

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS  
INSTITUTO DE FÍSICA

Leônade Daviliano da Silva

Absorção óptica, efeitos de campos elétricos e interação  
elétron-fônon em sistemas quaternários com desordem  
correlacionada

Maceió  
2014

Leônade Daviliano da Silva

Absorção óptica, efeitos de campos elétricos e interação  
elétron-fônon em sistemas quaternários com desordem  
correlacionada

*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 Bar-  
ros Fidelis de Moura*

Maceió  
2014

*Em memória de minha avó, Maria Pastora Izabel.*

## AGRADECIMENTOS

- A todos os meus parentes e familiares, em especial meu querido Pai Juvenal Daviliano da Silva, Minha querida mãe Cícera Maria de Jesus Silva, minha irmã Leandra Dayane da Silva, Minha linda sobrinha Láysa Mayane da Silva, ao meu filho de coração Lucas Emanuel Ferreira De Lima, a minha filha Késia Kauane Daviliano da Silva e minha querida esposa Keiliane Maria da Silva. Sou muito grato a todos por tudo que sou hoje;

- A todos os meus amigos do IF-UFAL, em especial meu amigo Carlos Henrique e José Fábio. E quero destacar mais ainda José Leandro Lúcio dos Santos, Anthony Sales Peixoto e Messias de Oliveira Sales obrigado pela grande contribuição durante o processo de trabalho. Sou muito grato a vocês;

- A todos os professores do IF-UFAL, devo a vocês a minha formação. Em especial ao meu professor Wandearley da Silva Dias, obrigado por ter acreditado em mim. A você professor toda minha gratidão e respeito por toda minha vida;

- À minha querida avó é matriarca de toda a família Maria Pastora Izabel que infelizmente nos deixou recentemente. Sou grato a você mãe por tudo que fez por nós. Sinto muito a sua falta e saiba que você sempre estará presente na minha vida;

- Ao meu orientador, professor e eterno grande mestre Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura. Sou grato mestre por acreditar em mim e ter me dado oportunidade de trabalhar com você. Durante esses anos muitos fatos não sairão da minha memória, no momento mais difícil da minha vida, com poucas palavras você conseguiu criar um suporte em que eu consegui me “escorar” e ficar de pé até conseguir me reerguer. Durante os exames de qualificação eu não tinha ânimo algum para fazer as provas, mas você como um mestre que é fez-me erguer a cabeça e ir até lá e conseguir os êxitos esperados. Mestre, com suas palavras, “não baixarei a guarda”. Devo imenso respeito ao mestre!

## RESUMO

Neste trabalho estudamos o transporte eletrônico em sistemas com desordem quaternária correlacionada. Consideramos um modelo unidimensional constituído por quatro tipos de átomos. As energias de ligação do elétron em cada um destes átomos foi dada por  $(\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \epsilon_4)$ . A distribuição das energias foi feita seguindo correlações de longo alcance semelhantes às utilizadas no trabalho de Moura e Lyra [F.A.B.F. de Moura and M.L.Lyra, PHYS. REV. LETT., **81** 3735 (1998)]. Desta forma, com a utilização de métodos numéricos foi estudado as propriedades de localização da função de onda, o espectro de absorção óptica e a dinâmica temporal de um pacote de onda. Em relação as propriedades de localização da função de onda, mostramos numericamente que a participação para correlações fracas ( $\gamma < 2$ ) é finita e os estados são localizados. Para  $\gamma > 2$  nossos resultados sugerem que o sistema apresenta estados metálicos. Nossa análise da absorção óptica mostrou um padrão interessante e bastante dependente do grau de correlação. Na ausência de correlação  $\gamma = 0$ , a absorção óptica em boa parte da banda é nula, entretanto em torno do topo da banda ( $E \sim 2$ ), existe uma região de absorção não nula. Em linhas gerais, o mesmo foi obtido para quaisquer valores com fracas correlações  $\gamma < 2$ . Para  $\gamma > 2$  nossos resultados indicam a presença de diversos picos de absorção. Utilizando um formalismo heurístico explicamos qualitativamente e quantitativamente a existência de cada pico. Além disso, estudamos os efeitos de campo elétrico e suas competições com o espalhamento causado pelas vibrações da rede. Na ausência de acoplamento elétron-fônon  $\alpha = 0$ , a presença de um campo elétrico produz oscilações coerentes se a desordem tiver correlações fortes ( $\gamma > 2$ ). Quando o acoplamento com a rede é ligado, nossos resultados indicam que o espalhamento por fônons destrói totalmente as oscilações de Bloch. Também investigamos o papel da interação com a rede sobre a dinâmica eletrônica no caso de desordem correlacionada. Nossos resultados numéricos indicam que o acoplamento elétron-fônon, na abordagem aqui utilizada, promove transporte de carga mesmo na presença de desordem sem correlação.

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

## ABSTRACT

In this work we study the electronic transport in systems with correlated quaternary disorder distribution. We consider a one-dimensional model with four kinds of atoms. The on site energy of each of these atoms are given by  $(\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \epsilon_4)$ . The distribution of energies was taken following a correlated rule similar to those used in the work of Moura and Lyra [F.A.B.F. de Moura and M.L.Lyra, PHYS. REV. LETT., **81** 3735 (1998)]. By using numerical methods, the localization properties, the optical absorption spectrum and the time dependent dynamic was studied. Regarding the localization properties of the wave function, we show numerically that for weak correlations ( $\gamma < 2$ ) the participation number is finite and the eigenstates are localized. For  $\gamma > 2$  our results suggest that the model displays metallic eigenstates. Our analysis of the optical absorption showed an interesting pattern and a strong dependence with the degree of correlation. In the absence of correlations ( $\gamma = 0$ ), the optical absorption is zero for the most part of energy spectrum except around to the top of the band ( $E \sim 2$ ), where a region of non-zero absorption is observed. In general, the same was obtained for any values weak correlations with  $\gamma < 2$ . For  $\gamma > 2$ , our results indicate the presence of several absorption peaks. Using a heuristic formalism we have explained qualitatively and quantitatively the existence of each peak. Furthermore we studied the effects of electric field and its competition with the scattering by lattice vibrations. In the absence of electron-phonon coupling ( $\alpha = 0$ ), the presence of an electric field promotes the appearance of wave packet oscillations at the limit of strong correlations ( $\gamma > 2$ ). When we switch on the coupling with the lattice vibrations, our results indicate that the scattering by phonons totally destroys the Bloch oscillations. We also investigated the role of interaction with the lattice vibrations on dynamic electronics in case of uncorrelated disorder. Our numerical results indicate that the electron-phonon coupling, within the approach used here, promotes electronic transport even at the presence of uncorrelated strong disorder.

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

## LISTA DE FIGURAS

1.1	Rede sem desordem e rede desordenada. Na figura da esquerda temos uma representação esquemática de uma estrutura de rede quadrada bidimensional de um cristal perfeito. Na figura da direita temos uma representação esquemática de uma estrutura de rede quadrada bidimensional com a implementação de lacunas na rede, distorções e diferentes átomos. . . . .	12
1.2	Representação de um potencial periódico típico de um cristal, com os núcleos dos íons representados pelos círculos fechados. . . . .	12
1.3	Representação esquemática de uma rede unidimensional de sítios $i$ 's. A parte A representa uma rede com desordem correlacionada, a desordem é caracterizada por bolinhas de tamanhos e texturas diferentes, semelhante ao modelo de Anderson unidimensional. B representa um rede unidimensional sem desordem correlacionada, semelhante ao modelo de Bloch unidimensional. . . . .	18
1.4	Ilustração da teoria de escala da condutância generalizada com o fator de escala $b$ . . . . .	19
1.5	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 [8]. . . . .	23
1.6	O expoente de Lyapunov $\Gamma$ , que na figura é representado por $\gamma(E)$ , versus $E$ para o modelo de dímeros aleatórios. Os sítios podem ter energias $\epsilon_A = 0.8$ com probabilidades $p$ e $\epsilon_B = 0.0$ com probabilidades $1 - p$ . O sítio com energia $\epsilon_A$ sempre aparece em pares. Observe que o Lyapunov é zero em uma única energia ressonante $E = \epsilon_A = 0.8$ . . . . .	27
1.7	Representação esquemática de uma rede unidimensional com um conjunto de átomos acoplados por molas. . . . .	27
2.1	Participação versus Energia para o parâmetro de correlação $\gamma = 0$ , número de sítio sendo $N = 2000, 4000, 8000$ e $16000$ e parâmetro de mapeamento $b = 0.5, 1.0, 1.5$ e $2.0$ . A figura mostra que a medida que o tamanho do sistema cresce, a participação permanece constante, e isso nos caracteriza um sistema isolante. . . . .	40
2.2	Participação versus Energia para o parâmetro de correlação $\gamma = 1$ , número de sítio sendo $N = 2000, 4000, 8000$ e $16000$ e parâmetro de mapeamento $b = 0.5, 1.0, 1.5$ e $2.0$ . A figura mostra uma suave dependência da participação com o tamanho do sistema, entretanto, os cálculos apresentados indicam estados localizados. . . . .	41
2.3	Participação versus Energia para o parâmetro de correlação $\gamma = 2$ , número de sítio sendo $N = 2000, 4000, 8000$ e $16000$ e parâmetro de mapeamento $b = 0.5, 1.0, 1.5$ e $2.0$ . A figura nos mostra que a medida que o tamanho do sistema aumenta, observamos uma dependência mais intensa da participação com o tamanho do sistema, e isso sugere que o sistema passa a ter características de sistema condutor. . . . .	42

- 2.4 Participação versus Energia para o parâmetro de correlação  $\gamma = 3$ , número de sítio sendo  $N = 2000, 4000, 8000$  e  $16000$  e parâmetro de mapeamento  $b = 0.5, 1.0, 1.5$  e  $2.0$ . A figura nos mostra que a participação cresce a medida que o sistema também cresce. Com isso, a participação apresenta uma forte dependência com o tamanho da cadeia, e isso é um forte indício de que o sistema seja condutor para este valor de  $\gamma$ . . . . . 43
- 2.5 (a-c) Desvio padrão local  $\Delta_{L0}$  versus o grau de correlação  $\gamma$  para  $b = 0.5, 1.0, 1.5$  e  $N = 2^{17}$  até  $2^{20}$ . Nestes cálculos mantivemos a razão  $N/L_0 = 8$  para todos os casos considerados. Com isso, observar claramente que a desordem local nas cadeias quaternárias consideradas é sempre maior que zero. . . . . 44
- 2.6 Absorção versus energia e parâmetro de correlação  $b$ .  $\gamma = 0, N = 2000$  e  $b$  variando de  $0.2$  até  $3.0$ , com variância  $\Delta = 0.2$ . Observamos que para o sistema sem correlação a figura apresenta apenas um pico de absorção com ( $E \sim 2$ ). . . . . 45
- 2.7 Absorção versus energia e parâmetro de correlação  $b$ .  $\gamma = 1, N = 2000$  e  $b$  variando de  $0.2$  até  $3.0$ , com variância  $\Delta = 0.2$ . Para uma grande faixa de energia a absorção é nula, entretanto, em torno do limite da banda temos uma região de absorção não nula. . . . . 46
- 2.8 Absorção versus energia e parâmetro de correlação  $b$ .  $\gamma = 2, N = 2000$  e  $b$  variando de  $0.2$  até  $3.0$ , com variância  $\Delta = 0.2$ . Podemos observar que a absorção apresenta uma estrutura de picos bem definidos na região de energia alta, mas podemos vislumbrar também de regiões de absorção não nulas além da presença dos picos de absorção. . . . . 47
- 2.9 Absorção versus energia e parâmetro de correlação  $b$ .  $\gamma = 3, N = 2000$  e  $b$  variando de  $0.2$  até  $3.0$ , com variância  $\Delta = 0.2$ . Podemos observar que a absorção é nula em todas as regiões de energia alta exceto na região dos picos. 48
- 2.10 Alargamento médio  $\sigma$  do pacote eletrônico versus o tempo (painel da esquerda) e a sua transformada de Fourier (painel da direita). Usamos o parâmetro de correlação  $\gamma = 0$ , acoplamento  $\alpha = 0$ , número de sítios  $N = 500$ , campo elétrico  $F = 0.2$  e  $b$  será considerado de  $0.5$  até  $2.0$ . Observamos que o pacote não apresenta uma oscilação coerente indicando a presença de muitas frequências fundamentais. . . . . 49
- 2.11 Alargamento médio  $\sigma$  do pacote eletrônico versus o tempo (painel da esquerda) e a sua transformada de Fourier (painel da direita). Usamos o parâmetro de correlação  $\gamma = 1$ , acoplamento  $\alpha = 0$ , número de sítios  $N = 500$ , campo elétrico  $F = 0.2$  e  $b$  será considerado de  $0.5$  até  $2.0$ . Observamos ausência de uma oscilação coerente por parte do alargamento médio. . . . . 50
- 2.12 Alargamento médio  $\sigma$  do pacote eletrônico versus o tempo (painel da esquerda) e a sua transformada de Fourier (painel da direita). Usamos o parâmetro de correlação  $\gamma = 2$ , acoplamento  $\alpha = 0$ , número de sítios  $N = 500$ , campo elétrico  $F = 0.2$  e  $b$  será considerado de  $0.5$  até  $2.0$ . Podemos ver que para  $b$  pequeno a largura do pacote eletrônico oscila de forma não coerente e para  $b = 2$  observamos uma oscilação aproximadamente coerente e uma transformada de Fourier típica de oscilação de Bloch. . . . . 51



- 
- 2.13 Alargamento médio  $\sigma$  do pacote eletrônico versus o tempo (painel da esquerda) e a sua transformada de Fourier (painel da direita). Usamos o parâmetro de correlação  $\gamma = 3$ , acoplamento  $\alpha = 0$ , número de sítios  $N = 500$ , campo elétrico  $F = 0.2$  e  $b$  será considerado de 0.5 até 2.0. Podemos ver claramente a presença de uma frequência fundamental de valor aproximado  $\omega \approx F$  para todos os valores de  $b$  considerados. . . . . 52
- 2.14 Desvio quadrático médio  $\sigma$  versus o tempo para  $\gamma = 3$ ,  $b = 0.5$  e acoplamento elétron-fônon  $\alpha = 0.05, 0.1, 0.3, 0.5$ . Para  $\alpha = 0.05$  e 0.1, existe um comportamento oscilatório bem caracterizado para tempos curtos e para tempos intermediário e longos observamos que o padrão de oscilação coerente desaparece. Para  $\alpha = 0.3$  e 0.5 observamos uma total ausência de oscilação por parte do pacote de onda. . . . . 53
- 2.15 Desvio quadrático médio  $\sigma$  versus o tempo para  $\gamma = 3$ ,  $b = 1.0$  e acoplamento elétron-fônon  $\alpha = 0.05, 0.1, 0.3, 0.5$ . Para  $\alpha = 0.05$  e 0.1, existe um comportamento oscilatório bem caracterizado para tempos curtos e para tempos intermediário e longos observamos que o padrão de oscilação coerente desaparece e no quadro da direita encontramos uma estrutura de alguns picos com o pico dominante em torno de  $\omega = F$ . Para  $\alpha = 0.3$  e 0.5 observamos uma total ausência de oscilação por parte do pacote de onda. . . . . 54
- 2.16 Desvio quadrático médio  $\sigma$  versus o tempo para  $\gamma = 3$ ,  $b = 1.5$  e acoplamento elétron-fônon  $\alpha = 0.05, 0.1, 0.3, 0.5$ . Semelhante a figura anterior para  $\alpha = 0.05$  e 0.1, existe um comportamento oscilatório bem caracterizado para tempos curtos e para tempos intermediário e longos observamos que o padrão de oscilação coerente desaparece e no quadro da direita encontramos uma estrutura de alguns picos com o pico dominante em torno de  $\omega = F$ . Para  $\alpha = 0.3$  e 0.5 observamos uma total ausência de oscilação por parte do pacote de onda. . . . . 55
- 2.17 Desvio médio quadrático  $\sigma$  versus o tempo  $t$  para  $\gamma = 0$ ,  $\alpha = 0.1, 0.2, 0.4$ ,  $F = 0$ ,  $b = 0.5$ ,  $b = 1.0$  e  $b = 1.5$ . Os resultados indicam que, apesar do forte grau de desordem não correlacionada considerado ( $\gamma = 0$ ), o alargamento médio cresce um pouco com o tempo. . . . . 56

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>10</b>
1.1	Introdução histórica . . . . .	10
1.2	Modelo de Bloch . . . . .	11
1.3	O modelo de Anderson . . . . .	14
1.4	Teoria de escala para a transição de Anderson . . . . .	16
1.5	O modelo de Anderson com correlação na desordem . . . . .	20
1.6	Correlação de longo alcance no modelo de Anderson . . . . .	23
1.7	Modelos com Desordem Correlacionada Discreta . . . . .	26
1.8	Interação elétron-fônon . . . . .	27
1.9	Interação com campo elétrico estático . . . . .	31
<b>2</b>	<b>MODELOS E RESULTADOS</b>	<b>34</b>
2.1	Modelo de Anderson com desordem quaternária . . . . .	34
2.2	Metodologia . . . . .	35
2.2.1	Participação . . . . .	36
2.2.2	Absorção óptica . . . . .	37
2.2.3	Dinâmica do pacote de onda, interação com campo elétrico e interação elétron-rede . . . . .	38
2.3	Resultados . . . . .	39
2.3.1	Resultados em relação ao número médio de participação . . . . .	39
2.3.2	Resultados em relação a absorção óptica . . . . .	45
2.3.3	Dinâmica eletrônica na presença de campo elétrico e interação elétron-fônon . . . . .	49
<b>3</b>	<b>CONCLUSÕES</b>	<b>58</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>60</b>

# 1

## INTRODUÇÃO

### 1.1 Introdução histórica

Durante muitos séculos as propriedades dos sólidos vêm despertando interesse em diversos cientistas, dentre esses cientistas então os físicos. Podemos iniciar essa discussão a partir de 1900 [1, 2, 3], quando P. Drude propôs um modelo em que os sólidos metálicos fossem formados por íons positivos em posições fixas e os elétrons pudessem se mover livremente por todo o sólido. Nesse modelo, os elétrons não interagem com os íons, então o sistema se comporta como um gás de elétrons livre. Apesar do modelo de Drude ser considerado simples e ter falhado em alguns aspectos, como por exemplo, na distinção entre condutores e isolantes, este modelo pode explicar propriedades importantes para os sólidos, como por exemplo, a dedução da lei de Ohm. Com o desenvolvimento da teoria quântica, o modelo de Drude sofreu algumas reformulações. Em 1927 [4] A. Sommerfeld trabalhou com a mesma hipótese de Drude, entretanto, ele foi capaz de acrescentar aspectos quânticos da matéria ao modelo de Drude, mas este modelo também não foi capaz de descrever a distinção entre metal e isolante.

No ano seguinte, foi proposto um modelo no qual os elétrons se moviam sobre a ação de um potencial periódico. Essa abordagem teve como objetivo estudar propriedades elétricas de um cristal. Nesse modelo, a energia cinética dos elétrons era muito menor que a energia potencial de interação entre eles. O presente modelo foi proposto por Felix Bloch [5]. Usando este modelo, foi mostrado que a função de onda do elétron em um cristal perfeito é estendida, então a probabilidade de encontrar o elétron é a mesma em todo o cristal. Além disso a teoria de Bloch introduziu o conceito de banda de energia e desta forma foi possível fazer uma distinção entre metal e isolante. Em 1958 [6, 7] Anderson propôs um modelo que propiciou o estudo dos efeitos da desordem sobre o transporte eletrônico. Esse modelo definiu o conceito de localização eletrônica na presença de desordem. O modelo de Anderson considera os elétrons se movendo sob a influência de um potencial aleatório. Anderson mostrou que a função de onda eletrônica sofre diversas reflexões no potencial aleatório e desta forma acontecem interferências destrutivas que localizam a função de onda em uma região finita do material. Posteriormente usando uma teoria de escala bem elaborada [8] Anderson e colaboradores mostraram que o efeito

da localização da função de onda é muito mais intenso em baixas dimensões, ou seja, quando a dimensão do sistema for menor igual a dois. A teoria de escala diz que para  $d \leq 2$  todos os estados são localizados mesmo no limite de desordem fraca. A teoria da localização eletrônica teve um sucesso considerável explicando por exemplo, transições de fases existentes em certos semicondutores. Em linhas gerais, a teoria de Anderson funciona bem se a distribuição de desordem não apresentar correlações intrínsecas. Contudo, no final dos anos oitenta [9, 10, 11] foi mostrado que se correlações forem introduzidas na distribuição de desordem a localização de Anderson pode ser suprimida. Alguns trabalhos envolvendo este tipo de correlação [12, 13, 14] mostraram inclusive a existência de uma banda de estados estendidos.

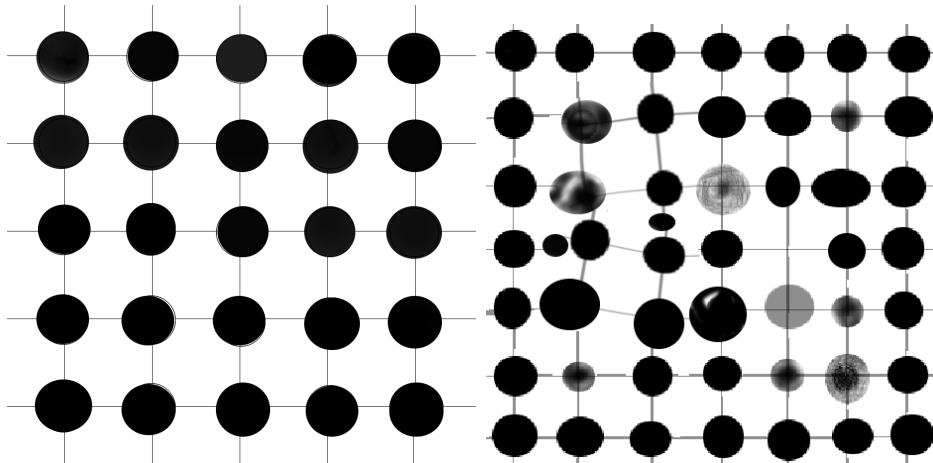
Dentro do contexto de estados estendidos e localizados em modelos de baixa dimensionalidade com desordem correlacionada, efeitos de interação representam sempre desafios e propriedades importantes. Neste trabalho, vamos analisar a dinâmica de um elétron em um sistema unidimensional idealizado composto por quatro tipos de átomos com desordem correlacionada. Com isso, estudamos as propriedades de localização da função de onda eletrônica, o espectro de absorção óptica e a dinâmica temporal de um pacote de onda. Também, foi feita uma análise desse problema considerando a presença de um campo elétrico externo ao nosso sistema. Outro tema de fundamental importância, que, aqui foi estudado é passar a considerar o termo de interação elétron-rede. Daí, vamos considerar que a rede atômica é um sistema harmônico massa mola. O acoplamento entre a dinâmica eletrônica e as vibrações da rede será feito escrevendo a energia cinética local do elétron em função das distâncias atômicas.

Antes de concentrarmos nossa atenção em nosso modelo, é necessário definir alguns conceitos. Vamos definir primeiro o que vêm a ser um sistema sem desordem, onde podemos apresentar de maneira mais clara o modelo de Bloch, e posteriormente, definir o que vêm a ser sistemas desordenados. Com isso, podemos apresentar o modelos de Anderson com mais facilidade, bem como, descrever um pouco os resultados já existentes na literatura em relação ao tema em questão.

## 1.2 Modelo de Bloch

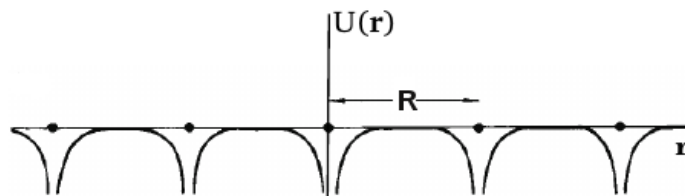
Antes de iniciarmos nossa discussão a respeito do modelo de Bloch, vamos considerar inicialmente um sistemas sem desordem [15], ou seja, uma estrutura cristalina perfeita. Para isso, considere a figura (1.1), lado esquerdo. Ela é uma representação bidimensional de uma rede cristalina perfeita, ou seja, um conjunto de átomos ou moléculas iguais com espaços regulares. Na abordagem de Bloch [16, 17, 18], que por sua vez, é aplicada apenas a sistemas sem desordem, as interações entre elétrons são desprezadas. Então, há interação do elétron apenas com os íons da rede, que por sua vez, é representado por um potencial de interação  $U(\mathbf{r})$ , onde  $\mathbf{r}$  indica a posição do elétron no material. O fato dos

Figura 1.1: Rede sem desordem e rede desordenada. Na figura da esquerda temos uma representação esquemática de uma estrutura de rede quadrada bidimensional de um cristal perfeito. Na figura da direita temos uma representação esquemática de uma estrutura de rede quadrada bidimensional com a implementação de lacunas na rede, distorções e diferentes átomos.



Fonte: Autor 2014

Figura 1.2: Representação de um potencial periódico típico de um cristal, com os núcleos dos íons representados pelos círculos fechados.



Fonte: C. Kittel, 1976 [17]

Íons ocuparem posições regulares implica uma periodicidade espacial do potencial  $U(\mathbf{r})$ , onde  $\mathbf{R}$  é o vetor de Bravais típico da rede. Veja a figura (1.2). Dai, o potencial terá a seguinte propriedade:

$$U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r} + \mathbf{R}). \quad (1.1)$$

Como bem sabemos, nesse problema não levamos em consideração a interação elétron-elétron. Então, os autoestados de um elétron que se move em um cristal são dados pela equação de Schrödinger. Dai, a função de onda associada ao potencial  $U(\mathbf{r})$  deve satisfazer a equação abaixo:

$$H\psi = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U(\mathbf{r})\psi \right] = E\psi, \quad (1.2)$$

Devido a periodicidade da rede ao substituirmos  $\mathbf{R} + \mathbf{r}$  por  $\mathbf{r}$  a equação permanece inalterada nos operadores que atuam sobre  $\psi$ . Portanto, o teorema de Bloch mostra que as soluções para a equação de Schrödinger devem ser:

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (1.3)$$

nessa equação temos  $\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  que representa os autoestados,  $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  é a função periódica ou a chamada função de Bloch e  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  indica uma onda plana. Com a substituição de  $\mathbf{R} + \mathbf{r}$  por  $\mathbf{r}$  temos:

$$u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}). \quad (1.4)$$

Contudo,  $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  tem a periodicidade da rede, o subscrito  $\mathbf{k}$  indica que a função de onda  $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  depende do vetor  $\mathbf{k}$ , e por fim,  $n$  representa as múltiplas soluções da equação de Schrödinger para um vetor de onda  $\mathbf{k}$ . Combinando as equações (1.3) e (1.4)

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.5)$$

que é conhecido como teorema de Bloch. Sem dúvidas, o modelo de Bloch tem fundamental importância no desenvolvimento da física do século *XX*. A partir do seu trabalho diversos fatores foram compreendidos, dentre estes fatores podemos destacar o fato de que quando o elétron está contido em uma rede periódica e interage apenas com os íons da rede, a função de onda do elétron se estende por todo o sistema. Outro fato importante que foi explicado em sistemas cristalino, foi a diferença entre condutores, isolantes e semicondutores. Entretanto, boa parte dos sistemas reais não são cristalinos, em geral exibem defeitos ou total ausência de quaisquer simetrias ou periodicidades. Desta forma, vem a necessidade de estudar a presença de desordem nos sistemas [15]. Para entender a definição de desordem considere a figura (1.1), lado direito. Enquanto na figura (1.1), lado esquerdo, temos um conjunto de átomos ou moléculas iguais e com espaços regulares, a figura (1.1), lado direito, inclui lacunas na rede, distorção e impurezas ou íons distintos. Portanto, a periodicidade que foi imposta no potencial de Bloch é violada em um sistema desordenado. Dentro desse contexto vamos apresentar o formalismo de Anderson que foi proposto em 1958 e o mesmo permite entender a natureza dos autoestados eletrônicos em sistemas desordenados.

### 1.3 O modelo de Anderson

Em 1958 Anderson propôs um modelo, em que passou a ser possível o estudo dos efeitos da desordem sobre o transporte eletrônico. Esse modelo definiu o importante conceito de localização eletrônica na presença de desordem. Com esse modelos, Anderson mostrou que a função de onda eletrônica sofre diversas reflexões no potencial aleatório e dessa forma acontecem interferências destrutivas que localizam a função de onda em uma região finita do material.

O modelo de Anderson [19, 20, 21] considera um elétron movendo-se em um sistema desordenado sobre a influência de um potencial aleatório. No presente modelo, vamos considerar dois termos de fundamental importância, eles são: a energia potencial que representa o acoplamento do elétron com os átomos da rede e a energia cinética entre átomos vizinhos (também chamado de “hopping”). Vamos assumir uma representação unidimensional, como na figura (1.3).A.

No modelo de Anderson o elétron pode ocupar os sítios  $i$ 's, que têm energia potencial  $\epsilon_i$ . E o que vai caracterizar a desordem nesse sistema é o fato de que as energias de cada sítio estarem distribuídas de forma aleatória. Na figura (1.3).A, esta aleatoriedade é representado pelos diferentes tamanhos e texturas das bolinhas. Tais energias estão compreendidas dentro do intervalo  $[-W/2, W/2]$ , onde  $W$  caracteriza a largura da desordem. Para que o elétron salte de um sítio  $i$  para um sítio vizinho  $j$ , ou como na figura, salte de  $i$  para  $i \pm 1$  por exemplo, é necessário uma energia  $\tau_{i,j}$ . Esse termo é chamado termo de “hopping”, ou seja, ele é a energia cinética necessário para o elétron saltar do sítio  $i$  para o sítio  $j$ . O operador Hamiltoniano que descreve esse modelo é expresso por:

$$H = \sum_i \epsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{i \neq j} \tau_{ij} |i\rangle\langle j|. \quad (1.6)$$

$|i\rangle$  indica o estado que representa o orbital atômico centrado no sítio  $i$ . Uma representação matricial  $N \times N$  do hamiltoniano de Anderson para o caso unidimensional é

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

O conjunto formado pelos vetores  $|i\rangle$  representa uma base em que podemos expandir seus autoestados  $\psi$  do hamiltoniano  $|\psi\rangle = \sum_i c_i |i\rangle$ , onde  $c_i$  caracteriza a amplitude da função de onda no sítio  $i$ . Para determinar os autoestados e as autoenergias basta usar a equação de autovalores, ou seja,  $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ . Assim permutando  $i, j$  e atuando  $|i\rangle$  na

expressão(1.6) iremos obter a seguinte expressão:

$$H|i\rangle = \epsilon_i|i\rangle + \sum_{j \neq i} \tau_{ji}|j\rangle. \quad (1.7)$$

Agora, se atuarmos  $|\psi\rangle$  em  $H$ , iremos obter

$$H|\psi\rangle = \sum_i c_i H|i\rangle. \quad (1.8)$$

Combinando as expressões (1.7) com a expressões (1.8) fica

$$H|\psi\rangle = \sum_i \epsilon_i c_i |i\rangle + \sum_{j \neq i} \tau_{ji} c_j |j\rangle, \quad (1.9)$$

Ao fazermos uma nova mudança de variável no segundo termo da equação (1.9),

$$H|\psi\rangle = \sum_i \left( \epsilon_i c_i + \sum_{i \neq j} \tau_{ij} c_j \right) |i\rangle \quad (1.10)$$

como

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (1.11)$$

logo

$$E \sum_i c_i |i\rangle = \sum_i \left( \epsilon_i c_i + \sum_{i \neq j} \tau_{ij} c_j \right) |i\rangle, \quad (1.12)$$

dai obteremos a seguinte expressão

$$E c_i = \epsilon_i c_i + \sum_j \tau_{ij} c_j. \quad (1.13)$$

Portanto se considerarmos um sistema unidimensional de sítio  $i$ , e utilizando o hopping deste sistema como sendo constante e diferente de zero entre os primeiros sítios vizinhos, e deixando  $\tau$  em evidência na expressão (1.13) iremos obter

$$E c_i = \epsilon_i c_i + \tau \sum_{j=i-1}^{j=i+1} c_j \quad (1.14)$$

que vai resultar em

$$E c_i = \epsilon_i c_i + \tau (c_{i-1} + c_{i+1}) \quad (1.15)$$



Para o caso de um sistema unidimensional sem desordem, ou seja, um sistema cristalino onde a largura da desordem seja ( $W = 0$ ) e com as energias potenciais do sítio  $\epsilon_i$ s iguais, como representado por bolinhas de mesmo tamanho na figura (1.3).B a equação (1.15) com  $\epsilon_i = 0$ , fica

$$Ec_i = \tau (c_{i-1} + c_{i+1}). \quad (1.16)$$

as soluções para esta equação é dada por

$$c_n = c_0 e^{ink} \quad (1.17)$$

a equação a cima é satisfeita se

$$E = 2\tau \cos(k), \quad (1.18)$$

Então a energia  $E$  está compreendida dentro do intervalo  $-2\tau < E < 2\tau$ . Logo, para um cristal  $1d$  a largura da banda permitida é  $B = 4\tau$ . De forma geral a largura da banda permitida é expressa por  $B = 2z\tau$ , onde  $z$  representa o número dos primeiros vizinho de uma rede de dimensão  $d$ . Anderson em 1958 em seu modelo, mostrou que se a razão entre  $W/B$  for suficientemente grande, todos os estados eletrônicos são exponencialmente localizados e se a razão entre  $W/B$  for aproximadamente 1 o sistema apresenta uma desordem intermediária. No caso de desordem intermediária, Anderson mostrou a possibilidade de uma transição de fase entre estados localizado e estendidos. Esta transição ficou conhecida na literatura como transição de Anderson. Durante a década de setenta Anderson e colaboradores perceberam a dependência da teoria da localização com a dimensão do sistema através de uma teoria de escala bem elaborada. Vamos revisar a teoria de escala apresentada por Anderson e colaboradores na próxima seção.

## 1.4 Teoria de escala para a transição de Anderson

O estudo da transição de Anderson só veio a ser possível devido à teoria de escala proposta por Abrahams, Anderson, Licciardello e Ramakrishnan [8]. Ela mostra que sistemas de baixa dimensionalidade, ou seja, com dimensões menores iguais a dois, há ausência de uma transição de Anderson para qualquer grau de desordem.

A Teoria de escala tem como base a dependência de escala da condutância generalizada  $g$ . Esta teoria foi aplicada na reformulação do modelo de Anderson feita por Thouless [22]. Nessa abordagem os sólidos são formados por várias caixas acopladas umas com as outras e cada caixa tem volume  $L^d$ , onde  $L$  indica os lados da caixa e  $d$  indica as dimensões da mesma. As energias  $W$  e  $\tau$  do modelo de Anderson serão generalizadas para este modelo de hipercubos. A largura da desordem  $W$  será substituída pelo espaçamento médio entre

os níveis de energia  $\Delta E$ .  $\Delta E$  tem que satisfazer a condição  $\Delta E \approx \frac{W}{N}$ . Já o termo de hopping  $\tau$  irá corresponder ao deslocamento causado pelas alterações nas condições de contorno de cada volume que ocupa o sólido  $\delta E$ . Logo  $(\frac{W}{\tau})$  no modelo de Anderson nos fornece uma medida do grau de desordem, agora analogamente  $(\frac{\Delta E}{\delta E})$  tem característica de parâmetro de desordem do sistema. Se um elétron executa um movimento aleatório semelhante ao Movimento Browniano no interior de uma caixa de lados  $L$ , então

$$T_D = \frac{L^2}{D}, \quad (1.19)$$

Sendo  $D$  a constante de difusão e  $T_D$  o tempo necessário para um pacote de onda eletrônica difundir até os contornos da caixa. Fazendo uso da relação de incerteza ( $\delta T \delta E \geq \hbar$ ), temos que:

$$\delta E = \frac{\hbar}{T_D}. \quad (1.20)$$

Por meio da relação de Einstein entre a condutância  $\sigma$  e as propriedades de difusão, temos que:

$$\sigma = e^2 D n(E), \quad (1.21)$$

aqui  $n(E)$  indica a densidade de estados média. Fazendo uso das equações (1.19), (1.20) e (1.21), iremos encontrar:

$$\delta E = \frac{\sigma \hbar}{e^2 L^2 n(E)}, \quad (1.22)$$

ou seja,  $\delta E$  no limite macroscópico pode ser expresso em função da condutividade  $\sigma$ . E por sua vez,

$$n(E) = \frac{1}{L^d \Delta E} \quad (1.23)$$

onde  $n(E)$  indica a densidade média de estados escrita em função do espaçamento médio entre os níveis de energia  $\Delta E$ . Se substituirmos a equação (1.22) em (1.23), iremos encontrar

$$\frac{\delta E}{\Delta E} = \frac{\hbar \sigma}{e^2} L^{d-2}. \quad (1.24)$$

Essa mesma equação pode ser reescrita como

$$g(L) \equiv \frac{\delta E}{\Delta E} = \frac{\hbar \sigma}{e^2} L^{d-2}. \quad (1.25)$$

Nessa expressão  $g(L)$  vai indicar a condutância generalizada. Como esperado a equa-

ção (1.25) é semelhante a razão  $\tau/W$  no modelo de Anderson tradicional, que por sua vez, indica uma medida na intensidade do grau de desordem no sistema. Logo:

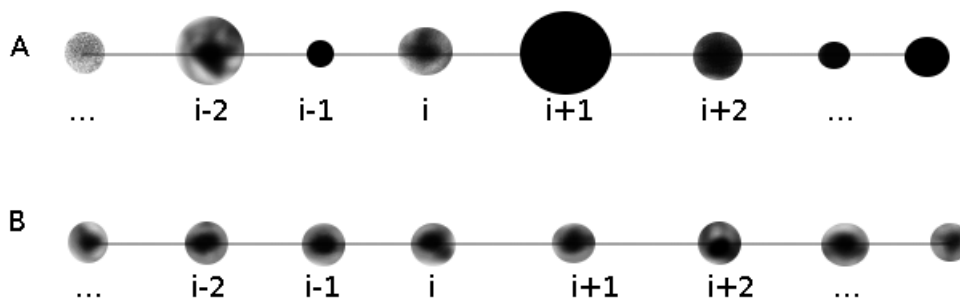
- ( $\delta E > \Delta E$ ) indica estados estendidos que são sensíveis à mudança nas condições de contorno;
- ( $\delta E < \Delta E$ ) indica estados localizados que não são sensíveis à mudança nas condições de contorno.

A equação (1.25) é aplicada somente para o caso de estados estendidos no limite macroscópico, desde que a equação (1.22) seja satisfeita nesse limite. Na equação (1.25),  $g(L)$  indica a condutância generalizada em unidades de  $\frac{e^2}{h}$ , pois o termo  $\sigma L^{d-2}$  indica a condutância de um cubo de lados  $L$  e dimensão  $d$ . Portanto, a teoria de escala examina a dependência de  $g(L)$  de acordo com o comprimento da escala utilizada. Agora sendo  $g_0$  a condutância generalizada para um sistema formado por uma caixa acoplada de volume  $L_0^d$ , ou seja,  $g(L_0) = \frac{\delta E(L_0)}{\Delta E(L_0)} = g_0$ . Dai, dado  $g_0$  numa escala de comprimento  $L_0$ , a teoria de escala assume que podemos obter uma nova condutância  $g$  em termos de uma nova escala maior  $L = bL_0$ . Portanto, a nova condutância é claramente determinada pelas quantidades  $g_0$  e pelo fator de escala  $b$ . Esta ideia é bem ilustrada na figura (1.4). Tratando  $b$  como uma transformação contínua, podemos analisar o comportamento de escala da função  $g$  a partir da seguinte função:

$$\beta(g) = \frac{d \ln g(L)}{d \ln L}. \quad (1.26)$$

Analisando esta função, observamos que se ( $\beta > 0$ ), logo  $L$  cresce com o crescimento de  $g$ , enquanto que ( $\beta < 0$ ),  $g$  decresce com o crescimento de  $L$ . Na figura (1.5) há uma representação qualitativa de  $\beta(g)$  para os seguintes valores de  $d = 1, 2$  e  $3$ , tal figura foi proposto por Abrahams, Anderson, Licciardello e Ramakrishman [8]. O comportamento qualitativo de  $\beta(g)$  pode ser melhor entendido tomando os limites assintóticos de  $g \rightarrow 0$

Figura 1.3: Representação esquemática de uma rede unidimensional de sítios  $i$ 's. A parte A representa uma rede com desordem correlacionada, a desordem é caracterizada por bolinhas de tamanhos e texturas diferentes, semelhante ao modelo de Anderson unidimensional. B representa um rede unidimensional sem desordem correlacionada, semelhante ao modelo de Bloch unidimensional.



Fonte: Autor 2014

e  $g \rightarrow \infty$  na equação (1.26). Portanto:

- Para ( $g \rightarrow \infty$ ), ou seja, no limite de forte acoplamento e baixo grau de desordem,  $g(L)$  é dada por:

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \beta(g) \approx d - 2, \quad (1.27)$$

$g$  cresce com o aumento de  $L$ , daí

$$\beta(g \rightarrow \infty) = \begin{cases} 1 & \text{para } d = 3, \\ 0 & \text{para } d = 2, \\ -1 & \text{para } d = 1. \end{cases} \quad (1.28)$$

Ver lado direito da figura (1.5).

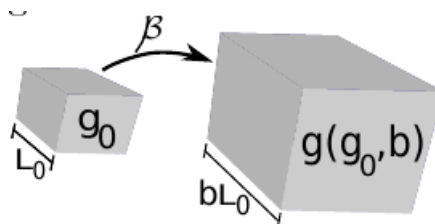
- Para ( $g \rightarrow 0$ ), ou seja, no limite de fraco acoplamento e forte desordem, o teorema de Anderson prevê que os estados eletrônicos são localizados e apresentam decaimento exponencial com a distância. Considerando um elétron confinado dentro de uma caixa de dimensões  $L$ , a amplitude da função de onda desse elétron é da ordem de  $e^{-\Gamma L}$ , nesse caso  $\Gamma$  indica o expoente de Lyapunov, que por sua vez, é o inverso do comprimento de localização  $\lambda$ .

O acoplamento entre as caixas também apresenta decaimento exponencial com  $L$ , ou seja,  $g(L) \propto e^{-\Gamma L}$ . A partir da equação (1.26), teremos que:

$$\lim_{g \rightarrow 0} \beta(g) \approx \ln g. \quad (1.29)$$

Nesse contexto podemos fazer as seguintes observações. Vejamos como  $g \sim e^{-\Gamma L}$ , ou seja, quando  $L$  aumenta a condutância diminui. Daí, a partir da equação (1.29) observamos que quando  $g \rightarrow 0$ , logo  $\beta(g) \rightarrow \infty$ , independente da dimensão. Analisando a figura (1.5) e assumindo que  $\beta(g)$  varia lentamente e monotonicamente entre ( $g \rightarrow 0$  e  $g \rightarrow \infty$ ), observamos que para  $d = 1$  e  $d = 2$ ,  $g$  diminui a medida que  $L$  cresce, logo não existe uma transição metal isolante. Agora para  $d = 3$ , observamos dois comportamentos, eles são:

Figura 1.4: Ilustração da teoria de escala da condutância generalizada com o fator de escala  $b$ .



Fonte: W. S. Dias, 2011 [20]

- ( $\beta(g) > 0$ )  $g$  cresce a medida que  $L$  também cresce, característica de sistema condutor;
- ( $\beta(g) < 0$ )  $g$  diminui a medida que  $L$  cresce, característica de sistema não condutor.

Isso nos mostra que para  $d = 3$  observamos uma transição metal-isolante no sistema em um ponto crítico  $g_c$  que separa ( $\beta(g) < 0$ ) e ( $\beta(g) > 0$ ). Com isso, fica claro que a transição de Anderson está inteiramente ligada com a dimensão do sistema, ou seja, há transição em sistemas com 3 dimensões. Tal observação também é encontrada nas seguintes referências [19, 23, 24].

## 1.5 O modelo de Anderson com correlação na desordem

Estudando a teoria de escala para o modelo de Anderson vimos que sistemas com uma ou duas dimensões apresentam um comportamento isolante com estados localizados. Por outro lado, sistemas com três dimensões podem apresentar uma transição metal-isolante. Entretanto, nas últimas décadas vários trabalhos trazem outra característica em relação aos resultados apresentados anteriormente [25, 26, 27]. A implementação de desordem correlacionada ou sequência pseudo-aleatória mostra um comportamento não previsto pela teoria de escala para o modelo de Anderson. Em 1976, o modelo **tight-binding** unidimensional proposto por Theodorou e Cohen com amplitudes de hopping aleatórias mostra uma energia crítica no centro da banda, onde a função de onda está no estado estendido [28, 29, 30]. No ano seguinte foi mostrado por Fleishman e Licciardello [31] que para este caso a função de onda apresenta um comportamento assintótico definido por  $\psi(r) \propto e^{-\lambda\sqrt{r}}$ .

Durante a década de oitenta alguns trabalhos consideraram a distribuição de energias dos sítios definidos pela equação (1.30),

$$\epsilon_n = V \cos(k|n|^\nu). \quad (1.30)$$

Na equação acima  $k = 2\pi\alpha$  onde  $\alpha$  indica um número irracional compreendido entre 0 e 1 e  $V, \nu$  são parâmetros característicos do potencial. Aspectos referentes a discussão podem ser vistos nas referências [32, 33, 34]. Considerando o modelo tight-binding unidimensional com energias regidas pela equação (1.30), foi demonstrado a existência de estados localizados e estados estendidos dependendo dos valores de  $V$  e  $\nu$  da seguinte forma:

- Para  $0 < \nu < 1$  e  $V < 2$ , o sistema apresenta estados estendidos compreendidos entre  $-2 + V < E < 2 - V$  e estados localizados compreendidos entre  $2 - V < E < 2 + V$  e  $-2 - V < E < -2 + V$ ;
- Para  $0 < \nu < 1$  e  $V \leq 2$ , o sistema apresenta estados localizados;
- Para  $\nu = 1$  e  $V < 2$ , o sistema apresenta estados estendidos;

- Para  $\nu = 1$  e  $V \geq 2$ , o sistema apresenta estados localizados;
- Para  $1 < \nu < 2$ , todos os estados do sistema são localizados. Entretanto, o expoente de Lyapunov<sup>1</sup> se aproximam de zero no centro da banda;

- $\nu \geq 2$ , todos os estados do sistema são exponencialmente localizados, uma característica semelhante ao modelo de Anderson unidimensional com desordem não correlacionada.

Em 1989 Flores [35, 36] mostrou de maneira generalizada que quando existe correlações entre o termo de *hopping* e o potencial diagonal (energia *on-site*) existe uma ressonância no centro da banda. Outro trabalho de grande importância na literatura foi o estudo feito por Dunlap e colaboradores [37] referente a liga binária com correlações tipo dímeros. No modelo de liga binária estudado na referência [37], há uma discretização na desordem do sistema, em que, os sítios da cadeia apresentam dois tipos de energias  $\epsilon_A$  e  $\epsilon_b$ , distribuídas na cadeia de forma aleatória com probabilidades  $p$  e  $1 - p$ . Para introduzir correlações tipo dímeros, basta considerar que uma das energias,  $\epsilon_A$ , por exemplo, aparecem na cadeia sempre aos pares. Usando métodos numéricos e analíticos foi mostrado que este modelo binário apresenta uma ressonância com energia  $E = \epsilon_A$ . O modelo tight binding unidimensional com distribuição de desordem tipo dímeros foi também investigado em 1992 por Bovier [38]. Nesse trabalho ele usou teoria de perturbação para analisar o comportamento da densidade de estado e o coeficiente de Lyapunov. Agora vamos apresentar de forma sucinta o formalismo numérico de fundamental importância para demonstrar a existência das energias ressonantes em cadeias binárias com correlações tipo dímeros [39]. Considerando o modelo tight binding unidimensional dado pela hamiltoniana:

$$H = \sum_n \epsilon_n |n\rangle \langle n| + \tau \sum_n [|n\rangle \langle n+1| + |n\rangle \langle n-1|], \quad (1.31)$$

aqui  $|n\rangle$  representa o orbital atômico centrado no sítio  $n$  e com  $\epsilon_n$  sendo o potencial aleatório. Usando  $|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$  a equação de Schrödinger fica:

$$\tau (c_{n+1} + c_{n-1}) = (E - \epsilon_n) c_n. \quad (1.32)$$

Usando técnicas de matriz de transferência [7, 19] a expressão anterior pode ser escrita como

$$\begin{pmatrix} c_{n+1} \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{(E-\epsilon_n)}{\tau} & -\frac{\tau}{\tau} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_n \\ c_{n-1} \end{pmatrix}. \quad (1.33)$$

Agora usando uma redefinição de variáveis, temos,

$$c_{n+1} = T_n c_n, \quad (1.34)$$

---

<sup>1</sup>ver página 17.

onde

$$c_{n+1} = \begin{pmatrix} c_{n+1} \\ c_n \end{pmatrix} \quad (1.35)$$

$T_n$  é a matriz de transferência, que por sua vez, pode ser escrita como:

$$T_n = \begin{pmatrix} \frac{(E-\epsilon_n)}{\tau} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.36)$$

Logo, usando a equação anterior e a equação (1.34), podemos obter as amplitudes da função de onda nos sítios  $N - 1$  e  $N$  através do produtório de todas as matrizes de transferência, ou seja,

$$c_{n+1} = \prod_{l=0}^n T_l c_0. \quad (1.37)$$

Dai teremos o comprimento de localização

$$\lambda^{-1} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln |c_n|. \quad (1.38)$$

Como o expoente de Lyapunov é expresso por  $\Gamma = \lambda^{-1}$ , então

$$\Gamma = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln |c_n|. \quad (1.39)$$

No limite termodinâmico se  $\Gamma$  é finito, a largura da função de onda é finita e o estado é localizado. Por outro lado, se no limite termodinâmico  $\Gamma$  tender a zero, o estado eletrônico é estendido. Agora podemos obter as energias de ressonância aplicando o formalismo de matriz de transferência ao modelo de dímeros aleatórios. Considere uma cadeia com  $N$  átomos com energias  $\epsilon_A$  e  $\epsilon_B$ , com respectivas probabilidades  $p$  e  $1 - p$ , como dito anteriormente  $\epsilon_A$  sempre se apresenta aos pares. O termo de hopping  $\tau_{i,i+1} = 1.0$  com  $i = 1, \dots, N$ . Agora analisando a figura (1.6) com  $10^7$  átomos,  $p = 0.5$ ,  $\epsilon_A = 0.8$  e  $\epsilon_B = 0.0$ . Observe que  $\Gamma$  é finito para todos os valores de  $E$ , exceto para  $E = 0.8$ , então este valor é o valor do dímero  $\epsilon_A$ . Em  $E = \epsilon_A = 0.8$ , para os átomos com energia  $\epsilon_A$  o termo  $E - \epsilon_A = 0.0$  da matriz de transferência é zero. Logo, para esta energia o produto de duas matrizes de transferência é  $-I$ . Os dímeros com estas energias não espalham a função de onda com energia  $E = \epsilon_A$ , eles apenas alteram sua fase. Com o comportamento de  $\lambda$ , ver equação (1.36), próximo da ressonância  $(E - E_c)^2$  o sistema apresenta  $\sqrt{N}$  estados não espalhados. Uma das aplicações deste modelo é encontrada em um tipo de polímero de alta condutividade chamado polianilina [40].

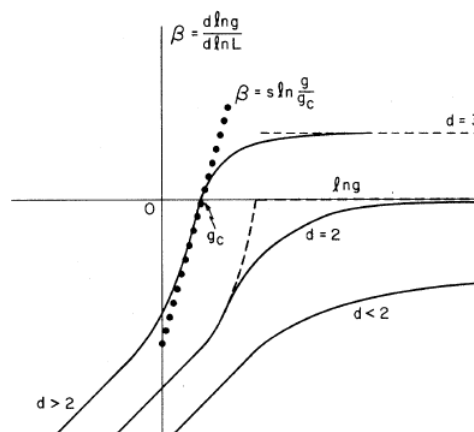
## 1.6 Correlação de longo alcance no modelo de Anderson

Nos últimos anos vários trabalhos que envolvem correlação no modelo de Anderson vêm despertando interesse da comunidade científica [41, 42, 43]. Como visto anteriormente, a presença de correlações na desordem promove o aparecimento de um comportamento não previsto pelo modelo de Anderson. Entretanto, como estudamos anteriormente, a presença de uma correlação de curto alcance na desordem do modelo de Anderson unidimensional induz o aparecimento de algumas energias ressonantes. Por outro lado, a presença de uma correlação de longo alcance na desordem pode induzir uma transição metal-isolante em sistemas unidimensionais. Agora iremos apresentar efeitos causados pela inclusão da correlação de longo alcance na desordem do modelo de Anderson unidimensional [44, 45, 46]. Inicialmente vamos considerar um sistema unidimensional, em que cada sítio da cadeia tenha interação apenas com seus sítios vizinhos e a distribuição de desordem apresente correlações de longo alcance. Esta distribuição de desordem apresenta uma densidade espectral que segue aproximadamente uma lei de potência com a seguinte forma  $S(k) = k^{-\gamma}$ , onde  $k$  é obtido através da transformada de Fourier da função correlação de dois pontos  $\langle \epsilon_i \epsilon_j \rangle$ ,  $k = 1/\lambda$ , onde  $\lambda$  é o comprimento de onda das ondulação no potencial;  $\gamma$  é um parâmetro que mede o grau de correlação da distribuição das energias.

Em 1998 Moura e Lyra [47] mostraram que sistemas com correlação de longo alcance podem induzir uma fase metálica. No trabalho de Moura e Lyra, a desordem no sistema foi escolhida de maneira que obedeça um Movimento Browniano Fracionário (M.B.F) com uma densidade espectral  $S(k) = 1/k^\gamma$ .

O (M.B.F), na verdade é uma generalização de uma função aleatória [48, 49]. Sendo  $x(t)$  a posição da partícula em (M.B.F) num instante  $t$ , onde  $x(t = 0) = 0$ . Agora seja  $C(t)$  uma função encarregada de medir a correlação entre os incrementos no passados

Figura 1.5: 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 [8].



Fonte: Abrahams, 1979 [8]



$-x(-t)$  e no futuro  $x(t)$ , então,

$$C(t) = \left( \frac{\langle -x(-t)x(t) \rangle}{x(t)^2} \right) = 2^{2H-1} - 1, \quad (1.40)$$

onde  $H$  é o expoente de Hurst. Percebe-se que se  $H = 1$ ,  $C(t) = 0$  e isso nos caracteriza um Movimento Browniano Simples, caso em que não há correlação entre  $x(t)$  e  $-x(-t)$ . Com intuito de gerar uma sequência aleatória  $x(t)$ , em que apresenta uma densidade espectral tipo lei de potência  $S(w_k) = w^{-\gamma}$ , Moura e Lyra utilizaram o formalismo da transformada de Fourier [50, 51, 52] e obtiveram a equação a baixo:

$$x_n(t) = \sum_{k=1}^{N/2} (S(w_k)\Delta w)^{1/2} \cos(w_k t_n + \phi_k), \quad (1.41)$$

onde  $w_k$  é múltiplo da frequência fundamental  $\Delta w = 2\pi/T$ , ou seja,  $w_k = k\Delta w$ . A  $N/2$  fases  $\phi_k$  no intervalo  $[0, 2\pi]$  representa a única fonte de ruído da série. Supondo  $\tau = 1$  e  $S(w_k) = w_k^{-\gamma}$ , temos

$$x_n(t) = \sum_{k=1}^{N/2} \left[ k^{-\gamma} \left( \frac{2\pi}{N} \right)^{1-\gamma} \right]^{1/2} \cos \left( \frac{2\pi n K}{N} + \phi_k \right) \quad (1.42)$$

Que é a equação para os termos da série e  $\gamma$  controla a correlação. Dai, para gerar a correlação de longo alcance no modelo de Anderson unidimensional Moura e Lyra consideraram as energias dos sítios como sendo  $\epsilon_n$  gerada pela equação (1.42), logo a equação para induzir a desordem nas energias dos sítios é:

$$\epsilon_n = \sum_{k=1}^{N/2} \left[ k^{-\gamma} \left( \frac{2\pi}{N} \right)^{1-\gamma} \right]^{1/2} \cos \left( \frac{2\pi n K}{N} + \phi_k \right) \quad (1.43)$$

Através da equação (1.43) Moura e Lyra demonstraram que para:

- $\gamma = 0$  temos uma sequência sem correlação, que recupera o modelo de Anderson original;
- $\gamma > 0$  temos uma distribuição de desordem com correlação de longo alcance;
- $\gamma > 2$  o sistema pode apresentar estados estendidos, ou seja, um comportamento metálico.

O trabalho de Moura e Lyra realmente merece destaque, pois neste trabalho eles mostraram pela primeira vez uma verdadeira transição metal-isolante em sistemas unidimensionais desordenados.

Outro trabalho que merece nossa atenção foi feito em 1998 por Izrailev e Krokhin [53]. Nesse trabalho eles mostraram que na presença de correlação de longo alcance sistemas unidimensionais podem exibir uma transição de Anderson com a presença de “mobility

edges”<sup>2</sup> Esse estudo foi feito usando teoria de perturbação para relacionar a função de correlação com o comprimento de localização. Eles apresentam um algoritmo para a construção numérica de potenciais “mobility edges” dentro da banda de estados permitidos. Através de alguns cálculos ver referência [53] eles chegaram a seguinte equação,

$$\lambda^{-1} = \frac{\epsilon_0^2 \varphi(\mu)}{8 \sin^2 \mu}. \quad (1.44)$$

Onde  $\lambda$  é o comprimento de localização e  $\varphi(\mu) = 1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \xi(k) \cos(2\mu k)$  é dada pela série de Fourier com coeficientes  $\xi(k)$  que são dispositivos de correlação dos sítios  $\epsilon_n$ . Essa equação estabelece um vínculo entre o comprimento de localização e a correlação. Isso permite-nos calcular o comprimento de localização se as propriedades estatísticas da sequência  $\epsilon_n$  forem conhecidas. Para revelar o papel da correlação, basta aplicar uma relação geral na equação (1.44) para modelos conhecidos, então, considere o potencial

$$\epsilon_n = \epsilon_0 \sqrt{2} \cos(2\pi\gamma n^\Gamma). \quad (1.45)$$

Sendo  $\gamma$  irracional, a função correlação para esta sequência é dada por:

$$\xi(k) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \cos(2\pi\Gamma\gamma k n^{\Gamma-1}). \quad (1.46)$$

Para  $0 < \Gamma < 1$ ,  $\xi(k)$  são independentes de  $k$  e iguais a 1, assim  $\varphi(\mu) = 0$  em  $0 < \mu < \pi$ . Para esse caso o resultado coincide com o caso em que  $\epsilon_n = \epsilon_0$ , potencial constante. Em ambos os casos o comprimento de localização desaparece. A equação (1.44) permite-nos construir o potencial local com “mobility edges”.

$$\xi(k) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \varphi(\mu) \cos(2k\mu) d\mu. \quad (1.47)$$

Dai, eles mostraram que para algumas dependências do expoente de Lyapunov existe um conjunto de sequências  $\epsilon_n$  com correlação  $\xi(k)$ . Então, reescrevendo a sequência em termos de  $\xi(k)$  fica:

$$\epsilon(n) = A \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \xi(k) Z_{n+k} \quad (1.48)$$

onde  $A$  é uma constante de normalização e os  $Z$ 's são números aleatórios compreendidos entre  $[0,1]$ . Portanto, esses resultados são muito importantes, pois eles demonstraram analiticamente a existência de “mobility edges” para potenciais unidimensionais com correlação de longo alcance.

<sup>2</sup>Limites de mobilidade eletrônica [53].

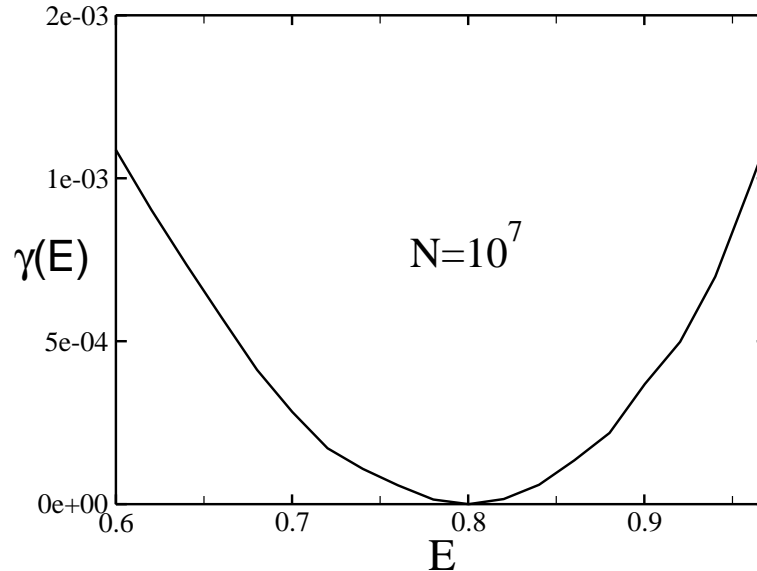
## 1.7 Modelos com Desordem Correlacionada Discreta

A partir de agora, iremos fazer uma discussão sobre modelos com desordem discreta. Na maioria dos modelos estudados anteriormente a distribuição de desordem era continuamente escolhida dentro de um dado intervalo  $[-W/2, W/2]$ , sendo  $W$  a largura da desordem. No caso de modelos com desordem discreta, as energias dos sítios podem assumir um conjunto discreto de valores. Por exemplo, o modelo de dímeros proposto por Dunlap se encaixa nesta classificação, uma vez que, temos apenas dois tipos de átomos ( $\epsilon_A$  e  $\epsilon_B$ ). Em geral, nesses problemas com desordem discreta correlacionada é feito um mapeamento que transforma um sistema com desordem correlacionada contínua em uma cadeia com desordem correlacionada discreta. Vamos revisar de forma sucinta alguns trabalhos com modelos binário e ternários. Em relação a sistemas binários, em que os sítios do sistema apresentam dois tipos de energias. Em 2002 Carpena e colaboradores [54] investigaram as propriedades físicas das função de onda de um elétron em sólidos binários unidimensionais com desordem correlacionada. Utilizando métodos numéricos foi demonstrado que para uma dada intensidade das correlações na liga binária o sistema apresentava uma transição metal-isolante. Agora iremos apresentar alguns trabalhos que envolvem um mapeamento ternário. Tais trabalhos, foram publicados recentemente e merecem nossa atenção. Em 2010 E. Lazo e E. Dias [55] analisaram o comportamento das correntes em linhas de transmissão dupla onde a distribuição dos valores das capacitâncias  $C_j$  segue uma distribuição ternária com correlações de longo alcance. Nesses trabalhos eles introduziram desordem correlacionada mantendo a densidade espectral como sendo  $S(k) \propto k^{-(2\gamma-1)}$ , onde  $\gamma$  é o expoente de correlação e  $\gamma \geq 0,5$ . Eles mostraram que se  $\gamma = 0,5$  a linha de transmissão de energia elétrica apresenta um comportamento isolante para todas as frequência. Com a introdução da correlação de longo alcance na distribuição do capacitor, as linhas de transmissão de energia elétrica podem ser alteradas, e com isso, surge um valor crítico para  $\gamma$  em que há uma transição de estado não condutor para um estado condutor.

Em 2011 Lazo e Dias [56] publicaram outro trabalho que também se trata de mapeamentos ternários. Neste trabalho eles estudaram o comportamento das bandas de estados estendidos e estados localizados que aparecem nas linhas de transmissões elétricas desordenadas. Isso com a utilização de um mapeamento ternário e o processo de Ornstein-Uhlenbeck (OU) para gerar a desordem correlacionada de longo alcance nas distribuição da capacitância  $C_j$ . O (OU) é mais uma técnica para gerar desordem nos sistemas. Nesse trabalho eles conseguiram obter os diagramas de fases que separam os estados localizados a partir dos estados estendidos.

Em 2012 Sales e Moura [57] estudaram cadeias harmônicas ternárias unidimensionais com distribuição em massa usando o processo (OU) correlacionado. Eles mapearam uma sequência (OU) em uma sequência de massas com três valores. A Probabilidade de cada valor dessas massas foi controlada usando um parâmetro  $b$ . Sales e Moura analisaram os

Figura 1.6: O expoente de Lyapunov  $\Gamma$ , que na figura é representado por  $\gamma(E)$ , versus  $E$  para o modelo de dímeros aleatórios. Os sítios podem ter energias  $\epsilon_A = 0.8$  com probabilidades  $p$  e  $\epsilon_B = 0.0$  com probabilidades  $1 - p$ . O sítio com energia  $\epsilon_A$  sempre aparece em pares. Observe que o Lyapunov é zero em uma única energia ressonante  $E = \epsilon_A = 0.8$ .

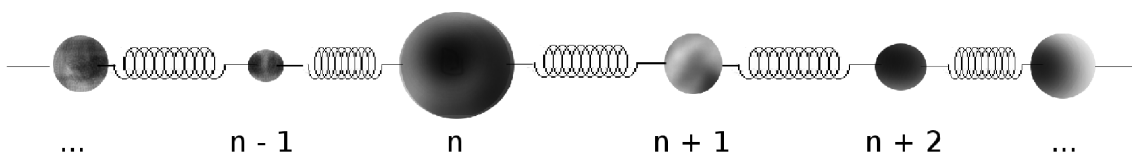


aspectos de localização do problema a partir das soluções numéricas das equações de hamilton e pelo processo de matriz de transferência. Os resultados encontrados no presente trabalho indicam que a distribuição de massa ternária correlacionada não promove o aparecimento de novos modos prolongados. Eles obtiveram modos estendidos para  $b \rightarrow \infty$ . Tais trabalhos têm fundamental importância literária para esse contexto, pois têm atraído mais pesquisadores para a averiguação da existência da transição metal-isolante em sistemas unidimensionais desordenados.

## 1.8 Interação elétron-fônon

Até o presente momento foram apresentados vários trabalhos relacionados ao transporte eletrônico em sistemas com desordem atômica. Tais trabalhos investigam a natureza da função de onda eletrônica bem como sua dependência com o tipo da desordem existente. Entretanto, na aproximação usada por Anderson, a rede atômica é “congelada”, ou seja,

Figura 1.7: Representação esquemática de uma rede unidimensional com um conjunto de átomos acoplados por molas.



Fonte: Autor 2014

os átomos estão parados (também conhecido na literatura como aproximação de Born-Oppenheimer). Nesta seção, iremos descrever de forma sucinta como podemos estudar a dinâmica de um elétron em uma rede atômica que apresente modos normais de vibrações. Ou seja, vamos considerar a presença de acoplamento do elétron com os fônons na rede. Em linhas gerais, este tema tem sido objeto de muitos estudos na literatura [20, 58, 59].

Alguns trabalhos vêm demonstrando que a presença da não linearidade na rede pode induzir o aparecimento de um par elétron-fônon com alta mobilidade. Em nosso estudo iremos assumir que os íons de uma rede unidimensional como ilustra na figura (1.7) possuam movimentos oscilatórios em torno de um ponto de equilíbrio. Para isso, será necessário tratar classicamente os modos de vibração da rede. Em nosso estudo vamos considerar uma abordagem harmônica para o Hamiltoniano dos modos de vibração.

Para melhor entender esse problema, vamos considerar o hamiltoniano completo do sistema elétron-rede. Lembrando que a parte eletrônica será descrita pelo Hamiltoniano de Anderson e a rede será abordada considerando que os átomos estão acoplados com molas harmônicas. Desta forma, o Hamiltoniano pode ser escrito como:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_n \epsilon_n |n\rangle \langle n| + \sum_n \tau_n (|n\rangle \langle n+1| + c.c) + \sum_n \frac{P_n^2}{2m_n} \\
 & + \sum_n \frac{1}{4} [\beta_n (Q_{n+1} - Q_n)^2 + \beta_{n-1} (Q_n - Q_{n-1})^2].
 \end{aligned}
 \tag{1.49}$$

O primeiro e segundo termo representam o Hamiltoniano de Anderson para um elétron com energia *on-site*  $\epsilon_n$  e termo de *hopping*  $\tau_n$ . O terceiro e quarto termos do Hamiltoniano representam respectivamente a energia cinética e potencial da rede.  $Q_n$  e  $P_n$  representam posição e momento respectivamente. Vamos considerar em nossa abordagem que a massa  $m_n$  de cada átomo, bem como, as constantes da mola  $\beta_n$  são uniformes com valores  $m_n = \beta_n = 1$ . O acoplamento entre a parte eletrônica e a rede será feito através da energia de *hopping*  $\tau_n$ . Para introduzir acoplamento elétron-rede vamos considerar o termo de hopping:

$$\tau_n = -e^{-\alpha(Q_{n+1} - Q_n)},
 \tag{1.50}$$

onde  $Q_n$  é a posição do átomo no sítio  $n$  e  $\alpha$  um parâmetro que controla a intensidade da interação elétron-rede. Basicamente  $\alpha$  será o acoplamento elétron-fônon. Analisando a equação (1.50) podemos perceber que, se os átomos localizados nas posições  $n$  e  $n+1$  estiverem próximos o *hopping* é forte, caso contrário é bem fraco. A abordagem apresentada na equação (1.50) é uma generalização da aproximação Su, Schrieffer e Heeger (SSH) [60, 61, 62]. Para pequenas vibrações, nossa abordagem recupera o modelo

SSH:  $\tau_n = -e^{-\alpha(Q_{n+1}-Q_n)} \approx -[1 - \alpha(Q_{n+1} - Q_n)]$ .

A equação de Schrödinger dependente do tempo,  $H|\Psi\rangle = i\hbar\frac{d|\Psi\rangle}{dt}$  pode ser escrita facilmente considerando o estado  $|\Psi\rangle = \sum_{n'} f_{n'}|n'\rangle$ . Lembrando que a parte clássica do Hamiltoniano (1.49) não atua no estado  $|\Psi\rangle$  temos:

$$H|\Psi\rangle = \left\{ \sum_n \epsilon_n |n\rangle\langle n| + \sum_n \tau_n (|n\rangle\langle n+1| + c.c.) \right\} |\Psi\rangle. \quad (1.51)$$

Com a atuação de  $|\Psi\rangle$  em  $H$  podemos escrever a equação de Schrödinger dependente do tempo para cada componente  $f_n$  da função de onda como sendo:

$$i\hbar\frac{df_n}{dt} = \epsilon_n f_n + \tau_n f_{n+1} + \tau_{n-1} f_{n-1}. \quad (1.52)$$

Considerando o termo de *hopping* definido na equação (1.50) chegamos na equação que descreve a dinâmica eletrônica neste modelo com acoplamento elétron-fônon.

$$i\hbar\frac{df_n}{dt} = \epsilon_n f_n - e^{-\alpha(Q_{n+1}-Q_n)} f_{n+1} - e^{-\alpha(Q_n-Q_{n-1})} f_{n-1}. \quad (1.53)$$

Uma vez deduzida a equação que rege a dinâmica do elétron precisamos descrever a evolução da rede. Vamos utilizar o formalismo de Hamilton para encontrar a equação que controla as vibrações atômicas. Do ponto de vista de mecânica clássica a equação de Hamilton para o momento  $P_n$  neste problema pode ser escrito como  $\dot{P}_n = -\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial Q_n}$ , onde  $\langle H\rangle = \langle\Psi|H|\Psi\rangle$ .

Substituindo o Hamiltoniano da equação (1.49) temos:

$$\begin{aligned} \dot{P}_n &= -\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial Q_n} = -\frac{\partial}{\partial Q_n} \langle\Psi| \left[ \sum_n \epsilon_n |n\rangle\langle n| + \sum_n \tau_n (|n\rangle\langle n+1| + c.c.) + \sum_n \frac{P_n^2}{2} \right. \\ &\quad \left. + \sum_n \frac{1}{4} [\beta_n (Q_{n+1} - Q_n)^2 + \beta_{n-1} (Q_n - Q_{n-1})^2] \right] |\Psi\rangle. \end{aligned} \quad (1.54)$$

Podemos observar que apenas o termo de *hopping*  $\tau_n$  e o termo da energia potencial clássica dependem de  $Q_n$ , desta forma, a derivada  $-\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial Q_n}$  será composta pelos dois termos abaixo:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial Q_n} &= -\frac{\partial}{\partial Q_n} \langle\Psi| \left\{ \sum_n V_n (|n\rangle\langle n+1| + c.c.) + \right. \\ &\quad \left. + \sum_n \frac{1}{4} [\beta_n (Q_{n+1} - Q_n)^2 + \beta_{n-1} (Q_n - Q_{n-1})^2] \right\} |\Psi\rangle. \end{aligned} \quad (1.55)$$

No primeiro termo podemos observar que os termos de ordem  $n - 1$  e  $n$  contém a posição  $Q_n$  e desta feita, serão submetidos a derivada parcial  $\frac{\partial}{\partial Q_n}$ . Os demais termos do somatório não contém  $Q_n$  portanto a derivada deles é nula. Para o segundo somatório temos que os termos de ordem  $n - 1$ ,  $n$  e  $n + 1$  contém a posição  $Q_n$  e assim irão contribuir com a derivada, os demais valores têm derivada nula. Dessa forma, podemos organizar a derivada como sendo:

$$\begin{aligned} \dot{P}_n = & -\frac{\partial}{\partial Q_n} \langle \Psi | \{ [\tau_{n-1}(|n-1\rangle\langle n| + c.c) + \tau_n(|n\rangle\langle n+1| + c.c) + [\frac{\beta_n}{2}(Q_{n+1} - Q_n)^2 + \\ & \frac{\beta_{n-1}}{2}(Q_n - Q_{n-1})^2]] | \Psi \rangle. \end{aligned} \quad (1.56)$$

Agora substituindo  $\tau_n$  e  $\tau_{n-1}$  como definido na equação (1.50) e atuando  $\langle \Psi |$  e  $| \Psi \rangle$  temos:

$$\begin{aligned} \dot{P}_n = & -\frac{\partial}{\partial Q_n} \{ (-\langle \Psi | n-1 \rangle \langle n | \Psi \rangle e^{-\alpha(Q_n - Q_{n-1})} + c.c) + (-\langle \Psi | n \rangle \langle n+1 | \Psi \rangle e^{-\alpha(Q_{n+1} - Q_n)} + c.c) \} \\ & - \frac{\partial}{\partial Q_n} \langle \Psi | \{ [\frac{\beta_n}{2}(Q_{n+1} - Q_n)^2 + \frac{\beta_{n-1}}{2}(Q_n - Q_{n-1})^2] | \Psi \rangle. \end{aligned} \quad (1.57)$$

Lembrando que,  $\langle \Psi | n-1 \rangle \langle n | \Psi \rangle = f_{n-1}^\dagger f_n$ ,  $\langle \Psi | n \rangle \langle n+1 | \Psi \rangle = f_n^\dagger f_{n+1}$  e  $(f_{n-1}^\dagger f_n)^\dagger = f_{n-1} f_n^\dagger$ . Essa última equação pode ser reescrita como sendo:

$$\begin{aligned} \dot{P}_n = & \frac{\partial}{\partial Q_n} \{ (f_{n-1}^\dagger f_n + f_{n-1} f_n^\dagger) e^{-\alpha(Q_n - Q_{n-1})} + (f_n^\dagger f_{n+1} + f_n f_{n+1}^\dagger) e^{-\alpha(Q_{n+1} - Q_n)} \} \\ & - \frac{\partial}{\partial Q_n} \langle \Psi | \{ [\frac{\beta_n}{2}(Q_{n+1} - Q_n)^2 + \frac{\beta_{n-1}}{2}(Q_n - Q_{n-1})^2] | \Psi \rangle. \end{aligned} \quad (1.58)$$

Portanto, calculando a derivada e lembrando que  $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$ ,

$$\begin{aligned} \dot{P}_n = & \beta_n(Q_{n+1} - Q_n) - \beta_{n-1}(Q_n - Q_{n-1}) - \alpha \{ e^{-\alpha(Q_{n+1} - Q_n)} (f_n^\dagger f_{n+1} + f_n f_{n+1}^\dagger) - \\ & e^{-\alpha(Q_n - Q_{n-1})} (f_{n-1}^\dagger f_n + f_{n-1} f_n^\dagger) \}. \end{aligned} \quad (1.59)$$

Dessa forma, deduzimos a equação que controla as velocidades das vibrações da rede. O problema composto elétron-rede pode ser resolvido através da resolução numérica da equação de Schrödinger (1.53) e da equação anterior (1.59). A resolução numérica dessas equações podem ser feitas através de métodos tradicionais de cálculo numérico como métodos de Runge-Kutta de alta ordem. Para  $\alpha = 0$  não temos acoplamento elétron-

fônon e as equações funcionam como dois problemas separados: um elétron propagando-se em uma cadeia com  $\tau_n = 1$ , equação (1.53), e uma cadeia harmônica com  $m_n = \beta_n = 1$ . Para  $\alpha > 0$  o acoplamento elétron-fônon introduz uma dependência temporal na energia de *hopping*  $\tau_n$ . Em alguns estudos anteriores, o acoplamento elétron-fônon foi investigado considerando um limite adiabático onde a vibração de cada átomo seria proporcional a densidade eletrônica local, ou seja,  $Q_n \propto |f_n|^2$ . Nessa abordagem [20] foi demonstrado que a presença de não linearidade na equação de Schrödinger dependente do tempo pode revelar diversos novos fenômenos, entre eles, a chamada transição de *self trapping* onde o elétron fica preso na rede devido ao intenso potencial diagonal oriundo da não linearidade. A abordagem aqui apresentada, que contempla tanto a dinâmica eletrônica quanto a dinâmica da rede, foi pouca estudada na literatura, entretanto, já concebe resultados bem interessantes. Nesse contexto, trabalhos de Manuel Velarde, por exemplo [58], vêm sendo demonstrado que a existência de acoplamento elétron-fônon pode ser um fator de amplificação do transporte de carga. Vale salientar, que, na abordagem utilizada na referência [58] a rede apresenta interações não harmônicas entre os átomos, favorecendo assim, o aparecimento de modos solitônicos. O acoplamento elétron-sóliton vem sendo apresentado como um possível mecanismo para transporte de carga em baixa dimensionalidade.

## 1.9 Interação com campo elétrico estático

Outro aspecto importante dentro da teoria de transporte de carga em sistemas de baixa dimensionalidade consiste na interação com um campo elétrico estático [63]. Vamos apresentar aqui uma descrição sucinta sobre as propriedades de transporte de um elétron sob a influência de um potencial periódico  $1d$  e um campo elétrico estático uniforme paralelo ao sistema. Vamos aplicar uma abordagem semiclássica para obter as equações de movimento para a posição  $\mathbf{r}$  e o momento  $\mathbf{p}$  do elétron. Assim pela equação de Hamilton temos:

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}, \quad (1.60)$$

$$\dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}}, \quad (1.61)$$

multiplicando a primeira equação temos

$$\mathbf{V} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}[\epsilon(\mathbf{p}/\hbar) + V(\mathbf{r})] = \frac{\partial \epsilon(\mathbf{p}/\hbar)}{\partial \mathbf{p}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}. \quad (1.62)$$

A equação anterior mostra a velocidade de um pacote de onda, também conhecida como velocidade de transmissão de energia no meio ou velocidade de grupo. Vemos que a velocidade é proporcional a inclinação da curva de energia em relação a  $\mathbf{k}$ . A equação (1.61)



pode ser reescrita como,

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}} = -\nabla V(\mathbf{r}). \quad (1.63)$$

Porém, se  $V(\bar{r})$  é a energia potencial de um elétron num campo fixo eletrostático, o lado direito da equação acima é simplesmente a força clássica agindo sobre o elétron. Em nosso caso trata-se de força oriunda do campo elétrico  $\mathbf{E}$ , ou seja,

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = (-e)\mathbf{E}. \quad (1.64)$$

Essa equação nos mostra que a variação temporal de  $\mathbf{k}$  é proporcional a força elétrica,

$$\mathbf{k}(t) = -\frac{eE}{\hbar}t + \mathbf{k}_0. \quad (1.65)$$

Para o elétron livre, a relação entre energia e momento é dada pela parábola clássica  $\epsilon = p^2/2m$ . Entretanto, o elétron em um sistema cristalino tem suas energias restritas a primeira zona de Brillouin. Neste caso,  $k$  fica restrito ao intervalo  $[-\pi/a, \pi/a]$ . Portanto considerando que em  $t = 0$  o elétron tem momento zero, ou seja,  $k_0 = 0$ , temos que a equação (1.65) descreve um movimento periódico dentro da zona de Brillouin. O período deste movimento oscilatório pode ser estimado fazendo  $\frac{eE}{\hbar}T = 2\pi/a$ , logo temos:

$$T = \frac{2\pi\hbar}{(e)Ea}. \quad (1.66)$$

Desta forma, obtemos a frequência de oscilação, que é dada por:

$$\omega = \frac{2\pi}{\tau} = \frac{eEa}{\hbar}. \quad (1.67)$$

Podemos também encontrar a largura do segmento no qual se dá oscilações do elétron. Para isso, vamos considerar a equação (1.62), ou seja,

$$\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}, \quad (1.68)$$

sabendo que  $\mathbf{r}$ ,  $\epsilon(\mathbf{k})$  e  $\mathbf{k}$  são contínuas no intervalo  $[-\pi/a, \pi/a]$  temos:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0) &= \int_0^t \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} dt = \frac{1}{\hbar} \int_0^t \frac{\partial \epsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \frac{d\mathbf{k}}{dk} dt = \\ &= -\frac{1}{(-e)E} (\epsilon(\mathbf{k}(t)) - E(\mathbf{k}(0))). \end{aligned} \quad (1.69)$$

Portanto, após o tempo  $T$  o elétron retorna a sua posição inicial. Este movimento oscilatório é chamado de Oscilação de Bloch e foi previsto por Bloch e Zener para sistemas cristalinos. Recentemente foi mostrado que oscilações de Bloch também podem ser encontradas em sistemas desordenados se a desordem apresentar correlações de longo alcance. A

existência de Oscilação de Bloch foi experimentalmente verificada inicialmente em estruturas semicondutoras chamadas de *superredes*. Essas estruturas consistem de um substrato semicondutor sobre o qual é depositado dois ou mais tipos de outro tipo de semicondutor. De um ponto de vista teórico uma *superredes* é uma sequência de poços quânticos. Nessas estruturas o parâmetro de rede  $a$  é bem maior que os cristais normais favorecendo uma detecção mais eficiente dos períodos de Bloch.

# 2

## MODELOS E RESULTADOS

### 2.1 Modelo de Anderson com desordem quaternária

Neste capítulo, vamos apresentar nossa contribuição sobre as propriedades físicas de sistemas de baixa dimensionalidade com desordem correlacionada. Vamos investigar a natureza dos estados eletrônicos em um sistema unidimensional com desordem quaternária correlacionada. O termo “desordem quaternária” agora introduzido representa uma distribuição de desordem contendo apenas quatro valores  $(\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \epsilon_4)$ . Dai, nosso sistema unidimensional será composto por apenas quatro tipos de átomos distribuídos aleatoriamente. Vamos aplicar um formalismo que permite construir a supracitada distribuição quaternária com correlações intrínsecas semelhantes as correlações apresentadas no capítulo I. Com isso, vamos introduzir pela primeira vez distribuições quaternárias correlacionadas nas energias potenciais atômicas de sistema de baixa dimensionalidade. Vamos inicialmente apresentar uma descrição sucinta do procedimento utilizado na construção da desordem quaternária correlacionada. Para construir a desordem quaternária correlacionada, vamos proceder com um mapeamento de uma série correlacionada contínua  $\{V_n\}$  em uma série discreta de quatro valores  $(\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \epsilon_4)$ . A série discreta resultante após o mapeamento mantém as funções de correlações internas compatíveis com as existentes na série contínua original. A série contínua  $\{V_n\}$  será obtida através do procedimento numérico que gera um traço de um movimento browniano fracionário,

$$V_n = \sum_{k=1}^{N/2} \frac{1}{k^{\gamma/2}} \cos \left( \frac{2\pi nk}{N} + \phi_k \right). \quad (2.1)$$

A equação anterior foi a mesma utilizada nos trabalho de Moura e Lyra [47], a sequência dos valores  $\{V_n\}$  estão contidas em um intervalo  $[-W/2, W/2]$  e têm espectro de potencia aproximadamente  $1/k^{\gamma/2}$ .  $\phi_k$  representam fases aleatórias no intervalo de  $[0, 2\pi]$ . Para  $\gamma = 0$  a sequência é totalmente decorrelacionada.  $\gamma > 0$  representa o limite onde a sequência contínua  $\{V_n\}$  contém correlações de longo alcance. Seguindo a abordagem utilizada nos trabalho de Moura e Lyra vamos normalizar esta sequência de maneira que  $\langle V_n \rangle = 0$  e  $\sqrt{\langle V_n^2 \rangle - \langle V_n \rangle^2} = 1$ . Uma vez construída a sequência contínua correla-

cionada  $\{V_n\}$ , vamos proceder com o mapeamento e concomitante construção da sequência quaternária correlacionada. O mapeamento pode ser definido através da equação abaixo. A energia on-site  $\epsilon_n$  será obtida através da seguinte equação:

$$\epsilon_n = \begin{cases} \epsilon_1 & \text{se } V_n < -b \\ \epsilon_2 & \text{se } -b < V_n < 0 \\ \epsilon_3 & \text{se } 0 < V_n < b \\ \epsilon_4 & \text{se } V_n > b. \end{cases} \quad (2.2)$$

O parâmetro de mapeamento  $b$  introduzido na equação anterior controla o tipo de mapeamento que será utilizado. Em linhas gerais  $b$  controla a probabilidade de cada um dos quatro valores ( $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \epsilon_4$ ) aparecerem na distribuição quaternária. Os valores escolhidos para o parâmetro de mapeamento quaternário, foram escolhidos de maneira que possam caracterizar desordem em nosso material. Contudo, escolhemos  $b \leq 2$ , que por sua vez, é um valor satisfatório para os nossos estudos. Com isso, vamos utilizar os seguintes valores para as energias on-sites:  $\epsilon_1 = -2$ ,  $\epsilon_2 = -1$ ,  $\epsilon_3 = 1$  e  $\epsilon_4 = 2$ . Gostaríamos de enfatizar que estamos considerando o Modelo de Anderson unidimensional com energia de hopping  $\tau = 1$ , desta forma, as energias citadas anteriormente estão parametrizadas em unidades de hopping.

## 2.2 Metodologia

Agora iremos descrever os métodos teóricos e computacionais necessários para o estudo de cadeias quaternárias com correlação de longo alcance. Como visto no capítulo anterior secção (1.6), a hamiltoniana de Anderson pode ser escrita em uma forma matricial do tipo tridiagonal como pode ser vista a baixo. Desta forma, para determinar as autofunções e as autoenergias da hamiltoniana de Anderson usaremos o método da diagonalização numérica. Este método consiste em resolver a equação secular  $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$  e daí poder extrair as autofunções  $|\psi\rangle$  e as autoenergias  $E$ . Então, a representação matricial de  $H$  pode ser escrita como:

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

onde  $\epsilon_j$  representa a energia dos átomos que será a distribuição quaternária correlacionada gerada através do formalismo apresentado na secção anterior. Para o estudo via diagonalização, vamos usar a energia de hopping  $\tau_{i,j} = 1$ . O procedimento de diagonalização

consiste em resolver numericamente a equação abaixo

$$\det(H - \lambda I) = 0. \quad (2.3)$$

A resolução da equação secular pode ser feita utilizando métodos de álgebra linear, dependendo da dimensão da matriz. Em nossos estudos utilizamos rotinas numéricas apropriadas, como por exemplo, biblioteca LAPACK. Com a diagonalização matricial temos os autovalores e autovetores, daí podemos estudar algumas quantidades físicas como o número médio de participação e o espectro de absorção óptica do sistema. Com isso, é possível fazer análises da natureza dos estados eletrônicos do sistema.

### 2.2.1 Participação

As propriedades de condução em determinados sistemas são entendidas a partir da natureza dos seus estados eletrônicos. Lembrando que, em linhas gerais, os estados podem ser estendidos ou localizados, respectivamente apontam para comportamentos metálico e isolantes. De maneira qualitativa é de fundamental importância que a característica dos estados eletrônicos sejam descritas através da análise de algumas quantidades que possam ser mensuráveis. Através da diagonalização apresentada na seção anterior e das autofunções obtidas através dessa diagonalização podemos calcular o número médio de participação  $P(E)$  [64, 65] e analisar a natureza estendida/localizada das autofunções. A participação é definida por:

$$P(E) = \frac{\sum_{n=1}^N (f_n(E))^2}{\sum_{n=1}^N (f_n(E))^4}. \quad (2.4)$$

A participação é uma média de quantos átomos participam da função de onda de um dado estado eletrônico. Para entender a dependência da participação com o número de átomos que participam do estado eletrônico, vamos inicialmente considerar a expansão dos autoestados na base de wanner<sup>1</sup> [66]  $|\psi(E)\rangle = \sum_{n=1}^N f_n(E)|n\rangle$ , onde  $f_n(E)$  representa a amplitude de Wannier no átomo  $n$  associada para uma dada energia  $E$  em uma cadeia composta por  $N$  átomos. Como os autoestados são normalizados, a soma das probabilidades de encontrar o elétron no sistema é igual a 1. Então teremos que:

$$\sum_{n=1}^N (f_n(E))^2 = 1, \quad (2.5)$$

considerando o caso onde  $f_n(E)$  é constante, ou seja, um estado estendido uniforme, temos  $f_n(E) = \frac{1}{\sqrt{N}}$ , e substituindo na equação (2.4), teremos:

<sup>1</sup>As funções Wannier constituem um conjunto completo de funções ortogonais utilizados em física do estado sólido [17].

$$P(E) = \frac{1}{\sum_{n=1}^N \left(\frac{1}{N^{1/2}}\right)^4} = \frac{1}{\sum_{n=1}^N \frac{1}{N^2}} = N. \quad (2.6)$$

Portanto, para estados eletrônicos estendidos, a participação é proporcional ao número de átomos que compõem o sistema, ou seja:

$$\frac{P(E)}{N} \rightarrow \text{constante}. \quad (2.7)$$

Para estados eletrônicos localizados a participação permanece finita, e como no limite termodinâmico o número de átomos que compõem o sistema tende ao infinito, temos

$$\frac{P(E)}{N} \rightarrow 0. \quad (2.8)$$

Com isso, podemos analisar a natureza dos estados eletrônicos como sendo localizado ( $\frac{P(E)}{N} \rightarrow 0$ ) e estendido ( $\frac{P(E)}{N} \rightarrow \text{constante}$ ). Através da análise de tamanho finito da função participação, vamos aplicar esse formalismo para investigar as propriedades de localização em sistema com desordem quaternária correlacionada.

### 2.2.2 Absorção óptica

Agora iremos apresentar outra quantidade física estudada neste trabalho, o espectro de absorção óptica [67, 68, 69]. A absorção óptica em uma transição de níveis de energia cria uma lacuna ou buraco na banda de valência, isso devido a locomoção de um elétron de um nível menos energético para um nível mais energético. O fenômeno apresentado cria um éxciton, que é a formação do par elétron-buraco. Os éxcitons são apresentados na natureza em duas formas, os excitons de Mott e os éxcitons de Frenkel [70, 71, 72]. Neste trabalho apenas os éxcitons de Frenkel são abordados, que por sua vez, também são conhecidos como éxcitons de raio zero, isso devido ao seu tamanho que é na ordem de escala atômica. Ele normalmente é usado para descrever propriedades de espectroscopia, dinâmica de estados eletrônicos e fluxo de energia de estados excitados em sólidos amorfos. Também vale destacar que o éxciton de Frenkel é um estado localizado. Dai, a absorção óptica é obtida acumulando a força de oscilação dos estados excitônicos.

$$F_E = \left( \sum_n f_n(E) \right)^2, \quad (2.9)$$

onde  $F_E$  é a força de oscilação de uma dado estado  $|\psi(E)\rangle$  com autovalores  $E$ . Então, a absorção óptica fica:

$$A(E) = \frac{1}{N} \sum_{E_n} \delta(E - E_n) F_{E_n} \quad (2.10)$$

Contudo, podemos usar os autovalores e os autovetores obtidos através da diagonalização e calcular o espectro de absorção óptica, equação (2.10), para obter as propriedades ópticas do sistema.

### 2.2.3 Dinâmica do pacote de onda, interação com campo elétrico e interação elétron-rede

Outra metodologia que vamos utilizar consiste em estudar a dinâmica do pacote eletrônico [57, 65] considerando a desordem quaternária na presença de campos elétricos externos [63], bem como a existência de interação elétron-fônon. A presença de um campo elétrico  $F$  paralelo a cadeia pode ser estudada introduzindo um termo adicional na energia dos átomos:  $\epsilon_n(F \neq 0) = \epsilon_n(F = 0) + F(n - N/2)$  onde  $\epsilon_n(F = 0)$  representa a desordem quaternária correlacionada sem a presença do campo e  $F(n - N/2)$  representa a energia potencial devido a presença do campo elétrico. O termo de interação elétron-fônon está relacionado com a presença de modos normais de vibração na rede atômica. A interação elétron fônon foi abordada na seção (1.8). Dessa forma, as equações que descrevem a dinâmica do elétron na presença de campo e acoplamento elétron-fônon podem ser resumidas como segue abaixo. Inicialmente temos a equação de Schrödinger, que descreve a dinâmica eletrônica (2.11),

$$i\hbar \frac{df_n}{dt} = [\epsilon_n + F(n - N/2)]f_n + V_n f_{n+1} + V_{n-1} f_{n-1}. \quad (2.11)$$

Por fim, temos a equação que controla as vibrações atômicas da rede:

$$\begin{aligned} \dot{P}_n = & \beta_n(Q_{n+1} - Q_n) - \beta_{n-1}(Q_n - Q_{n-1}) - \alpha \{e^{-\alpha(Q_{n+1} - Q_n)}(f_n^\dagger f_{n+1} + f_n f_{n+1}^\dagger) - \\ & e^{-\alpha(Q_n - Q_{n-1})}(f_{n-1}^\dagger f_n + f_{n-1} f_n^\dagger)\}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

O termo elétron-fônon aparece na energia de hopping que, nesta abordagem, passa a ser dependente das vibrações atômicas como foi discutido no capítulo I. Após a solução numérica deste conjunto de equações vamos calcular a posição média do elétron e a largura média do pacote de onda. A posição média é definida por:

$$\langle x(t) \rangle = \sum_n n |f_n(t)|^2. \quad (2.13)$$

A largura  $\sigma$  do pacote eletrônico é definida por:

$$\sigma(t) = \sum_n \sqrt{(n - \langle x(t) \rangle)^2 |f_n(t)|^2}. \quad (2.14)$$

Utilizando estas quantidades podemos investigar a presença de oscilações de Bloch, bem como, investigar as propriedades de condução eletrônica na presença desses efeitos.

## 2.3 Resultados

Neste capítulo, será apresentado os resultados das análises numéricas da dinâmica de um elétron em um modelo unidimensional de cadeias quaternárias com correlação de longo alcance. Através dos resultados apresentados nesta análise estudamos com detalhes as propriedades de localização, espectro de absorção óptica, bem como a investigação das oscilações de Bloch e a interação elétron-fônon na presença do campo elétrico estático. Desta forma, foi aplicado um formalismo no qual seja possível nos fornecer estimativas precisas para a dependências do parâmetro de correlação e o parâmetro de mapeamento com as quantidades físicas citadas a cima. Tais informações, foram expostas de maneira detalhadas com a utilização de argumentos heurísticos.

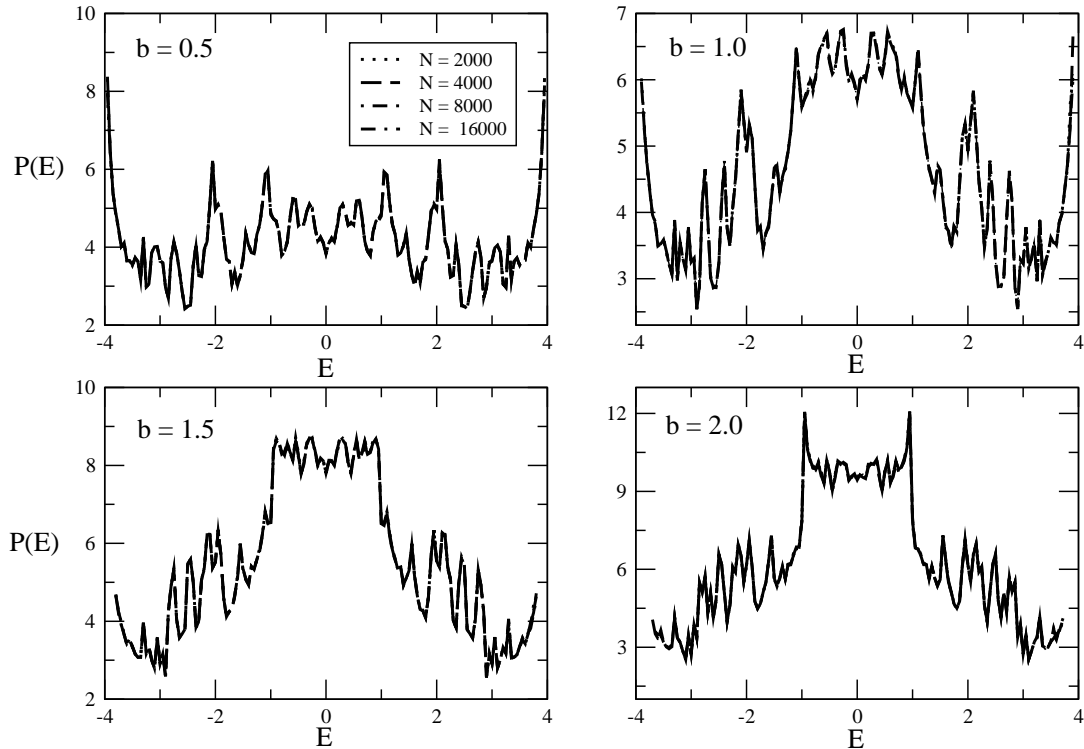
### 2.3.1 Resultados em relação ao número médio de participação

Agora vamos apresentar nossos primeiros resultados. Inicialmente apresentaremos nossa análise da participação média. Vamos analisar a Participação versus Energia em cadeias quaternárias com correlação de longo alcance. Na figura (2.1), apresentamos a participação versus energia para cadeia quaternárias com  $\gamma = 0$ ,  $b = 0.5, 1.0, 1.5$  e  $2.0$ , e  $N = 2000, 4000, 8000$  e  $16000$ . Nossos dados foram obtidos através da diagonalização da representação matricial do Modelo de Anderson. Para efetuar a diagonalização utilizamos as rotinas da biblioteca de álgebra linear LAPACK. Observamos na figura que a participação apresenta pouca dependência com o tamanho do sistema. Os gráficos para diversos tamanhos de cadeias dos sistema estão praticamente sobrepostos. Este resultado sugere que todos os autoestados são localizados. Lembrando que, para  $\gamma = 0$  temos uma distribuição quaternária sem correlação. Realmente era de se esperar que as autofunções fossem localizadas segundo a teoria de Anderson. Portanto, nossos resultados para desordem quaternária sem correlação são compatíveis com os resultados obtidos no Modelo de Anderson tradicional.

Vamos agora aumentar um pouco o grau de correlação na desordem quaternária. A figura (2.2), mostra a participação versus energia para uma cadeia quaternária com  $\gamma = 1$ ; consideramos os mesmos valores de  $b$  e  $N$  que foram utilizados na figura (2.1). Podemos observar na figura (2.2) uma suave dependência da participação com o tamanho do sistema, entretanto, os cálculos apresentados indicam novamente estados localizados. Para



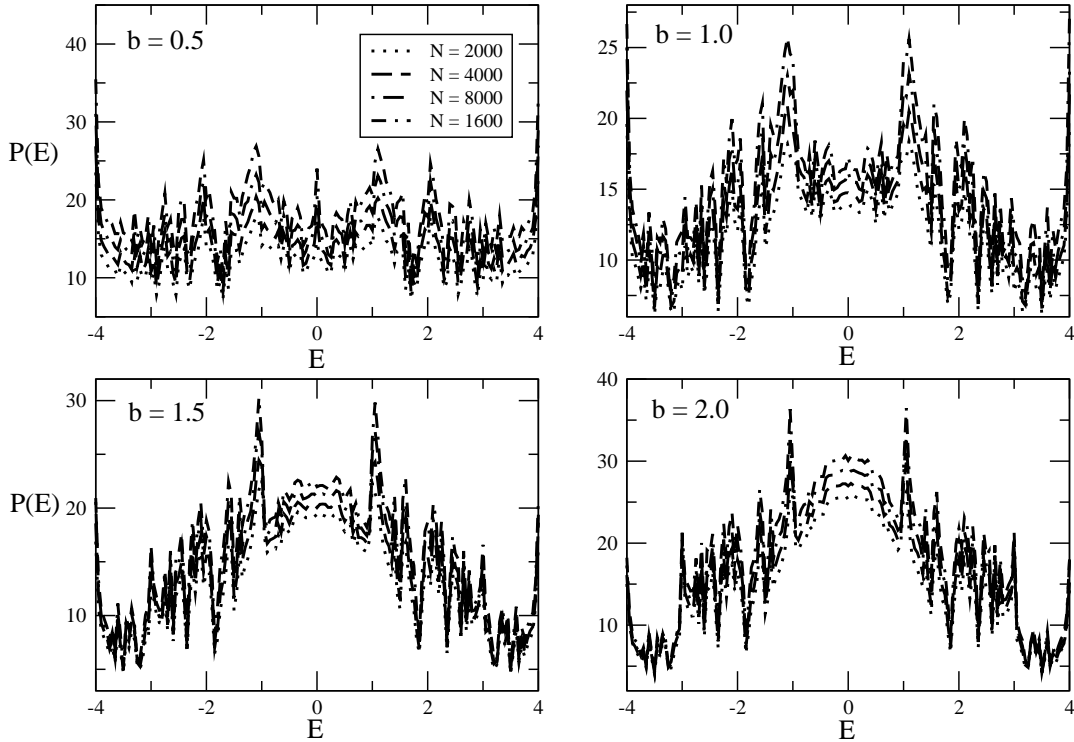
Figura 2.1: Participação versus Energia para o parâmetro de correlação  $\gamma = 0$ , número de sítio sendo  $N = 2000, 4000, 8000$  e  $16000$  e parâmetro de mapeamento  $b = 0.5, 1.0, 1.5$  e  $2.0$ . A figura mostra que a medida que o tamanho do sistema cresce, a participação permanece constante, e isso nos caracteriza um sistema isolante.



Fonte: Autor 2014

$\gamma = 2$ , como mostrado na figura (2.3), observamos uma dependência mais intensa da participação com o tamanho do sistema. Comparando nossos resultados apresentados até o presente momento com os resultados obtidos na referência [47], podemos concluir que existe uma considerável compatibilidade entre nossos resultados e os resultados lá obtidos. A participação dos autoestados em sistemas com desordem quaternária cresce consideravelmente a medida que a correlação torna-se mais forte. Esses resultados também foram obtidos na referência [47]. Vamos analisar agora o comportamento da participação quando  $\gamma$  cresce ainda mais. A figura (2.4), apresenta a participação versus energia para  $\gamma = 3$ . Os valores de  $b$  e  $N$  são os mesmo utilizados nas figuras anteriores. Observamos nessa figura que a participação apresenta uma forte dependência com o tamanho da cadeia. Analisando as figuras com mais cuidado podemos observar que a participação praticamente dobra a medida que o tamanho da rede é duplicada. Estes resultados é um forte indício de que os estados são estendidos. Nessa classe de sistemas quaternário correlacionados é importante mencionar que existem dois aspectos fundamentais que podem modificar a natureza dos estados eletrônicos. O primeiro aspecto importantíssimo é o grau de correlação intrínseco na distribuição de desordem quaternária. Nossa distribuição de desordem quaternária contém correlação de longo alcance similares as correlação impetradas na referência [47]. Este ingrediente tem um papel importante na propagação do

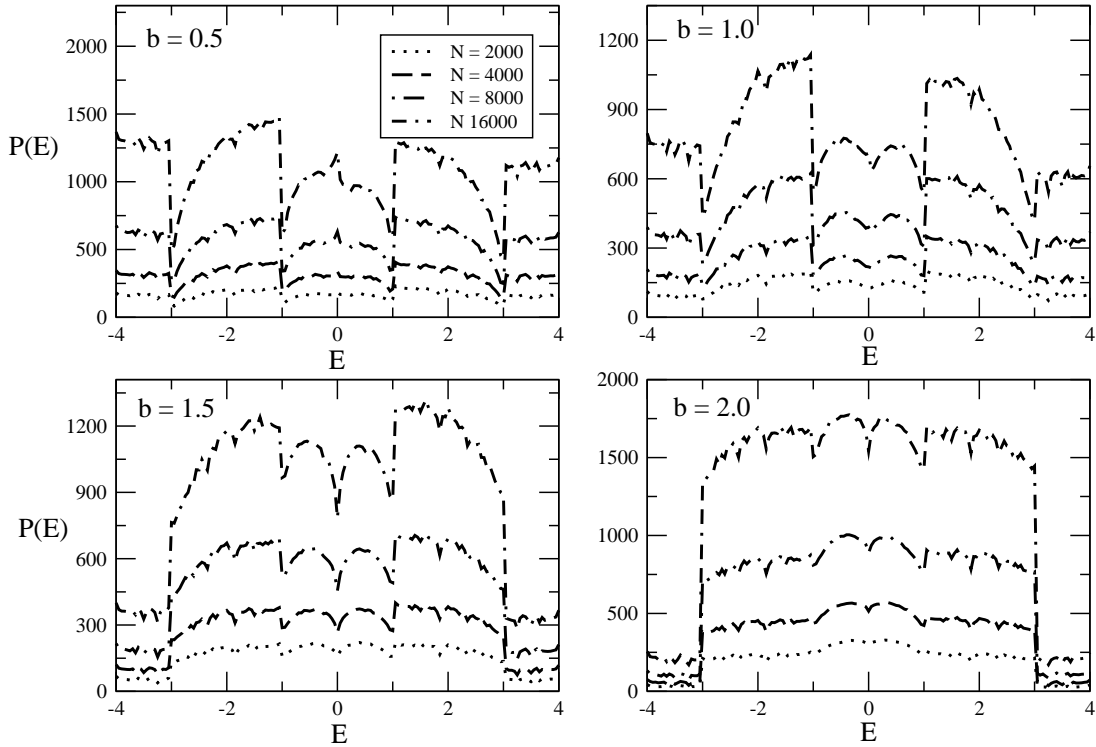
Figura 2.2: Participação versus Energia para o parâmetro de correlação  $\gamma = 1$ , número de sítio sendo  $N = 2000, 4000, 8000$  e  $16000$  e parâmetro de mapeamento  $b = 0.5, 1.0, 1.5$  e  $2.0$ . A figura mostra uma suave dependência da participação com o tamanho do sistema, entretanto, os cálculos apresentados indicam estados localizados.



Fonte: Autor 2014

elétron em cadeias desordenadas. Têm sido mostrado ao longo dos anos que as correlação podem promover o aparecimento de estados estendidos, aspectos que aparentemente estão sendo observados novamente em nosso trabalho. Entretanto, nessa distribuição com desordem discreta precisamos salientar que existe outro ingrediente importante que é a probabilidade de cada classe de átomo aparecer na distribuição. Na desordem quaternária utilizada em nosso trabalho, a probabilidade de cada um dos quatro valores de energia ( $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \epsilon_4$ ) aparecerem é controlado pelo parâmetro  $b$ . Desta forma, seguindo o mapeamento que utilizamos, quanto maior o valor de  $|b|$ , a distribuição quaternária se aproxima de uma sequência pura (sem desordem). Podemos observar que para  $b = 2$  a participação é consideravelmente maior que as participação obtidas para  $b < 2$ . Portanto, é importantíssimo salientar que o parâmetro  $b$  da forma como foi construído nosso mapeamento não deve ser utilizado em quaisquer limites e também sem a averiguação da distribuição quaternária obtida. Em um passado recente, modelos com distribuições de desordem discretas baseadas em mapeamentos similares ao que foi utilizado, foram investigados numericamente [54, 55, 56]. Nesses trabalhos, os valores escolhidos para o parâmetro de mapeamento quaternário, foram escolhidos de maneira que, a sequência quaternária geral contenha desordem interna não nula. Conforme vamos mostrar adiante através de análises numéricas os valores de  $b \leq 2$  serão suficientes para satisfazer esta

Figura 2.3: Participação versus Energia para o parâmetro de correlação  $\gamma = 2$ , número de sítio sendo  $N = 2000, 4000, 8000$  e  $16000$  e parâmetro de mapeamento  $b = 0.5, 1.0, 1.5$  e  $2.0$ . A figura nos mostra que a medida que o tamanho do sistema aumenta, observamos uma dependência mais intensa da participação com o tamanho do sistema, e isso sugere que o sistema passa a ter características de sistema condutor.



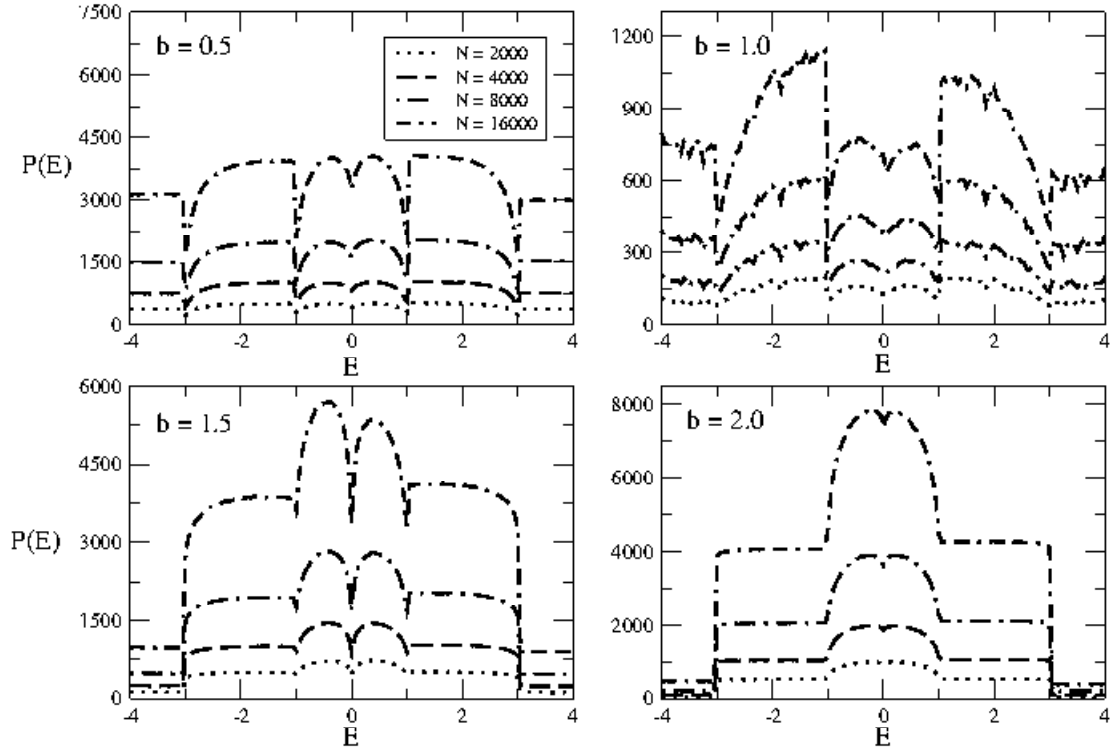
Fonte: Autor 2014

premissa.

Gostaríamos de enfatizar que neste limiar o sistema é puro, e obviamente a existência de uma transição de Anderson não tem sentido. Portanto, como mencionado anteriormente, em nossos estudos vamos concentrar nossos esforços numérico no limiar onde o módulo de  $b \leq 2$ . No regime supracitado a probabilidade de aparecimento de quaisquer uma das quatro energias de nossa rede quaternária é aproximadamente constante e não nula. Vamos apresentar uma análise da quantidade de desordem intrínseco em nossa distribuição de desordem quaternária. Essa análise é importante para que possamos nos certificarmos que nos regimes de correlação  $b$  aqui considerados estamos trabalhando com sistemas desordenados. Calcularemos então, o desvio padrão local  $\Delta_{L_0}$  da energia on-site dos átomos de um segmento com  $L_0$  átomos. O desvio padrão local  $\Delta_{L_0}$  é definido por

$$\Delta_{L_0} = \left( \sum_{k=1}^M \Delta_{k,L_0} \right) / M, \quad (2.15)$$

Figura 2.4: Participação versus Energia para o parâmetro de correlação  $\gamma = 3$ , número de sítio sendo  $N = 2000, 4000, 8000$  e  $16000$  e parâmetro de mapeamento  $b = 0.5, 1.0, 1.5$  e  $2.0$ . A figura nos mostra que a participação cresce a medida que o sistema também cresce. Com isso, a participação apresenta uma forte dependência com o tamanho da cadeia, e isso é um forte indício de que o sistema seja condutor para este valor de  $\gamma$ .



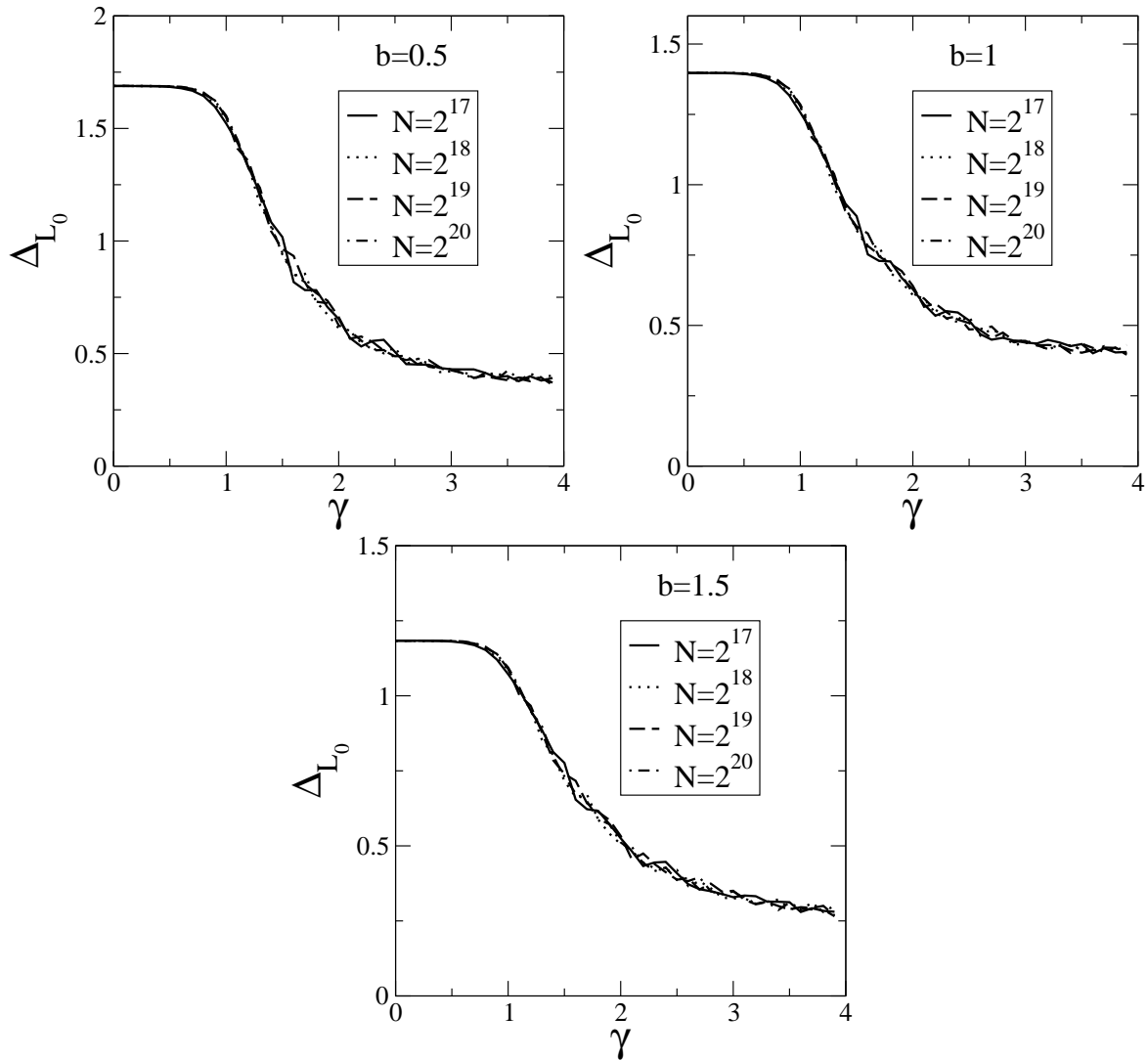
Fonte: Autor 2014

em que  $\Delta_{k,L_0}$  é dado por

$$\Delta_{k,L_0} = \sqrt{\sum_{n=(k-1)L_0+1}^{n=kL_0} (\epsilon_n^2)/L_0 - \left(\sum_{n=(k-1)L_0+1}^{n=kL_0} \epsilon_n/L_0\right)^2}, \quad (2.16)$$

e  $M = N/L_0$ .  $\Delta_{L_0}$  é uma medida de intensidade da desordem local em um segmento com  $L_0$  átomos. Na figura (2.5), plotamos o desvio padrão local  $\Delta_{L_0}$  versus o grau de correlação  $\gamma$  para  $b = 0.5, 1.0, 1.5$  e  $N = 2^{17}$  até  $2^{20}$ . Nesses cálculos mantivemos a razão  $N/L_0 = 8$  para todos os casos considerados. Podemos observar claramente que a desordem local nas cadeias quaternárias consideradas é sempre maior que zero. Esse fato afasta a possibilidade de nosso estudo repetir os erros que foram cometidos nas referências [54, 55, 56]. Ou seja, em nosso trabalho dentro da faixa de valores de  $b$  utilizados garantimos que a de-

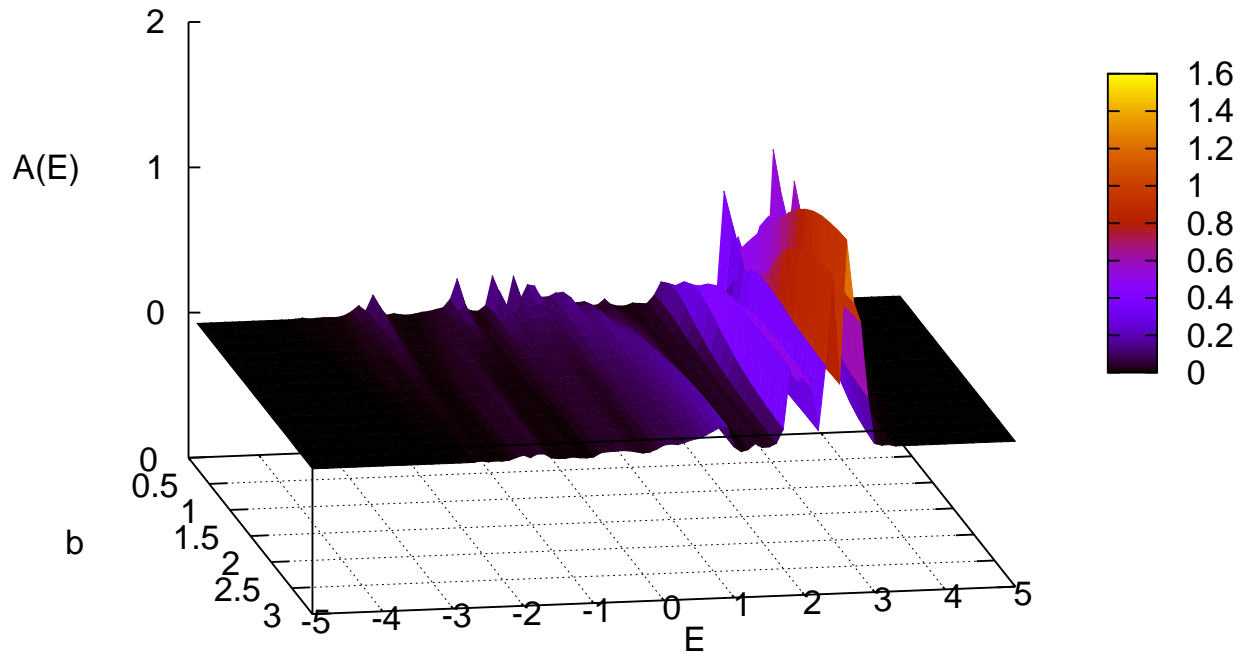
Figura 2.5: (a-c) Desvio padrão local  $\Delta_{L_0}$  versus o grau de correlação  $\gamma$  para  $b = 0.5, 1.0, 1.5$  e  $N = 2^{17}$  até  $2^{20}$ . Nestes cálculos mantivemos a razão  $N/L_0 = 8$  para todos os casos considerados. Com isso, observar claramente que a desordem local nas cadeias quaternárias consideradas é sempre maior que zero.



Fonte: Autor 2014

sordem está sempre presente. Por outro lado, outra informação importante que pode ser extraída da figura (2.5) consiste no fato da diminuição da intensidade da desordem local a medida que  $\gamma$  cresce. Esse é um aspecto importante que tem consequências drásticas na natureza dos estados eletrônicos. A medida que a correlação fica mais forte a desordem local efetiva diminui consideravelmente. A superposição das diversas curvas para distintos tamanhos ( $N = 2^{17}$  até  $2^{20}$ ), sugere que estes resultados são também válidos no limite termodinâmico. Ou seja, uma cadeia quaternária desordenada tem uma redução de sua quantidade efetiva de desordem local a medida que as correlações intrínsecas são intensificadas. Essa conclusão aqui chegamos sobre as propriedades da distribuição de

Figura 2.6: Absorção versus energia e parâmetro de correlação  $b$ .  $\gamma = 0$ ,  $N = 2000$  e  $b$  variando de 0.2 até 3.0, com variância  $\Delta = 0.2$ . Observamos que para o sistema sem correlação a figura apresenta apenas um pico de absorção com ( $E \sim 2$ ).



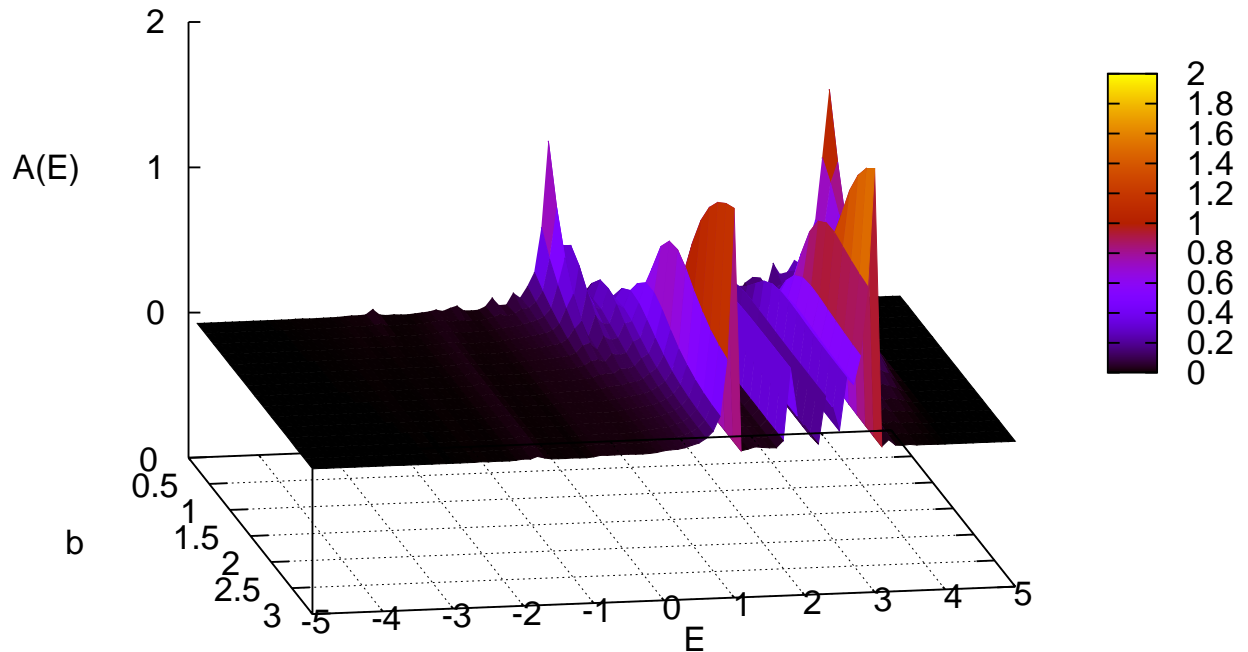
Fonte: Autor 2014

desordem quaternária são importantes para se compreender melhor quais são os mecanismos responsáveis pelo aumento da participação. Dessa forma podemos concluir, que, nossos resultados indicam a presença de estados estendidos para  $\gamma > 2$ .

### 2.3.2 Resultados em relação a absorção óptica

Com intuito de analisar as propriedades de absorção óptica do nosso sistema, vamos considerar o espectro de absorção óptica dado pela equação (2.10). Em nossa análise, vamos plotar ( $A(E) \times E \times b$ ), ou seja, um gráfico 3D da absorção óptica versus energia e parâmetro  $b$ . Para este estudo vamos considerar  $N = 2000$  e  $\gamma = 0, 1, 2$  e  $3$ . Vamos apresentar inicialmente os nossos resultados para o caso sem correlação  $\gamma = 0$  (ver figura (2.6)). Em  $\gamma = 0$ , ou seja, na ausência de correlação, podemos ver que a absorção é praticamente nula em boa parte da banda de energia, entretanto, em torno do topo da banda de energia ( $E \sim 2$ ), existe um pico largo de absorção. Tal fenômeno é esperado

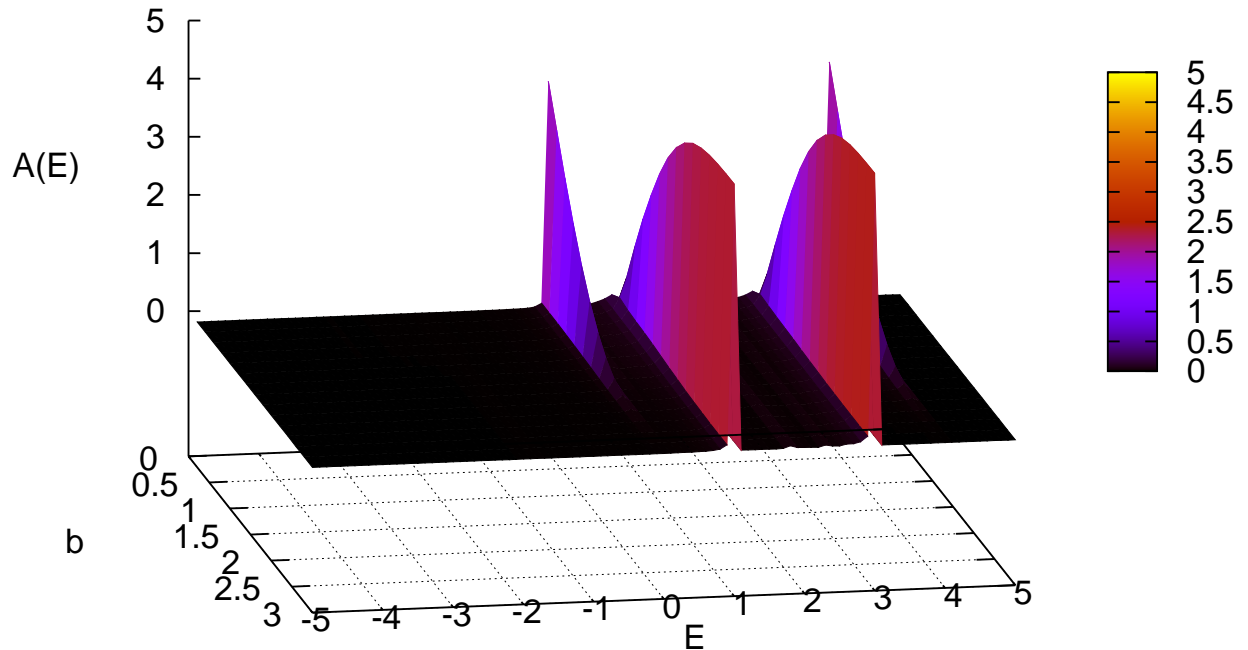
Figura 2.7: Absorção versus energia e parâmetro de correlação  $b$ .  $\gamma = 1$ ,  $N = 2000$  e  $b$  variando de 0.2 até 3.0, com variância  $\Delta = 0.2$ . Para uma grande faixa de energia a absorção é nula, entretanto, em torno do limite da banda temos uma região de absorção não nula.



Fonte: Autor 2014

na literatura para sistemas desordenados sem correlação [73, 74, 75]. Em sistemas com desordem não correlacionadas e hopping positivo os estados no topo da banda têm maior força de oscilação e portanto, contribuem efetivamente para a absorção óptica. Nossa análise para  $\gamma = 0$  é bastante compatível com este comportamento. Para  $\gamma = 1$  o gráfico da absorção tem algumas semelhanças com os resultados obtidos para o caso sem correlação (ver figura (2.7)). Para uma grande faixa de energia a absorção é nula, entretanto, em torno do limite da banda temos uma região de absorção não nula. Podemos observar que para  $\gamma = 1$  a região com absorção macroscópica é consideravelmente mais larga em energia do que o caso de  $\gamma = 0$ . Em alguns trabalhos de [73, 74] esta expansão em energia da região de absorção foi também observado para correlações intermediárias. Em geral, um grau de correlação fraco promove uma maior localização dos estados de borda e este comportamento promove uma expansão da banda de absorção. Outro aspecto que podemos observar na figura (2.7) consiste na presença de alguns picos bem pronunciados. Vamos proceder com nossa análise e no final apresentar uma argumentação que possibilita

Figura 2.8: Absorção versus energia e parâmetro de correlação  $b$ .  $\gamma = 2$ ,  $N = 2000$  e  $b$  variando de 0.2 até 3.0, com variância  $\Delta = 0.2$ . Podemos observar que a absorção apresenta uma estrutura de picos bem definidos na região de energia alta, mas podemos vislumbrar também de regiões de absorção não nulas além da presença dos picos de absorção.

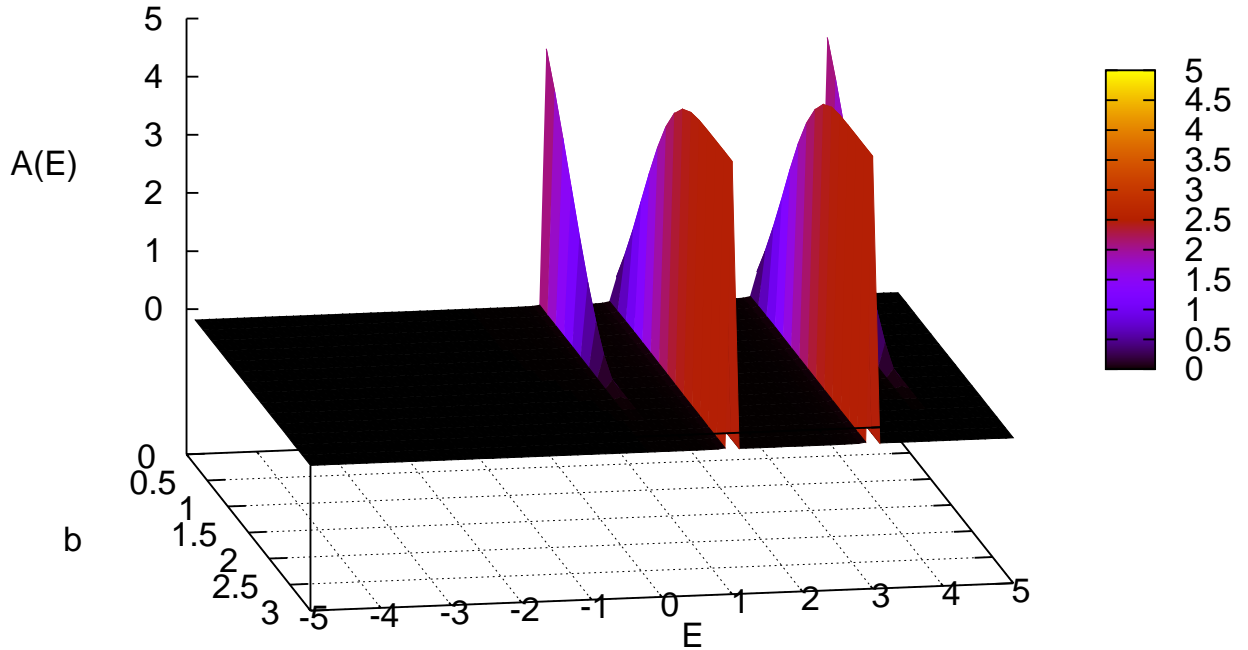


Fonte: Autor 2014

explicar essa estrutura de picos. A figura (2.8) mostra nossos resultados para absorção óptica com  $\gamma = 2$ . Podemos observar que a absorção apresenta uma estrutura de picos bem definidos na região de energia alta. Para  $\gamma = 3$  (ver figura (2.9)) os resultados da absorção óptica são bem parecidos com os resultados obtidos para  $\gamma = 2$ . Podemos observar pequenas diferenças no valor da absorção entre os picos; para  $\gamma = 3$  a absorção é nula em todas as regiões de energia alta exceto na região dos picos. Por outro lado, para  $\gamma = 2$ , podemos vislumbrar regiões de absorção não nulas além da presença dos picos. Essa estrutura de picos merece uma análise mais detalhada que permita inclusive prever a posição de cada pico. Vamos iniciar nossa análise entendendo o que acontece com desordem quaternária quando a correlação cresce ( $\gamma > 0$ ). Com base na análise apresentada na figura (2.5), a desordem local intrínseca em uma sequência quaternária diminui consideravelmente a medida que a correlação cresce. Desta forma, a medida que  $\gamma$  cresce a sequência quaternária evolui para uma estrutura mais ordenada contendo



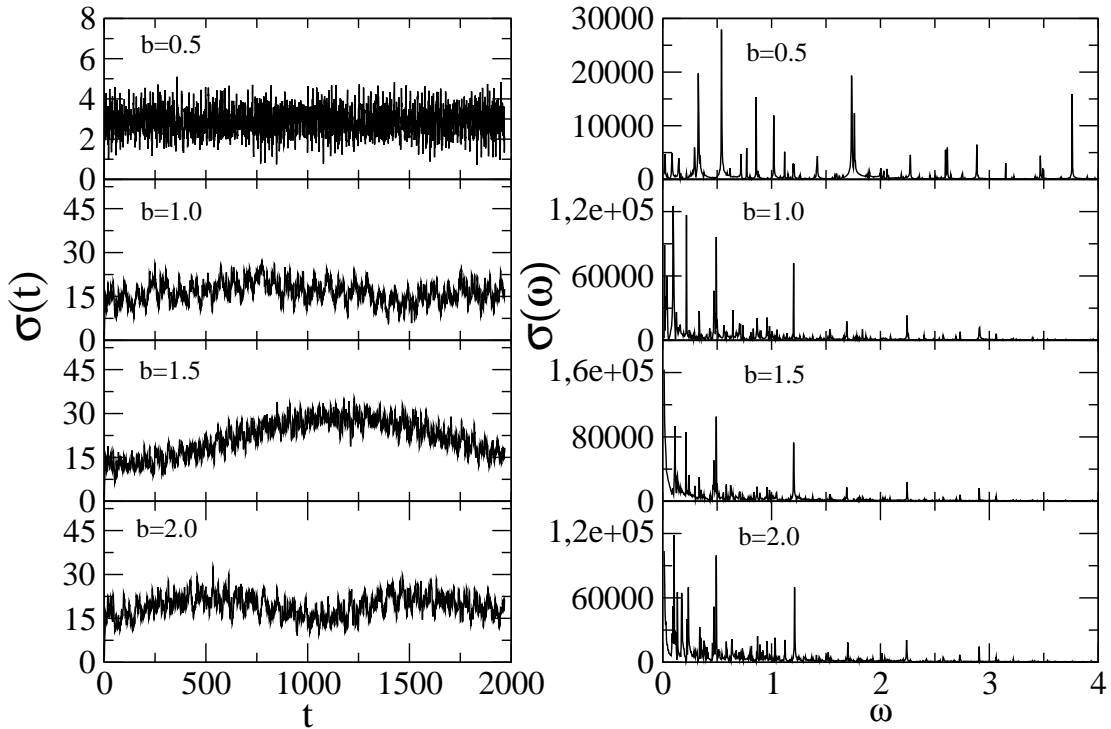
Figura 2.9: Absorção versus energia e parâmetro de correlação  $b$ .  $\gamma = 3$ ,  $N = 2000$  e  $b$  variando de 0.2 até 3.0, com variância  $\Delta = 0.2$ . Podemos observar que a absorção é nula em todas as regiões de energia alta exceto na região dos picos.



Fonte: Autor 2014

seguintes finitos com energias  $(\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \epsilon_4)$ . Portanto, de uma forma aproximada podemos considerar que para  $\gamma$  grande a nossa distribuição quaternária pode ser vista como uma concatenação de quatro sistemas unidimensionais cada um deles com energias  $(\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \epsilon_4)$ . Para obtermos a posição dos picos de absorção de maneira qualitativa, basta analisarmos a expressão  $[\epsilon_i - 2\tau, \epsilon_i + 2\tau]$  [75], como bem sabemos, o termo de hopping, aqui considerado, é  $\tau = 1$ . Desta forma, a banda de energia do nosso sistema consiste de uma sobreposição de quatro bandas unidimensionais sendo elas:  $[\epsilon_1 - 2, \epsilon_1 + 2]$ ,  $[\epsilon_2 - 2, \epsilon_2 + 2]$ ,  $[\epsilon_3 - 2, \epsilon_3 + 2]$  e  $[\epsilon_4 - 2, \epsilon_4 + 2]$ . Portanto, considerando que esse sistema tem hopping positivo os estados com absorção não nulas devem estar em torno do topo de cada sub-banda, ou seja:  $\epsilon_1 + 2, \epsilon_2 + 2, \epsilon_3 + 2$  e  $\epsilon_4 + 2$ . Utilizando os valores de  $(\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \epsilon_4)$  considerados em nosso mapeamento  $(-2, -1, 1, 2)$  conseguimos reproduzir de forma precisa a posição dos picos de absorção  $(0, 1, 3, 4)$ .

Figura 2.10: Alargamento médio  $\sigma$  do pacote eletrônico versus o tempo (painel da esquerda) e a sua transformada de Fourier (painel da direita). Usamos o parâmetro de correlação  $\gamma = 0$ , acoplamento  $\alpha = 0$ , número de sítios  $N = 500$ , campo elétrico  $F = 0.2$  e  $b$  será considerado de 0.5 até 2.0. Observamos que o pacote não apresenta uma oscilação coerente indicando a presença de muitas frequências fundamentais.

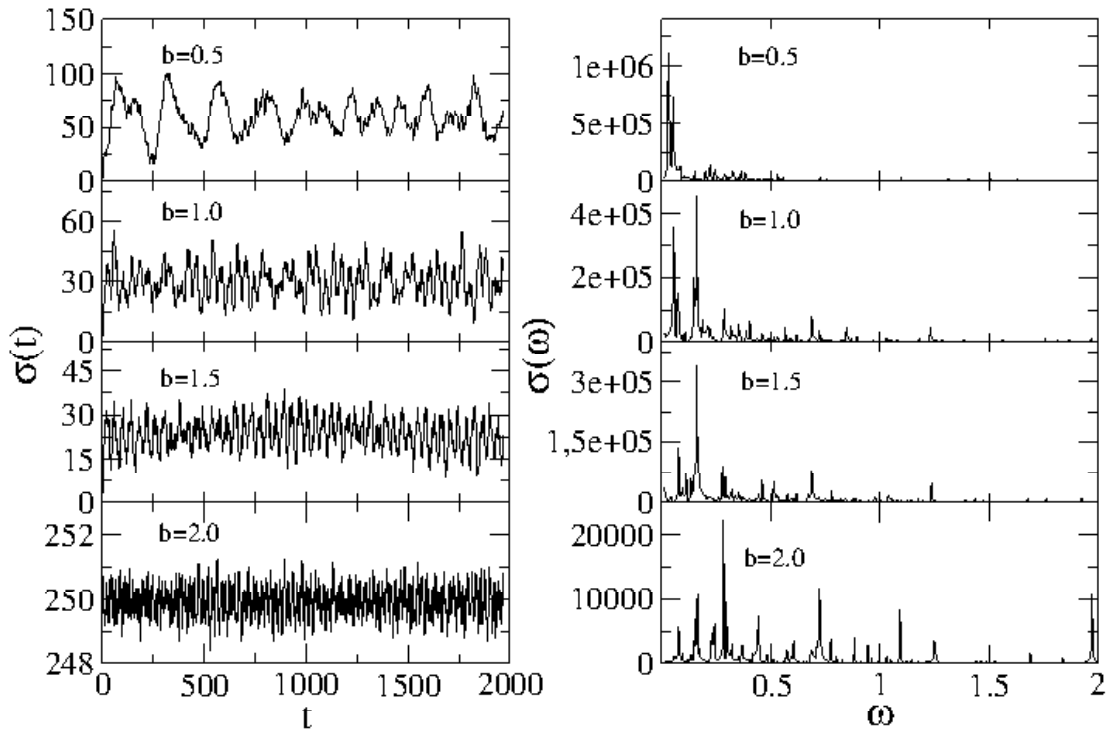


Fonte: Autor 2014

### 2.3.3 Dinâmica eletrônica na presença de campo elétrico e interação elétron-fônon

Nesta secção vamos apresentar nossos resultados para a dinâmica eletrônica em uma cadeia quaternária correlacionada na presença de interação com as vibrações da rede atômica e com um campo elétrico externo. Vamos considerar inicialmente no tempo  $t = 0$ , o elétron está totalmente localizado no centro da cadeia. Desta forma, a amplitude da função de onda pode ser escrita com:  $f_n(t = 0) = \delta_{n,N/2}$ . Vamos resolver numericamente as equações (2.11) e (2.12) e calcular a posição média do pacote de onda em função do tempo. Utilizamos uma cadeia de tamanho  $N = 500$  e os valores do parâmetro de correlação  $\gamma = 0, 1, 2$  e  $3$ .  $b$  será considerado de 0.5 até 2.0. Vamos inicialmente considerar o caso sem acoplamento com a rede ( $\alpha = 0$ ). A figura (2.10) mostra o alargamento médio  $\sigma$  do pacote eletrônico para  $\gamma = 0$  versus o tempo (painel da esquerda) e a sua transformada de Fourier (painel da direita). O campo elétrico considerado foi  $F = 0.2$ . Podemos observar que o pacote não apresenta uma oscilação coerente indicando a presença de muitas frequências fundamentais. Esta observação é confirmada na transformada de Fourier. Podemos observar um espectro largo com diversos picos confirmando a ausência de uma oscilação coerente com uma única frequência. Na figura (2.11) podemos ver os resultados

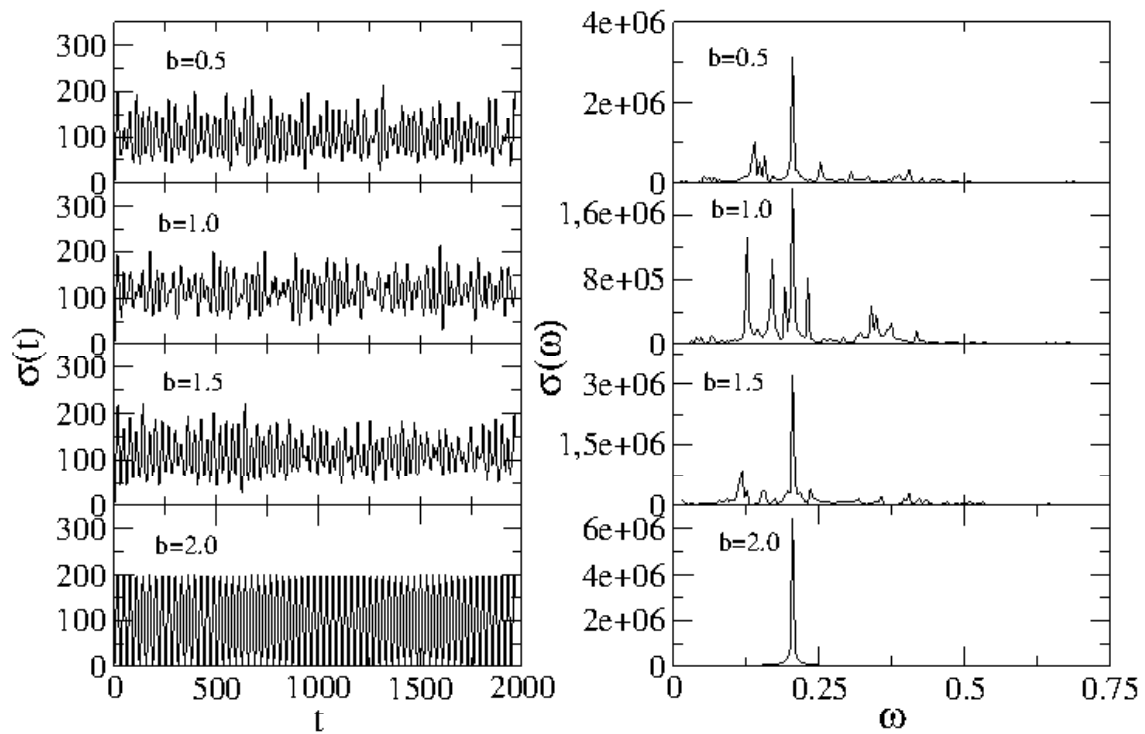
Figura 2.11: Alargamento médio  $\sigma$  do pacote eletrônico versus o tempo (painel da esquerda) e a sua transformada de Fourier (painel da direita). Usamos o parâmetro de correlação  $\gamma = 1$ , acoplamento  $\alpha = 0$ , número de sítios  $N = 500$ , campo elétrico  $F = 0.2$  e  $b$  será considerado de 0.5 até 2.0. Observamos ausência de uma oscilação coerente por parte do alargamento médio.



Fonte: Autor 2014

para  $\gamma = 1$ . Novamente observamos a ausência de uma oscilação coerente por parte do alargamento médio  $\sigma$  o que sugere a presença de muitos picos na transformada de Fourier. Podemos ver claramente no painel direito que a transformada de Fourier realmente apresenta muitos picos, o que prova a ausência de oscilação coerente. Para  $\gamma = 2$  os resultados são semelhantes aos resultados obtidos anteriormente. Podemos ver que para  $b$  pequeno a largura do pacote eletrônico oscila de forma não coerente. A transformada de Fourier para  $b$  pequeno é compatível com nossa observação da posição média uma vez que observamos uma coleção de picos em sua estrutura. Para  $b = 2$  observamos uma oscilação aproximadamente coerente e uma transformada de Fourier típica de oscilação de Bloch. Como mencionamos anteriormente o limite de  $b \geq 2$  representa uma evolução da distribuição quaternária desordenada para um sistema puro. Desta forma, este resultado em  $\gamma = 2$  e  $b = 2$  é controverso devido a possibilidade do sistema não apresentar um perfil de sistema desordenado. Portanto, nossos resultados para correlações fracas e intermediárias

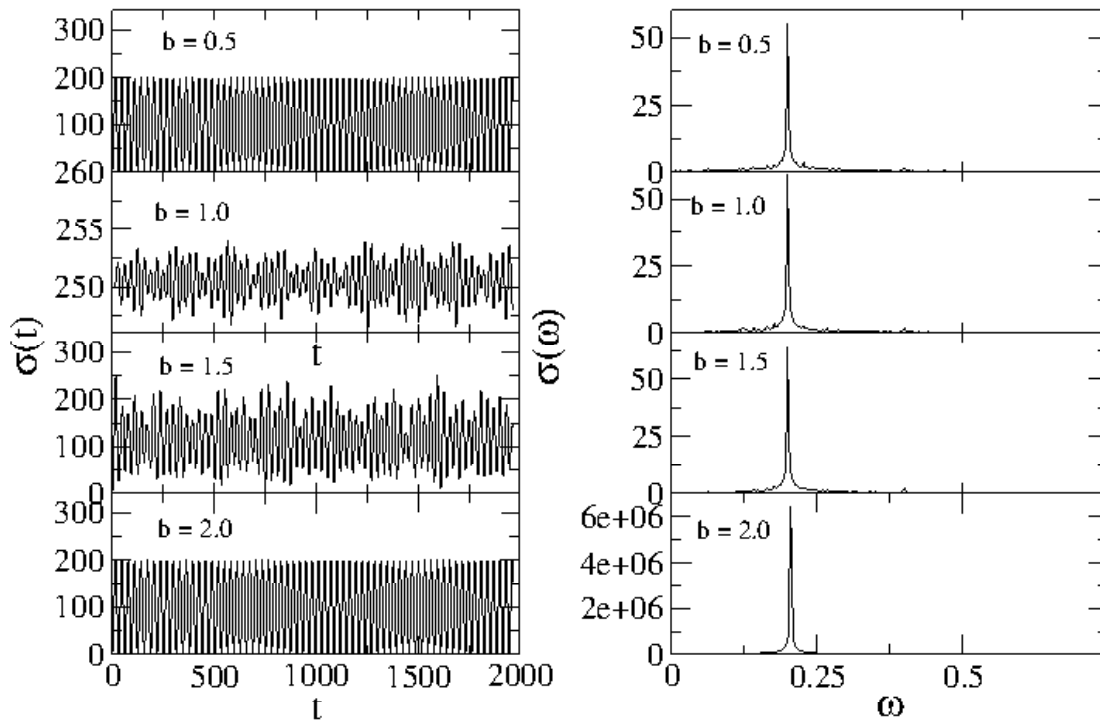
Figura 2.12: Alargamento médio  $\sigma$  do pacote eletrônico versus o tempo (painel da esquerda) e a sua transformada de Fourier (painel da direita). Usamos o parâmetro de correlação  $\gamma = 2$ , acoplamento  $\alpha = 0$ , número de sítios  $N = 500$ , campo elétrico  $F = 0.2$  e  $b$  será considerado de 0.5 até 2.0. Podemos ver que para  $b$  pequeno a largura do pacote eletrônico oscila de forma não coerente e para  $b = 2$  observamos uma oscilação aproximadamente coerente e uma transformada de Fourier típica de oscilação de Bloch.



Fonte: Autor 2014

rias indicam a ausência de oscilações coerentes induzidas por campo elétrico (oscilação de Bloch). Na figura (2.13), apresentamos nossos resultados com  $\gamma = 3$  mantendo o mesmo valor do campo elétrico  $F = 0.2$ , e sem interação com a rede ( $\alpha = 0$ ). Podemos observar que o padrão de oscilação encontrado apresenta um comportamento mais coerente. Para alguns casos observamos uma pequena envoltória abrigando a oscilação principal do pacote eletrônico (quadro da esquerda). No quadro da direita podemos observar a transformada de Fourier obtida usando 100 médias. Podemos ver claramente a presença de uma frequência fundamental de valor aproximado  $\omega \approx F$  para todos os valores de  $b$  considerados. Este resultado é um forte indício que o comportamento oscilatório observado no quadro da esquerda é compatível com a classe de oscilações chamada de oscilações de Bloch. Nossos resultados indicam que modelos unidimensionais com desordem correlacionada quaternária na presença de um campo elétrico externo estático apresentam uma

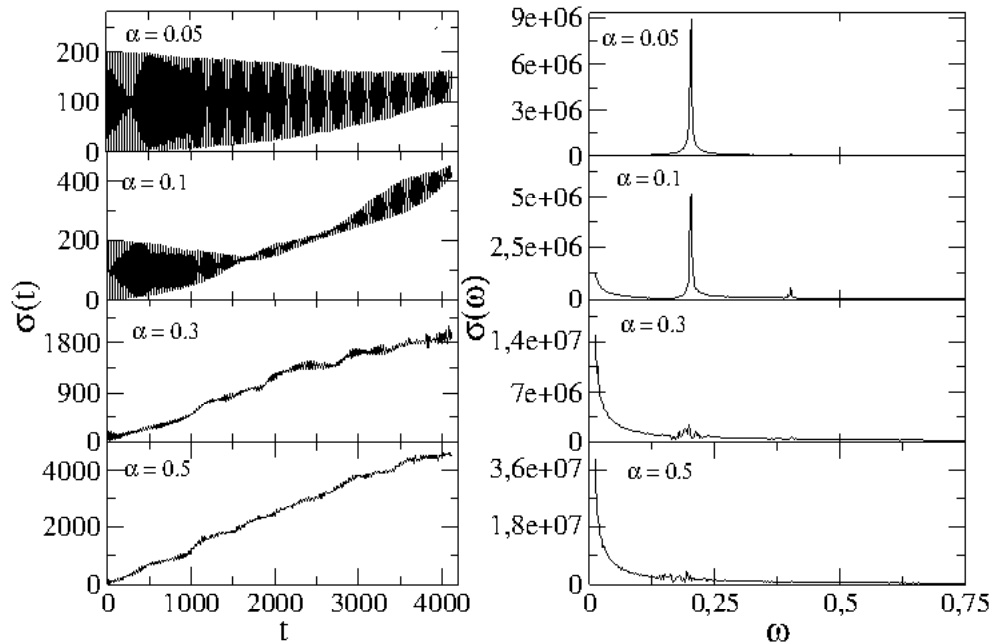
Figura 2.13: Alargamento médio  $\sigma$  do pacote eletrônico versus o tempo (painel da esquerda) e a sua transformada de Fourier (painel da direita). Usamos o parâmetro de correlação  $\gamma = 3$ , acoplamento  $\alpha = 0$ , número de sítios  $N = 500$ , campo elétrico  $F = 0.2$  e  $b$  será considerado de 0.5 até 2.0. Podemos ver claramente a presença de uma frequência fundamental de valor aproximado  $\omega \approx F$  para todos os valores de  $b$  considerados.



Fonte: Autor 2014

oscilação do pacote eletrônico compatível com as oscilações previstas para cristais (oscilações de Bloch). Gostaríamos de enfatizar que nossos resultados foram obtidos através de soluções numéricas das equações de movimento (equação de Schrödinger). A solução numérica foi obtida do método de Runge-Kutta de quarta ordem com discretização temporal  $dt = 0.001$ . Usando este formalismo obtivemos uma precisão numérica considerável de forma tal que:  $|1 - \sum_n |f_n|^2| < 10^{-8}$ . Agora vamos iniciar nossa análise dos resultados incluindo a interação com as vibrações da rede. Gostaríamos de enfatizar que a análise que será apresentada a seguir foi feita através da solução numérica do conjunto de equações acopladas envolvendo a parte quântica usamos a equação de Schrödinger para o elétron, e a parte clássica usamos a equação de Hamilton para as vibrações da rede. O acoplamento entre as equações, como foi apresentado anteriormente, será feito através do termo de hopping que dependerá do termo de acoplamento elétron-rede  $\alpha$ . Em linhas gerais esta análise consiste em repetir os cálculos apresentados anteriormente considerando

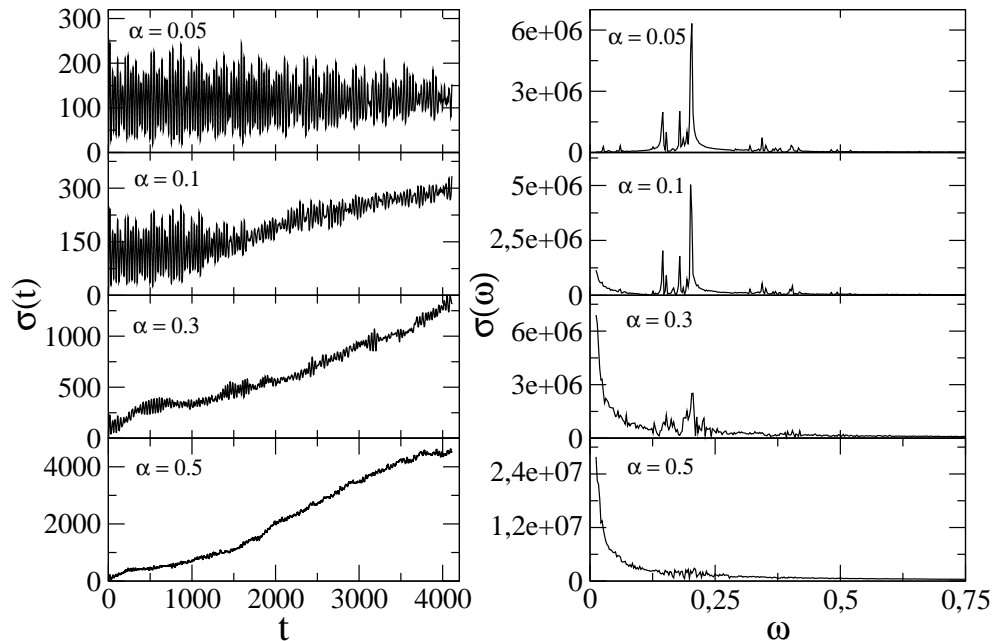
Figura 2.14: Desvio quadrático médio  $\sigma$  versus o tempo para  $\gamma = 3$ ,  $b = 0.5$  e acoplamento elétron-fônon  $\alpha = 0.05, 0.1, 0.3, 0.5$ . Para  $\alpha = 0.05$  e  $0.1$ , existe um comportamento oscilatório bem caracterizado para tempos curtos e para tempos intermediário e longos observamos que o padrão de oscilação coerente desaparece. Para  $\alpha = 0.3$  e  $0.5$  observamos uma total ausência de oscilação por parte do pacote de onda.



Fonte: Autor 2014

agora  $\alpha > 0$ . Para  $\gamma \leq 2$ , devido a inexistência de oscilações de Bloch neste limiar, o efeito da interação com os fônons da rede não introduz nenhum novo efeito. Cadeias com desordem quaternárias com correlações fracas ( $\gamma \leq 2$ ) na presença de interação com as vibrações da rede atômica e com o campo, apresentam oscilações incoerentes com muitas frequências fundamentais. Vamos conectar nossa atenção no caso de correlações fortes  $\gamma > 2$ . Na figura (2.14) mostramos no quadro da esquerda o desvio quadrático médio  $\sigma$  versus o tempo para  $\gamma = 3$ ,  $b = 0.5$  e acoplamento elétron-fônon  $\alpha = 0.05, 0.1, 0.3$ , e  $0.5$ . Vale salientar que a solução numérica do conjunto de equações diferenciais acopladas pertinentes ao estudo em foco torna-se extremamente complicada para  $\alpha$  grande. Portanto, os valores aqui apresentados estão dentro da faixa de valores onde nossa solução numérica foi confiável. Podemos observar que, para  $\alpha = 0.05$  e  $0.1$ , existe um comportamento oscilatório bem caracterizado para tempos curtos. Para tempos intermediário e longos observamos que o padrão de oscilação coerente desaparece. No quadro da direita a transformada de Fourier revela a presença de uma frequência dominante em torno de  $\omega = F$ . Para um acoplamento elétron-fônon mais intenso ( $\alpha = 0.3$  e  $0.5$ ) observamos uma total ausência de oscilação por parte do pacote de onda. A transformada de Fourier

Figura 2.15: Desvio quadrático médio  $\sigma$  versus o tempo para  $\gamma = 3$ ,  $b = 1.0$  e acoplamento elétron-fônon  $\alpha = 0.05, 0.1, 0.3, 0.5$ . Para  $\alpha = 0.05$  e  $0.1$ , existe um comportamento oscilatório bem caracterizado para tempos curtos e para tempos intermediário e longos observamos que o padrão de oscilação coerente desaparece e no quadro da direita encontramos uma estrutura de alguns picos com o pico dominante em torno de  $\omega = F$ . Para  $\alpha = 0.3$  e  $0.5$  observamos uma total ausência de oscilação por parte do pacote de onda.



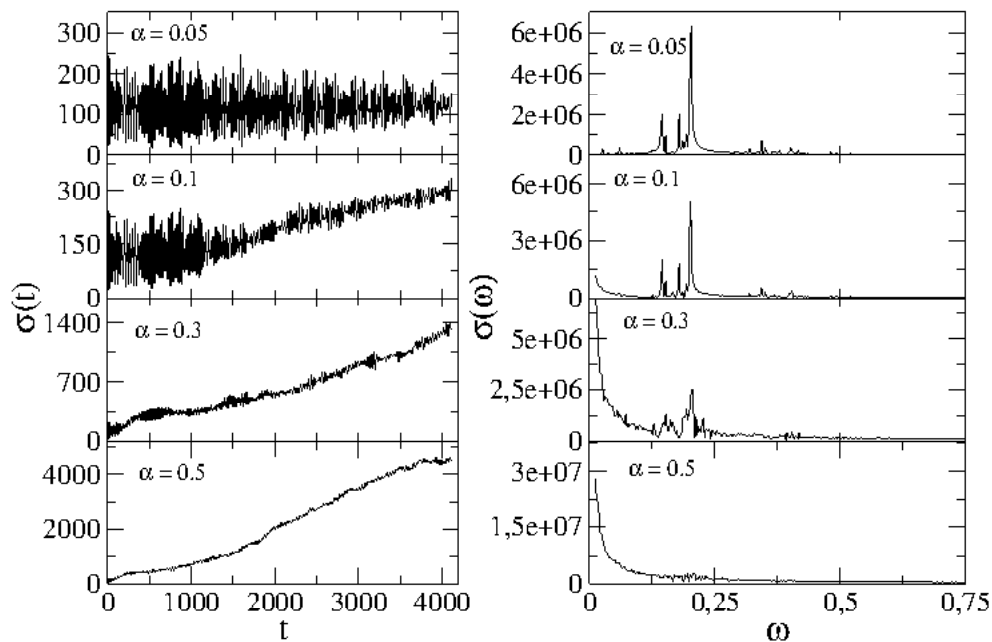
Fonte: Autor 2014

encontrada é compatível com esta observação.

Os resultados para  $b = 1$  e  $1.5$  são semelhantes aos resultados encontrados para  $b = 0.5$  (ver respectivamente figuras (2.15) e (2.16)). Podemos ver novamente que para  $\alpha = 0.05$  e  $0.1$ , existe um comportamento oscilatório para tempos muito curtos e posteriormente a destruição desta oscilações. Para  $\alpha = 0.3$  e  $0.5$  o pacote eletrônico apresenta uma dinâmica claramente não oscilatória. As Transformadas de Fourier para os casos anteriormente citados (ver quadros da direita das figuras (2.15) e (2.16)) seguem a tendência que foi encontrada na figura (2.14). Para a interação elétron-fônon fraca ( $\alpha = 0.05$  e  $0.1$ ), encontramos uma estrutura de alguns picos com o pico dominante em torno de  $\omega = F$ . Para acoplamento elétron-fônon um pouco mais intenso ( $\alpha = 0.3$  e  $0.5$ ) a transformada de Fourier apresenta alguns modos em torno da frequência zero.

Vamos discutir de forma sucinta o que está acontecendo na dinâmica do elétron, originando assim, os resultados apresentados nas figuras (2.14), (2.15) e (2.16). Para tempos curtos as vibrações atômicas são fracas, logo, o termo do campo elétrico domina a dinâmica. Logo, para tempos curtos o termo de campo elétrico, termo dominante na energia, impõe oscilações do pacote eletrônico semelhantes as oscilações de Bloch. Para tempos intermediários as vibrações atômicas se propagam de forma mais intensa pela cadeia gerando uma aleatoriedade na energia de hopping. Desta forma, este ruído dinâmico agora impetrado na cadeia começa a competir com o termo de campo elétrico e assim destruir

Figura 2.16: Desvio quadrático médio  $\sigma$  versus o tempo para  $\gamma = 3$ ,  $b = 1.5$  e acoplamento elétron-fônon  $\alpha = 0.05, 0.1, 0.3, 0.5$ . Semelhante a figura anterior para  $\alpha = 0.05$  e  $0.1$ , existe um comportamento oscilatório bem caracterizado para tempos curtos e para tempos intermediário e longos observamos que o padrão de oscilação coerente desaparece e no quadro da direita encontramos uma estrutura de alguns picos com o pico dominante em torno de  $\omega = F$ . Para  $\alpha = 0.3$  e  $0.5$  observamos uma total ausência de oscilação por parte do pacote de onda.



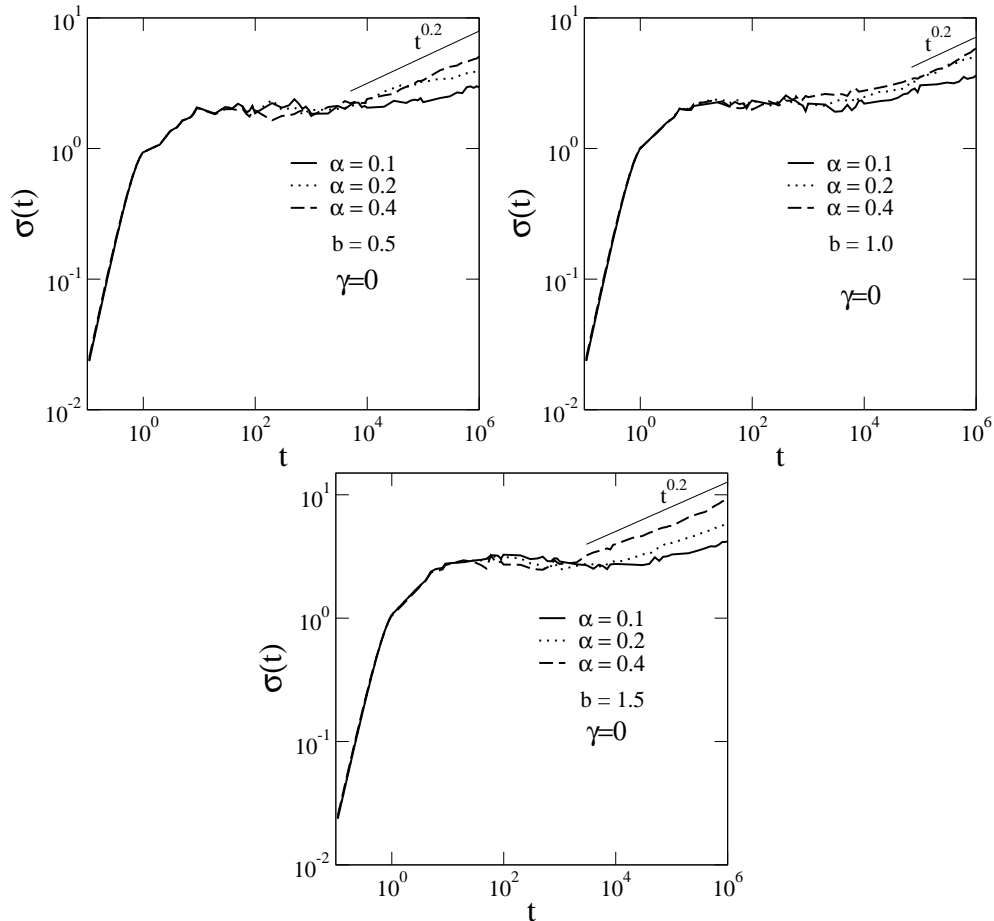
Fonte: Autor 2014

as oscilações do pacote eletrônico. Vale salientar que a medida que o acoplamento elétron-fônon fica mais intenso este transiente inicial onde ainda se encontra oscilações diminui. Podemos observar claramente isso analisando as figuras de  $\sigma$  versus  $t$  para  $\alpha = 0.05, 0.1, 0.3$ , e  $0.5$ . Particularmente para  $\alpha = 0.05$  e  $0.1$ , o tempo de transiente inicial onde a oscilação eletrônica ainda é mensurável é tão grande que a transformada de Fourier registra a frequência de oscilação associada. Podemos ver que em todas as figuras (2.14), (2.15) e (2.16) a transformada apresenta a frequência  $\omega = F$  remanescente do tempo inicial de oscilação que, neste limite de acoplamento elétron-fônon, é um tempo consideravelmente grande.

Para o caso sem correlação ou correlações fracas a presença de campo elétrico e interação elétron-fônon não introduz nenhum comportamento novo, basicamente encontramos uma localização dinâmica do pacote de onda sem oscilações coerentes. Entretanto, gostaríamos de apresentar aqui uma análise breve e inicial da dinâmica eletrônica na presença de acoplamento elétron-fônon e ausência de campo elétrico. Portanto, vamos considerar



Figura 2.17: Desvio médio quadrático  $\sigma$  versus o tempo  $t$  para  $\gamma = 0$ ,  $\alpha = 0.1, 0.2, 0.4$ ,  $F = 0$ ,  $b = 0.5$ ,  $b = 1.0$  e  $b = 1.5$ . Os resultados indicam que, apesar do forte grau de desordem não correlacionada considerado ( $\gamma = 0$ ), o alargamento médio cresce um pouco com o tempo.



Fonte: Autor 2014

$\gamma = 0$ ,  $\alpha > 0$  e  $F = 0$  e investigar o alargamento médio de um pacote de onda inicialmente localizado no centro da cadeia. Ou seja, vamos considerar novamente  $f_n = \delta_{n,N/2}$  e resolver numericamente o conjunto de equações diferenciais usando discretização temporal  $dt = 0.001$ . Nesta análise, devido a ausência de campo elétrico e concomitante ausência de localização do pacote eletrônico vamos necessitar utilizar cadeias maiores para evitar efeitos de reflexão na borda. Uma possibilidade seria utilizar  $N$  consideravelmente grande para assim evitar a chegada do pacote de onda na borda (por exemplo  $N = 10000$  ou  $20000$  sítios). Entretanto, esta solução é pouco recomendável, uma vez que, o número de equações cresce com o tamanho  $N$ , e desta forma, o tempo computacional torna-se à grande e inviável computacionalmente. Para transpor esta dificuldade técnica vamos aplicar o procedimento da cadeia auto expandida. Este procedimento consiste em iniciar os cálculos com uma cadeia pequena ( $N = 200$  ou  $300$  sítios) e crescer a cadeia a medida que o pacote eletrônico se aproxima de suas bordas. Em termos práticos quando o módulo quadrado da função de onda nas bordas for maior que zero dez novos sítios são

acoplados a cada extremidade da cadeia, expandindo assim, a cadeia de forma dinâmica. Este procedimento reduz o tempo computacional por um fator de dez.

Agora vamos analisar os resultados obtidos. Em relação figuras (2.17), apresentamos o desvio médio quadrático  $\sigma$  versus o tempo  $t$  para  $\gamma = 0$ ,  $\alpha = 0.1, 0.2, 0.4$ ,  $F = 0$ ,  $b = 0.5$ ,  $b = 1.0$  e  $b = 1.5$ . Nossos resultados indicam que, apesar do forte grau de desordem não correlacionada considerando ( $\gamma = 0$ ), o alargamento médio cresce um pouco com o tempo. Para tempos longos podemos observar um crescimento aproximadamente sub difusivo ( $\sigma \propto t^{0.2}$ ). Nos reconhecemos que essa análise é ainda um pouco incipiente devido as escalas de tempo considerada. O tempo máximo utilizado,  $t_{max} \approx 10^6$ , apesar de ser o limite de nossa capacidade computacional ainda é um pouco curto para estabelecer com mais precisão a dinâmica eletrônica em tempos longos. Entretanto, dentro de nossa atual precisão computacional nossos resultados sugerem que a interação elétron-fônon pode, de certa forma, “empurrar” o elétron e assim promover mobilidade eletrônica na cadeia.

# 3

## CONCLUSÕES

Neste trabalho foi estudado o transporte eletrônico em sistemas com desordem quaternária correlacionada. Nosso objetivo foi compreender as propriedades de localização da função de onda do elétron, absorção óptica e a dinâmica eletrônico. Em nossos trabalhos aplicamos uma metodologia que possibilitou a inclusão do termo de acoplamento elétron-fônon bem como a presença de um campo elétrico estático. Em linhas gerais consideramos um modelo unidimensional constituído por quatro tipos de átomos. As energias de ligação do elétron em cada um desses átomos foi dada por  $(\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \epsilon_4)$ . A distribuição das energias foi feita seguindo correlações de longo alcance semelhantes as utilizadas no trabalho de Moura e Lyra equação (2.2). Desta forma, com a utilização de métodos numéricos foi estudado as propriedades de localização da função de onda, espectro de absorção óptica e a dinâmica temporal de um pacote de onda. Em relação as propriedades de localização da função de onda, mostramos numericamente que a participação para correlações fracas ( $\gamma < 2$ ) é finita e os estados são localizados. Para  $\gamma > 2$  nossos resultados sugerem que o sistema apresenta estados metálicos.

Nossa análise da absorção óptica mostrou um padrão interessante e bastante dependente do grau de correlação. Na ausência de correlação  $\gamma = 0$ , a absorção óptica em boa parte da banda é nula, entretanto em torno do topo da banda ( $E \sim 2$ ), existe uma região de absorção não nula. Em linhas gerais, o mesmo foi obtido para quaisquer valores com fracas correlações  $\gamma < 2$ . Para  $\gamma > 2$  nossos resultados indicam a presença de diversos picos de absorção. Utilizando um formalismo heurístico explicamos qualitativamente e quantitativamente a existência de cada pico.

Por fim, nossa análise dos efeitos de campo e suas competições com o espalhamento pelas vibrações da rede apresentou resultados interessantes e instrutivos. Na ausência de acoplamento elétron-fônon  $\alpha = 0$ , a presença de um campo elétrico produz oscilações coerentes se a desordem tiver correlação forte ( $\gamma > 2$ ). Quando o acoplamento com a rede é ligado, nossos resultados indicam que o espalhamento por fônons destrói totalmente as oscilações de Bloch. Nossa metodologia também permitiu investigar o papel da interação com a rede sobre a dinâmica eletrônica no caso de desordem correlacionada. Nossos resultados numéricos indicam que o acoplamento elétron-fônon, na abordagem aqui utili-

zada, promove transporte de carga mesmo na presença de desordem sem correlação. Um aspecto importante é estudar qual a magnitude desse transporte de carga induzido por fônons e qual o papel do tipo de acoplamento elétron-fônon utilizado. Outro aspecto importante consiste em entender qual o papel da interação elétron-elétron nestes sistemas e quais propriedades físicas emergem da competição entre o termo de Coulomb e a interação elétron-fônon. Estas questões em aberto são pontuadas aqui como algumas perspectivas deste estudo.

# 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] OHM, G. S. Die galvanische kette, mathematisch bearbeitet:(Berlin 1827 bei TH Reimann.); Neudruck mit einem Vorwort von James Moser. *Toeplitz & Deuticke*, 1887.
- [4] SOMMERFELD, A. Zur Elektronentheori der Metalle auf Grund der Fermischen Statistik. *Zeitschrift für Physik*, v. 47, N. 1-2, p. 1-32, 1928.
- [5] BLOCH, F. Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern. *Zeitschrift für Physik*, v. 52, N. 7-8, p. 555-600, 1929.
- [6] ANDERSON, P. W. Absence of Diffusion in Certain Random Lattices. *Proc. Phys. Soc. Lond. A*, v. 109, N. 5, p. 1492 – 1505, 1958.
- [7] dos Santos. J. L. L, Propriedades de localização e espectro de absorção em sistemas eletrônicos com correlação tipo exponencial alongada na distribuição de desordem, 2013, 73 f. Dicertação (Mestrado)- Instituto de Física. Universidade Federal de Alagoas. Maceió 2013
- [8] 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, p. 673 – 676, 1979.
- [9] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello and T. V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 673 (1979). For a review see, e.g., I. M. Lifshitz, S. A. Gredeskul and L. A. Pastur, *Introduction to the Theory of Disordered Systems* (Wiley, New York, 1988).
- [10] B. Kramer and A. MacKinnon, *Rep. Prog. Phys.* 56, 1469 (1993). For a review see, e.g., I. M. Lifshitz, S. A. Gredeskul and L. A. Pastur, *Introduction to the Theory of Disordered Systems* (Wiley, New York, 1988).
- [11] LIFSHITZ, I. M.; GREDESKUL,S. A.; PASTUR. L. A. Introduction to the Theory of Disordered System. *Wiley, New York*, 1988.
- [12] KRAMER, B.; MACKINNON, A. Localization: Theory and Experiment. *Rep. Prog. Phys.*, v. 56, N. 12, p. 1469 – 1564, 1993.

- [13] R. A. Romer and H. Schulz-Baldes. Weak-disorder expansion for localization lengths of quasi-1D systems *Europhys. Lett*, v. 68 (2), p. 247–253 2004.
- [14] MOTT, N. F. Metal-insulator Transitions. *Tay. and Fran.*, London/Philadelphia, 1990.
- [15] dos Santos B. Propriedades de Transporte no Modelo de Anderson 1D com Desordem Correlacionada, 2007, 49 f. Trabalho de conclusão de curso - Instituto de Física. Universidade Federal de Alagoas. Maceió 2007.
- [16] WIGNER, E.; SEITZ, F. On the Constitution of Metallic Sodium. *Phys. Rev.*, v. 43, N. 10, p. 804-810, 1929.
- [17] KITTEL, C.; *Introduction Solid State Physics. John Wiley & Sons*, 1976.
- [18] KRONIG, R. L.; PENNEY, W. G. Quantum Mechanics of Electrons in Cristal Lattices. *Proc. Roy. Soc. A*, v. 130, p. 499-513, 1931.
- [19] de MOURA, F. A. B. F, Transição de Anderson em sistemas de baixa dimensionalidade com desordem correlacionada, 2003, 151 f. Tese (Doutorado) - Instituto de Física. Universidade Federal de Pernambuco, Recife, 2003.
- [20] DIAS, W. S. Propriedades de transporte em sistema de baixa dimensionalidade na presença de interação, 2011, 148 f. Tese (Doutorado) - Instituto de Física. Universidade Federal de Alagoas. Maceió 2011.
- [21] EVERS, F.; MIRLIN, A. D. Anderson transition. *Rev. Mod. Phys.*, v. 80, N. 4, p. 1355 – 1417, 2008.
- [22] THOULESS, D. J. *Phys. Rev. Lett.*, v. 39, p. 1167, 1977.
- [23] THOULESS, D. J. Electrons in disordered systems and the theory of localization. *Phys. Rep.*, v. 13C, N. 93, p. 93 – 142, 1974.
- [24] WEGNER, F. Electrons in disordered systems. Scaling near the mobility edge *Zeits. Phys. B Condens. Matt.*, v. 25, N. 4, p. 327 – 337, 1976.
- [25] ISHII, K. Localization of Eigenstates and Transport Phenomena in the One-Dimensional Disordered System. *Prog. Theor. Phys.*, N. 53, p. 77 – 138, 1973.
- [26] SOUKOULIS, C. M.; ECONOMOU, E. N. Off-diagonal disorder in one-dimensional systems. *Phys. Rev. B*, v. 24, N. 10, p. 5698 – 5702, 1981.
- [27] 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.
- [28] 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.
- [29] E. Díaz, A. Sánchez, and F. Domínguez-Adame, Absence of localization and large dc conductance in random superlattices with correlated disorder, *Phys. Rev. B*. v. 50, p. 14359–14367, 1994.

- [30] F. Domínguez-Adame, A. Sánchez, and E. Díaz, Quasi-ballistic-electron transport in random superlattices, *Phys. Rev. B.* v. 50, p. 17736–17739, 1994.
- [31] FLEISHMAN, L.; LICCIARDELLO, D. C. Fluctuations and localization in one dimension. *Phys. C: Solid State Phys.*, v. 10, N. 6, p. L125 – L126, 1977.
- [32] GRINIASTY, M.; FISHMAN, S. Localization por pseudorandom potentials in one dimation. *Phys. Rev. Lett.*, v. 60, p. 1334 – 1337, 1988.
- [33] 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.
- [34] THOULESS, D. J. Localization by a with Slowly Varying Period. *Phys. Rev. Lett.*, v. 61, p. 2141 – 2143, 1988.
- [35] J. C. Flores, J. Transport in models with correlated diagonal and off-diagonal disorder. *Phys. Condens. Matter.* V. 1, p. 8471-8479, (1989).
- [36] FLORES, J. C. Transport in models with correlated diagonal and off-diagonal. *J. Phys.: Condens. Matter.*, v. 1, p. 8471 – 8479, 1989.
- [37] DUNLAP, D. H.; WU, H. L.; PHILLIPS, P. W. Absence of Localization in a Random-Dimer Model. *Phys. Rev. Lett.*, v. 65, N. 1 p. 88 – 91, 1990.
- [38] BOVIER, A. Perturbation Theory for the random dimer model. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 25, p. 1021 – 1029, 1992.
- [39] HILKE, M. Local correlations in one-and two-dimensional disordered systems. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 27, p. 4773 – 4783, 1994.
- [40] WU, H. -L.; PHILLIPS, P. Polyaniline is a random-dimer model: A new transport mechanism for conducting polymers. *Phys. Rev. Lett.*, v. 66, N 10, p. 1366 – 1369, 1991.
- [41] F. A. B. F. de Moura, M. D. Coutinho-Filho, E. P. Raposo and M. L. Lyra. Delocalization and ballistic dynamics in the two-dimensional Anderson model with long-range correlated disorder *Europhys. Lett.* V. 66, p. 585–591, 2004.
- [42] F. M. Izrailev, A. A. Kroklin, N. M. Makarav, Anomalous Localization in low-dimensional systems with correlated disorder. *physics Reports.* V. 512, p. 125-254, 2012.
- [43] F. Domínguez-Adame , V. A. Malyshev, F. A. B. F. de Moura and M. L. Lyra. Bloch-Like Oscillations in a One-Dimensional Lattice with Long-Range Correlated Disorder *Phys. Rev. Lett.* V. 91 p. 197-402, 2003.
- [44] I. F. dos Santos, F. A. B. F. de Moura, M. L. Lyra and M. D. Coutinho-Filho, J. Critical behavior of the two-dimensional Anderson model with long-range correlated disorder. *Phys. Condens. Matter,* V. 19, p. 476-213, 2007.
- [45] W. S. Liu, T. Chen, and S .J. Xiong, J, Kosterlitz-Thouless-type metal-insulator transition in two-dimensional layered media with long-range correlated disorder. *Phys. Condens. Matter* V. 11, p. 6883–6889, 1999.

- [46] G. P. Zhang and S.J. Xiong, Eur. Phys. J. B, Localization-delocalization transition in one-dimensional system with long-range correlated diagonal disorder. V. 29, p. 491–495, 2002.
- [47] F. A. B. F. de Moura and M. L. Lyra, Delocalization in the 1D Anderson Model with Long-Range Correlated Disorder. Phys. Rev. Lett. V. 81, p. 3735–3738, 1998.
- [48] B. B Mandelbrot, J. W. Ness SIAM rev. 10 422. 1968.
- [49] B. B Mandelbrot, The fractal Geometry of Nature (Freeman, New York 1983).
- [50] A. R. Osborne e A Provenzale, Physica D 35, 357 1989.
- [51] The Science of Fractal Images, editado por Heinz-Otto Peitgen e Dietmar Saupe (Springer-Verlag, New York 1988).
- [52] T. Higuchi, Physica D 46, 254 1988.
- [53] F. M. Izrailev, A. A. Krokhin, Localization the Mobele Edge in On-Dimension Potential with correletd disorder, Phys. Lett. V. 82, N 20, p. 4062-4065, 1998.
- [54] A. Esmailpour, H. Cheraghchi, Pedro Carpena and M Reza Rahimi Tabar, Metal-insulator transition in a ternary model with long range correlated disorder, Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment. (2007) P. 09014
- [55] E. Lazo and E. Diez, Conducting to non-conducting in dual transmission lines using a ternary model with long-range correlated disorder, Phys. Lett. A, V. 374, p. 3538-3545, 2010.
- [56] E. Lazo and E. Diaz, Conduiting properties of classical transmission lines with Ornstein-Uhlenbeck typ disorder Phys. Lett. A V. 375, p. 2122-2128, 2011.
- [57] M. O. Sales, S.S. Albuquerque and F. A. B. F. de Moura, J. Phys. Condens. Matter. Energy transport in a one-dimensional harmonic ternary chain with Ornstein-Uhlenbeck disorder, V. 24, 495-401, 2012.
- [58] Manuel G. Velarde. From polaron to solectron: The addition of nonlinear elasticity to quantum mechanics and its possible effect upon electric transport. Phys. Rev. Lett **233**, (2010) 1432.
- [59] F. A. B. F. de Moura, Numerical evidence of electron-soliton dynamics in Fermi-Pasta-Ulam disordered chains. Physica. D, Nonlinear Phenomena. Lett **253**, (2013) 66.
- [60] W. P. Su, J. R. Schrieffer and A. J. Heeger. Solitons in polyacetylene. Phys. Rev. Lett. **42** (1979) 1698;
- [61] W. P. Su, J. R. Schrieffer and A. J. Heeger. Soliton excitations in polyacetylene. Phys. Rev. B **22** (1980) 2099;
- [62] A. J. Heeger, S. Kivelson, J. R. Schrieffer and W. P. Su. Solitons in conducting polymers. Rev. Mod. Phys. **60** (1988) 781.



- [63] DIAS, W. S, Dois elétrons em cadeias cristalinas aperiodicidade: efeitos de campo elétrico, 2007, 103 f. Dicerção (Mestrado)- Instituto de Física. Universidade Federal de Alagoas. Maceió 2007.
- [64] VARRIALE, M. C. *Transição de localização em potenciais aleatórios com correlações de longo alcance*,. Tese (Doutorado) — UFRGS, Porto Alegre, 1994.
- [65] M. O. SALES, Localização em sistemas com desordem correlacionada: Correlações exponenciais e correlações tipo Ornstein-Uhlenbeck, 2012, 68 f. Dicerção (Mestrado)- Instituto de Física. Universidade Federal de Alagoas. Maceió 2012.
- [66] WANNIER, G. H. The Structure of Electronic Excitation Levels in Insulating Crystals. *Phys. Rev.*, v. 52. N 3. p. 191 – 197, 1937.
- [67] F. M. Izrailev, A.A. Krokhin, Localization and the Mobility Edge in One-Dimensional Potentials with Correlated Disorder, *Physical Review Letter*, V. 82, p. 4062–4065, 1999.
- [68] F. M. Izrailev, A.A. Krokhin, N.M. Makarov, Anomalous localization in low-dimensional systems with correlated disorder *Physics Reports*, V. 512, p. 125–254, 2012.
- [69] DÍAZ, E.; RODRÍGUEZ, A.; DOMÍNGUEZ-ADAME, F.; MALYSHEV, V. A. Anomalous optical absorption in a random system with scale-free disorder. *Europhys. Lett.*, v. 72. N 6. p. 1018 – 1024, 2005.
- [70] FRENKEL, J. On the Transformation of light into Heat in Solids II. *Phys. Rev.*, v. 37. N 10. p. 1276 – 1294, 1931.
- [71] FRENKEL, J. On the Transformation of light into Heat in Solids I. *Phys. Rev.*, v. 37. N 1 . p. 17 – 44, 1931.
- [72] KNOX, R. S. Theory of excitons. Vol. 5. *New York: Academic Press*, 1963.
- [73] T. F. Assunção, M.L. Lyra, F. A. B. F. de Moura and F. Domínguez-Adame, Coherent electronic dynamics and absorption spectra in an one-dimensional model with long-range correlated off-diagonal disorder. *Phys. Lett. A*, V. 375, p. 1048-1052, 2011.
- [74] E. Díaz, A. Rodríguez, F. Domínguez-Adame, V.A. Malyshev, Anomalous optical absorption in a random system with scale-free disorder *Europhys. Lett.* V. 72, N. 6, p. 1018–1024, 2005.
- [75] M. O. SALES, T. F. Assunção, S. S. ALBUQUERQUE, F. A. B. F. de Moura, Absorption spectra and level spacing statistics in a ternary ally with an Ornstein-Uhlenbeck disorder distribution, *International Journal of Modern Physics C*, V. 25, N. 2 2013