinado valor crítico da intensidade da desordem  $W_c$ . Georgios Theodorou e Morrel H. Cohen propuseram em 1976 um modelo *tight binding* unidimensional com amplitudes de *hopping* aleatórias que mostra uma energia crítica no centro da banda, onde a função de onda encontra-se no estado estendido [69]. Em casos como este, a função de onda com uma taxa de decaimento  $\lambda$ , apresenta um comportamento assintótico  $\psi(r) \propto e^{-\lambda\sqrt{r}}$ , como mostra o trabalho proposto por Fleishman e Licciardello em 1977 [70]. Dessa forma, mesmo com comprimento de localização divergindo, o coeficiente de transmissão, que tem relação com a condutividade  $\sigma$ , tende a zero, então este estado deve ser levado em conta como sendo localizado [71]. David H. Dunlap e colaboradores investigaram no final da década de oitenta e início da década de noventa modelos com correlações tipo dímero na desordem. Eles chegaram a conclusão de que um pacote de onda eletrônica, que esteja a princípio localizada, pode sofrer uma deslocalização [15] devido a existência de ressonâncias dentro da banda. Na mesma época, 1989, J. C. Flores [72] apresentou uma variante do hamiltoniano de Anderson unidimensional com correlações entre a amplitude de *hopping* e o potencial aleatório. Ele mostrou a existência de uma energia crítica  $E_c$ , onde o estado eletrônico permanece estendido.

Na natureza, existem muitos processos estocásticos que resultam em sequências aleatórias com correlações de longo alcance [83]. A densidade espectral neste tipo de sistema pode ser expressa como lei de potência na forma  $S(k) \propto \frac{1}{k^\alpha}$ , com  $S(k)$  representando a transformada de Fourier da função de correlação de dois pontos  $\langle \epsilon_i \epsilon_{i+l} \rangle$  e  $k$  é o vetor de onda vinculado à propagação de ondas na rede. Recentemente foram feitos vários estudos referente aos efeitos vinculados com a presença de correlações de longo alcance em sistemas desordenados. Russ *at al* em 1998 [85] analisaram um modelo de Anderson unidimensional com correlação de longo alcance na desordem, onde as energias dos sítios apresentam uma função de correlação tipo  $C(l) \propto \langle \epsilon_i \epsilon_{i+l} \rangle \propto l^{-\gamma}$ , sendo  $\gamma$  uma constante positiva. Eles mostraram que para  $\gamma$  positivo todos os estados eletrônicos são localizados, porém o comprimento de localização diverge para  $\gamma$  tendendo a zero ( $\gamma \rightarrow 0$ ). No mesmo ano, 1998, F. A. B. F. Moura e M. L. Lyra [12] analisaram um modelo de Anderson em uma dimensão com correlações, induzida por desordem, de longo alcance na diagonal do

hamiltoniano. Neste modelo, para aplicar as correlações de longo alcance, as energias ou os potenciais dos sítios foram escolhidos como sendo um movimento Browniano, de forma que a densidade espectral tem a seguinte forma

$$S(k) \propto \frac{1}{k^\alpha}, \quad (2.112)$$

com  $\alpha$  sendo o parâmetro que controla o grau de correlação na sequência e  $S(k)$  é a transformada de Fourier da função de correlação de dois pontos  $\langle \epsilon_n \epsilon_m \rangle$ . Os autores, através da técnica de grupo de renormalização, mostraram que sistema deste tipo pode apresentar uma fase de estados eletrônicos estendidos no centro da banda de energia se  $\alpha > 2$ . Já para  $\alpha < 2$  todos os estados permanecem localizados. De forma que, esta foi a primeira vez que uma verdadeira transição metal-isolante em sistemas desordenados foi descoberto.

Neste trabalho de mestrado vamos apresentar um estudo sobre os efeitos de correlações tipo exponencial alongada na distribuição de desordem. Vamos investigar um hamiltoniano de Anderson  $1d$  onde a desordem diagonal apresenta correlações do tipo  $C(r) \propto e^{-r^\gamma/\zeta}$  onde  $\gamma$  e  $\zeta$  são constantes que controlam o grau de correlação na distribuição de desordem. Vamos estudar detalhadamente as propriedades de transporte neste modelo bem como investigar o papel destas correlações nas propriedades de absorção óptica.

# 3

## ESPECTRO DE ABSORÇÃO E LOCALIZAÇÃO EM SISTEMAS COM CORRELAÇÕES TIPO EXPONENCIAL ALONGADA NA DISTRIBUIÇÃO DE DESORDEM

### 3.1 Introdução

Nos últimos anos, um problema que tem despertado um grande interesse dentro do contexto da física da matéria condensada é compreender o efeito da desordem correlacionada sobre as propriedades ópticas e a natureza dos autoestados [27, 28, 30, 31, 32, 29]. Do ponto de vista das propriedades ópticas, é conhecido que a espectroscopia óptica falha na detecção de transições localização-deslocalização. No entanto, em [30], foi mostrado através de um formalismo numérico um comportamento anômalo do espectro de absorção em uma estrutura  $1d$  com correlação de longo alcance na desordem diagonal. Desta forma, pela primeira vez uma propriedade óptica apareceu como uma ferramenta espectroscópica para monitorar a transição de Anderson. Além disso, na referência [31] um espectro de absorção de duplo-pico foi numericamente observado em estrutura  $1d$  com correlação de longo alcance na desordem fora da diagonal. Em [32], um estudo detalhado sobre as propriedades ópticas em modelos  $1d$  com uma distribuição de desordem tipo Lévy de cauda longa (heavy-tailed). Os autores encontraram um alargamento na banda de absorção óptica e uma escala não universal do comprimento de localização na distribuição dos éxcitons. O dimensionamento da largura de banda de absorção óptica e a não universalidade do comprimento localização dentro de modelos com distribuição de desordem tipo Lévy foi revisto em [29].

Neste capítulo, vamos analisar de forma numérica a dinâmica de apenas um elétron em um modelo unidimensional com correlações exponenciais alongadas na distribuição da desordem diagonal. Através dos efeitos apresentados por causa desta desordem correlacionada no sistema, estudaremos com detalhe os aspectos de localização e o espectro da absorção óptica. De forma que, vamos aplicar um formalismo ao qual seja possível fornecer uma estimativa precisa para a dependência das propriedades de localização com as correlações intrínsecas na distribuição da desordem. Com isso, notaremos que os resultados obtidos referentes aos espectros de absorção óptica mostrará uma dependência

bastante interessante do perfil de absorção com a desordem correlacionada apresentada pelo sistema. E por fim, mostraremos que os resultados obtidos neste capítulo indica que à medida que distribuição da desordem tende a ficar mais correlacionada a intensidade da absorção tende a diminuir. Explicaremos este comportamento de forma detalhada com a utilização de argumentos heurísticos.

### 3.2 Modelo de Anderson com correlação exponencial alongada

Para darmos início aos estudos das propriedades de localização referente a correlações exponenciais alongadas, consideraremos um hamiltoniano *tight binding* para um elétron com distribuição da desordem  $\epsilon_n$ , definido por [14]:

$$H = \sum_{n=1}^N \epsilon_n |n\rangle \langle n| + t \sum_{\langle n,m \rangle} [|n\rangle \langle m|] , \quad (3.1)$$

Onde  $t$  representa o termo cinético que descreve o *hopping* do elétron entre os sítios vizinhos,  $\epsilon_n$  é o potencial que descreve a energia de ligação do elétron em um dado sítio da rede,  $|n\rangle$  representa o estado localizado de Wannier no sítio  $n$  e  $\sum_{\langle n,m \rangle}$  representa o soma de pares dos vizinhos mais próximos. Para este estudo, assumiremos a energia de *hopping*  $t$  como sendo unitária ( $t = 1$ ). Em nosso estudo, vamos considerar os sistemas com correlações tipo exponencial alongada na distribuição da desordem atômica. O potencial  $\epsilon_n$  será gerado utilizando um formalismo descrito a seguir: Inicialmente vamos calcular a sequência  $E_n$  definida pela seguinte expressão:

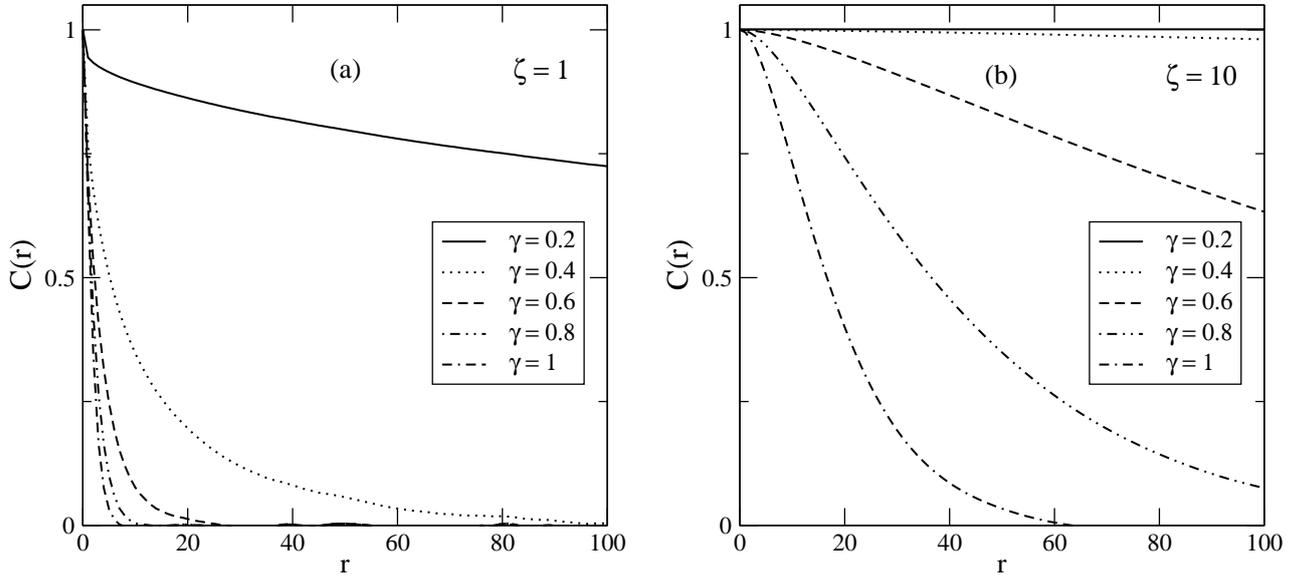
$$E_n = \sum_{m=1}^N \eta_m * \exp(-|n - m|^\gamma / \zeta) \quad n=1, \dots, N, \quad (3.2)$$

de forma que  $\eta_m$  representa números aleatórios independentes uniformemente distribuído no intervalo  $[-0.5, 0.5]$ ,  $\zeta$  sendo o comprimento de correlação e  $\gamma$  é um parâmetro, assim como  $\zeta$ , que controla a intensidade da correlação na distribuição de desordem. Podemos obter o potencial no sítio  $\epsilon_n$  através da expressão mostrada a seguir:

$$\epsilon_n = \frac{E_n - \langle E_n \rangle}{\sqrt{\langle E_n^2 \rangle - \langle E_n \rangle^2}} \quad n=1, \dots, N. \quad (3.3)$$

Por conseguinte, a distribuição de desordem no sítio  $\epsilon_n$  tem valor médio dado por  $\langle \epsilon_n \rangle = 0$  e desvio padrão fixo  $\left( \sqrt{\langle \epsilon_n^2 \rangle - \langle \epsilon_n \rangle^2} = 1 \right)$ . Para  $\gamma = 1$  e  $\zeta$  tendendo a zero ( $\zeta \rightarrow 0$ ) recupera-se uma distribuição de desordem sem correlação. Já para  $\gamma$  unidade ( $\gamma = 1$ ) e  $0 < \zeta < \infty$  geramos uma distribuição de desordem com correlação exponencial, semelhante ao que foi estudado em [14]. Se  $\gamma$  for diferente de 1 ( $\gamma \neq 1$ ), então temos um novo tipo de correlações sobre a distribuição da desordem no sítio. Para  $\gamma$  tendendo ao infinito ( $\gamma \rightarrow$

Figura 3.1: Para uma cadeia finita com 500000 sítios e  $\gamma = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8$  e 1 (a) Ilustra o comportamento da função de autocorrelação para  $\zeta = 1$ . (b) ilustra o comportamento da função de autocorrelação para  $\zeta = 10$ .



Fonte: Autor, 2013.

$\infty$ ) estamos lidando com uma distribuição de desordem sem correlação no sítio, mesmo para  $\zeta$  grande. Entretanto, para  $(0 < \gamma < 1)$ , mesmo para  $\zeta$  pequeno a distribuição de desordem torna-se substancialmente mais correlacionada. Uma ferramenta importante para estudar algumas propriedades estatísticas das sequências mencionadas é a função de autocorrelação, definida por:

$$C(r) = \left[ \frac{1}{N-r} \right] * \sum_{n=1}^{N-r} \epsilon_n \epsilon_{n+r}, \quad (3.4)$$

sendo que, quanto maior  $C(r)$  menos desordenado é o sistema em estudo.

As figuras 3.4(a) e 3.4(b) ilustram o decaimento tipo exponencial alongada da função de autocorrelação  $C(r)$  sobre a distribuição da desordem produzida pelo formalismo numérico imposto neste trabalho. Para  $\zeta = 1$  a figura 3.4(a) mostra que a função de autocorrelação  $C(r)$ , para alguns valores de  $\gamma$ , tem um decaimento na forma de exponencial alongada mais acentuado em relação ao comportamento que apresenta a figura 3.4(b) com os mesmos valores de  $\gamma$ , mas com  $\zeta = 10$ .

É importante mencionar que as referências [23, 24, 89, 90] descrevem modelos de correlações que têm decaimento tipo exponencial sobre a distribuição de desordem. Analiticamente, em 1999 F. M. Izraïlev e A. A. Krokhin [23] foram os pioneiros no estudo do modelo de Anderson correlacionado exponencialmente na distribuição da desordem. Os autores obtiveram uma expressão analítica, utilizando o método perturbativo, para o comprimento da localização e a ausência do estado estendido no limite de uma desordem fraca. Já o modelo deste trabalho, descreve um elétron se movimentando em um

sistema unidimensional com correlações que decaem tipo exponencial alongada sobre a distribuição de desordem. Além disto, vamos utilizar a diagonalização numérica exata para estudar algumas propriedades como: o número médio da participação e o espectro de absorção óptica do sistema.

### 3.2.1 Propriedades

Através do formalismo da diagonalização exata em todo o hamiltoniano, podemos encontrar os autoestados  $|\Phi(E)\rangle = \sum_{n=1}^N f_n(E)|n\rangle$ . Diante disto, podemos averiguar uma propriedade muito importante para este trabalho, o número de participação que é definido por [?, ?]

$$\xi(E) = \frac{1}{\sum_{n=1}^N f_n^4(E)}, \quad (3.5)$$

onde  $f_n(E)$  representa a amplitude de Wannier associada com a autoenergia  $E$  de uma cadeia composta de  $N$  sítios. Em geral, o número de participação é uma boa estimativa do número de sítios que participam nos autoestados. Para que seja mantida a normalização dos autoestados escrito na base discreta  $|\Phi(E)\rangle = \sum_{n=1}^N f_n(E)|n\rangle$ , fazemos o seguinte

$$\sum_{n=1}^N (f_n)^2 = 1, \quad (3.6)$$

considerando  $f_n$  constante temos

$$f_n = \frac{1}{\sqrt{N}}. \quad (3.7)$$

Substituindo 3.7 em 3.5, obtemos

$$\xi(E) = \frac{1}{\sum_{n=1}^N \left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right)^4} \quad (3.8)$$

$$\xi(E) = \frac{1}{\sum_{n=1}^N \left(\frac{1}{N^2}\right)}$$

$$\xi(E) = N. \quad (3.9)$$

Para estados eletrônicos estendidos,  $\xi$  é proporcional ao número total de sítios  $N$  ( $\xi \propto N$ ), de forma que a razão entre  $\xi$  e  $N$  tende a 1 ( $\frac{\xi}{N} \rightarrow 1$ ). Já para estados eletrônicos localizados,  $\xi$  permanece finito, mas  $N \rightarrow \infty$  de forma que a razão entre  $\xi$  e  $N$  agora tende a zero ( $\frac{\xi}{N} \rightarrow 0$ ).

Uma outra propriedade importante referente a natureza da localização dos vários autoestados estudado neste trabalho, é o espectro de absorção óptico, que vamos descrevê-lo através da utilização do conceito de éxciton de Frenkel.

A absorção óptica em uma transição entre níveis de energia, gera um buraco na banda de valência devido a migração de um elétron para um nível mais energético, em geral é um nível contido na banda de condução. Este efeito produz uma interação atrativa entre o elétron (carga negativa) e o buraco (carga positiva) aumentando, dessa forma, a probabilidade de formação do par elétron-buraco. A formação de um par elétron-buraco neutro é conhecido por éxciton.

Os éxcitons são observados na natureza em dois tipos:

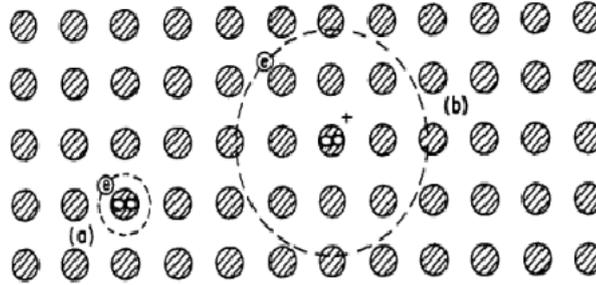
- éxcitons livres ou éxcitons de Wannier-Mott;
- éxcitons de Frenkel.

Aqui, vamos nos concentrar no modelo de éxcitons proposto por Frenkel, pois é através das características deste que vamos estudar as propriedades óptica deste modelo. Os éxcitons de Frenkel apresentam características de localização no átomo ao qual foram gerados e são observados como estados excitados de átomos individuais ao qual estão localizados. A condução dos éxcitons de Frenkel pode ser dado através de saltos entre átomos que compõe o sistema.

O conceito de éxciton em uma excitação eletrônica não condutora (isolante) foi proposto inicialmente em 1931 por J. Frenkel [91, 92]. Este tipo de éxciton é conhecido por éxciton de raio-zero ou simplesmente por éxciton de Frenkel. O nome de raio-zero é por conta de que o tamanho do éxciton é da ordem da escala atômica. Já o estudo do éxciton em propriedades espectral de semicondutores e em sólidos cristalinos foi mostrado inicialmente em 1937 por Gregory H. Wannier [93] e Nevill F. Mott [95]. A figura 3.2(a) apresenta uma ilustração do éxciton de Frenkel, já a figura 3.2(b) ilustra o éxciton de Wannier-Mott. Em 1963 Robert S. Knox [94] mostrou que os dois modelos são limitados à estudos de excitações num cristal no contexto de uma abordagem com duas partículas.

Em linhas gerais, o éxciton é normalmente aplicado para descrever as propriedades de espectroscopia, a dinâmica de excitação eletrônica e o fluxo de energia de estados excitados em sólidos amorfos. Nesta seção 3.2.1, vamos introduzir o conceito de espectro de absorção óptica para na seção 3.3 averiguarmos a existência da transição de Anderson através desta propriedade. Vamos considerar que em cada átomo da rede podemos encontrar uma formação de par elétron-buraco (éxciton de Frenkel). Nesta abordagem a amplitude da função de onda  $f_n$  em um dado sítio  $n$  representará a amplitude de probabilidade de uma transição entre dois níveis ou seja, uma transição por absorção óptica. Em 2005, E. Díaz e colaboradores [30] verificaram a existência de transição de Anderson através da

Figura 3.2: Representação esquemática do (a) éxciton de Frenkel, e do (b) éxciton de Wannier-Mott.



Fonte: R. Knox, 1976 [94]

utilização deste tipo de formalismo. Os autores estudaram o espectro de absorção óptica em sistemas  $1d$  com correlação de longo alcance na distribuição de desordem.

Seguindo às referências [30, 31], podemos estudar a absorção óptica através da seguinte definição

$$A(E) = \frac{1}{N} \sum_{\beta} \delta(E - E_{\beta}) F_{\beta}, \quad (3.10)$$

onde  $E_{\beta}$  representa as autoenergias e  $F_{\beta}$  é a força de oscilação associada com o autovalor  $\beta$  e é expressa como

$$F_{\beta} = \left[ \sum_n f_n(E_{\beta}) \right]^2. \quad (3.11)$$

Para realizar o cálculo numérico da absorção óptica a função  $\delta$  será numericamente definida como:

- $\delta(E - E_{\beta}) = \frac{1}{\Delta E}$  para  $|E - E_{\beta}| < \Delta E$ ;
- $\delta(E - E_{\beta}) = 0$  para outros valores.

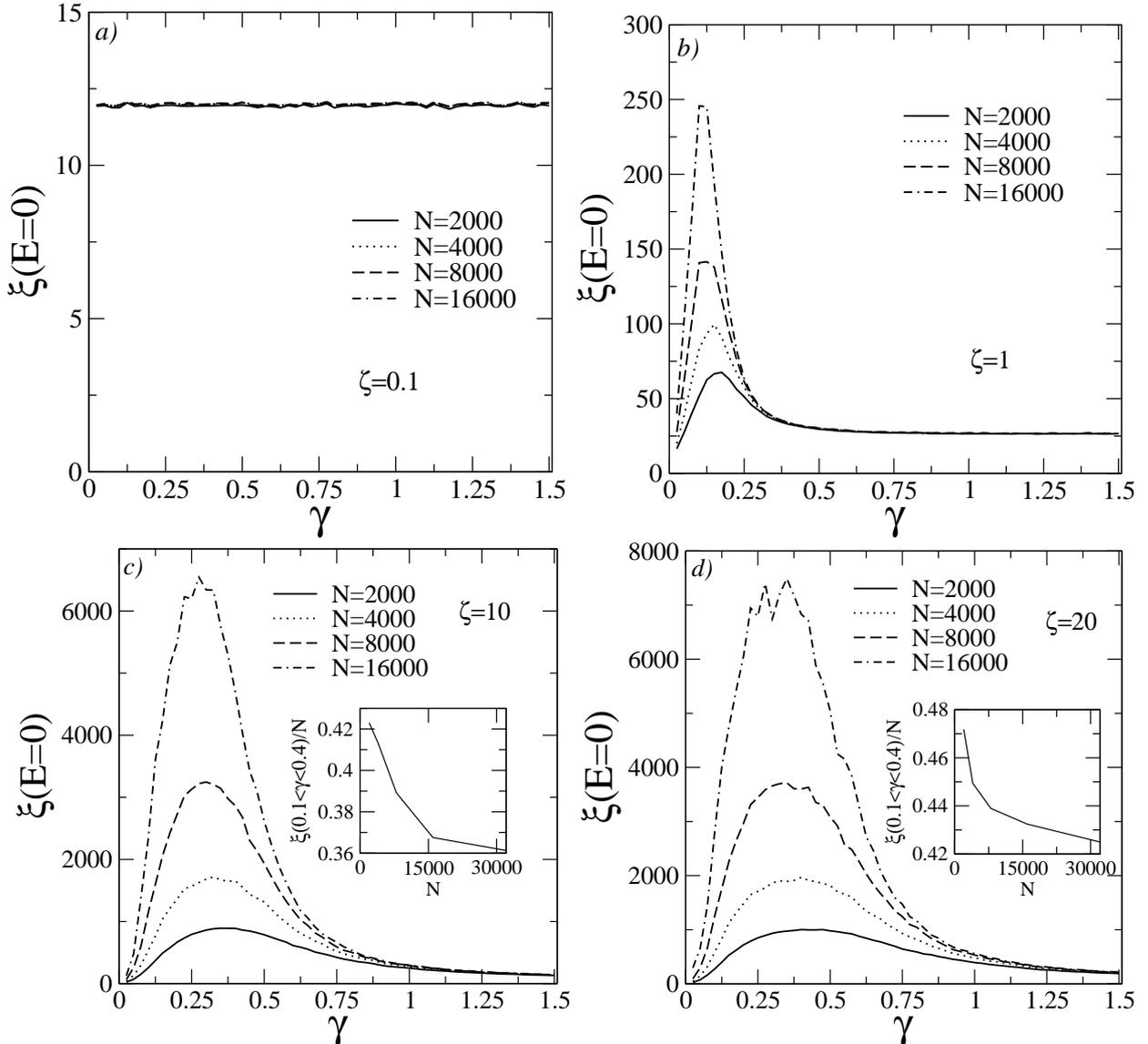
Quando o termo fora da diagonal é positivo e a diagonal tem uma distribuição desordenada não correlacionada, os autoestados com maior força de oscilação são aqueles que encontra-se na parte superior da banda (autoestados com energia positiva).

## 3.3 Resultados

### 3.3.1 Número de participação

Neste trabalho, os nossos resultados foram obtidos através de um processo de diagonalização exata em cadeias finitas com  $N = 2000$  até 16000 sítios. Em todos os cálculos

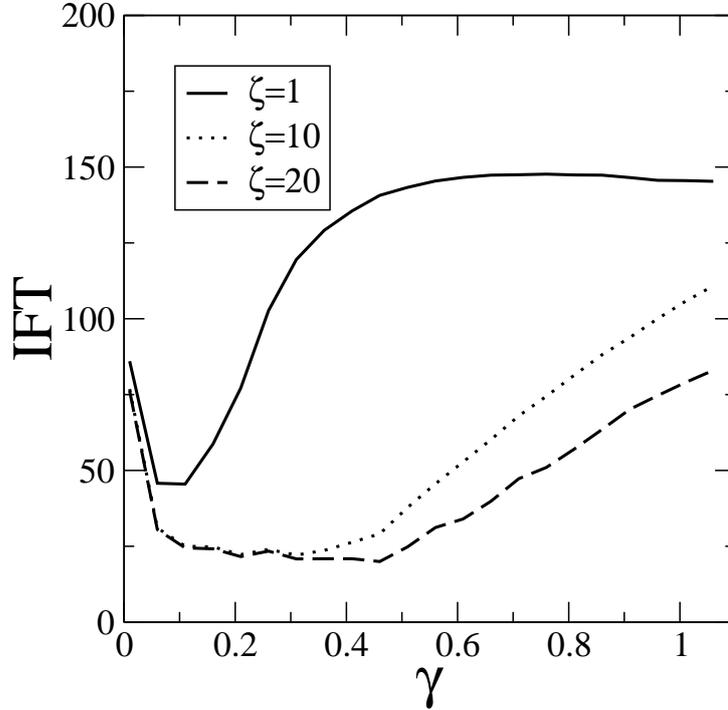
Figura 3.3: Número de participação no centro da banda ( $E = 0$ ) versus  $\gamma$  para  $\zeta = 0.1, 1, 10$  e  $20$ . Para  $\zeta = 0,1$  estamos lidando com um potencial desordenado com correlações fracas, logo,  $\xi(E = 0)$  é independente de  $\gamma$ . Para o caso correlacionado  $\zeta = 1, 10$  e  $20$ , observamos um comportamento interessante e não monotônico. Para  $\gamma$  compreendido no intervalo  $[0.12(2), 0.40(2)]$  o número de participação aumenta à medida que  $N$  aumenta. A análise de tamanho finito (ver *inset*) demonstrou que, embora o comprimento de localização seja grande, no limite termodinâmica este comprimento é finito.



Fonte: Autor, 2013.

usamos pelo menos 1000 configurações de desordem para efetuar médias. Na figura 3.3 mostramos o número de participação em torno do centro da banda energética ( $E = 0$ ) em função de  $\gamma$  para  $\zeta = 0.1, 1, 10$  e  $20$ . Ressaltamos que o centro da banda  $E = 0$  representa o modo com maior comprimento de localização, mesmo no caso do modelo de Anderson unidimensional com uma distribuição de desordem na diagonal não correlacionada. Para  $\zeta = 0.1$  estamos lidando com um potencial desordenado com fraca correlações. Na verdade, é quase o limite não correlacionado. Portanto, o número de participação não deve

Figura 3.4: A transformada de Fourier integrada (*IFT*) versus  $\gamma$  para  $\zeta = 1, 10$  e  $20$ . *IFT* é definido por  $IFT = \int_0^{k_{max}} \epsilon_k dk$ , onde  $\epsilon_k$  representar a transformada de Fourier da distribuição de desordem no sítio  $\epsilon_n$ . Observamos que o *IFT* apresenta uma diminuição no intervalo  $[\gamma_1, \gamma_2]$  indicando dessa forma, a um decréscimo efetivo na intensidade da desordem e, conseqüentemente, o aumento do comprimento de localização.



Fonte: Autor, 2013.

mudar com a variação do expoente  $\gamma$ . Na figura 3.3(a) podemos ver este comportamento,  $\xi(E=0)$  é independente de  $\gamma$ . Para o caso correlacionado  $\zeta = 1, 10$  e  $20$  observamos um comportamento interessante e não monotônico. Para  $\gamma$  dentro de um dado intervalo  $[\gamma_1, \gamma_2]$  o número de participação aumenta à medida em que  $N$  é aumentado. Para  $\zeta = 1$  podemos observar que este comportamento compreendido no intervalo  $[\gamma_1, \gamma_2] \propto [0.07(2), 0.13]$ . Para um comprimento de correlação grande analisamos este comportamento, como mostra as figuras 3.3 (c) e 3.3(d). Nossos resultados sugerem que a razão entre o número de participação e o número de sítios  $\frac{\xi}{N}$  na região compreendida por  $0.1 < \gamma < 0.4$  decresce à medida que  $N$  aumenta indicando, desta forma, só há apenas presença de estados eletrônicos localizados. No entanto, apesar dos nossos resultados indicarem que os autoestados são localizadas, podemos ver que o comprimento de localização aumenta substancialmente nesta região. Para entender esse resultado, podemos utilizar uma medida eficaz para a rugosidade na desordem diagonal de nossa cadeia, a transformada de Fourier integrada.

### 3.3.2 Análise numérica da transformada de Fourier integrada

Seguindo as referências [86, 87] vamos considerar a transformada de Fourier integrada (*IFT*) definida por

$$IFT = \int_0^{k_{max}} \epsilon_k dk, \quad (3.12)$$

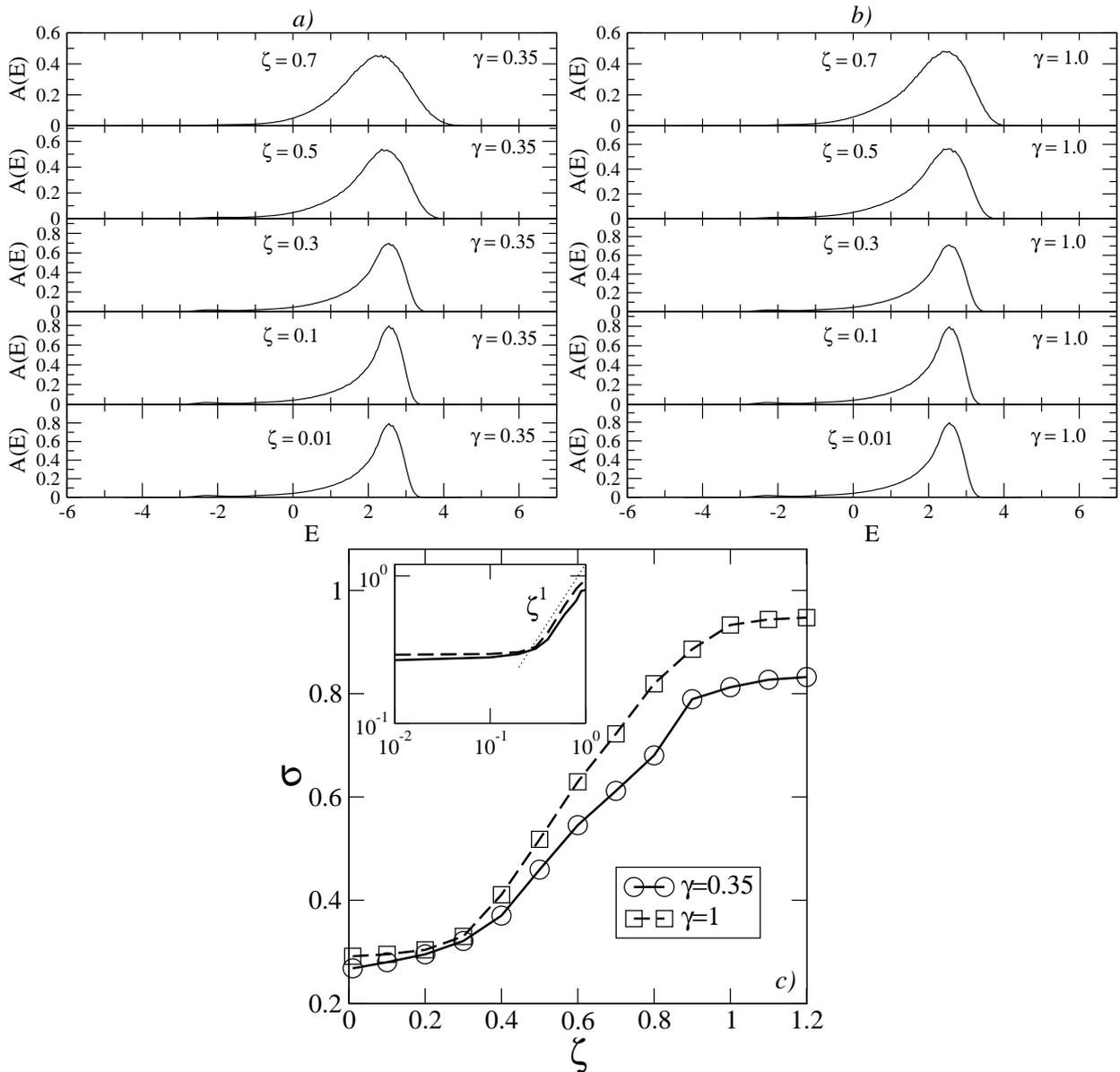
onde  $\epsilon_k$  representa a transformada de Fourier na distribuição da desordem  $\epsilon_n$ . Para uma distribuição diagonal aleatória não correlacionada, temos um *IFT* grande devido ao comportamento tipo ruído branco das energias  $\epsilon_n$ . Entretanto, estruturas mais regulares apresenta um espectro de Fourier mais estreito e, conseqüentemente, uma menor *IFT*. Na figura 3.4 plotamos nossos resultados para *IFT* em função de  $\gamma$  para  $\zeta = 1, 10$  e  $20$ . Observamos também um comportamento não monotônico da transformada de Fourier integrada. A *IFT* mostra uma diminuição em torno de um dado intervalo  $[\gamma_1, \gamma_2]$ . A diminuição da *IFT* indica que a correlação no regime  $[\gamma_1, \gamma_2]$  diminui efetivamente a intensidade da desordem promovendo, dessa forma, um aumento do comprimento de localização. Os nossos resultados sobre a *IFT* estão de acordo com os cálculos da participação mostrados nas figuras 3.3(b-d). Podemos ver que os intervalos  $[\gamma_1, \gamma_2]$  obtidos utilizando dados da *IFT* se encaixam razoavelmente com a região de grande participação mostrado nas figuras 3.3(b-d) ou seja,  $[0.07(2), 0.13(2)]$  para  $\zeta = 1$  e  $[0.12(2), 0.40(2)]$  para  $\zeta = 10$  e  $20$ .

### 3.3.3 Espectro de absorção óptica

Agora, vamos mostrar nossos resultados referentes ao espectro de absorção óptica deste modelo. Nas figuras 3.5(a,b) plotamos a absorção óptica  $A(E)$  em função da energia  $E$  para  $\gamma = 0.35$  (painel (a)),  $\gamma = 1$  (painel (b)) e  $\zeta = 0.01, 0.1, 0.3, 0.5$  e  $0.7$ . Os cálculos foram feitos para  $N = 2000$  sítios e 1200 realizações da desordem. Para  $\zeta = 0.01$  observamos um pico nas proximidades do extremo superior da banda da rede periódica  $E = 2$ . Este resultado é facilmente compreendido, lembrando que para  $\zeta = 0.01$  estamos lidando com uma desordem diagonal não correlacionada. Em sistemas  $1d$  com desordem diagonal não correlacionada e *hopping* positivo, apenas os estados de mais alta energia contribuem para o espectro de absorção óptica [30, 31]. Nossos cálculos para  $\zeta = 0.01$  estão de acordo com estes resultados.

Vamos agora, aumentar o comprimento de correlação  $\zeta$ . Observamos que à medida que  $\zeta$  é aumentado, o espectro de absorção  $A(E)$  torna-se mais largo e a sua intensidade diminui. Portanto, para  $\zeta > 0$  observamos um aumento da largura de banda de absorção. Vale apenas salientar que nas referências [27, 28, 30] também foi observado um aumento da largura de banda de absorção devido a presença de desordem correlacionada. Entretanto, as distribuições de desordem correlacionadas consideradas nas referências [27, 28, 30] fo-

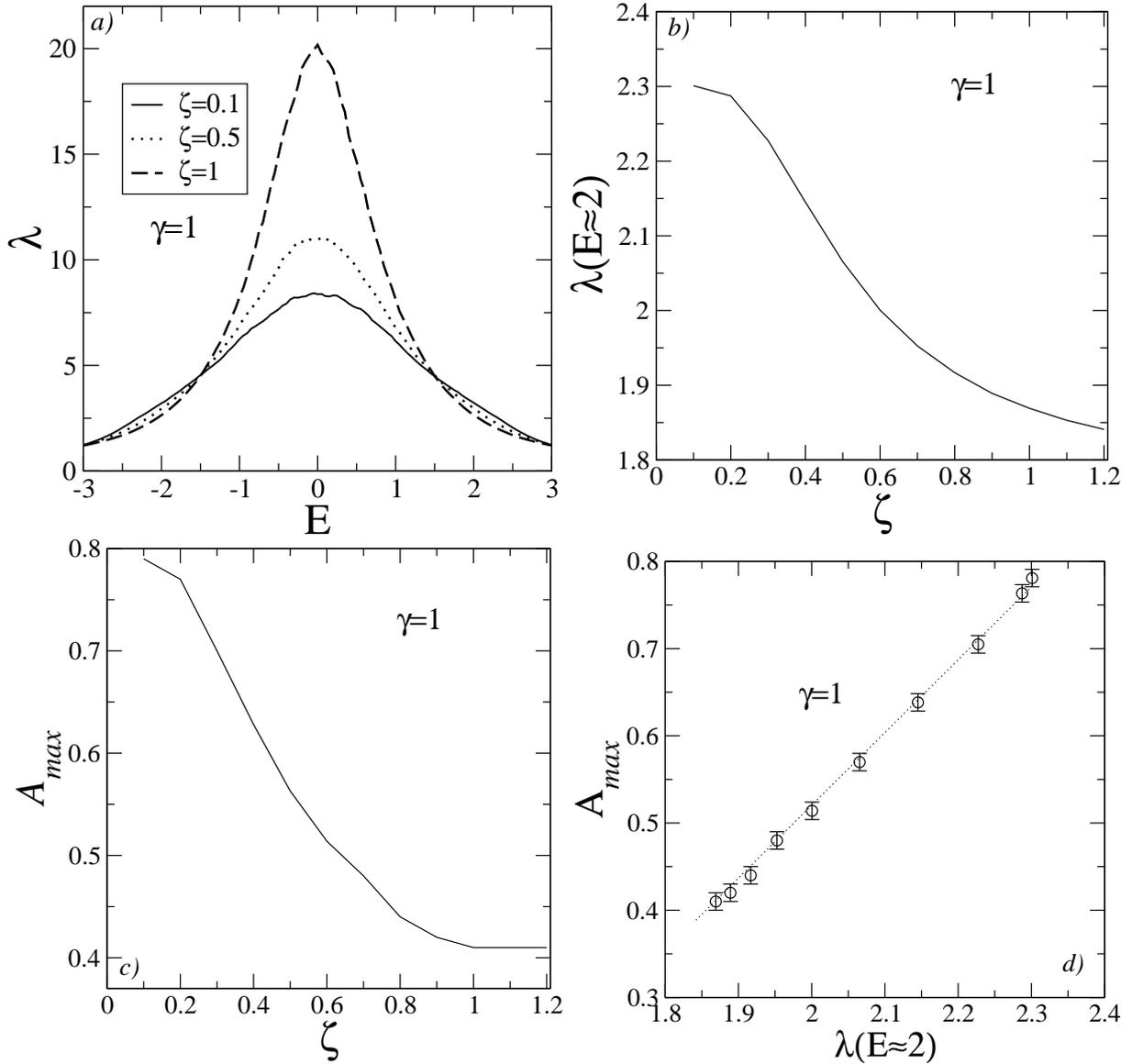
Figura 3.5: Em (a–b) temos espectro de absorção  $A(E)$  versus a energia  $E$  para  $\gamma = 0.35$  (painel (a)) e  $\gamma = 1$  (à direita (b)). Os cálculos foram realizados em um sistema constituído por  $N = 2000$  sítios, 1200 realizações de desordem e  $\zeta = 0.01, 0.1, 0.3, 0.5$  e  $0.7$ . Para  $\zeta = 0,01$  observamos um único pico em torno de  $E = 2$  da rede periódica. Este resultado mostra-se de acordo com os resultados de  $A$  em sistemas  $1d$  com desordem diagonal não correlacionada e *hopping* onde somente os maiores estados da banda pode contribuir para a banda de absorção. Observamos que quando  $\zeta$  é aumentado a banda de absorção  $A(E)$  torna-se mais alargada, já a sua intensidade diminui. (c) O desvio padrão  $\sigma$  do espectro de absorção  $A(E)$  versus o comprimento de correlação  $\zeta$ .



Fonte: Autor, 2013.

ram completamente distintas do tipo de desordem correlacionada utilizada neste trabalho. Desta forma, observamos um indicio da existência de um comportamento universal em sistemas com desordem correlacionada. Na figura 3.5(c), plotamos o desvio padrão  $\sigma$  da banda de absorção em função do comprimento de correlação  $\zeta$ . Para determinar com precisão o desvio padrão  $\sigma$  nós fizemos um ajuste gaussiano da curva de absorção na região

Figura 3.6: (a) comprimento de localização  $\lambda$  versus  $E$  para  $\gamma = 1$  e  $\zeta = 0.1, 0.5$  e  $1$ . Observamos que  $\lambda$  diminui em torno de  $E = 2$  à medida que o comprimento de correlação  $\zeta$  é aumentado, com isso ocorre um alargamento na banda de absorção em torno de  $E = 2$ . b) A média de comprimento de localização em torno  $E = 2$  ( $\lambda(E \approx 2)$ ) versus o comprimento de correlação  $\zeta$ . c) A intensidade máxima da banda de absorção  $A_{max}$  versus o comprimento de correlação  $\zeta$ . d) combinando (b) e (c) obtemos a dependência linear da intensidade do espectro de absorção  $A_{max}$  versus a média do comprimento de localização  $\lambda(E \approx 2)$ .



Fonte: Autor, 2013.

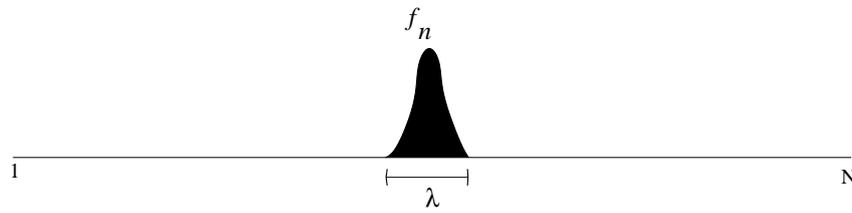
de altas energias. Observamos que  $\sigma$  apresenta um crescimento com o comprimento  $\zeta$ . O valor máximo de  $\sigma$  apresenta uma pequena dependência com o valor do expoente  $\gamma$  entretanto, para todos os  $\gamma$  considerados, observamos que  $\sigma \propto \zeta$  (ver *inset* da figura 3.5(c)). Vamos investigar algumas especificidades das propriedades ópticas em torno do limite superior da banda  $E = 2$ . Vamos mostrar que a diminuição de intensidade do espectro de absorção  $A(E)$  pode ser explicado analisando as propriedades de localização dos autoestados na borda positiva da banda. Nossos resultados numéricos associados com uma

análise heurística vão explicar em detalhes o comportamento de  $A(E)$  neste modelo de  $1d$  com desordem correlacionada. Começaremos apresentando o cálculo numérico do comprimento de localização  $\lambda$  executado por meio do método da matriz de transferência [14]. Na figura 3.6(a) plotamos  $\lambda$  versus  $E$  para  $\gamma = 1$  e  $\zeta = 0.1, 0.5$  e  $1$ . Examinando a região em torno da energia  $E = \pm 2$  podemos observar que o comprimento de localização diminui à medida que o comprimento de correlação  $\zeta$  é aumentado. Este comportamento anômalo de  $\lambda$  em torno de  $E = 2$  explica qualitativamente o alargamento do espectro de absorção em torno de  $E = 2$ . Já sabemos que um grau de localização mais forte nas extremidades da banda promove um alargamento da banda de absorção [30]. Este comportamento anômalo de  $\lambda$  em torno de  $E = 2$  também foi encontrado no modelo de Anderson  $1d$  com correlações tipo lei de potência na distribuição de desordem diagonal [88]. Agora, vamos apresentar informações quantitativas sobre o espectro de absorção e sua dependência com o grau de localização em torno de  $E = 2$ . Vamos considerar o comprimento de localização médio em torno dos autoestados que contribuem para a absorção óptica ( $\lambda(E \approx 2)$ ) versus o comprimento de correlação  $\zeta$ . Os resultados são mostrados na figura 3.6(b). Agora, vamos considerar na figura 3.6(c) a intensidade máxima do espectro de absorção  $A_{max}$  versus a correlação comprimento  $\zeta$ . Podemos combinar as figuras 3.6(b) e (c) para obter a dependência da intensidade do espectro de absorção  $A_{max}$  com o comprimento de localização  $\lambda(E \approx 2)$  (ver figura 3.6 (d)). Nossos resultados numéricos sugerem que a intensidade do espectro de absorção depende de forma linear do comprimento de localização. Nós consideramos outros valores de  $\gamma$  e não encontramos mudanças qualitativas para este comportamento do espectro de absorção.

Portanto, os cálculos numéricos do comprimento de localização explicaram de forma quantitativa o comportamento anômalo do espectro de absorção  $A(E)$  em sistemas  $1d$  com desordem correlacionada tipo exponencial alongada. Vamos apresentar agora um formalismo heurístico que permite o tratamento das propriedades ópticas deste sistema. Nosso formalismo é baseado na topologia dos autoestados que efetivamente contribuem para o espectro de absorção. Sabemos que em um sistema  $1d$  desordenado com termo de *hopping* positivo os autoestados com energia em torno de  $E \approx 2$  que apresentam uma forma de *sino* contribuem efetivamente com as maiores força de oscilador [30]. Na figura 3.7, podemos ver um exemplo pedagógico de um estado com forma de *sino* semelhante aos observados na região de altas energias em sistemas  $1d$  desordenados. Em um sistema composto por  $N$  sítios, vamos considerar um estado localizado com forma de *sino* e largura típica  $\lambda$ . Portanto, a amplitude da função de onda  $f_n$  é diferente de zero dentro da região de comprimento  $\lambda$  e é insignificante em outras partes deste sistema. A força de oscilador  $F$  desse estado pode ser escrito como

$$F = \left( \sum_{n=1}^N f_n \right)^2 \approx \left( \sum_{n=n_1}^{n_2} f_n \right)^2, \quad (3.13)$$

Figura 3.7: Ilustração pedagógica de um estado localizado na forma de *sino* com largura  $\lambda$ . Este tipo de estado contribui efetivamente para o espectro de absorção.



Fonte: Autor, 2013.

onde  $|n_1 - n_2| \approx \lambda$ . Por outro lado, baseado na condição de normalização da função de onda, podemos escrever

$$\sum_{n=1}^N f_n^2 \approx \sum_{n=n_1}^{n_2} f_n^2 = 1. \quad (3.14)$$

Vamos considerar inicialmente que  $f_n$  é praticamente uma constante  $\mathcal{F}$  na região de tamanho  $\lambda$  portanto, a condição de normalização da função de onda pode ser expressa por

$$\sum_{n=n_1}^{n_2} f_n^2 = 1 \quad (3.15)$$

$$\mathcal{F}^2 \sum_{n=n_1}^{n_2} (1) = 1 \quad (3.16)$$

$$\mathcal{F}^2 \lambda = 1, \quad (3.17)$$

assim

$$\mathcal{F} = \frac{1}{\sqrt{\lambda}}. \quad (3.18)$$

Logo, a força do oscilador  $F$  desse estado pode ser representado por

$$F \approx \left( \sum_{n=n_1}^{n_2} f_n \right)^2 \approx \left( \sum_{n=n_1}^{n_2} \left[ \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \right] \right)^2 \approx \lambda. \quad (3.19)$$

Portanto, a força de oscilação dos estados que efetivamente contribuem para o espectro de absorção é proporcional ao comprimento de localização  $\lambda$  destes estados. O procedimento mostrado anteriormente, apesar de ter reproduzido de forma satisfatória a dependência da intensidade do espectro de absorção com o comprimento de localização, foi desenvolvido

utilizando a seguinte hipótese  $f_n \approx \mathcal{F}$  que representa uma simplificação. Ressaltamos que na região de altas energias ( $E \approx 2$ ), temos autoestados fortemente localizados com  $\lambda \ll N$ , logo, esta simplificação pode ser aceitável. Entretanto, vamos revisar nossos cálculos analíticos utilizando uma hipótese mais coerente com a teoria de localização ou seja, vamos considerar que  $f_n$  é dado por

$$f_n = \mathcal{F}e^{(-|n-n_0|/\lambda)}. \quad (3.20)$$

Vamos considerar  $n_0 = 0$  como sendo o centro da cadeia. Portanto, a condição de normalização no limite termodinâmico pode ser expresso como

$$\sum_{n=-N/2}^{N/2} f_n^2 \approx \int_{-N/2}^{N/2} \mathcal{F}^2 e^{(-2|n|/\lambda)} dn = 1. \quad (3.21)$$

Depois de uma álgebra simples podemos obter

$$\mathcal{F} = \left[ \sqrt{\lambda(1 - e^{-N/\lambda})} \right]^{-1}. \quad (3.22)$$

Portanto, a força de oscilador  $F$  deste autoestado pode ser escrita como

$$F = \left( \sum_{n=-N/2}^{N/2} f_n \right)^2 \approx \left( \int_{-N/2}^{N/2} \mathcal{F} e^{(-|n|/\lambda)} dn \right)^2 = \mathcal{F}^2 \lambda^2 (2 - 2e^{-N/2\lambda})^2. \quad (3.23)$$

O comprimento de localização  $\lambda$  na região de altas energias ( $E \approx 2$ ) é muito menor do que o tamanho do sistema  $N$ , logo, podemos considerar  $e^{-N/2\lambda} \rightarrow 0$ . Portanto, neste limite a força do oscilador novamente é proporcional ao comprimento de localização  $F \propto \lambda$ . Nosso formalismo heurístico corroborou nossos cálculos numéricos mostradas na figura 3.6(d) sobre a dependência linear da intensidade do espectro de absorção com o comprimento de localização.

# 4

## CONCLUSÕES

Com o intuito de estudar as propriedades em uma transição metal-isolante, partimos do ponto (capítulo 2) ao qual descrevemos de forma resumida alguns modelos de condução iniciais: O modelo de Drude, o modelo de Sommerfeld, o modelo de Bloch, o modelo de Mott e o modelo de Anderson. De forma que, nos modelos de Drude, Sommerfeld e Bloch estudamos as propriedades da condução eletrônica em sólidos cristalinos. Como o objetivo era compreender os fenômenos naturais do transporte eletrônico, então descrevemos os modelos de Mott, que considera a interação elétron-elétron, e de Anderson, que considera a presença de desordem no nos sólidos, sendo dessa forma modelos mais realísticos. O modelo de Anderson por ser a ferramenta base do desenvolvimento deste dissertação, foi necessário sermos mais categóricos na descrição do mesmo. Ao ponto que estudamos de forma mais detalhada os conceitos voltados a: Sistemas com desordem na transição de Anderson, o modelo de Anderson original, a medida do grau de localização, a teoria de escala na transição de Anderson e a correlação no modelo de Anderson.

Já no capítulo 3, estudamos o problema de localização de um elétron em sistemas  $1d$  com desordem correlacionada, bem como o espectro de absorção óptica. Nós consideramos cadeias com correlações tipo exponencial alongada na distribuição de desordem diagonal  $\epsilon_n$ . Basicamente nós consideramos uma função de correlação  $C(r)$  na desordem diagonal  $\epsilon_n$  como  $C(r) = \langle \epsilon_n \epsilon_{n+r} \rangle \propto e^{-r^\gamma/\zeta}$ . Nós realizamos a técnica de diagonalização numérica exata para calcular o número de participação e o espectro de absorção. O formalismo estudado neste trabalho fornece uma estimativa precisa para a dependência do comprimento de localização com os parâmetros ajustáveis  $\gamma$  e  $\zeta$  da função de correlações  $C(r)$ . De forma geral, podemos notar que o comprimento de localização aumenta à medida que o comprimento de correlação efetivo  $\zeta$  aumenta. No entanto, foi demonstrado numericamente a ausência de estados eletrônicos estendidos no modelo apresentado neste trabalho. Observamos também, que não existe uma dependência evidente das propriedades de localização com o expoente  $\gamma$ . Através de uma análise espectral da desordem correlacionada explicamos a dependência do comprimento de localização com o expoente  $\gamma$ . é importante salientar que nossa análise espectral desta distribuição de desordem com correlações tipo exponencial alongada apresenta o efeito das correlações intrínsecas como

---

um mecanismo de suavização da rugosidade interna. Os resultados obtidos em torno dos espectros de absorção óptica revelam uma dependência interessante do perfil de absorção com a distribuição de desordem correlacionada. Nós mostramos que quando o comprimento de correlação  $\zeta$  é aumentado, a largura de banda de absorção também aumenta linearmente. Além disso, observamos também que a intensidade do espectro de absorção óptica  $A(E)$  também depende do grau de correlações. Ao utilizarmos a técnica de matriz de transferência padrão estabelecemos numericamente a relação direta entre o comportamento do espectro de absorção e o comprimento de localização dos autoestados que contribuem para a absorção. A partir da utilização dos cálculo numérico do comprimento de localização  $\lambda$  destes autoestados que contribuem para a banda de absorção, podemos demonstrar numericamente que a intensidade máxima do espectro de absorção  $A_{max}$  depende de forma linear do comprimento de localização. Além disso, nós utilizamos um procedimento analítico heurístico que baseia-se na topologia dos autoestados e sua relação com o espectro de absorção. Nosso procedimento heurístico corrobora a previsão numérica referente a relação da linearidade entre a intensidade do espectro de absorção e o comprimento de localização. Os cálculos que obtivemos, mostra que não existe uma dependência substancial do espectro absorção com o expoente  $\gamma$ . Em resumo, fornecemos uma análise detalhada dos aspectos de localização e propriedades ópticas em sistemas  $1d$  com correlações tipo exponenciais alongadas na distribuição de desordem diagonal.

Nesta dissertação, apresentamos novos resultados referentes as propriedades ópticas e aos aspectos de localização em sistemas  $1d$  com correlação tipo exponencial alongada desordem. Uma perspectiva para este trabalho seria investigar a dependência de nossos resultados com a dimensão do sistema. Podemos efetuar estudos semelhantes em geometrias bidimensionais.

# REFERÊNCIAS

- [1] DRUDE, P. Zur Elektronentheori der Metalle, I. Teil. *Annalen der Physik*, v. 306, N. 3, p. 566 – 613, 1900.
- [2] DRUDE, P. Zur Elektronentheori der Metalle, II. Teil. *Annalen der Physik*, v. 308, N. 11, p. 369 – 402, 1900.
- [3] PLANCK, M. On the law of distribution of energy in the normal spectrum. *Ann. Phys.*, v. 4, N. 553, p. 1 – 11, 1901.
- [4] EINSTEIN, A. The Photoelectric Effect. *Ann. Phys.*, v. 322, N. 6, p. 132 – 148, 1905.
- [5] SOMMERFELD, A. Zur Elektronentheori der Metalle auf Grund der Fermischen Statistik. *Zeitschrift für Physik*, v. 47, N. 1-2, p. 1 – 32, 1928.
- [6] BLOCH, F. Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern. *Zeit. Phys.*, v. 52, N. 7-8, p. 555 – 600, 1929.
- [7] ANDERSON, P. W. Absence of Diffusion in Certain Random Lattices. *Proc. Phys. Soc. Lond. A*, v. 109, N. 5, p. 1492 – 1505, 1958.
- [8] KRAMER, B.; MACKINNON, A. Localization: Theory and Experiment. *Rep. Prog. Phys.*, v. 56, N. 12, p. 1469 – 1564, 1993. Para mais detalhes ver [52].
- [9] ABRAHAMAS, E.; ANDERSON, P. W.; LICCIARDELLO, D. C.; RAMAKRISHNAN, T. V. Scaling Theory of Localization: Absence of Quantum Diffusion in Two Dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, v. 42, N. 10, p. 673 – 676 , 1979. Para mais detalhes ver [52].
- [10] ROMER, R. A.; SCHULZ-BALDES, H. Weak-disorder expansion for localization lengths of quasi-1D systems. *Europhys. Lett.*, v. 68, N. 2, p. 247 – 253, 2004.
- [11] FLORES, J. C. Transport in models with correlated diagonal and off-diagonal disorder. *J. Phys. Condens. Matter.*, v. 1, N. 44, p. 8471 – 8479, 1989.
- [12] MOURA, F. A. B. F.; LYRA, M. L. Delocalization in the 1D Anderson Model with Long-Range Correlated Disorder. *Phys. Rev. Lett.*, v. 81, N. 17, p. 3735 – 3738, 1998.
- [13] MOURA, F. A. B. F. Absence of localization on the 2d model with long-range correlated off-diagonal disorder. *Eur. Phys. J. B*, v. 78, N. 3, p. 335 – 339, 2010.
- [14] SALES, M. O.; MOURA, F. A. B. F. Numerical study of the one-electron dynamics in one-dimensional systems with short-range correlated disorder. *Physica E*, v. 45, p. 97 – 102, 2012.

- [15] DUNLAP, D. H.; WU, H. L.; PHILLIPS, P. Absence of localization in a random-dimer model. *Phys. Rev. Lett.*, v. 65, N. 1, p. 88 – 91, 1990.
- [16] BELLANI, V.; DIEZ, E.; HEY, R.; TONI, L.; TARRICONE, L.; PARRAVICINI, G. B.; DOMÍNGUEZ-ADAME, F.; GÓMEZ-ALCALÁ, R. Experimental Evidence of Delocalized States in Random Dimer Superlattices. *Phys. Rev. Lett.*, v. 82, N. 10, p. 2159 – 2162, 1999.
- [17] DÍAZ, E.; SÁNCHEZ, A.; DOMÍNGUEZ-ADAME, F. Absence of localization and large dc conductance in random superlattices with correlated disorder. *Phys. Rev. B*, v. 50, N. 19, p. 14359 – 14367, 1994.
- [18] DOMÍNGUEZ-ADAME, F.; SÁNCHEZ, A.; DÍAZ, E. Quasi-ballistic-electron transport in random superlattices. *Phys. Rev. B*, v. 50, N. 23, p. 17736 – 17739, 1994.
- [19] SÁNCHEZ, A.; DOMÍNGUEZ-ADAME, F. Intentionally disordered superlattices with high-dc conductance. *IEEE Journal of Quantum electronics*. N. 11, v. 31, p. 1919 – 1926, 1995.
- [20] GANTMAKHER, V. F. Electrons and disorder in solids. *Oxford University Press*. 2005.
- [21] GANTMAKHER, V. F. Noninteracting electrons in one-dimensional systems. *Low Temp. Phys.*, v. 31, N. 3, p. 331 – 336, 2005.
- [22] KUHL, U.; IZRAILEV, F. M.; KROKHIN, A.; STÖCKMANN, H. J. Experimental observation of the mobility edge in a waveguide with correlated disorder. *Appl. Phys. Lett.*, v. 77, N. 5, p. 633 – 635, 2000.
- [23] IZRAILEV, F. M.; KROKHIN, A. A. Localization and the Mobility Edge in One-Dimensional Potentials with Correlated Disorder. *Phys. Rev. Lett.*, v. 82, N. 20, p. 4062 – 4065, 1999.
- [24] IZRAILEV, F. M.; KROKHIN, A. A. Mobility edge in aperiodic Kronig-Penney potentials with correlated disorder: Perturbative approach. *Phys. Rev. B*, v. 63, N. 4, p. 41102 – 41105, 2001.
- [25] HILKE, M. Seeing Anderson localization *Phys. Rev. A*, v. 80, N. 6, p. 063820 – 063824, 2009.
- [26] CRISANTI, A. Resonances in random binary optical media. *J. Phys. A*, V. 23, N. 22, P. 5235 – 5240, 1990.
- [27] MALYSHEV, A. V.; RODRÍGUEZ, A.; DOMÍNGUEZ-ADAME, F. Linear optical properties of one-dimensional Frenkel exciton systems with intersite energy correlations. *Phys. Rev. B*, v. 60, N. 20, p. 14140 – 14146, 1999.
- [28] DOMÍNGUEZ-ADAME, F.; MALYSHEV, A. V.; RODRÍGUEZ, A. Absorption line shape of Frenkel excitons in one-dimensional random chains with pairwise correlated Gaussian disorder. *Chemical Physics*, v. 244, N. 2-3 p. 351 – 359, 1999.

- [29] WERPACHOWSKA, A.; OLAYA-CASTRO, A. Comment on “Excitons in Molecular Aggregates with Lévy-Type Disorder: Anomalous Localization and Exchange Broadening of Optical Spectra”. *Phys. Rev. Lett.*, v. 109, N. 25, p. 259701, 2012; EISFELD, A.; VLAMING, S. M.; MALYSHEV, V. A.; KNOESTER, J. *Phys. Rev. Lett.*, v. 109, N. 25, p. 259702, 2012.
- [30] DÍAZ, E.; RODRÍGUEZ, A.; MALYSHEV, A. V.; DOMÍNGUEZ-ADAME, F. Anomalous optical absorption in a random system with scale-free disorder. *Europhys. Lett.*, v. 72, N. 6, p. 1018 – 1024, 2005.
- [31] ASSUNÇÃO, T. F.; LYRA, M. L.; MOURA, F. A. B. F.; DOMÍNGUEZ-ADAME, F. Coherent electronic dynamics and absorption spectra in an one-dimensional model with long-range correlated off-diagonal disorder. *Phys. Lett. A*, v. 375, N. 6, p. 1048 – 1052, 2011.
- [32] EISFELD, A.; VLAMING, S. M.; MALYSHEV, V. A.; KNOESTER, J. Excitons in Molecular Aggregates with Lévy-Type Disorder: Anomalous Localization and Exchange Broadening of Optical Spectra. *Phys. Rev. Lett.*, V. 105, P. 137402, 2010.
- [33] MOTT, N. F. The Basis of the Electron Theory of Metals, with Special Reference to the Transition Metals. *Proc. Phys. Soc. Lond. A*, v. 62, p. 416 – 422, 1949.
- [34] MOTT, N. F. On the Transition to Metallic Conduction in Semiconductors. *Can. J. Phys.*, v. 34, N. 12A, p. 1356, 1956.
- [35] MOTT, N. F. The Transition to the Metallic state. *Philos. Mag.*, v. 6, N. 62, p. 287 – 309, 1961.
- [36] MOTT, N. F. Metal-insulator Transitions. *Tay. and Fran.*, London/Philadelphia, 1990.
- [37] MOTT, N. F. Metal-insulator Transitions. *Rev. Mod. Phys.*, v. 40, N. 4, p. 677 – 683, 1968.
- [38] OHM, G. S. Die galvanische kette, mathematisch bearbeitet:(Berlin 1827 bei TH Reimann.); Neudruck mit einem Vorwort von James Moser. *Toeplitz & Deuticke*, 1887.
- [39] KITTEL, C.; Introduction Solid State Physics. *John Wiley & Sons*, 1976.
- [40] KRONIG, R. L.; PENNEY, W. G. Quantum Mechanics of Electrons in Cristal Lattices. *Proc. Roy. Soc. A*, v. 130, p. 499 – 513, 1931.
- [41] WIGNER, E.; SEITZ, F. On the Constitution of Metallic Sodium. *Phys. Rev.*, v. 43, N. 10, p. 804 – 810, 1929.
- [42] WILSON, A. H. The Theory of Electronic semi-conductors. *Proc. Roy. Soc. Lond. A*, v. 133, p. 458 – 491, 1931.
- [43] PEIERLS, R.; MOTT, N. F. Discussion of the paper by de Boer and Verwey. *Proc. Phys. Soc.*, v. 49, N. 4S, p. 72, 1937.
- [44] OLIVEIRA W. S. *Transição metal-isolante induzida por desordem e interação elétron-elétron*. Dissertação (Mestrado) – UFMG, Belo Horizonte, 2010.

- [45] ZALLEN, R. *The Physics of Amorphous Solids*. New York: A Wiley-Interscience, 1983.
- [46] DIAS, W. S. *Propriedades de transporte em sistema de baixa dimensionalidade na presença de interação*. Tese (Doutorado) – UFAL, Maceió, 2011.
- [47] ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. *Solid State Physics*. *Winston*, 1976.
- [48] MOTT, N. F. Conduction in non-crystalline systems. *Phylos. Mag.*, v. 17, N. 150, p. 1259 – 1268, 1968.
- [49] EVERS, F.; MIRLIN, A. D. Anderson transition. *Rev. Mod. Phys.*, v. 80, N. 4, p. 1355 – 1417, 2008.
- [50] HUBBARD, J. Electrons correlations in narrow energy bands II. The degenerate band case. *Proc. Phys. Soc. Lond. A*, v. 277, p. 237 – 259, 1964.
- [51] FAZEKAS, P. *Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism*. *World Scientific, Singapore*, 1999.
- [52] LIFSHITZ, I. M.; GREDESKUL, S. A.; PASTUR, L. A. *Introduction to the Theory of Disordered System*. *Wiley, New York*, 1988.
- [53] de MOURA, F. A. B. F. *Transição de Anderson em sistemas de baixa dimensionalidade com desordem correlacionada*. Tese (Doutorado) — UFPE, Recife, 2003.
- [54] HAIRER, E.; NØRSETT, S. P.; WANNER, G. *Solving ordinary differential equations. Nonstiff problems*. [Volume 1, 2nd ed.], Trondheim, Norway: Springer Series in Computational Mathematics, Springer, 2008.
- [55] BARATTO, G. *Solução de Equações Diferenciais Ordinárias Usando Métodos Numéricos*. [Versão 0.1], Santa Maria, RS, Brasil: Universidade Federal de Santa Maria – UFSM, DELC - Departamento de Eletrônica e Computação, ELC 1021 – Estudo de Casos em Engenharia Elétrica, 2007.
- [56] PRESS, W. H.; TEUKOLSKY, S. A.; VETTERLING, W. T.; FLANNERY, B. P. *Numerical Recipes in C. The Art Of Scientific Computing*. [2nd ed.], EUA: Cambridge University Press, 1992.
- [57] THOULESS, D. J. Maximum Metallic Resistance in Thin Wires. *Phys. Rev. Lett.*, v. 39, N. 18, p. 1167 – 1169, 1977.
- [58] THOULESS, D. J. Electrons in disordered systems and the theory of localization. *Phys. Rep.*, v. 13C, N. 93, p. 93 – 142, 1974.
- [59] WEGNER, F. Electrons in disordered systems. Scaling near the mobility edge *Zeits. Phys. B Condens. Matt.*, v. 25, N. 4, p. 327 – 337, 1976.
- [60] SLEVIN, K.; OHTSUKI, T. Critical exponent for the quantum Hall transition. *Phys. Rev. B*, v. 4, p. 1 – 4, 2009.
- [61] KOBAYASHI, K.; OHTSUKI, T.; SLEVIN, K. Critical exponent for the quantum spin Hall transition in  $\mathbb{Z}_2$  network model. *Phys. Rev. B*, v. 1, p. 1 – 5, 2011.

- [62] OBUSE, H.; FURUSAKI, A.; RYU, S.; MUDRY, C. Boundary criticality at the Anderson transition between a metal and a quantum spin Hall insulator in two dimensions. *Phys. Rev. B*, v. 78, N. 11, p. 115301 – 115311, 2008.
- [63] ASADA, Y.; SLEVIN, K.; OHTSUKI, T. Numerical estimation of the  $\beta$  function in two-dimensional systems with spin-orbit coupling. *Phys. Rev. B*, v. 70, N. 3, p. 035115 – 035120, 2004.
- [64] ZAVARITSKAYA, T. N.; ZAVARITSKAYA, É. I. Metal-insulator transition in inversion channels of silicon MOS structures. *Sov. Phys. JETP Lett.*, v. 45, N. 10, p. 609 – 613, 1987.
- [65] KRAVCHENKO, S. V.; SARACHIK, M. P. A metal-insulator transition in 2d: Established facts and open questions. *Mod. Phys. B*, v. 24, N. 12-13, p. 1640 – 1663, 2010.
- [66] HEBARD, A. F.; PAALANEN, M. A. Magnetic-field-tuned superconductor-insulator transition in two-dimensional films. *Phys. Rev. Lett.*, v. 65, N. 7, p. 927 – 930, 1990.
- [67] SAMBANDAMURTHY, G.; ENGEL, L. W.; JOHANSSON, A.; PELED, E.; SHAHAR, D. Experimental Evidence for a Collective Insulating State in Two-Dimensional Superconductors *Phys. Rev. Lett.*, v. 94, N. 1, p. 017003-1 – 017003-4, 2005.
- [68] ISHII, K. Localization of Eigenstates and Transport Phenomena in the One-Dimensional Disordered System. *Prog. Theor. Phys.*, N. 53, p. 77 – 138, 1973.
- [69] THEODOROU, G.; COHEN, M. H. Extended states in a one-dimensional system with off-diagonal disorder. *Phys. Rev. B*, v. 13, N. 10, p. 4597 – 4601, 1976.
- [70] FLEISHMAN, L.; LICCIARDELLO, D. C. Fluctuations and localization in one dimension. *Phys. C: Solid State Phys.*, v. 10, N. 6, p. L125 – L126, 1977.
- [71] SOUKOULIS, C. M.; ECONOMOU, E. N. Off-diagonal disorder in one-dimensional systems. *Phys. Rev. B*, v. 24, N. 10, p. 5698 – 5702, 1981.
- [72] FLORES, J. C. Transport in models with correlated diagonal and off-diagonal. *J. Phys.: Condens. Matter.*, v. 1, p. 8471 – 8479, 1989.
- [73] GRINIASTY, M.; FISHMAN, S. Localization por pseudorandom potentials in one dimension. *Phys. Rev. Lett.*, v. 60, p. 1334 – 1337, 1988.
- [74] DAS SARMA, S.; SONG HE; XIE, X. C. Mobility Edge in a Model One-Dimensional Potential. *Phys. Rev. Lett.*, v. 61, p. 2144 – 2147, 1988.
- [75] THOULESS, D. J. Localization by a with Slowly Varying Period. *Phys. Rev. Lett.*, v. 61, p. 2141 – 2143, 1988.
- [76] BOVIER, A. Perturbation Theory for the random dimer model. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 25, p. 1021 – 1029, 1992.
- [77] EVANGELOU, S. N.; KATSANOS, D. E. Super-diffusion in random chains with correlated. *Phys. Lett. A*, v. 164, p. 456 – 464, 1992.

- [78] FLORES, J. C.; HILKE, M. Absence of localization in disordered systems with local correlation. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 26, p. L1255 – L1260, 1993.
- [79] HILKE, M. Local correlations in one-and two-dimensional disordered systems. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 27, p. 4773 – 4783, 1994.
- [80] LAVARDA, F. C. et al. Near resonant scattering from nonsymmetric dimers: Applications to substituted polyanilines. *Phys. Rev. Lett.*, v. 73, p. 1267 – 1270, 1994.
- [81] HEINRICHS, J. Localization, antilocalization, and delocalization in one-dimensional disordered lattices. *Phys. Rev. B*, v. 51, p. 5699 – 5710, 1995.
- [82] CRESSONI, J. C.; LYRA, M. L. Scaling behavior of the localization length in random dimer harmonic chains with thermal correlations. *Phys. Rev. B*, v. 53, p. 5067 – 5069, 1996.
- [83] PACZUSKI, M.; MASLOV, S.; BARK, P. Avalanche dynamics in evolution growth, and depinning models. *Phys. Rev. E*, v. 53, p. 414 – 443, 1996.
- [84] VARRIALE, M. C. *Transição de localização em potenciais aleatórios com correlações de longo alcance*,. Tese (Doutorado) — UFRGS, Porto Alegre, (1994).
- [85] BUNDE, A.; HAVLIN, S.; KANTELHARDT, J. W.; RUSS, S. Localization in a highly correlated potential landscape. *Physica A*, v. 86, p. 151 – 161, 2000.
- [86] NASCIMENTO, E. M.; MOURA, F. A. B. F.; LYRA, M. L. Suppressed transmission in aperiodically modulated multilayered dielectric structures. *Photonics and Nanostructures – Fundamentals and Applications*, v. 7, N. 2, p. 101–107, 2009.
- [87] MACIA, E. The role of aperiodic order in science and technology *Rep. Prog. Phys.*, v. 69, N. 2, p. 397 – 441, 2006.
- [88] RUSS, S.; HAVLIN, S.; WEBMAN, I. Anderson localization in a correlated landscape near the band edge. *Philos. Mag. B*, v. 77, N. 5, p. 1449 – 1453, 1998.
- [89] IZRAILEV, F.M.; KROKHIN, A. A.; MAKAROV, N. M. Anomalous localization in low-dimensional systems with correlated disorder. *Phys. Rep.*, v. 512, N. 3 , p. 125 – 254, 2012.
- [90] KAYA, T. Hamiltonian map approach to 1D Anderson model. *Euro. Phys. Journ. B*, v. 67, N 2, p. 225 – 230, 2009.
- [91] FRENKEL, J. On the Transformation of light into Heat in Solids I. *Phys. Rev.*, v. 37, N. 1, p. 17 – 44, 1931.
- [92] FRENKEL, J. On the Transformation of light into Heat in Solids II. *Phys. Rev.*, v. 37, N. 10, p. 1276 – 1294, 1931.
- [93] WANNIER, G. H. The Structure of Electronic Excitation Levels in Insulating Crystals. *Phys. Rev.*, v. 52, N. 3, p. 191 – 197, 1937.
- [94] KNOX, R. S. Theory of excitons. Vol. 5. *New York: Academic Press*, 1963.

- 
- [95] MOTT, N. F. Conduction in polar crystals. II. The conduction band and ultra-violet absorption of alkali-halide crystals. *Trans. Faraday Soc.*, v. 34 , N. 0, p. 500 – 506, 1938.