

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS
INSTITUTO DE FÍSICA

MESSIAS DE OLIVEIRA SALES

**Localização em Sistemas com Desordem Correlacionada:
Correlações Exponenciais e Correlações tipo Ornstein-Uhlenbeck.**

Maceió
2012

MESSIAS DE OLIVEIRA SALES

**Localização em Sistemas com Desordem Correlacionada:
Correlações Exponenciais e Correlações tipo Ornstein-Uhlenbeck.**

*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
2012**

A minha família.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a meus pais pela confiança e carinho. Ao professor Francisco e o professor Samuel pela imensa influência e contribuição em minha evolução acadêmica. E a todos os outros professores e colegas que tive a oportunidade de conhecer e interagir até o presente momento. Todos foram essenciais na junção de partes que fazem ser possível a construção deste trabalho.

À Capes, o CNPQ, e à Fapeal pelo apoio financeiro.

RESUMO

Neste trabalho, calculamos numericamente a dinâmica de um elétron em um sistema unidimensional desordenado. O formalismo utilizado é baseado na solução numérica da equação de Schrödinger independente do tempo para o Hamiltoniano completo, combinado com uma análise de escala de tamanho finito. Os cálculos foram executados em cadeias com correlação exponencial de curto alcance sobre uma distribuição com desordem diagonal. Os métodos numéricos utilizados fornecem uma estimativa precisa para a dependência do comprimento de localização com a intensidade da desordem. Mostramos também, cálculos numéricos do comprimento de localização usando um procedimento de renormalização padrão. Os resultados adquiridos estão dentro da precisão numérica utilizada. Descrevemos detalhadamente o papel desempenhado por estas correlações de curto alcance no transporte eletrônico. Demonstramos numericamente a relação entre o comprimento de localização, comprimento de correlação, e a intensidade da desordem. Seguindo o estudo, analisamos uma cadeia harmônica ternária $1-d$ com a distribuição de massas construída a partir de um processo Ornstein-Uhlenbeck. Calculamos a distribuição de massas, generalizando o processo Ornstein-Uhlenbeck correlacionado e mapeando ele em uma sequência de três valores diferentes. A probabilidade de encontrar cada valor é controlada por um parâmetro b fixo. Analisamos o aspecto de localização do modelo acima através da solução numérica das equações de Hamilton e pelo formalismo de matriz de transferência. Os resultados obtidos com essas técnicas numéricas, indicam que a distribuição desordenada de massas ternária correlacionada não promove o aparecimento de novos modos estendidos. De acordo com outros trabalhos da literatura científica, obtemos modos estendidos para $b \rightarrow \infty$. Explicaremos com detalhes durante o trabalho a questão principal por trás dessa aparente transição localização-deslocalização. Além disso, nós obtemos a dinâmica de energia para essa cadeia clássica.

Palavras-chave: Correlações exponenciais. Desordem Ornstein-Uhlenbeck. Transição desordem-ordem.

ABSTRACT

In this work, we numerically calculate the dynamics of an electron in one-dimensional disordered systems. Our formalism is based on the numerical solution of the time-dependent Schrodinger equation for the complete Hamiltonian combined with a finite-size scaling analysis. Our calculations were performed on chains with short-ranged exponential correlation on the diagonal disorder distribution. Our formalism provides an accurate estimate for the dependence of the localization length with the width of disorder. We also show here numerical calculations of the localization length by using a standard renormalization procedure. Our results agree within our numerical precision. We provide a detailed description of the role played by these short-range correlations within electronic transport. We numerically demonstrate the relationship between localization length, correlation length, and the strength of disorder. Following the study, we analyzed a one-dimensional ternary harmonic chain with the mass distribution constructed from a Ornstein-Uhlenbeck process. We generate a ternary mass disordered distribution by generating the correlated Ornstein-Uhlenbeck process and mapping it into a sequence of three different values. The probability of each value is controlled by a fixed parameter b . We analyze the localization aspect of the above model by the numerical solution of the Hamilton equations and by the transfer matrix formalism. Our results indicate that the correlated ternary mass distribution does not promote the appearance of new extended modes. In good agreement with previous works, we obtain extended modes for $b \rightarrow \infty$ however, we explain in detail the main issue behind this apparent localization delocalization transition. In addition, we obtain the energy dynamics for this classical chain.

Keywords: Exponential correlation. Ornstein-Uhlenbeck disorder. Disorder-order transition.

LISTA DE FIGURAS

1.1	Um elétron na aproximação <i>tight-binding</i> para a transição de Anderson. Quando a largura W da desordem excede a largura de banda B sobreposta, ocorre uma transição desordem-induzida no regime localizado.	15
1.2	Comportamento qualitativo da $\beta(g)$ para sistema de $d = 1, 2, 3$ dimensões na teoria de escala apresentada por Abrahams Anderson, Licciardelo e Ramakrishnan.	17
2.1	a) Mostra a distribuição de energia decaindo exponencialmente com a correlação. Notamos a suavização da distribuição quando o comprimento de correlação ζ aumenta. Em (b) cálculos numéricos dos dois pontos da função auto correlação definida por $C(r) = [1/(N - r)] * \sum_{n=1}^{N-r} \epsilon_n \epsilon_{n+r}$	29
2.2	Representação esquemática do cálculo para o comprimento de localização dentro do formalismo de renormalização. Em (a) o Hamiltoniano inicial infino unidimensional é indicado. Em (b) os sítios entre 0 e $N + 1$ foram eliminados. Finalmente, em (c) apenas os sítios 0 e $N + 1$ são preservados.	35
2.3	Cálculos do deslocamento médio quadrático para o pacote de onda em uma cadeia com distribuição de desordem decorrelacionada, tendo o desvio padrão variando de $\Delta = 0.1$ até $\Delta = 0.6$. A condição inicial foi um pacote de onda de um elétron inicialmente localizado no centro da cadeia, ou seja, $c_n(t = 0) = \delta_{n,n_0}$. A propagação da função de onda aumenta quando o grau de desordem Δ decresce.	37
2.4	(o) O limite de longos tempos do deslocamento médio quadrático $\Sigma = \lim_{t \rightarrow t_{max}} \sigma(t)$ versus o desvio padrão da distribuição de energia nos sítios Δ . O melhor fit (linha pontilhada) nos fornece $\Sigma \propto \Delta^{-2.00(5)}$. (o) O mesmo resultado obtido acompanhando o comprimento de localização no centro da banda Λ	38
2.5	a) Comprimento de localização Λ versus o desvio padrão Δ para vários valores do comprimento de correlação ζ . Λ cresce quando ζ é aumentado e o comportamento de escala com Δ não muda qualitativamente $\Lambda \propto \Delta^{-2}$. b) Comprimento de localização escalado Λ/N versus o tamanho do sistema para $\Delta = 0.1$ e $\zeta = 4$ até $\zeta = 12$. A escala de tamanho finito sugere um comprimento de localização finito no limite termodinâmico.	39
2.6	Grau de localização versus ζ para $\Delta = 0.1$ até $\Delta = 0.6$. Para desordem fraca ($\Delta \ll 0.5$), o comprimento de localização escala proporcionalmente a ζ^3 . Por outro lado, para Δ grande em correlações de curto alcance não são suficientes para enfraquecer os efeitos de localização de uma distribuição com forte desordem e Λ aparentemente satura em um valor finito quando ζ é aumentado.	40

2.7 a) Δ_{L_0} versus ζ calculado em uma sequência desordenada para as energias dos sítios com desvio padrão $\Delta = 0.5$, $N = 10^7$ e valores distintos de L_0 . De uma maneira geral, esse resultado está de acordo com a teoria usual de processos aleatórios correlacionados, em que observamos o decrescimento da desordem à medida que o comprimento de correlação é aumentado. Além disso, para um valor fixo de ζ , o grau de desordem aumenta quando L_0 cresce. b) Comprimento de localização Λ versus ζ calculado em uma cadeia com desvio padrão $\Delta = 0.5$ e $N = 10^7$ sítios. Nos podemos ver a dependência contra-intuitiva de Λ com ζ . Para comprimentos de correlação pequenos nossos resultados indicam um aumento cúbico. Para uma escala intermediária de comprimento de correlação, o efeito da desordem domina, estabilizando assim, o comprimento de localização em uma constante. Para comprimentos de correlação grandes, a desordem deve decrescer substancialmente e o comprimento de localização retorna a crescer. 41

3.1 Cálculo numérico dos dois pontos da função auto correlação, definida como $C(r) = [1/(N - r)] * \sum_{n=1}^{N-r} x_n x_{n+r}$. Vemos que à medida que γ é diminuído o processo OU exhibe um aumento do grau de correlação. 50

3.2 Comprimento de Localização λ versus ω^2 para uma cadeia harmônica com uma distribuição de massas desordenada (OU) tendo $\gamma = 1.0, 5.0$ e $b = 0.25, 0.5, 0.75, 1.0$. Cálculos foram feitos usando $N \approx 10^8$ e medidas algo em torno de 100 configurações de desordem. Nossos cálculos indicam que para $\gamma \gg 0$ a cadeia harmônica considerada aqui exhibe comportamento similar a uma cadeia harmônica com distribuição de desordem descorrelacionada. (c,d) Comprimento de localização λ versus ω^2 para uma cadeia harmônica com distribuição desordenada de massas (OU) tendo $\gamma = 0.1; 0.01$ e $b = 0.25, 0.5, 0.75, 1.0$ 51

3.3 (a) Comprimento de localização λ versus ω^2 para uma cadeia harmônica com distribuição desordenada de massas (OU) tendo $\gamma = 0.001$ e $b = 0.25, 0.5, 0.75, 1.0$. b) Define a escala de tamanho do comprimento de localização para $\gamma = 0.001$, $b = 0.5$ e $\omega^2 = 0, 0.01$ e 0.1 , onde observamos que o comprimento de localização aumenta quando γ é diminuído, contudo, apenas o modo de frequência nula continua sendo estendido. 52

3.4 a) Comprimento de localização escalado λ/N para $\omega^2 = 0.25$ versus b . Cálculos foram feitos para $\gamma = 0.001$ e um sistema tendo de 2×10^7 até 10^8 massas. Podemos ver claramente que em $b \leq 4.0$ o comprimento de localização escalado decresce quando o tamanho do sistema é aumentado, indicando assim, estados localizados. Para $b > 4.0$ todos os dados coincidem, indicando modos vibracionais estendidos. b) Cálculos numéricos da intensidade da desordem em um segmento com L_0 massas. Para $b > 4.0$ o intensidade da desordem local vai a zero; portanto, nossos cálculos indicam que o aparecimento da transição localização-delocalização de Anderson obtida em (a), que é de fato uma transição de fase desordem-ordem. 53

- 3.5 a) Comprimento de localização λ versus γ para $b = 0.25, 0.5, 0.75$ e 1.0 . Nossos resultados indicam que o comprimento de localização escala proporcionalmente a $\gamma^{-0.5}$. b) A quantidade efetiva de desordem na cadeia calculada usando a Transformada de Fourier Integrada, (Integrated Fourier Transform (*IFT*)). Cálculos de *IFT* versus γ foram feitos para $b = 0.25, 0.5, 0.75, 1.0$ e $N = 2^{26}$ massas. Nossos cálculos indicam que $IFT \propto \gamma^{0.25(2)}$. O comportamento de escala de *IFT* associado com a dependência bem conhecida de λ com a quantidade de desordem corroborada aos resultados obtidos em (a), (ou seja, $\lambda \propto 1/W^2 \propto 1/(IFT)^2 \propto 1/\gamma^{0.5}$). 54
- 3.6 (a,b) Segundo momento escalado $M_2/t^{\kappa(\gamma)}$ como uma função do tempo para $\gamma = 0.001, 0.01, 0.1, 1.0$; $b = 0.25, 0.5$ e $N = 250000$ massas. O expoente do segundo momento κ varia consideravelmente com γ . Para γ grande obtemos exatamente os mesmos resultados como esperado para uma cadeia harmônica com desordem descorrelacionada $\kappa \approx 1.5$ [62, 100, 108]. Contudo, quando o grau de correlação é aumentado, (isto é, $\gamma \rightarrow 0$) a energia propagada se torna mais lenta com $\kappa < 1.0$. Para compreender esta dinâmica lenta, mesmo na presença de correlação dentro da distribuição de desordem, nos podemos focar no comportamento de escala do comprimento de localização em torno da ressonância no início da banda ($\omega = 0$). 55
- 3.7 Aqui plotamos o comprimento de localização versus ω^2 no início da banda. Os cálculos foram realizados para $N = 10^8$ massas, $\gamma = 0.01, 5.0$ e $b = 0.25, 0.5, 0.75, 1.0$. Para $\gamma = 5.0$ recuperamos uma cadeia com desordem descorrelacionada tendo $\lambda \propto \omega^{-2}$. Este resultado está em bom acordo com o comportamento superdifusivo do segundo momento $M_2 \propto t^{1.5}$ encontrado em (a,b). Além disso, para $\gamma = 0.01$ obtemos uma lenta divergência para o comprimento de localização em torno $\omega = 0$, concordando assim, com a lenta dinâmica obtida em 3.6(a,b) para $\gamma \rightarrow 0$ 56

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	10
1.1	Modelo de Anderson	11
1.2	Teoria de Escala	13
1.3	Desordem Correlacionada	19
1.4	Mapeamento de uma Cadeia Harmônica	22
1.4.1	Medidas do Grau de Localização	25
2	DINÂMICA DE UM ELÉTRON EM SISTEMAS COM DESORDEM CORRELACIONADA DE CURTO ALCANCE	27
2.1	Introdução	27
2.2	Correlações Exponenciais no Modelo de Anderson	28
2.3	Expansão de Taylor na Equação de Schrödinger	30
2.4	Operador de Green no Método de Grupo de Renormalização	31
2.5	Resultados e implicações	37
3	TRANSPORTE DE ENERGIA EM CADEIAS HARMÔNICAS UNIDIMENSIONAIS COM DESORDEM CORRELACIONADA TIPO ORNSTEIN-UHLENBECK	43
3.1	Introdução	43
3.2	Cadeia Harmônica Unidimensional	45
3.2.1	Sequência Ornstein-Uhlenbeck (OU)	46
3.3	Propriedades de Localização	47
3.4	Fluxo de Energia	48
3.5	Discussão dos Resultados	49
3.5.1	Aspectos da Localização	49
3.5.2	Análise do Transporte de Energia	54
4	CONCLUSÃO	57
	REFERÊNCIAS	60

1

INTRODUÇÃO

Os esforços para compreender a estrutura dos sólidos cristalinos foram intensificados com a descoberta de técnicas experimentais, em particular a difração de raios X [1]. Além de diversas descobertas experimentais, uma série de cálculos analíticos das propriedades térmicas e eletrônicas dos cristais foram o ponto chave para o entendimento das diversas excitações elementares e suas fenomenologias em materiais cristalinos [1]. Dentro deste contexto, a Mecânica Estatística e a Mecânica Quântica foram as principais teorias responsáveis pelas previsões teóricas. Geralmente, as quasi-partículas ou excitações coletivas em sistemas com invariância translacional, como elétrons, mágnons ou fônons, são descritas por funções de onda espalhadas por todo o sistema. Quando se estuda sólidos cristalinos perfeitos os modelos teóricos com invariância translacional são uma boa aproximação. O modelo de Bloch é um bom exemplo deste tipo de abordagem. Este modelo considera um elétron movendo-se em um potencial periódico que representa a estrutura atômica cristalina. Este modelo prevê uma resistência nula para sólidos cristalinos perfeitos. Entretanto, encontrar sólidos cristalinos na natureza ou mesmo os produzidos em laboratório é algo extremamente raro. Em geral, os sólidos apresentam defeitos que destroem a invariância translacional, modificando as propriedades físicas indicadas pelos modelos teóricos citados. Ao fim da década de cinquenta Anderson [1, 2, 3, 4], introduziu um modelo contendo os ingredientes básicos para se estudar o efeito da presença de defeitos (desordem estrutural ou composicional) nas propriedades de condução de um dado modelo. O modelo de Anderson considera um elétron se movendo sobre a ação de um potencial aleatório. Este potencial aleatório pode representar uma composição amorfa (desordem oriunda da composição do material) ou uma estrutura interna distorcida. Apesar de várias mudanças com o intuito de simplifica-lo, o modelo de Anderson é considerado até hoje a estratégia mais eficaz nas análises dos efeitos da desordem sobre as propriedades de transporte eletrônico. Outros efeitos, como o de correlação eletrônica [5, 6, 7, 8], são apresentados no avançar da descrição do trabalho. Anderson, através de suas pesquisas mostrou que a natureza dos estados eletrônicos apresenta forte dependência com o grau de desordem no material [2]. Em geral, para dimensões altas e considerando desordem fraca, as funções de onda eletrônicas são estendidas e o comportamento do sistema é tipicamente metá-

lico [1, 3, 4]. Para desordem forte os estados eletrônicos são exponencialmente localizados e o material é dito isolante. Por fim, em um grau de desordem intermediário o sistema pode apresentar uma transição metal-isolante, neste caso dependendo da dimensão do sistema.

Segundo o modelo de Anderson [2], todos os estados eletrônicos são exponencialmente localizados para qualquer grau de desordem em sistemas com dimensão $d \leq 2$. No limiar, isto é, $d = 2$ é possível encontrar uma transição metal-isolante se o termo de acoplamento spin órbita for considerado [9, 10]. Porém, nas últimas décadas, ampliações do modelo de Anderson unidimensional têm sido propostas, nas quais foram encontrados alguns estados estendidos ressonantes [11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20] e também fases metálicas [21, 22, 23, 24]. Os avanços nesses modelos unidimensionais incluem a existência de correlações de curto e longo alcance na distribuição da desordem. A descoberta de que mesmo em sistemas unidimensionais, existe uma fase metálica têm motivado os pesquisadores [25, 26] e despertando o interesse dos mesmos em estudar sistemas com desordem correlacionada em outras áreas do conhecimento. Como o estudo experimental da propagação de microndas através de guias de onda desordenados [27], que mostra a correlação na desordem causando a delocalização no sistema.

Nos capítulos seguintes, estudaremos o transporte de energia em sistemas com correlações na desordem. Investigaremos sistemas com correlações de curto alcance bem como estudar o efeito de distribuições de desordem geradas a partir de um processo estocástico com memória de longo alcance chamado, sequência Ornstein-Uhlenbeck. Nosso estudo consiste em cadeias eletrônicas bem como cadeias harmônicas simples. Vamos fazer uma breve revisão da literatura científica necessária neste trabalho, apresentando a teoria existente bem como a metodologia empregada em nosso estudo.

1.1 Modelo de Anderson

O modelo de Anderson [1, 2, 3, 4], foi de importância imprescindível para compreender as transições metal-isolante, que ocorrem em diversos materiais, mais notavelmente no Si:P [7]. Anderson considerou somente os elementos cruciais para investigar o fenômeno de localização dos estados eletrônicos em sistemas desordenados. A essência desse modelo é estudar uma grande variedade de fenômenos em metais, que ocorrem pela presença de desordem. Na forma representativa das funções de Wannier, e utilizando a aproximação *tight-binding* [29], o operador Hamiltoniano de Anderson é dado por

$$H = \sum_i \epsilon_i |i\rangle \langle i| + \sum_{i \neq j} T_{ij} |i\rangle \langle j|, \quad (1.1)$$

onde $|i\rangle$ é um estado localizado no sítio i e T_{ij} é o termo que descreve a dinâmica do elétron, isto é, o *hopping* do elétron entre sítios vizinhos na presença de um potencial aleatório, também é chamado de elemento de matriz do Hamiltoniano ou integral de

transferência entre os sítios i e j , que decresce muito rapidamente com a distância entre eles. O potencial aleatório mencionado, possui as seguintes características: Para um cristal perfeitamente ordenado, todos sítios de energia ϵ_i têm os mesmos valores ou seguem um padrão periódico. Em sólidos desordenados, ϵ_i pode ser aleatoriamente escolhido de uma certa distribuição de probabilidade; por exemplo, uma distribuição uniforme ou gaussiana. Em uma distribuição de probabilidade geral, ϵ_i é caracterizada por um parâmetro W que quantifica a extensão da distribuição, e assim o grau de desordem. A respeito de uma distribuição uniforme, W mede o comprimento da mesma, já em uma distribuição gaussiana W é o desvio padrão. Em modelos unidimensionais para sólidos desordenados normalmente se considera apenas dois parâmetros de interesse, o termo de interação entre os vizinhos mais próximos, T_{ij} , e a desordem do sistema, W . Logo, o parâmetro de controle é a razão W/T . É comum manter T_{ij} em um valor fixo (como, $T_{ij} = 1$), assim fixando a escala de energia do sistema, W é variado para estudar os efeitos produzidos por diferentes níveis de desordem [28].

No limite $W \rightarrow 0$ (desordem fraca), onde o acoplamento de energia T_{ij} entre vizinhos domina, uma estrutura perfeita é recuperada, e o teorema de Bloch se aplica: existem estados eletrônicos estendidos, e o sistema pode conduzir [29]. Isso é válido para sistemas de tamanho finito apenas, porque a teoria de localização afirma que no limite de grandes sistemas todos estados eletrônicos são localizados, isso em modelos unidimensionais [3]. Para W suficientemente grande, onde a desordem domina, as funções de onda são fortemente localizadas. O fenômeno de localização tem grande dependência com a dimensão do sistema; em redes tridimensionais, por exemplo, em temperatura nula, $\theta = 0$, existe um valor crítico $W_c = 16.5$ intermediário a uma escala de valores de W , para o qual ocorre uma transição metal-isolante [30, 31], referente a uma distribuição uniforme. No intervalo da distribuição de desordem, $W < W_c$, observa-se que as funções de onda eletrônicas são estendidas, e o sistema se comporta como um metal, enquanto para $W > W_c$, as funções de onda ficam localizadas, e o sistema se comporta como um isolante. Para sistemas desordenados bi e unidimensionais, mesmo com grau de desordem infinitesimal, ocorrem estados localizados [3], como também em $\theta = 0$ o sistema se comporta como um isolante no limite termodinâmico, embora para alguns casos especiais em duas dimensões seja possível encontrar uma transição metal-isolante [32, 33].

Para obter os autoestados eletrônicos ψ do Hamiltoniano H é necessário usar a solução da equação de Schrödinger com um termo aleatório. Expandindo os autoestados nas bases dos orbitais ($\psi = \sum_i c_i |i\rangle$) encontramos a equação de Schrödinger ($H\psi = E\psi$) para o operador Hamiltoniano da Eq. 1.1 projetado na base $|i\rangle$:

$$Ec_i = \epsilon_i c_i + \sum_j T_{ij} c_j. \quad (1.2)$$

Agora analisemos as Eqs 1.1 e 1.2 em algumas situações limites. Inicialmente, conside-

raremos o elemento estocástico essencial no modelo de Anderson, isto é, a distribuição ϵ_i , este modelo é muitas vezes particularizado a um simples caso em que os sítios estão espacialmente dispostos sobre uma rede regular, e todas as integrais de transferência T_{ij} em torno dos vizinhos mais próximos são consideradas nulas. Tendo isto, a Eq. 1.2 se torna

$$Ec_i = \epsilon_i c_i + T \sum_{j=1}^{j=k} c_{i+j}, \quad (1.3)$$

onde T é a integral de transferência entre os primeiros vizinhos e a soma se estende em torno dos k vizinhos mais próximos do sítio i , medido com unidade de energia, inclusive para a intensidade de desordem W . No caso de estados estendidos, isto é, sem desordem a solução é encontrada pelo caso limite da Eq. 1.3. Em um sólido cristalino, $W = 0$, as energias ϵ são idênticas (podendo ser escolhidas como $\epsilon = 0$). Assim, em uma cadeia linear a Eq. 1.3 se reduz a

$$Ec_i = T(c_{i-1} + c_{i+1}). \quad (1.4)$$

Existem funções exponenciais complexas que obedecem equações semelhantes a Eq. 1.4. Daí, fazemos as constantes c_i ter a forma $c_m = c_0 e^{imk}$, feito isso percebemos que a Eq. 1.4 só é satisfeita se $E = 2T \cos k$. Esse resultado corresponde a banda cristalina da teoria de Bloch ($-2T < E < +2T$). Portanto, para cadeias unidimensionais ($k = 2$) a amplitude da banda cristalina é $B = 4T$. Geralmente, essa amplitude, para uma rede de dimensão d com número de correlação k é $B = 2kT$. Além disso, o caso limite $W \neq 0$ e $\theta = 0$ sugere a possibilidade de obter orbitais atômicos como solução do problema (estados estendidos), desde que o acoplamento seja removido ($T = 0$).

O problema em que T e W são não nulos tem maior complexidade, e foi estudado por Anderson através da teoria de perturbação. Com o passar do tempo, foram se desenvolvendo uma grande variedade de técnicas analíticas e numéricas capazes de investigar este problema. No presente trabalho, serão utilizados principalmente métodos de função de Green, expansão de Taylor, solução numérica da equação de Hamilton e o método de matriz de transferência. Com esses métodos, a serem apresentados no decorrer do trabalho, podemos calcular quantidades como o comprimento de localização λ e o segundo momento de distribuição de energia $M_2(t)$. Estas quantidades identificam o grau de localização dos autoestados do Hamiltoniano H .

1.2 Teoria de Escala

A teoria de escala, foi originalmente utilizada por Abrahams, Anderson, Licciardello, e Ramakrishnan [4] para encontrar a dependência da transição de Anderson com a dimensão. A hipótese essencial da teoria de escala é que próximo da região de transição

entre estados localizados e estendidos em temperatura $\theta = 0$, existe apenas uma variável de escala relevante, a condutância generalizada g , que é suficiente para descrever o comportamento crítico da condutividade DC , σ_{DC} (no regime metálico) e do comprimento de localização, λ (no regime isolante). Fisicamente, isso é equivalente à afirmação de que próximo da transição não faz qualquer sentido à distinção entre os vários mecanismos de localização. A teoria de escala foi aplicada na reformulação do modelo de Anderson feita por Thouless [34] ver a Tabela 1.1.

Na Tab. 1.1, em vez de um simples sítio atômico, a unidade básica é agora um hipercubo de volume L^d que contém muitos sítios, (característica das teorias de transição de fase, dada por uma expressão em termos da dimensão arbitrária d). O sólido é considerado como sendo construído de tais hipercubos (blocos), acoplados um ao outro. W e B (ou T), as duas energias características que medem, respectivamente, a energia de desordem com um bloco e o acoplamento eletrônico entre os blocos adjacentes.

Tabela 1.1: Correspondência entre a teoria de escala tradicional e a reformulada

Modelo de Anderson	Reformulação da Teoria de Escala, por Thouless
Um sítio atômico individual i .	Um sólido formado por caixas contendo muitos sítios, com dimensão d e lado L , daí um volume L^d .
A extensão W da distribuição E_i das energias dos sítios.	O espaçamento médio $\Delta E \approx W/N$ dos N níveis de energia com o volume L^d .
A energia de transferência ou integral de <i>hopping</i> T_{ij} que ocopla o sítios vizinhos.	O passo de energia δE causado por uma mudança nas condições de contorno na interface do cubo (\hbar/t_d , onde t_d é o tempo necessário para um pacote de onda eletrônico difundir até os contornos de uma caixa de lado L).
$(W/B) \approx (W/2kT_{01})$, é a medida adimensional da intensidade de desordem.	$(\Delta E/\delta E) \approx (1/g)$, onde $g(L) = (\hbar/e^2)\sigma L^{d-2}$ é a condutância adimensional da dependência de escala que serve como intensidade de desordem.

Em lugar de W na Fig. 1.1 consideramos ΔE , tido como o espaçamento médio de energia entre os níveis com um bloco. A conexão qualitativa entre ΔE e W é simplesmente dada em termos da densidade de estados $n(E)$:

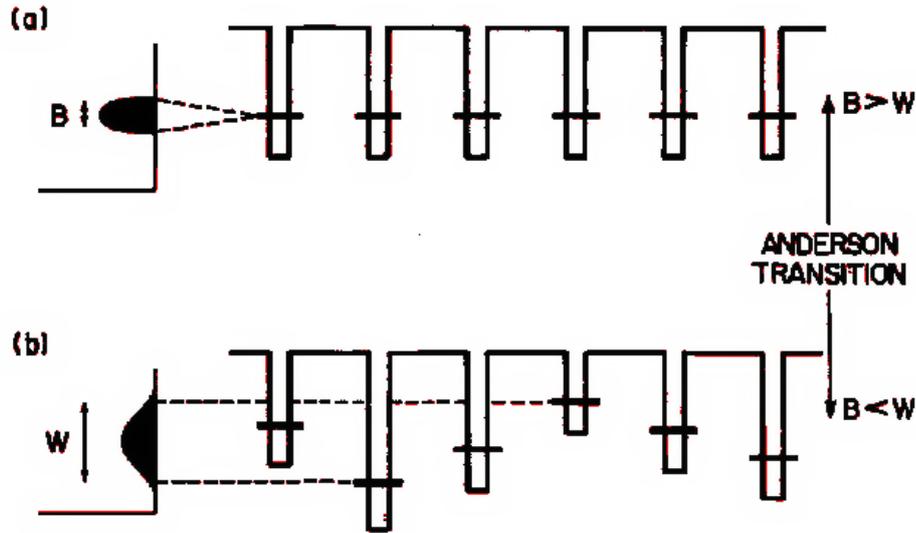
$$n(E) = \frac{1}{L^d \Delta E}. \quad (1.5)$$

Ao invés do acoplamento sítio para sítio T_{ij} , nós agora temos uma energia δE , que é uma medida da sensibilidade de um estado com um bloco para uma mudança nas condições de contorno na interface com um bloco adjacente. Uma argumentação interessante, baseada no princípio de incerteza e nas aproximações identificadas a seguir, conecta δE a

condutividade σ em um limite macroscópico:

$$\delta E \approx \hbar/t_d. \quad (1.6)$$

Onde t_d é o tempo necessário para um pacote de ondas difundir até os contornos de Figura 1.1: Um elétron na aproximação *tight-binding* para a transição de Anderson. Quando a largura W da desordem excede a largura de banda B sobreposta, ocorre uma transição desordem-induzida no regime localizado.



Fonte: Zallen, 1998.

um hipercubo de lado L . Considerando que o elétron realize um movimento Browniano dentro do hipercubo, identificamos que t_d é dado por,

$$t_d \approx \frac{L^2}{D}, \quad (1.7)$$

onde D é a constante de difusão. Usando a relação de Einstein entre a condutividade e as propriedades de difusão:

$$\sigma \approx e^2 D n(E). \quad (1.8)$$

Agora combinamos as Eqs. 1.6 e 1.7, temos

$$\delta E \approx \frac{\hbar}{L^2/D}, \quad (1.9)$$

isolando D na Eq. 1.8, e substituindo em 1.9, obtemos

$$\delta E \approx \frac{\sigma \hbar}{e^2 L^2 n(E)}. \quad (1.10)$$

Como apresentado na Tab. 1.1, a razão $\Delta E/\delta E$ é agora adotada como a medida da intensidade da desordem, a analogia da razão W/B no modelo de Anderson tradicional.

Estados estendidos são sensíveis a mudanças nas condições de contorno ($\delta E > \Delta E$), enquanto que estados localizados não podem perceber os contornos e são bastante insensíveis ($\delta E < \Delta E$). A condição de localização $\delta E < \Delta E$ pode ser interpretada no sentido de que a falta de regularidade de energia entre os níveis de blocos adjacentes excede a extensão em que a interface pode deslocá-los, fazendo com que o alinhamento dos níveis (e o transporte de elétrons) seja impossível.

O parâmetro de desordem, denotado como g^{-1} , é a agora uma quantidade de dependência de escala, definida por

$$\frac{1}{g(L)} \equiv \frac{\Delta E}{\delta E}. \quad (1.11)$$

Inserindo as Eqs. 1.10 e 1.5 em 1.11 podemos observar a dependência de escala do parâmetro g :

$$g(L) = \left(\frac{\hbar}{e^2}\right)\sigma L^{d-2}. \quad (1.12)$$

A Eq. 1.12 se aplica a estados estendidos no limite macroscópico, desde que a Eq. 1.9 seja baseada neste limite. O termo σL^{d-2} é a condutância de um cubo (d -dimensional) de lado L e condutividade σ . Logo a função $g(L)$ pode ser vista como uma condutância generalizada expressa em unidades de e^2/\hbar .

A teoria de escala verifica a dependência de $g(L)$ com o comprimento de escala utilizado. Seja $g_0 = g(L_0) = \delta E(L_0)/\Delta E(L_0)$ a condutância generalizada para um sistema composto de caixas acopladas de volume L_0^d . Essa teoria considera que dado g_0 em uma escala de comprimento L_0 , encontramos g em uma escala maior $L = L_0 b$. Nessa reescala de $L_0 b$, a condutância g é completamente determinada pelo valor antigo g_0 e pelo fator de escala b . O comportamento de escala da função g pode ser obtido por meio da função $\beta(g)$:

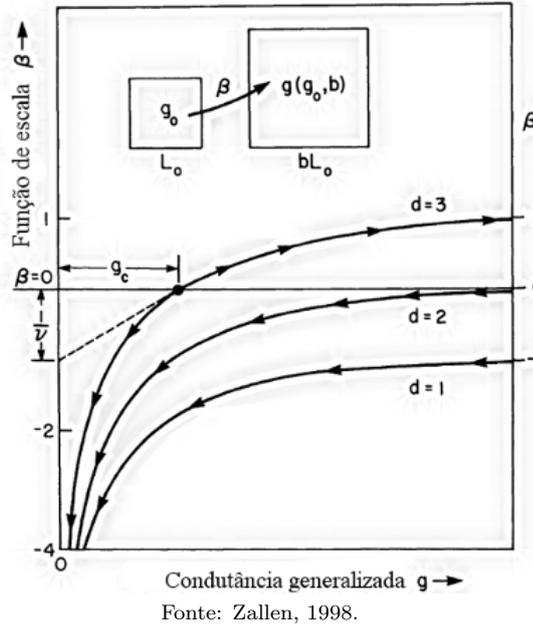
$$\beta(g) = \frac{d \ln g(L)}{d \ln L}. \quad (1.13)$$

Para $\beta > 0$, g cresce com o aumento de L ; já para $\beta < 0$, decresce com a diminuição de L . As características qualitativas de $\beta(g)$ estão representadas na Figura 1.2 para $d = 1, 2$ e 3 . A Figura 1.2 mostra uma curva proposta por Abrahams *et al* [4]. Qualitativamente, as características da função $\beta(g)$ podem ser determinados a partir dos seus limites assintóticos ($g \rightarrow \infty$ e $g \rightarrow 0$). Para g grande podemos usar a Eq. 1.12, mostrando

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \beta(g) = d - 2. \quad (1.14)$$

Portanto,

Figura 1.2: Comportamento qualitativo da $\beta(g)$ para sistema de $d = 1, 2, 3$ dimensões na teoria de escala apresentada por Abrahams Anderson, Licciardelo e Ramakrishnan.



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

Como verificamos na Figura 1.2. Em g pequeno, isto é, no limite de baixo acoplamento e forte desordem, o teorema de Anderson prevê que os estados eletrônicos são localizados e decaem exponencialmente com a distância. Nos contornos de uma caixa de dimensão linear L , a amplitude da função de onda de um elétron localizado dentro da caixa é da ordem de $e^{-\gamma L}$ onde γ é o expoente de Lyapunov (inverso do comprimento de localização λ). O acoplamento entre as caixas também tem decaimento exponencial ($e^{-\gamma L}$), de forma que $g(L) \propto e^{-\gamma L}$. Através da Eq. 1.13, temos,

$$\lim_{g \rightarrow 0} \beta(g) = \ln g. \quad (1.15)$$

Portanto, $\beta(g)$ se aproxima de $-\infty$ quando g tende a zero, sem depender da dimensão. O fato de que $\beta(g)$ varia monotonicamente entre os limites $g \rightarrow \infty$ e $g \rightarrow 0$ [35], é uma indicativa do comportamento qualitativo da Fig. 1.2. As setas do diagrama de fluxo sobre as curvas representam a direção em que g sofre variações quando L cresce. Para $d = 1$ e $d = 2$ as setas indicam que g sempre diminui quando L cresce. Em $d = 3$ temos dois comportamentos: Para valores menores que um certo g_c , ($\beta(g) < 0$) as setas do diagrama de fluxo indicam que a condutância generalizada g diminui quando L cresce; acima de g_c ($\beta(g) > 0$) o comportamento é contrário, g cresce quando L cresce. O ponto no diagrama de fluxo ($g_c, \beta(g_c) = 0$) é chamado ponto fixo instável. Esta diagramação

indica a dependência da transição de Anderson com a dimensão: Em $1d$ e $2d$ não existe transição metal-isolante, com a condutividade indo sempre a zero quando $L \rightarrow \infty$; em $3d$ existe uma transição metal-isolante. O comportamento crítico próximo desta transição em $3d$ também foi obtido através da teoria de escala [3]. Em analogia com teorias sobre transição de fase de segunda ordem, a condutividade σ_{DC} e o comprimento de localização λ , próximos da energia crítica de transição (*mobility edge*) tem um comportamento tipo lei de potência:

$$\sigma_{DC} \propto (E - E_C)^s, \quad (1.16)$$

$$\lambda \propto (E - E_C)^{-v}. \quad (1.17)$$

Os valores dos expoentes $s = v = 1$ foram obtidos numericamente usando uma expansão em $d + \epsilon$ por Wegner [36] e também por técnicas de expansão diagramática realizadas por Vollhard e Wölfle [3]. Há alguns anos, considerações sistemáticas de variáveis irrelevantes e correlações não-lineares na teoria de escala tem refinado os resultados da teoria de escala, obtendo o expoente crítico com maior precisão $v \approx 1.57$ [37, 38, 39, 40].

Podemos encontrar muitos experimentos na literatura onde transições metal-isolante com desordem vêm sendo observadas [3]. Existem trabalhos notáveis [3, 7, 8, 41, 42], que realizaram experimentos em silício dopado com fósforo ou bário. Nesses experimentos a desordem é proveniente das posições aleatórias dos átomos dopantes. A intensidade ou distribuição de probabilidade da desordem pode ser modificada variando a concentração de dopantes N_p . Em ambos os casos a distância entre os dopantes muda, modificando assim a intensidade de desordem W . Em comparação a resultados de escala para o expoente da condutividade (Eq. 1.16) com os resultados experimentais [1] para o sistema $Si:P$, foi encontrado que enquanto o fit $s = 1$ é melhor que o valor de percolação $s = 1.65$ para o valor observado de $s = 0.5$, ele ainda corresponde a uma transição isolante-metal que é muito menos acentuada que a observada no experimento. Durante muitos anos foi sugerido que a existência de dois tipos de materiais: semicondutores não compensados (com $v = 0.5$) e semicondutores compensados, e ainda materiais amorfos com $v = 1$ [3, 8]. Recentemente, foi observado um expoente $v = 1$ para o silício dopado com fósforo não compensado ($Si:P$) [41] e $v = 1.6$ para silício dopado com Bário ($Si:B$) [42]. Assim, não só a classificação do tipo do material como também o valor do expoente são questões ainda não resolvidas. Geralmente, a diferença no expoente vêm sendo atribuída à presença de outros efeitos no experimento, como por exemplo, a interação Coulombiana entre os elétrons [41]. Nos materiais sólidos reais os elétrons correlacionam seus movimentos uns com os outros de forma a suprimir configurações muito energéticas; correlações essas, que são responsáveis pela transição de Mott [5, 8]. Propriedades de localização como um efeito de interferência vêm sendo observadas em escala macroscópica através de experimentos de propagação de ondas eletromagnéticas ou ondas de água [3]. O padrão na água pode ser

completamente ou parcialmente restrito a uma pequena região da superfície dependendo se os espalhadores são periódicos ou aleatórios. Frizemos também o impacto que as idéias e conceitos descritos acima causaram no desenvolvimento da teoria quântica de transporte em nanoestruturas [43].

1.3 Desordem Correlacionada

As propriedades de localização de sistemas desordenados foram primeiro examinadas por Anderson [2], mostrando que existem estados localizados devido a presença de desordem. Esse resultado foi generalizado por Mott e Twose [44] para uma dimensão, indicando que todos estados são localizados para alguma quantidade de desordem. Esse estudo foi estendido para altas dimensões por Abrahams *et al* [4] usando propriedades de escala. As conclusões dos estudos mais atuais em localização para sistemas desordenados bidimensionais e a possibilidade de ocorrência de uma transição metal-isolante em três dimensões, tem sido reportado por vários trabalhos [3, 30, 45]. Dentre estes estudos, a abordagem analítica sobre localização, identificou estados eletrônicos localizados em cadeias unidimensionais, K. Ishii [45], que é uma consequência natural do teorema de Fustenberg sobre produtos de variáveis não correlacionadas; e ainda por estudos numéricos [30], mostrando que todos estados são também localizados em duas dimensões para alguma quantidade de desordem [3].

Contudo, quando correlações locais são adicionadas a um sistema desordenado, nem todos os estados são localizados; estados suficientemente estendidos existem para alterar as propriedades de condução [11]. Na década de 90, Sil *et al* [46] encontrou que todos estados são estendidos para um modelo particular com desordem fora da diagonal (quando a desordem é introduzida fora da diagonal principal do operador Hamiltoniano). Um modelo contínuo com impurezas infinitesimais exibindo delocalização para correlações tipo dímero foi estudado por Sanchez *et al* [47]. Evangelou e Economou [48] mostraram que as propriedades de localização são essencialmente as mesmas se, ao invés de se considerar uma impureza tipo dímero, considerarmos uma grande quantidade de desordem, que são examinadas como o resultado principal sendo, que o número de energias em que os estados estendidos existem está relacionado ao tamanho da quantidade de desordem.

As propriedades físicas de grandes sistemas, são intermediárias entre as propriedades dos sistemas cristalinos e dos materiais amorfos. No entanto, um potencial que não pode ser medido, apesar de não conter a periodicidade cristalina, é perfeitamente determinístico. Na década de 80, vários trabalhos abrangendo modelos com aproximação *tight-binding* unidimensionais com potenciais incommensuráveis revelaram a presença de uma transição metal-isolante. Um exemplo, é um potencial da forma $\epsilon_n = V \cos(k|n|^v)$ onde $k = 2\pi\alpha$ e α , é um número real entre 0 e 1, este modelo apresenta várias características intrigantes [49, 50, 51]. Para $0 < v < 1$ existem estados estendidos na faixa $-2+V < E < 2-V$ e estados

localizados nas faixas $2 - V < E < 2 + V$ e $-2 - V < E < -2 + V$ para $V < 2$, enquanto que todos os estados são localizados se $V > 2$. Para $v = 1$ os estados eletrônicos são todos localizados se $V > 2$ e são todos estendidos se $V < 2$. Já em $1 < v < 2$ todos os estados são localizados, mas o coeficiente de Lyapunov se aproxima de zero no centro da banda, o que indica estados eletrônicos estendidos. Por fim, em $v > 2$ o sistema se comporta como um modelo de Anderson unidimensional e todos os estados são exponencialmente localizados.

Nas últimas décadas, modelos com desordem correlacionada têm despertado um grande interesse da comunidade científica. Flores [11], em 1989, mostrou que o Hamiltoniano de Anderson unidimensional com potencial e amplitude de *hopping* aleatórios pode apresentar uma energia crítica E_C , onde a transmissão da função de onda ocorre (delocalização), se forem introduzidas correlações entre as energias dos sítios e os termos de *hopping*. Existindo apenas desordem no *hopping*, esse resultado generaliza a energia crítica de transmissão.

Dunlap *et al* [12] estudaram o Hamiltoniano de Anderson unidimensional para uma liga binária, (isto é, com dois tipos de átomos). Na liga binária, as energias dos sítios no sistema podem ser ϵ_A ou ϵ_B com probabilidade p e $1-p$, respectivamente. Os sítios com energia ϵ_A sempre aparecem em pares. Verificou-se que se $|\epsilon_A - \epsilon_B| \leq 2T$ com T sendo a amplitude de *hopping*, o sistema apresenta uma energia ressonante para a função de onda delocalizada. Bovier [14], em 1992 estudou o modelo com aproximações *tight-binding* unidimensional com distribuição de desordem tipo dímeros, (ou seja, átomos que podem ter apenas dois possíveis valores de energia, aparecendo aos pares na rede). Através da teoria de perturbação foi analisado o comportamento da densidade de estados e do coeficiente de Lyapunov (comprimento de localização), obtendo resultados semelhantes. Vários trabalhos envolvendo correlações tipo dímeros surgiram, sempre tendo os mesmos resultados: Divergência do comprimento de localização em algumas energias críticas [15, 16, 17, 18, 19, 20]. O que diferencia o modelo de Anderson original e os modelos dímeros é que existem correlações de curto alcance nas energias dos sítios. Analiticamente, é possível demonstrar a existência das energias ressonantes em cadeias binárias [18] através do formalismo de matriz de transferência. Para evidenciar estas propriedades analíticas, vamos considerar a aproximação *tight-binding* unidimensional com desordem apenas na diagonal, descrito pelo seguinte Hamiltoniano:

$$H = \sum_l V_l |l\rangle\langle l| + T \sum_l [|l\rangle\langle l+1| + |l\rangle\langle l-1|], \quad (1.18)$$

onde $|l\rangle$ é o orbital atômico centrado no sítio l e V_l é a amplitude do potencial aleatório. Para resolver a equação de Schrödinger $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, expandimos a função de onda em uma base discreta,

$$|\psi\rangle = \sum_l \varphi_l |l\rangle. \quad (1.19)$$

A equação de Schrödinger pode então ser escrito como,

$$T(\varphi_{n+1} + \varphi_{n-1}) = (E - V_n)\varphi_n, \quad (1.20)$$

sendo V_n a amplitude do potencial aleatório.

Escolhendo o termo de *hopping* T igual a unidade, têm-se por meio de técnicas de matriz de transferência, que a Eq. 1.20 toma a forma;

$$\begin{pmatrix} \varphi_{n+1} \\ \varphi_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (E - V_n) & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_n \\ \varphi_{n-1} \end{pmatrix} \quad (1.21)$$

A partir de um refinamento das variáveis em 1.21,

$$\Psi_{n+1} = T_n \Psi_n, \quad (1.22)$$

onde

$$\Psi_{n+1} = \begin{pmatrix} \varphi_{n+1} \\ \varphi_n \end{pmatrix} e T_n = \begin{pmatrix} E - V_n & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.23)$$

Após obter a Eq. 1.22, temos

$$\Psi_{n+1} = \prod_{i=0}^n T_i \Psi_0. \quad (1.24)$$

Portanto, a quantidade relevante para o estudo é o produto dessas matrizes de transferência, onde temos Ψ_0 representando uma condição inicial.

Uma maneira simples de construir uma função de onda estendida, é olhar para o produto das matrizes de transferência. Se um dos produtos resulta em uma matriz identidade, então será fácil calcular os estados. O exemplo simples disso é tomar $E = V_0$, assim, $T_0^2 = -I$, onde I é a matriz identidade. Agora, se considerarmos dois possíveis valores aleatórios, por exemplo: $V_n = \pm V$, as energias tem valor $E = V$ ou $E = -V$, indicando que o produto de duas matrizes de transferência idênticas resulta em $-I$. Consideremos agora o seguinte modelo de impureza em $E = V$ para dois diferentes sítios. O primeiro é um par de sítios com $V_{n+1} = V_n = V$ que podemos chamar sítio A e o segundo é um sítio $V_m = W$, chamado sítio B . O sítio A pode ser avaliado como o produto de duas matrizes de transferência com valores $E - V = 0$ resultando em $-I$. Daí, os sítios A não podem alterar as propriedades de localização desse modelo. Por outro lado, os sítios B podem ser determinados por essas propriedades. Definindo o comprimento de localização λ por

$$\lambda^{-1} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln |\varphi_n|, \quad (1.25)$$

mostra que o inverso do comprimento de localização é principalmente dado pelo logaritmo dos autovalores do produto das matrizes de transferência. Como os sítios A não podem contribuir para o produto; o comprimento de localização pode ser simplesmente dado pelo valor absoluto do inverso do logaritmo dos autovalores, (o produto dos dois autovalores de uma matriz é um, portanto seu logaritmo é igual em valores absolutos).

Em um trabalho mais contemporâneo, Cressoni e Lyra [52] estudaram cadeias com correlações térmicas (cadeias recozidas), onde a correlação entre as energias dos sítios é dada por $\langle \epsilon_i \epsilon_j \rangle \propto e^{-|i-j|/\zeta}$. Foi mostrado que o comprimento de localização cresce com o comprimento de correlação ζ , mas todos os estados permanecem localizados dada a ausência de ressonâncias típicas.

Dentre esses modelos, é comum o fato de que as correlações de curto alcance modificam as propriedades eletrônicas do sistema. Na natureza, vários processos estocásticos resultam em sequências aleatórias com correlações de longo alcance [53]. Estas sequências geralmente, tem uma densidade espectral tipo $S(k) \propto k^{-\alpha}$, onde $S(k)$ é a transformada de Fourier da função de correlação de dois pontos $\langle \epsilon_i \epsilon_j \rangle$ e k é o vetor de onda relacionado com a propagação de ondas na rede. Efeitos da presença de correlações de longo alcance em sistemas desordenados foram recentemente analisados. Em 1994, M. C. Varriable e A. Theumann [54] estudaram um gás de elétrons d -dimensional, $T = 0$; na presença de potenciais aleatórios com correlações espaciais de longo alcance que decaem com a separação $|x|$, concordando com uma lei do tipo $|x|^{-d-\sigma}$, onde σ é um parâmetro que controla a correlação do sistema. Usando um formalismo Lagrangeano e a teoria de perturbação foi demonstrada a existência de transição de Anderson em altas dimensões ($d > 4$).

Russ *et al* [55], em 2000 publicaram um estudo sobre um modelo de Anderson unidimensional com correlações de longo alcance na desordem. Neste modelo, a função de correlação é dada por $C(l) \propto \langle \epsilon_i \epsilon_{j+l} \rangle \propto e^{-\gamma}$ onde γ é uma constante positiva. Eles mostraram que todos os estados são localizados para γ positivo mas o comprimento de localização diverge quando γ tende a zero.

1.4 Mapeamento de uma Cadeia Harmônica

Nesta seção são apresentados conceitos referentes ao mapeamento de uma cadeia harmônica desordenada. Como suporte para estudo da caracterização do aspecto localizado ou estendido de um sistema, são descritos também nesta seção conceitos de medidas de grau de localização.

O mapeamento dos modos vibracionais de uma cadeia harmônica desordenada, possui um análogo no problema eletrônico, como indicado por Dean [56]. A importância da pesquisa, tanto analítica, quanto computacional, de modos vibracionais em cadeias com

desordem e/ou anarmonicidade possuem origem na possibilidade de se estender aos modos inelásticos que aparecem em vidros ou outras substâncias com arranjos atômicos aleatórios [57]. O estudo teórico dos modos vibracionais em cadeias harmônicas desordenadas foi produto de estudo durante várias décadas [48, 52, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 67, 68, 69].

No trabalho de *de Moura* [35], foi tratado o problema de uma cadeia com N átomos que interagem através de uma força harmônica, isto é, uma força proporcional a distância entre os átomos $f = \beta_{ij}(u_j - u_i)$, onde u_j e u_i indicam as posições de dois átomos consecutivos. A desordem neste modelo pode ser colocada de duas formas: com uma distribuição de massas aleatórias e constantes de força iguais ($\beta_{ij} = 1$). No presente trabalho consideraremos uma distribuição de massas gerada por uma sequência com desordem do tipo Ornsteinn-Uhlenbeck [71], como será apresentado com mais detalhes no Cap. 3. Pode-se também fazer as massas iguais $m_i = m$ e constantes de forças aleatórias [57]. A equação de movimento para as amplitudes de vibração u_n , sendo agora n o índice representante dos sítios, toma a forma

$$m_n \frac{d^2 u_n}{dt^2} = \beta_n (u_{n+1} - u_n) - \beta_{n-1} (u_n - u_{n-1}). \quad (1.26)$$

Considerando dependência temporal com uma única frequência [$u_n = u_0 \exp(-i\omega t)$], podemos construir uma equação estacionária para os modos:

$$(\beta_{n-1} + \beta_n - \omega^2 m_n) u_n = \beta_{n-1} u_{n-1} + \beta_n u_{n+1}. \quad (1.27)$$

Podemos mapear essa equação na equação de Schrödinger para um problema eletrônico semelhante a Eq. 1.20. Este mapeamento foi apresentado por Dean [56] e pode ser facilmente reproduzido, definindo-se uma nova variável $\varphi_n = m_n^{1/2} u_n$. Levando essa consideração em 1.27, teremos

$$(\beta_{n-1} + \beta_n - \omega^2 m_n) (\varphi_n m_n^{1/2}) = \beta_{n-1} (\varphi_{n-1} m_{n-1}^{1/2}) + \beta_n (\varphi_{n+1} m_{n+1}^{1/2}). \quad (1.28)$$

Agora, multiplicando a Eq. 1.28 por $1/m_n^{1/2}$ e definindo $t_{n-1,n} = -\beta_{n-1}/\sqrt{m_{n-1}m_n}$, $t_{n,n+1} = -\beta_n/\sqrt{m_n m_{n+1}}$, $V_n = (\beta_{n-1} + \beta_n)/m_n$ e $E = \omega^2$ temos um resultado análogo a Eq. 1.20, salvo que em 1.20 os *hopping* entre os sítios são todos iguais a T . O resultado é

$$t_{n,n+1} \varphi_{n+1} + t_{n-1,n} \varphi_{n-1} = (E - V_n). \quad (1.29)$$

Utilizando o formalismo de matriz de transferência, Matsuda e Ishii mostraram que modos vibracionais de uma cadeia harmônica com frequência não nula ($\omega > 0$) são localizados [60] e próximo de $\omega = 0$ existem \sqrt{N} estados estendidos, visto que o comprimento de localização λ dos modos diverge seguindo $\lambda \propto 1/\omega^2$. Mostraram ainda que a condutivi-

dade térmica nesta cadeia é fortemente dependente destes modos vibracionais estendidos. O resultado de correlações em cadeias harmônicas têm sido produto de grande interesse no meio acadêmico. Kundu e Datta, em 1994 mostraram que correlações na distribuição de massas produz um novo conjunto de modos vibracionais estendidos [61]. Nesse modelo as massas podem ter valores m_0 e m_1 com probabilidades p e $1 - p$; e a correlação é introduzida através do tipo de distribuição das massas (dímeros). Eles mostraram, que no caso de dímeros aparecem \sqrt{N} modos não espalhados em torno da frequência $\omega_c = m_1$ e no caso de trímeros aparecem $N^{3/4}$ novos estados. Já em $m_1 = 0$, identificou-se que a cadeia harmônica apresenta $N^{5/6}$ modos estendidos em torno de $\omega_c = 0$.

Modos não espalhados foram também encontrados em cadeias harmônicas com correlações tipo dímeros na distribuição de constantes de força [63]. No trabalho de Lyra e Cressoni [52], foram analisadas outras formas de correlações em cadeias harmônicas, como o efeito de correlações induzidas por recozimento térmico (*thermal annealing*). Neste mesmo trabalho, foi mostrado que o comprimento de localização dos modos vibracionais apresenta um decaimento exponencial nas distâncias superiores ao comprimento de correlação térmico (correlação dependente das propriedades térmicas do sistema). Sob a perspectiva analítica, Datta e Kundu [62] demonstraram que o transporte de energias em cadeias harmônicas com desordem correlacionada e não correlacionada está diretamente vinculado aos modos vibraconais não espalhados e com as condições iniciais do sistema.

Com respeito ao transporte de energia, é feito um estudo através do segundo momento $M_2(t)$ da distribuição espacial de energia, onde inicialmente o sistema é perturbado através de um impulso (P) sobre uma dada massa na cadeia ($P_{n_0} = P^0 \delta_{n,n_0}$), ou através de um deslocamento (Q) em uma massa da cadeia ($Q_{n_0} = Q^0 \delta_{n,n_0}$). Como a propagação da energia na cadeia é governada pelas equações de Hamilton, integramos essas equações para obter a energia $h_n(t)$ em cada massa ou sítio, calculando assim o segundo momento da distribuição [35], dado por,

$$M_2(t) = \sum_{n=1}^N (n - n_0) h_n(t). \quad (1.30)$$

Kundu e Datta mostraram que para uma cadeia com desordem não correlacionada, $M_2(t) \sim t^{3/2}$ se a condição inicial é dada por um impulso e $M_2(t) \sim t^{1/2}$ se a condição inicial é dada por deslocamento, caracterizando comportamento superdifusivo e subdifusivo da energia propagada, respectivamente. O regime de propagação subdifusivo é inerente a um lento transporte de energia no sistema de interesse (com o comportamento de escala em relação tempo $M_2(t) \sim t^{1/2}$); seguindo as propriedades de transporte de enrgia, identificamos o regime difusivo ($M_2(t) \sim t^1$) da propagação de energia, em que o pulso de vibração se propaga de maneira mais rápida que no regime subdifusivo; outro comportamento bastante observado em cadeias harmônicas, é o regime superdifusivo ($M_2(t) \sim t^{3/2}$), característico de uma rápida propagação da energia na cadeia [62]. Quando a distribuição

de massas apresenta correlações, significa que o transporte de energia sofre mudanças, podendo atingir o expoente máximo $M_2(t) \sim t^{11/6}$ para o caso de correlações tipo trímeros com $m_1 = 0$ e excitação inicial dada por um impulso; este expoente máximo está relacionado com os $N^{5/6}$ modos estendidos em torno de $\omega_c = 0$, como é verificado em [62].

No trabalho indicado por [62], todos os resultados analíticos obtidos para $M_2(t)$ foram confirmados por simulações numéricas da evolução da energia na cadeia. Vincula-se o segundo momento com a constante de difusão na cadeia através da relação $D(t) \propto dM_2(t)/dt$ [61, 72]. No entanto, a condutividade térmica está relacionada com a constante de difusão e assim com o segundo momento da distribuição de energia $M_2(t)$ [72]. Em um trabalho contemporâneo da última década, a condutividade térmica em cadeias harmônicas e anarmônicas com massas aleatórias não correlacionadas [64, 65] e também de cadeias com massas alternadas [66, 69] foram numericamente investigadas. A condutividade tem dependência com o tamanho da cadeia e o valor da condutividade térmica no limite termodinâmico, discussões mais detalhadas são encontradas em [68].

1.4.1 Medidas do Grau de Localização

A existência de uma transição metal-isolante em um dado sistema é indicada pelo aspecto estendido ou localizado dos autoestados do Hamiltoniano. Qualitativamente, é importante descrever o caráter estendido ou localizado de um certo estado por um único número. De forma simples, fazemos esta descrição quando é resolvida a equação de Schrödinger $H|\Psi_i\rangle = E_i|\Psi_i\rangle$ e investigados os autoestados $|\Psi_i\rangle$. Se existir desordem no Hamiltoniano, têm-se dificuldades num tratamento analítico da equação de Schrödinger. Por isso utilizamos a expansão dos autoestados $|\Psi_i\rangle$ nos orbitais atômicos ($|\Psi_i\rangle = \sum_{j=1}^N c_j^{(i)}|j\rangle$) na equação de Schrödinger, onde escrevemos o operador Hamiltoniano H na forma matricial, e assim, fazendo-o agir sobre os autoestados $|\Psi_i\rangle$. Daí, fazemos a diagonalização numérica de H na base indicada acima, e então, calculamos um número que possa medir o grau de localização dos estados $|\Psi_i\rangle$. Este número se chama razão de participação ξ [3]:

$$\xi = \frac{\sum_j |c_j|^2}{\sum_j |c_j|^4}. \quad (1.31)$$

Na compreensão de como a participação está vinculada com o grau de localização, é necessário analisar o caso de uma cadeia pura onde todos os autoestados são estendidos com c_j constante. Tendo que o numerador de 1.31 seja igual a 1 para manter a normalização dos autoestados do Hamiltoniano e $\sum_j |c_j|^2 = 1$, tem-se como resultado, $N|c_j|^2 = 1$ e $|c_j| = 1/\sqrt{N}$. Introduzindo esse resultado em 1.31, temos:

$$\xi = \frac{1}{\sum_j |c_j|^4} = \frac{1}{\sum_j \frac{1}{N^2}} = N. \quad (1.32)$$

Portanto, ξ representa o número de sítios em que as amplitudes c_j da função de onda

são diferentes de zero. Em funções de onda localizadas, referente a uma certa região do espaço, ξ é finito no limite termodinâmico [3].

Além da razão de participação, é comum também medir a localização, através do comprimento de localização λ , que é definido através do comprimento assintótico da função de onda [3]. Em longas distâncias, a função de onda apresenta um decaimento exponencial do tipo

$$\Psi_i(r) = \psi(r)e^{(-r/\lambda)}, \quad (1.33)$$

em que r é a distância ao centro de localização. Para estados estendidos, $\lambda \rightarrow \infty$. Existem vários métodos para calcular λ , entre os quais destacamos o de grupo de renormalização, funções de Green e matriz de transferência, dentre estes utilizaremos o método de funções de Green e matriz de transferência neste trabalho.

É interessante frizar que o comportamento dinâmico de um sistema desordenado pode indicar a existência de estados estendidos no sistema. Considerando o modelo de Anderson $1d$ como exemplo, supomos que em $t = 0$, um elétron é colocado no sítio m de maneira que $|c_m(t = 0)|^2 = 1$, $c_i(t = 0) = 0$ para $i \neq m$. Assumindo que seja possível resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo para este problema,

$$i\hbar \frac{dc_j(t)}{dt} = \epsilon_j c_j(t) + t_{j-1,j} c_{j-1}(t) + t_{j,j+1} c_{j+1}(t) \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad (1.34)$$

examinemos $c_m(t)$ para $t \rightarrow \infty$ [35]. Se a probabilidade de encontrar o elétron no sítio m após o passar de um longo período de tempo for nula, ou seja, $c_m(t \rightarrow \infty) = 0$, no limite termodinâmico, o elétron é itinerante através da cadeia (estado estendido). Se $c_m(t \rightarrow \infty) \neq 0$, então o elétron não está difundindo por toda a rede e pode ser encontrado apenas nas vizinhanças de m (estado localizado). A quantidade $|c_m(t)|^2$ é chamada probabilidade de retorno ao ponto de partida. Uma maneira de encontrar $|c_m(t)|^2$ é executar a integração numérica do conjunto de equações de movimento, usando o método de Runge-Kutta [73, 74, 75].

2

DINÂMICA DE UM ELÉTRON EM SISTEMAS COM DESORDEM CORRELACIONADA DE CURTO ALCANCE

2.1 Introdução

A evolução temporal da função de onda de um elétron em um dado sistema desordenado pode mostrar diversos detalhes sobre a natureza isolante ou metálica deste sistema [3, 4, 76, 77]. Dentro da teoria de localização de Anderson em dimensão baixa ($d \leq 2$) [4], é bem conhecido que a largura do pacote de onda satura em uma região finita em torno da posição inicial para tempos longos. No entanto, durante as duas últimas décadas, estudos realizados sobre sistemas de baixa dimensão contendo correlação de curto ou longo alcance na distribuição de desordem, indicam existir estados estendidos ou uma transição do regime localizado para delocalizado [11, 12, 13, 21, 22, 23, 24, 26, 27, 63, 78, 79, 80, 81, 82, 83, 84, 85, 86, 87, 88, 89]. Durante o final da década de oitenta, baseando-se no contexto teórico, Flores [11] e Dunlap [12] constataram a ausência de localização de Anderson na presença de desordem com correlações de curto alcance; a confirmação experimental deste fato surgiu com resultados obtidos por F. Domínguez-Adame e colaboradores [81] sobre super-redes semicondutoras. O problema da localização, já vêm sendo estudado em várias décadas, porém o estudo da delocalização em sistemas unidimensionais ($1d$) com desordem correlacionada despertou maior interesse ao fim da década de 90. Diversos autores [21, 23, 24, 80, 82] mostraram que sistemas com correlações de longo alcance na distribuição de desordem podem exibir uma transição metal-isolante (*TMI*). Do ponto de vista experimental, foi considerado um análogo clássico deste tipo de sistema: um guia de micro-ondas com espalhadores aleatórios [27]. Neste trabalho, os autores mostraram que correlações de longo alcance na distribuição dos espalhadores podem induzir ao aparecimento de novas bandas de transmissão [27].

Iremos investigar ao decorrer deste capítulo, os aspectos inerentes a localização de um elétron em sistemas unidimensionais com desordem correlacionada. Os resultados a serem mostrados, terão como base, principalmente dois formalismos numéricos: a solução numérica da equação de Schrödinger dependente do tempo para o Hamiltoniano completo e uma técnica de renormalização baseada na equação de Dyson com respeito aos elemen-

tos das funções de Green. O método baseado na equação de Schrödinger dependente do tempo consiste em simular a propagação da função de onda em longos intervalos de tempo, e então obter o maior comprimento de localização dentro do pacote de ondas. Já com o método referente as funções de Green, vamos calcular o comprimento de localização no centro da banda. Nosso modelo para este tipo de sistema, considera uma cadeia com correlação exponencial de curto alcance na distribuição de desordem. Os resultados obtidos com os formalismos indicados, apresentam estimativas precisas da dependência do comprimento de localização com a intensidade de desordem. Os dois métodos citados acima produzem dados para o comprimento de localização, que estão de acordo com nossa precisão numérica. Estes dados indicam uma divergência de grandes comprimento de localização com o comprimento de correlação. Já no regime de baixa desordem e pequeno comprimento de correlação, observamos que o comprimento de localização tem um aumento cúbico com relação ao comprimento de correlação. Quando aumentamos a intensidade de desordem no sistema, percebemos que a relação de escala entre o comprimento de localização e a função de correlação tem uma mudança drástica. Se continuarmos a aumentar a intensidade de desordem, chegando no limite de alta desordem, notamos que o comprimento de localização tende a permanecer constante com o aumento da correlação. Dadas estas observações, notamos que o comprimento de localização é duplamente ligado com a função de correlação e com a intensidade da desordem, ambas as quantidades influenciam no comportamento. Utilizando algumas propriedades locais sobre desordem correlacionada, poderemos mostrar com detalhes a relação do comprimento de localização com a quantidade de desordem e o grau de correlação.

2.2 Correlações Exponenciais no Modelo de Anderson

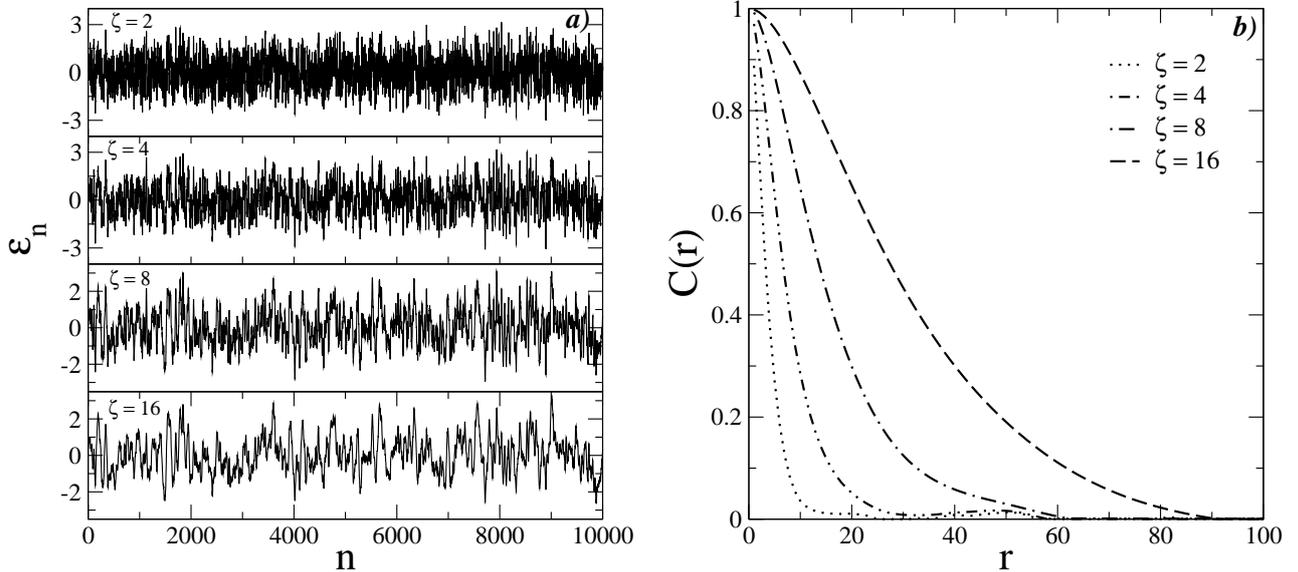
Para estudar as propriedades de localização inerentes a correlações exponenciais, consideraremos inicialmente o modelo de Anderson desordenado indicado pelo Hamiltoniano abaixo

$$H = \sum_n \epsilon_n |n\rangle \langle n| + V \sum_{\langle n,m \rangle} [|n\rangle \langle m|], \quad (2.1)$$

onde $|n\rangle$ é um estado localizado no sítio n , proveniente das funções de Wannier e $\sum_{\langle n,m \rangle}$ uma soma em torno dos primeiros vizinhos. Faremos aqui a energia de *hopping* V sendo igual a unidade ($V = 1$). Por fim, ϵ_n representa a distribuições de desordem dos sítios. Neste capítulo vamos considerar o potencial em cada sítio ϵ_n como sendo uma sequência aleatória com correlações que decaem exponencialmente. Para gerar este tipo de desordem vamos considerar inicialmente a sequência definida por:

$$E_n = \sum_{n=1}^N \eta_n \exp(-|n - m|/\zeta) \quad n = 1, \dots, N, \quad (2.2)$$

Figura 2.1: a) Mostra a distribuição de energia decaindo exponencialmente com a correlação. Notamos a suavização da distribuição quando o comprimento de correlação ζ aumenta. Em (b) cálculos numéricos dos dois pontos da função auto correlação definida por $C(r) = [1/(N - r)] * \sum_{n=1}^{N-r} \epsilon_n \epsilon_{n+r}$.



Fonte: Autor, 2012.

onde η_n são números aleatórios independentes uniformemente distribuídos no intervalo $[-0.5; 0.5]$ e ζ é o comprimento de correlação. Vamos levar em conta a soma da Eq. 2.2, de forma que $|n - m| < 50\zeta$. Esse procedimento agiliza os cálculos numéricos e não modifica as propriedades estatísticas da sequência E_n . O potencial por sítio ϵ_n é obtido usando a fórmula:

$$\epsilon_n = \Delta * \left(\frac{[E_n - \langle E_n \rangle]}{\sqrt{\langle E_n^2 \rangle - \langle E_n \rangle^2}} \right) \quad n = 1, \dots, N. \quad (2.3)$$

Portanto, a distribuição de desordem possui valor médio nulo ($\langle \epsilon_n \rangle = 0$) e desvio padrão fixo ($\Delta = \sqrt{\langle \epsilon_n^2 \rangle - \langle \epsilon_n \rangle^2}$). O limite $\zeta \rightarrow 0$ recupera uma distribuição de desordem descorrelacionada. Para caracterizar o grau de desordem, vamos usar o desvio padrão Δ da distribuição de desordem como um parâmetro controlável. Na Fig. 2.1(a) plotamos diversos potenciais gerados pelo formalismo descrito anteriormente. Podemos notar a suavização da distribuição de energia quando o comprimento de correlação é aumentado. Para comparar as mesmas propriedades estatísticas das sequências acima, calculamos a função auto-correlação, definida como:

$$C(r) = \left[\frac{1}{(N - r)} \right] * \sum_{n=1}^{N-r} \epsilon_n \epsilon_{n+r}, \quad (2.4)$$

Podemos ver claramente o decaimento exponencial da função auto-correlação imposta em nosso formalismo numérico para gerar a distribuição de desordem. Identificamos nas

refs. [90, 91], modelos com decaimento exponencial da correlação na distribuição de desordem, que foram investigados usando um formalismo analítico perturbativo. Os autores estudaram os efeitos da sequência de desordem diagonal dicotômica correlacionada no comprimento de localização. O processo dicotômico ou telegráfo aleatório consiste de uma sequência binária definida por $\epsilon_n = \epsilon_0(-1)^{U_n}$. A variável dicotômica inicial ϵ_0 pode assumir valores W ou $-W$ com mesma probabilidade $p = 0.5$. U_n denota o processo de Poisson e n é o n -ésimo sítio da rede [91]. Usando esse formalismo os autores geraram um processo aleatório com média nula ($\langle \epsilon_n \rangle = 0$) e tendo a função de correlação $\langle \epsilon_n \epsilon_{n+r} \rangle \propto \exp(-2r/\zeta)$. Os cálculos do comprimento de localização foram feitos usando um Hamiltoniano perturbativo aproximado no limite de fraca desordem. Foi mostrado analiticamente a ausência do estado estendido neste limite. Em nosso problema, estudamos o movimento de um elétron em uma cadeia com decaimento exponencial das correlações na distribuição de desordem, referente ao formalismo numérico baseado na equação de Schrödinger dependente do tempo e também técnicas de grupo de renormalização.

2.3 Expansão de Taylor na Equação de Schrödinger

A evolução temporal de um pacote de onda, inicialmente localizado, pode ser obtido através da equação de Schrödinger dependente do tempo. Na base de amplitudes de Wannier, a equação de Schrödinger dependente do tempo com ($\hbar = 1$) pode ser escrita como:

$$i \frac{dc_n(t)}{dt} = \epsilon_n c_n(t) + \sum_{\langle m \rangle} c_m(t). \quad (2.5)$$

Consideramos um pacote de onda inicialmente localizado no sítio n_0 , $|\Phi(t=0)\rangle = \sum_n c_n(t=0)|n\rangle$ onde $c_n(t=0) = \delta_{n,n_0}$. O sistema de equações resultante foi resolvido numericamente usando um método de alta ordem baseado na expansão de Taylor do operador evolução temporal $U(\Delta t)$:

$$U(\Delta t) = \exp(-iH\Delta t) = 1 + \sum_{l=1}^{l_0} \frac{(-iH\Delta t)^l}{l!}. \quad (2.6)$$

Onde H é o operador Hamiltoniano. A função de onda no tempo Δt é dada por $|\Phi(\Delta t)\rangle = U(\Delta t)|\Phi(t=0)\rangle$. O método pode ser usado recursivamente para obter a função de onda no instante t . Para obter $H^l|\Phi(t=0)\rangle$, podemos usar uma fórmula recursiva mostrada a seguir. Definindo $H^l|\Phi(t=0)\rangle = \sum_n c_n^l|n\rangle$. Utilizando a Eq. 2.1 podemos calcular $H^1|\Phi(t=0)\rangle$, e obter c_n^1 como,

$$c_n^1 = \epsilon_n c_n(t=0) + \sum_{\langle m \rangle} c_m(t=0). \quad (2.7)$$

onde $\sum_{\langle m \rangle}$ representa uma soma em torno dos pares de vizinhos mais próximos. Portanto, usando o fato que $H^l |\Phi(t=0)\rangle = H \sum_n c_n^{l-1} |n\rangle$, c_n^l pode ser obtida recursivamente por,

$$c_n^l = \epsilon_n c_n^{l-1} + \sum_{\langle m \rangle} c_m^{l-1}. \quad (2.8)$$

Os resultados seguintes foram obtidos usando $\Delta t = 0.5$ e a soma foi truncada em $l_0 = 15$. Este método foi suficiente para manter a conservação na norma da função de onda ao longo de todo o intervalo de tempo considerado ($t_{max} \gg 10^5$). Este formalismo é mais rápido do que métodos de Runge-Kutta com alta ordem e é fácil de ser implementado numericamente. Estamos particularmente interessados em calcular o desvio médio quadrático do pacote de onda $\sigma(t)$ definido por [84],

$$\sigma(t) = \sqrt{\sum_n [(n - n_0)^2] |c_n(t)|^2}. \quad (2.9)$$

Note que $\sigma(t)$ varia de 0, para uma função de onda confinada em um único sítio, até um valor proporcional ao número de sítios. Estamos interessados no comportamento de longos tempos do desvio médio quadrático $\Sigma = \lim_{t \rightarrow \infty} \sigma(t)$. Em nossos cálculos devemos usar $t_{max} > 10^5$, para observar além do aspecto dinâmico do desvio médio quadrático $\sigma(t)$.

2.4 Operador de Green no Método de Grupo de Renormalização

A investigação dos autoestados de um Hamiltoniano pode ser realizada, através do estudo do método de renormalização. Este método é baseado nas equações de movimento para o operador de Green associado ao Hamiltoniano. A compreensão do operador de Green será mais efetiva quando estudarmos os autoestados de um certo Hamiltoniano de referência H_0 , tendo

$$H_0 |\varphi_n\rangle = E_0 |\varphi_n\rangle. \quad (2.10)$$

Considerando agora um outro Hamiltoniano H definido por

$$H = H_0 + T, \quad (2.11)$$

visto que, o operador H é o Hamiltoniano do sistema de referência na presença de uma interação T . Daí, a equação de autovalores para o Hamiltoniano H , é dado por

$$H |\psi_n\rangle = E |\psi_n\rangle. \quad (2.12)$$

Sabendo que os autoestados de H tenham relação com os autoestados do modelo de referência pela relação

$$|\psi_n\rangle = |\varphi_n\rangle + TG|\varphi_n\rangle, \quad (2.13)$$

onde G é o operador de Green associado ao Hamiltoniano

$$G(E) = \frac{I}{E - H}. \quad (2.14)$$

Contudo, os autoestados de um Hamiltoniano H , sendo $H = H_0 + T$ e os autoestados de H_0 são conhecidos, podem ser obtidos usando os operadores de Green, I é o operador identidade. O método de renormalização será deduzido com a exposição das equações de movimento para os elementos de matriz do operador de Green. Um conhecimento mais profundo sobre o assunto pode ser obtido por [92, 93]. A equação 2.14 pode ser reescrita na forma

$$EG(E) = I + HG(E). \quad (2.15)$$

Das explanações feitas acima, calcularemos o conjunto de equações de movimento para os elementos de matriz do operador de Green $G(E)$. Assim, o elemento de matriz $G_{m,n} = \langle m|G(E)|n\rangle$, é escrito como

$$EG_{m,n} = \delta_{m,n} + \langle m|HG(E)|n\rangle. \quad (2.16)$$

Temos utilizado a notação $B_{m,n} = \langle m|B|n\rangle$ para condensar as equações, sendo B um operador qualquer. Aplicamos então, a relação de completeza $\sum_l |l\rangle\langle l| = I$ no produto $HG(E)$, obtendo

$$EG_{m,n} = \delta_{m,n} + \sum_l H_{m,l}G_{l,n}, \quad (2.17)$$

novamente fizemos uso da notação $\langle m|B|n\rangle = B_{m,n}$. Para melhor estruturar nossos cálculos, escreveremos as equações de movimento para os elementos $m,0$ do operador de Green sem nos preocuparmos com perda de generalidade,

$$EG_{m,0} = \delta_{m,0} + \sum_l H_{m,l}G_{l,0}. \quad (2.18)$$

Para prosseguir, calcularemos os elementos de matriz $H_{m,l}$ do operador H sobre a base das posições dos estados $|m\rangle$ e $|l\rangle$. O Hamiltoniano tem a característica de ter termos diferentes de zero apenas na diagonal principal e nas secundárias; daí, l se restringe aos valores $l = m - 1$, $l = m$ e $l = m + 1$. Do Hamiltoniano H dado na Eq. 2.1, temos

$$\langle m|H|l\rangle = \epsilon_m\delta_{m,l} + V\delta_{m-1,l} + V^{(0)}\delta_{m+1,l}. \quad (2.19)$$

Logo, os elementos de matriz de H são identificados por: $l = m$,

$$\langle m|H|m\rangle = \epsilon_m = H_{m,m}, \quad (2.20)$$

para $l = m + 1$, temos

$$\langle m|H|m+1\rangle = V = H_{m,m+1}, \quad (2.21)$$

e finalmente $l = m - 1$,

$$\langle m|H|m-1\rangle = V = H_{m,m-1}. \quad (2.22)$$

Tendo os elementos $H_{m,l}$, podemos reescrever a equação de movimento para os elementos de matriz, dada por

$$EG_{m,0} = \delta_{m,0} + H_{m,m}G_{m,0} + H_{m,m+1}G_{m+1,0} + H_{m,m-1}G_{m-1,0}, \quad (2.23)$$

ou ainda,

$$(E - H_{m,m})G_{m,0} = \delta_{m,0} + H_{m,m-1}G_{m-1,0} + H_{m,m+1}G_{m+1,0}. \quad (2.24)$$

A equação acima pode ser expandida em um conjunto infinito de equações acopladas. Portanto, fazendo $m = 0, 1, 2, \dots$ na Eq. 2.24, encontramos;

$$m = 0, \quad (E - \epsilon_0)G_{0,0} = 1 + H_{0,-1}G_{-1,0} + H_{0,1}G_{1,0}, \quad (2.25)$$

$$m = 1, \quad (E - \epsilon_1)G_{1,0} = H_{1,0}G_{0,0} + H_{1,2}G_{2,0}, \quad (2.26)$$

$$m = 2, \quad (E - \epsilon_2)G_{2,0} = H_{2,1}G_{1,0} + H_{2,3}G_{3,0}, \quad (2.27)$$

⋮

$$m = 2m - 1, \quad (E - \epsilon_{2m-1})G_{2m-1,0} = \delta_{2m-1,0} + H_{2m-1,2m-2}G_{2m-2,0} + H_{2m-1,2m}G_{2m,0}, \quad (2.28)$$

$$m = 2m, \quad (E - \epsilon_{2m})G_{2m,0} = \delta_{2m,0} + H_{2m,2m-1}G_{2m-1,0} + H_{2m,2m+1}G_{2m+1,0}, \quad (2.29)$$

$$m = 2m + 1, \quad (E - \epsilon_{2m+1})G_{2m+1,0} = \delta_{2m+1,0} + H_{2m+1,2m}G_{2m,0} + H_{2m+1,2m+2}G_{2m+2,0}. \quad (2.30)$$

⋮

Observamos que em um dado sítio m , a equação de $G_{m,0}$ é acoplada às equações de $G_{m+1,0}$ e $G_{m-1,0}$. Assim, podemos remover do conjunto de equações o elemento de matriz $G_{m,0}$ associado ao sítio m . Depois deste processo, temos feito um procedimento de desimação do sítio m . Agora, é necessário renormalizar os parâmetros ϵ_{m-1} e ϵ_{m+1} associados aos sítios $m-1$ e $m+1$, bem como o acoplamento entre eles. Para entender efetivamente como são deduzidas as equações responsáveis pela renormalização dos parâmetros mencionados

acima, iremos estruturar formalmente a dezimação de um certo sítio. Escolhemos o sítio $2m + 1$, assim, isolando o termo $G_{2m+1,0}$ em 2.30, temos

$$G_{2m+1,0} = \frac{\delta_{2m+1,0} + H_{2m+1,2m}G_{2m,0} + H_{2m+1,2m+2}G_{2m+2,0}}{E - \epsilon_{2m+1}}. \quad (2.31)$$

Substituindo a equação acima em 2.29, obtemos;

$$(E - \epsilon_{2m})G_{2m,0} = \delta_{2m,0} + H_{2m,2m-1}G_{2m-1,0} + H_{2m,2m+1} \left[\frac{H_{2m+1,2m}G_{2m,0} + H_{2m+1,2m+2}G_{2m+2,0}}{E - \epsilon_{2m+1}} \right]. \quad (2.32)$$

Após está substituição notamos, que restam apenas os elementos de matriz $G_{2m,0}$, $G_{2m-1,0}$ e $G_{2m+2,0}$. Daí, podemos reorganizar os termos como,

$$\left[E - \epsilon_{2m} - \frac{H_{2m,2m+1}H_{2m+1,2m}}{E - \epsilon_{2m+1}} \right] G_{2m,0} = \delta_{2m,0} + H_{2m,2m-1}G_{2m-1,0} + \left(\frac{H_{2m,2m+1}H_{2m+1,2m+2}}{E - \epsilon_{2m+1}} \right) G_{2m+2,0}. \quad (2.33)$$

Observando as considerações anteriores; voltamos à Eq. 2.4, onde ϵ_{2m} é real, $H_{2m,2m-1} = H_{2m-1,2m}$, $H_{2m+1,2m} = H_{2m,2m+1}$, visto que, os termos de *hopping* entre os sítios vizinhos são reais. Portanto, a Eq. 2.4 fica

$$\left[E - \epsilon_{2m} - \frac{|H_{2m,2m+1}|^2}{E - \epsilon_{2m+1}} \right] G_{2m,0} = \delta_{2m,0} + H_{2m,2m-1}G_{2m-1,0} + \left(\frac{H_{2m,2m+1}H_{2m+1,2m+2}}{E - \epsilon_{2m+1}} \right) G_{2m+2,0}. \quad (2.34)$$

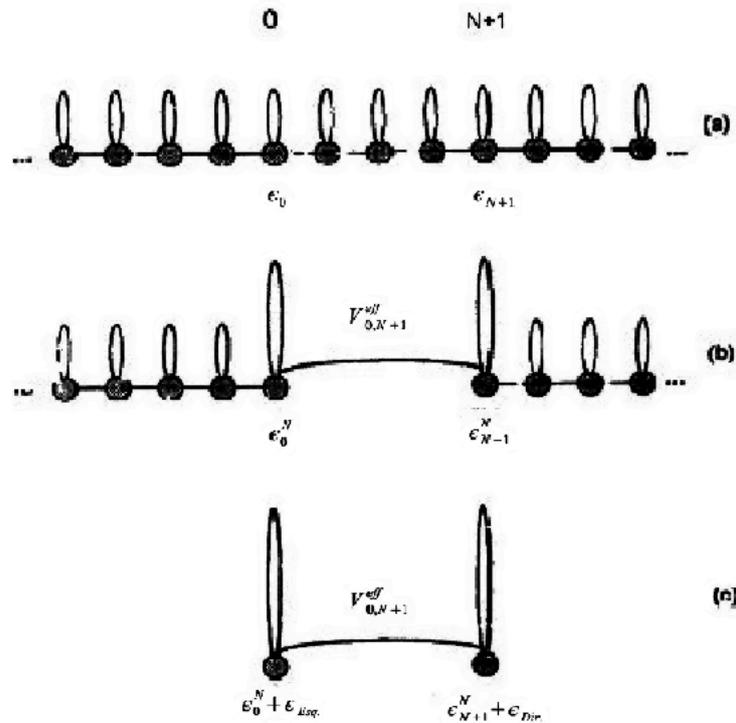
É importante notar na equação de movimento 2.34, que mesmo depois da dezimação é mantida a sua estrutura original. O coeficiente do termo $G_{2m,0}$ é a energia do sítio $2m$ renormalizada. Já o coeficiente do termo $G_{2m+2,0}$ é o acoplamento efetivo entre o sítio $2m$ e o $2m + 2$, depois da dezimação do sítio $2m + 1$. Daí, sendo $H_{2m,2m+1} = V$, escrevemos a equação que renormaliza a energia do sítio $2m$, como

$$\epsilon_{2m}^{(1)}(E) = \epsilon_{2m} + V \frac{1}{E - \epsilon_{2m+1}} V, \quad (2.35)$$

o índice (1) presente em 2.35 indica que apenas um sítio foi dezimado. Por um caminho análogo, encontramos a equação que renormaliza a energia do sítio $2m + 2$, dada como;

$$\epsilon_{2m+2}^{(1)}(E) = \epsilon_{2m+2} + V \frac{1}{E - \epsilon_{2m+1}} V. \quad (2.36)$$

Figura 2.2: Representação esquemática do cálculo para o comprimento de localização dentro do formalismo de renormalização. Em (a) o Hamiltoniano inicial infino unidimensional é indicado. Em (b) os sítios entre 0 e $N + 1$ foram eliminados. Finalmente, em (c) apenas os sítios 0 e $N + 1$ são preservados.



Fonte: R. Farchioni, 1992.

Como mencionado anteriormente, o acoplamento efetivo entre os sítios $2m$ e $2m + 2$ é

$$V_{2m,2m+2}^{(eff)}(E) = V \frac{1}{E - \epsilon_{2m+1}} V. \quad (2.37)$$

Neste caso os demais sítios não sofrem nenhuma mudança. Em um grupo de 0 a $N + 1$ sítios como indicado na Fig. 2.2, podemos remover iterativamente os sítios 1, 2, 3, ..., N do sistema, até que tenhamos apenas os sítios extremos. Daí, ao fim do processo de dezimação será adicionado a ϵ_0 e ϵ_{N+1} as energias dos sítios desimados á esquerda ($\epsilon_{Esq.}$) e á direita ($\epsilon_{Dir.}$), respectivamente. Assim, encontramos as energias efetivas dos sítios extremos, e a interação de *hopping* efetiva (acoplamento efetivo) utilizando as seguintes equações renormalizadas:

$$\epsilon_0^{N+1} = \epsilon_0^N + V_{0,N}^{eff} \frac{1}{E - \epsilon_{N-1}^N} V, \quad (2.38)$$

$$\epsilon_{N+1}^N = \epsilon_{N+1}^0 + V \frac{1}{E - \epsilon_N^{N-1}} V, \quad (2.39)$$

$$V_{0,N+1}^{(eff)} = V_{0,N}^{eff} \frac{1}{E - \epsilon_N^{N-1}} V. \quad (2.40)$$

Em que ϵ_0^N e ϵ_{N+1}^N são respectivamente as energias efetivas nos sítios 0 e $N + 1$ após a dezimação dos N sítios internos. Para investigar a natureza localizada ou delocalizada das ondas eletrônicas em estudo, vamos calcular o comprimento de localização, definido inicialmente através dos elementos de matriz do operador de Green como [92, 93]

$$\lambda(E) = \left\{ \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{N} \log \left| \frac{G_{N+1, N+1}(E)}{G_{0, N+1}(E)} \right| \right) \right\}^{-1}. \quad (2.41)$$

Os elementos de matriz $G_{N, N}$ e $G_{N, 0}$ podem ser encontrados como função do *acoplamento efetivo* $V_{0, N}^{(eff)}(E)$. O Hamiltoniano efetivo após o processo de dezimação é dado por

$$H^{(eff)}(E) = \begin{pmatrix} \epsilon_0^{N+1}(E) & V_{0, N+1}^{(eff)} \\ V_{0, N+1}^{(eff)} & \epsilon_{N+1}^N(E) \end{pmatrix}$$

Tendo o operador H^{eff} , calculamos o operador de Green efetivo $G^{(eff)}$. Agora, é necessário apenas inverter o operador $E - H^{eff}$; feito isso, encontramos $G_{N+1, N+1}(E)$ e $G_{0, N+1}(E)$ a serem utilizados no cálculo de λ :

$$G_{N+1, N+1}(E) = \frac{E - \epsilon_0^{N+1}(E)}{(E - \epsilon_0^{N+1}(E))(E - \epsilon_{N+1}^N(E)) - V_{0, N+1}^{(eff)} V_{0, N+1}^{(eff)}}, \quad (2.42)$$

$$G_{0, N+1}(E) = \frac{V_{0, N+1}^{(eff)}}{(E - \epsilon_0^{N+1}(E))(E - \epsilon_{N+1}^N(E)) - V_{0, N+1}^{(eff)} V_{0, N+1}^{(eff)}}, \quad (2.43)$$

Substituindo as duas equações anteriores em 2.41, conseguimos

$$\lambda(E) = \left\{ \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{N} \log \left| \frac{E - \epsilon_0^{N+1}(E)}{V_{0, N+1}^{(eff)}(E)} \right| \right) \right\}^{-1}. \quad (2.44)$$

Em $N \rightarrow \infty$, o termo $\frac{1}{N} \log(E - \epsilon_0^{N+1}(E))$ vai a zero, já que a energia renormalizada é finita. Assim, como indicado por [21], temos uma relação entre $\lambda(E)$ e $V_{0, N+1}^{(eff)}$,

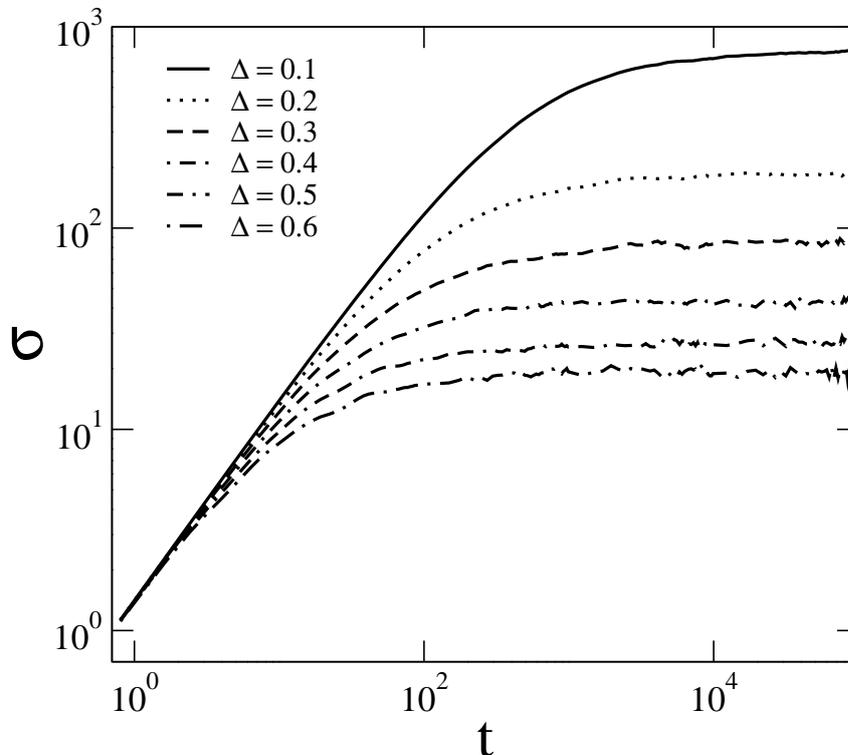
$$\lambda(E) = \left\{ - \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{N} \log \left| V_{0, N+1}^{eff} \right| \right) \right\}^{-1}. \quad (2.45)$$

Faremos nossos cálculos utilizando o comprimento de localização, redefinido de maneira a estudar a localização nas proximidades de $E = 0$, isto é, $\Lambda = \frac{1}{N_f} \sum_{E=-0.01}^{E=0.01} \lambda(E)$ onde N_f é o número de estados para o intervalo $[-0.01; 0.01]$. $\Lambda \propto N$ em estados estendidos e é finito para estados exponencialmente localizados. Observando a equação de Schrödinger dependente do tempo, percebemos que a propagação dos elétrons em longos tempos prevalecem os automodos com grande comprimento de localização no centro da banda. Daí, espera-se que $\Sigma \approx \Lambda$, (ou seja, que o desvio médio quadrático em tempo longo Σ coincida com o comprimento de localização Λ).

2.5 Resultados e implicações

Em nosso primeiro estudo, encontramos numericamente a evolução temporal de um pacote de onda inicialmente localizado no centro de uma cadeia auto expandida (como $c_n = \delta_{n,n_0}$). A cadeia auto expandida foi utilizada para minimizar os efeitos de borda; sempre que a probabilidade de encontrar a partícula no fim da cadeia exceder 10^{-30} , dez novos sítios são adicionados para cada borda da cadeia. A convergência numérica

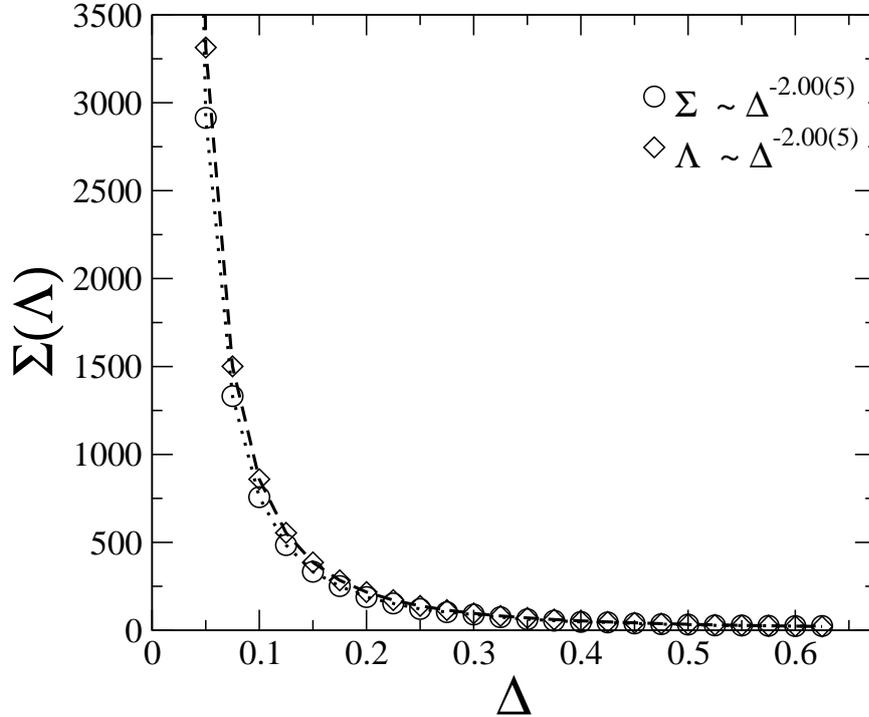
Figura 2.3: Cálculos do deslocamento médio quadrático para o pacote de onda em uma cadeia com distribuição de desordem descorrelacionada, tendo o desvio padrão variando de $\Delta = 0.1$ até $\Delta = 0.6$. A condição inicial foi um pacote de onda de um elétron inicialmente localizado no centro da cadeia, ou seja, $c_n(t = 0) = \delta_{n,n_0}$. A propagação da função de onda aumenta quando o grau de desordem Δ decresce.



Fonte: Autor, 2012.

do procedimento de integração numérica foi verificada através do cálculo da norma do pacote de onda em cada passo de tempo. Em todos nossos cálculos o critério de convergência foi $|1 - \sum_n |c_n(t)|^2| < 10^{-10}$. Utilizamos 30 configurações de desordem para calcular médias. Cálculos do comprimento de localização foram feitos usando métodos de funções de Green para cadeias com $N \approx 5 \times 10^7$. Vamos iniciar nossos cálculos pela reprodução dos mesmos resultados previstos sobre a localização de um elétron em cadeias com desordem correlacionada [3, 90]. Para simular cadeias com desordem descorrelacionada vamos considerar ϵ_n sendo um número aleatório independente com média nula $\langle \epsilon_n \rangle = 0$ e desvio padrão fixo ($\Delta = \sqrt{\langle \epsilon_n^2 \rangle - \langle \epsilon_n \rangle^2}$). Na Fig. 2.3 plotamos o deslocamento médio quadrático do pacote de onda $\sigma(t)$ versus o tempo t para uma cadeia com distribuição

Figura 2.4: (◦) O limite de longos tempos do deslocamento médio quadrático $\Sigma = \lim_{t \rightarrow t_{max}} \sigma(t)$ versus o desvio padrão da distribuição de energia nos sítios Δ . O melhor fit (linha pontilhada) nos fornece $\Sigma \propto \Delta^{-2.00(5)}$. (◊) O mesmo resultado obtido acompanhando o comprimento de localização no centro da banda Λ .

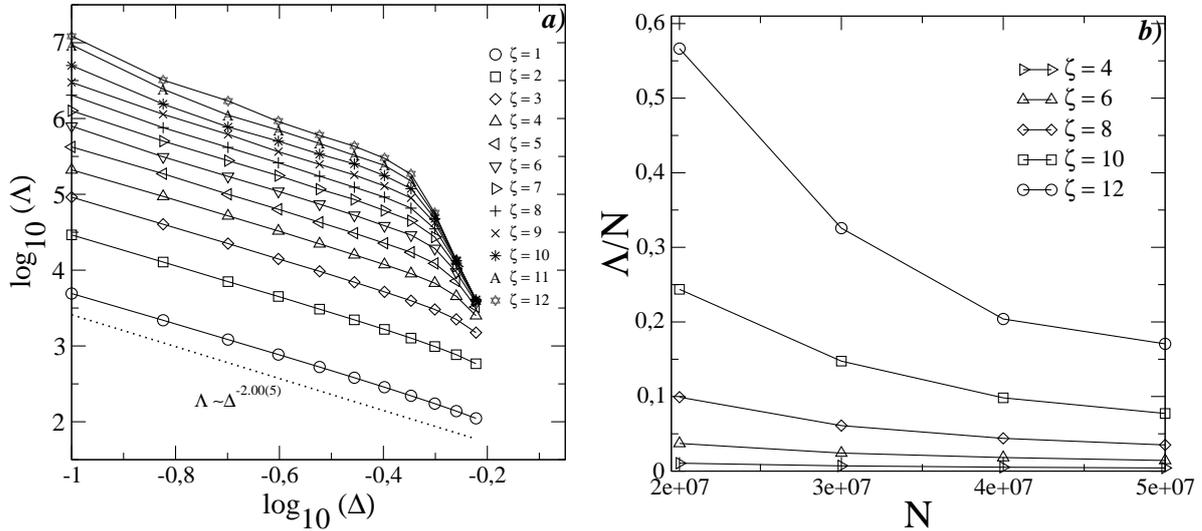


Fonte: Autor, 2012.

de desordem descorrelacionada, e com desvio padrão indo de $\Delta = 0.1$ até 0.6. De acordo com a teoria de localização [3, 90], o deslocamento médio quadrático cresce quando o grau de desordem Δ é diminuído. Na Fig. 2.4 colocamos o desvio médio quadrático em longos tempos $\Sigma = \lim_{t \rightarrow t_{max}} \sigma(t)$ versus o desvio padrão da distribuição de energia nos sítios Δ (ver (◦) na Fig. 2.4). O fit superior indicado na legenda (linha pontilhada) nos fornece $\Sigma \propto \Delta^{-2.00(5)}$. A Fig. 2.4(◊) representa cálculos do comprimento de localização médio no centro da banda Λ versus Δ para a mesma cadeia desordenada. Podemos ver que ambos os resultados concordam dentro de nossa tolerância numérica ($\Lambda \propto \Delta^{-2.00(5)}$). Nossos resultados estão em perfeito acordo com previsões anteriores sobre o grau de localização em modelos 1d tendo desordem descorrelacionada [3, 90]. Portanto, ambos os formalismos fornecem estimativas precisas do grau de localização eletrônico em sistemas desordenados.

Agora, começamos nossas análises numéricas sobre o efeito de correlações exponenciais de curto alcance na distribuição de desordem. Nós generalizamos a desordem no sistema usando o formalismo descrito nas equações 2.2 e 2.3. Com respeito ao procedimento numérico e precisão; os cálculos numéricos envolvendo a solução direta da equação de Schrödinger, mesmo usando métodos de alta ordem, requerem muito tempo computacional. Além disso, dependendo da magnitude do comprimento de localização, a precisão numérica obtida pelo método de funções de Green é mais interessante. Quando o com-

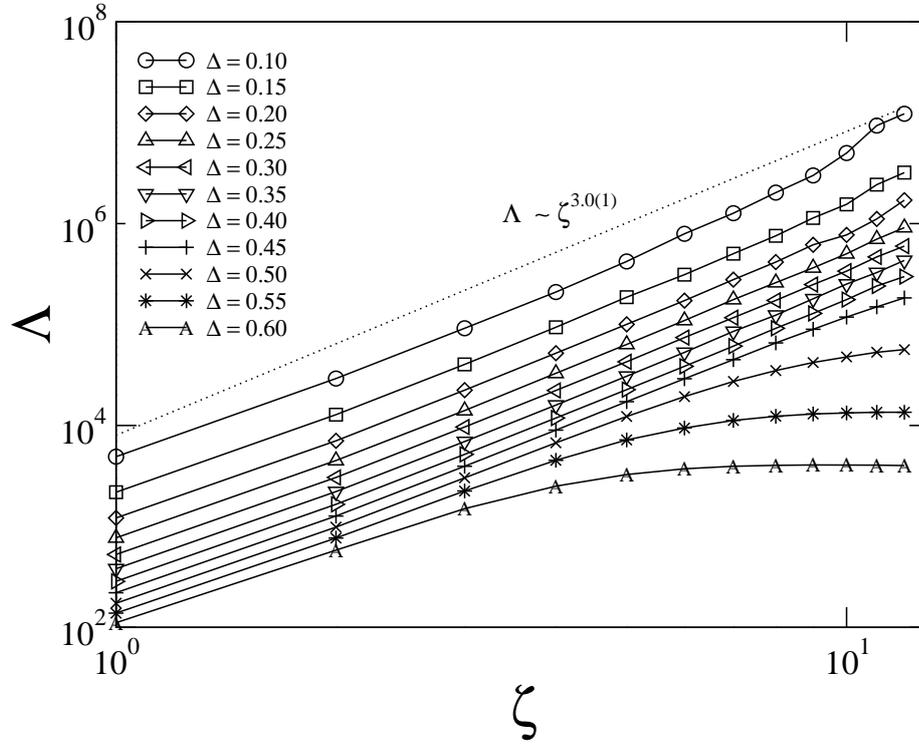
Figura 2.5: a) Comprimento de localização Λ versus o desvio padrão Δ para vários valores do comprimento de correlação ζ . Λ cresce quando ζ é aumentado e o comportamento de escala com Δ não muda qualitativamente $\Lambda \propto \Delta^{-2}$. b) Comprimento de localização escalado Λ/N versus o tamanho do sistema para $\Delta = 0.1$ e $\zeta = 4$ até $\zeta = 12$. A escala de tamanho finito sugere um comprimento de localização finito no limite termodinâmico.



Fonte: Autor, 2012.

primento de correlação é aumentado, a barra de erros obtida usando solução direta da equação de Schrödinger fica duas ou três vezes maior que a escala de erros obtida usando o método de funções de Green. Portanto, os resultados apresentados a seguir, são obtidos pelo formalismo de funções de Green. Contudo, devemos salientar que ambos os cálculos estão dentro da barra de erros. Na Fig. 2.5(a) mostramos um gráfico log-log do comprimento de localização Λ versus o desvio padrão Δ para vários valores do comprimento de correlação ζ e $\Delta = 0.1$ até $\Delta = 0.55$. Em geral, Λ aumenta quando ζ cresce. Podemos ver também que, como previsto em [90] mesmo na presença de correlações de curto alcance $\Lambda \propto \Delta^{-2}$. Contudo, em $\zeta > 7$ se percebe que o comprimento de localização não obedece a lei de potência $\Lambda \propto \Delta^{-2}$ no regime de desordem $\Delta > 0.45$. No limite de forte desordem (como exemplo o caso em que, a intensidade da desordem é comparável com a largura da banda) o efeito de correlações de curto alcance no potencial diagonal funciona de uma maneira contra intuitiva. Esse efeito será analisado em detalhes nas figuras 2.6 e 2.7. Para uma quantidade finita de desordem Δ o comprimento de localização fica comparável ao tamanho do sistema. Contudo, como indicado em [90], este modelo não contém estados estendidos. Na Fig. 2.5(b) podemos observar um comportamento de escala do comprimento de localização escalado Λ/N versus o tamanho do sistema $N = 2 \times 10^7$ até 5×10^7 . Temos considerado desordem fraca $\Delta = 0,1$ e vários valores do comprimento de correlação ($\zeta = 4$ até 12). Daí, foi obtido $\Lambda \propto 1/N$ o que indica um comprimento de localização finito no limite termodinâmico, em bom acordo com o estudo da ref. [90]. Na Fig. 2.6 estudamos a escala do grau de localização com o comprimento de correlação ζ . Plotamos Λ versus ζ para $\Delta = 0.1$ até $\Delta = 0.6$. Para fraca desordem ($\Delta \leq 0.45$), o

Figura 2.6: Grau de localização versus ζ para $\Delta = 0.1$ até $\Delta = 0.6$. Para desordem fraca ($\Delta \ll 0.5$), o comprimento de localização escala proporcionalmente a ζ^3 . Por outro lado, para Δ grande em correlações de curto alcance não são suficientes para enfraquecer os efeitos de localização de uma distribuição com forte desordem e Λ aparentemente satura em um valor finito quando ζ é aumentado.



Fonte: Autor, 2012.

comprimento de localização escala proporcionalmente a ζ^3 no intervalo do comprimento de correlação ($\zeta = 1$ até 12). Para desordem forte ($\Delta > 0.45$), Λ aumenta cubicamente com ζ no intervalo $1 \leq \zeta < 10$; contudo, aparentemente satura em um valor finito menor que o tamanho do sistema quando $\zeta > 10$. Portanto, existe uma competição contra intuitiva entre o grau de correlção e a intensidade da desordem. Para detalhar melhor essa competição, vamos analisar algumas propriedades locais da desordem correlacionada de curto alcance. Iniciamos calculando o desvio padrão local Δ_{L_0} das energias de um segmento com L_0 sítios. O desvio padrão local Δ_{L_0} é definido por

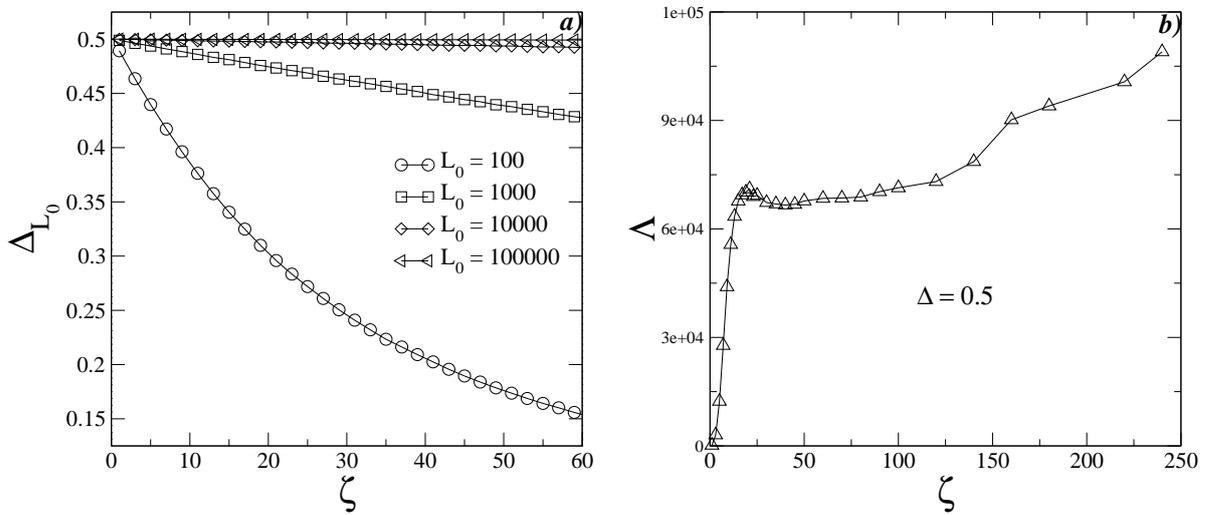
$$\Delta_{L_0} = \left(\sum_{k=1}^M \Delta_{k,L_0} \right) / M, \quad (2.46)$$

onde Δ_{k,L_0} é dado por

$$\Delta_{k,L_0} = \sqrt{ \sum_{i=(k-1)L_0+1}^{i=kL_0} (\epsilon_i^2) / L_0 - \left(\sum_{i=(k-1)L_0+1}^{i=kL_0} \epsilon_i / L_0 \right)^2 }, \quad (2.47)$$

e $M = N/L_0$. Δ_{L_0} é uma média da intensidade da desordem em um segmento com

Figura 2.7: a) Δ_{L_0} versus ζ calculado em uma sequência desordenada para as energias dos sítios com desvio padrão $\Delta = 0.5$, $N = 10^7$ e valores distintos de L_0 . De uma maneira geral, esse resultado está de acordo com a teoria usual de processos aleatórios correlacionados, em que observamos o decrescimento da desordem à medida que o comprimento de correlação é aumentado. Além disso, para um valor fixo de ζ , o grau de desordem aumenta quando L_0 cresce. b) Comprimento de localização Λ versus ζ calculado em uma cadeia com desvio padrão $\Delta = 0.5$ e $N = 10^7$ sítios. Nos podemos ver a dependência contra-intuitiva de Λ com ζ . Para comprimentos de correlação pequenos nossos resultados indicam um aumento cúbico. Para uma escala intermediária de comprimento de correlação, o efeito da desordem domina, estabilizando assim, o comprimento de localização em uma constante. Para comprimentos de correlação grandes, a desordem deve decrescer substancialmente e o comprimento de localização retorna a crescer.



Fonte: Autor, 2012.

L_0 sítios. Na Fig. 2.7(a) plotamos Δ_{L_0} versus ζ , sendo calculado através das Eqs. 2.46 e 2.47 em um potencial com desvio padrão $\Delta = 0.5$ e $N = 10^7$. O estudo acima foi feito para $L_0 = 100, 1000, 10000, 100000$. Através desses cálculos, observamos a princípio que para valores de $L_0 = 100$ e 1000 , Δ_{L_0} diminui substancialmente quando o comprimento de correlação é aumentado. Para $L_0 = 10000$ e 100000 percebemos também um decréscimo com ζ , porém, bem mais suave. Em uma perspectiva geral, o decréscimo da desordem à medida que o comprimento de correlação é aumentado está de acordo com a teoria usual de processos aleatórios correlacionados. Nosso melhor fit indica que a intensidade da desordem vai a zero como $\Delta_{L_0} \propto \exp[-B(L_0)\zeta]$, sendo B uma constante. O decaimento exponencial da desordem local com ζ está relacionado com tipos de desordem correlacionada que estamos a utilizar. Voltando a discutir os dados da Fig. 2.7(a), para valores distintos de L_0 . Nós observamos que, para um ζ fixo, o grau de desordem cresce à medida que L_0 é aumentado. Esse comportamento é o ingrediente principal por trás da aparente saturação do comprimento de localização encontrado na Fig. 2.6. Vamos focar no caso de desordem forte ($\Delta \geq 0.45$): quando o comprimento de correlação aumenta, o comprimento de localização aumenta até 10^4 ou 10^5 sítios. Portanto, a função de onda

é aprisionada em um segmento com algo em torno de 10^4 ou 10^5 sítios. Como vimos na Fig. 2.7(a), para os valores de ζ usados em nossos cálculos, a intensidade de desordem dentro de um segmento com 10^4 ou 10^5 sítios é comparável ao desvio padrão de desordem Δ . Portanto, neste caso, a forte desordem deve competir com os efeitos da correlação e retardar o aumento do comprimento de localização. Para grandes valores do comprimento de correlação, a desordem deve decrescer substancialmente e o comprimento de localização deve retornar a crescer. Podemos ver esse comportamento na Fig. 2.7(b). Contudo, é necessário um grande tempo computacional neste limite de altas correlações, o que nos força a diminuir o número de amostras, diminuindo assim a precisão numérica. Portanto, os dados foram obtidos com uma grande barra de erros e o comportamento de escala do comprimento de correlação não é discutido neste caso.

Neste capítulo estudamos o efeito de correlações de curto alcance na distribuição de desordem em sistemas eletrônicos unidimensionais. Nossos resultados indicam que, apesar das correlações modificarem certas especificidades ligadas ao transporte eletrônico, qualitativamente, obtemos completa ausência de transporte no limite termodinâmico. Tivemos a oportunidade de aprender técnicas numéricas potentes que podem ser utilizadas em outras classes de sistemas inclusive sistemas com dimensão elevada. Os principais resultados deste capítulo foram aceitos para publicação no periódico *Physica E*.

3

TRANSPORTE DE ENERGIA EM CADEIAS HARMÔNICAS UNIDIMENSIONAIS COM DESORDEM CORRELACIONADA TIPO ORNSTEIN-UHLENBECK

3.1 Introdução

O transporte de energia em cadeias clássicas não periódicas, têm atraído grande interesse na comunidade científica atual em diversas linhas de pesquisa [11, 12, 21, 22, 28, 45, 52, 56, 59, 60, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 68, 71, 79, 94, 95, 97, 98, 99, 100, 101, 102, 103, 104, 105, 106, 107]. Em redes clássicas de baixa dimensionalidade não periódicas, o fluxo de energia é fortemente dependente da natureza dos modos vibracionais. O estudo dos modos de vibração em cadeias harmônicas desordenadas pode ser feito através do mapeamento no modelo *tight-binding* para um elétron. Por meio desta modelagem, as pesquisas de [59, 106] mostraram que a maioria dos modos vibracionais estão localizados, e uma pequena fração dos modos de baixa frequência propagam ao longo da cadeia. O número de modos não espalhados em uma cadeia com N massas é da ordem de \sqrt{N} modos. Dentre outras pesquisas em cadeias harmônicas com massas desordenadas, os resultados de [45, 60] evidenciam a importância de modos vibracionais não espalhados (estendidos) no transporte de energia.

Um outro aspecto que influencia na propagação de energia é o tipo de excitação inicial; dentro dessa abordagem, cálculos indicam o comportamento superdifusivo para o segundo momento de distribuição de energia $M_2(t) \propto t^{1.5}$ em cadeias aleatórias não correlacionadas quando a excitação inicial é feita por um impulso. Por outro lado, no caso de uma excitação inicial por deslocamento, a energia é propagada no regime subdifusivo ($M_2(t) \propto t^{0.5}$). Essa dependência de $M_2(t)$ com o tipo de excitação inicial foi também investigada em [108]. Dentro desse campo de estudo, os trabalhos apresentados nas referências [61, 63, 79, 95, 107] demonstram que as evidências apontadas anteriormente, são alteradas quando estudamos um sistema com desordem correlacionada. Além desses resultados para modos de baixa frequência espalhados, a abordagem sobre modos de alta frequência não espalhados fornece subsídios para estudar problemas com correlações de curto alcance [61, 63] ou longo alcance [79, 95, 107] na distribuição de desordem, onde

correlações nas constantes de mola e/ou nas massas de cadeias clássicas são alvo de investigação. O problema indicado por [79] estuda as propriedades dos modos de vibração coletivos em cadeias com massas aleatórias tendo correlação de longo alcance, considerando a lei de potência espectral $S \propto k^{-\alpha}$. Sobre esse problema o uso do método de matriz de transferência, aponta o aparecimento de uma fase de baixa energia em excitações coletivas no regime fortemente correlacionado ($\alpha > 1$). Em junção a estas observações, os resultados em [79] mostram duas rotulações do segundo momento de distribuição de energia $M_2(t)$; o regime subdifusivo ou superdifusivo, dependendo se ocorre uma excitação por deslocamento ou impulso inicial, respectivamente, para um comportamento balístico.

Grande parte dos trabalhos inferidos acima, consideraram distribuições de desordem correlacionada distribuídas uniformemente em um intervalo finito $[W_1, W_2]$, sendo W_1 e W_2 convencionados ao problema em estudo. Dentro do contexto de modelos eletrônicos com desordem correlacionada, existem modelos abordados por alguns pesquisadores que consideram a possibilidade da energia de um sítio assumir dois ou três valores diferentes, ou seja, modelos binários ou ternários, respectivamente, [28, 98]. O caso de uma sequência ternária, por exemplo, tem como base o modelo de Anderson com correlações de longo alcance na distribuição de desordem [98]. Utilizando métodos numéricos foi verificado que modelos eletrônicos com distribuições de desordem ternária correlacionada apresenta uma transição do regime localizado para delocalizado [98], o que não ocorre quando a sequência de energias é gerada de maneira totalmente aleatória. Nos últimos dois anos, linhas de transmissão clássicas (LT) com sequências ternárias de capacitâncias com desordem correlacionada tem sido estudadas por Lazo e Diez [70, 71]. Como ferramenta para gerar a sequência ternária correlacionada, foi utilizado o método de filtro de Fourier [70], e também o processo de Ornstein-Uhlenbeck (OU) [71]. Nos dois casos, os autores observaram uma transição do estado não condutor para condutor nas (LT) provocada pela presença de fortes correlações.

Nosso foco aqui estará voltado para o problema de uma cadeia harmônica com distribuição de desordem ternária correlacionada, identificando principalmente características como o transporte de energia. Vamos construir a distribuição de desordem ternária correlacionada a partir de um processo Ornstein-Uhlenbeck (OU). Para gerar uma cadeia harmônica com uma distribuição ternária aleatória de massas vamos inicialmente gerar o processo (OU) e depois fazer um mapeamento da sequência (OU) em uma sequência com três valores diferentes (m_1, m_2, m_3). A probabilidade de cada valor da sequência, é controlada por um parâmetro fixo b . Feito isso, teremos como resultado uma distribuição ternária de massas com correlações de longo alcance. Para investigar os aspectos de localização inerentes ao nosso modelo, utilizaremos como ferramentas numéricas: a solução numérica das equações de Hamilton, o método de matriz de transferência e o cálculo da densidade de estados, tendo como base o método de Dean [56]. Os resultados obtidos com a aquisição dos dados, mostram que a distribuição ternária de massas correlaciona-

das não tende a apresentar novos modos estendidos. De acordo com trabalhos no mesmo segmento de estudo, observamos modos estendidos para $b \rightarrow \infty$. Nossa resumida análise inicial sobre a transição de fase encontrada, será detalhada a partir do cálculo numérico da intensidade de desordem no sistema em estudo. Dentre outros resultados, estudamos ainda a dinâmica da energia por meio do cálculo do segundo momento da distribuição espacial de energia [62].

3.2 Cadeia Harmônica Unidimensional

Nesta seção discutiremos a forma da equação de movimento para a cadeia harmônica em estudo, tendo a desordem sendo introduzida por uma sequência de Ornstein-Unlenbeck.

Consideraremos as vibrações longitudinais de uma cadeia de N sítios de massas m_n . Tendo u_n sendo o deslocamento de equilíbrio do n -ésimo sítio, e β_n sendo a constante de força que relaciona os n e $n + 1$ sítios, neste problema faremos $\beta_n = 1$. De uma forma semelhante a descrição apresentada no Cap. 1, a equação de movimento para u_n , é dada por

$$m_n \frac{d^2 u_n}{dt^2} = (u_{n+1} - u_n) - (u_n - u_{n-1}). \quad (3.1)$$

Para vibrações de frequência angular ω . Assim, a equação de movimento que conecta os sucessivos deslocamentos $q_n = u_n \exp(i\omega t)$ dos átomos, como dado na Eq. 1.27, Cap. 1, toma a forma;

$$(2 - \omega^2 m_n) u_n = u_{n-1} + u_{n+1}. \quad (3.2)$$

Do mapeamento feito na seção 1.4, Cap. 1, reescrevemos a Eq. 3.2 em uma forma mapeada nas massas m_n e constantes de força $\beta_n = 1$, como

$$t_{n,n+1} \varphi_{n+1} + t_{n-1,n} \varphi_{n-1} = (E - V_n). \quad (3.3)$$

onde

$$t_{n-1,n} = -\frac{1}{\sqrt{m_{n-1} m_n}}, \quad (3.4)$$

$$t_{n,n+1} = -\frac{1}{\sqrt{m_n m_{n+1}}}, \quad (3.5)$$

$$V_n = \frac{2}{m_n}, \quad (3.6)$$

$$E = \omega^2. \quad (3.7)$$

Nesse mapeamento, $t_{n-1,n}$ e $t_{n,n+1}$ são quantidades que correspondem a integral de *Hopping* no problema eletrônico, e V_n corresponde a um potencial aleatório também no estudo de elétrons.

3.2.1 Sequência Ornstein-Uhlenbeck (OU)

Utilizaremos neste trabalho o processo Ornstein-Uhlenbeck [109] para gerar a sequência desordenada de massas m_n com correlação de longo alcance, através de um mapa ternário [71]. O processo OU é definido pela seguinte equação diferencial

$$\frac{dx}{dt} = -\gamma x(t) + \sqrt{C}\alpha(t). \quad (3.8)$$

onde γ é a viscosidade e C é o coeficiente de difusão. $\alpha(t)$ é um ruído branco com distribuição Gaussiana o gerado pelo processo de Box-Muller com as seguintes propriedades:

$$\langle \alpha(t) \rangle = 0, \quad \langle \alpha(t)\alpha(t+\tau) \rangle = \delta(\tau).$$

A sequência $x(t)$ segue as propriedades:

$$\langle x(t) \rangle = x_0 e^{-\gamma t}, \quad \langle x(t)x(t+\tau) \rangle = \frac{C}{2\gamma} e^{-\gamma\tau}.$$

Como subsídio para gerar a sequência OU, utilizaremos a simulação apresentada por Gillespie [110]. Seguindo este método, a Eq. 3.8 pode ser discretizada por meio de uma equação que relacione $x(t)$ em dois diferentes tempos $t_i = t$ e $t_f = (t + \Delta t)$, ou seja, $x(t)$ é escrito como x_n onde n denota o número de passos de tempo ($t = n\Delta t$). Portanto, a forma discretizada de 3.8 fica:

$$x_{n+1} = \mu x_n + \sigma_x \alpha_n. \quad (3.9)$$

em que μ , σ_x são definidos como uma função dos parâmetros γ e C do processo OU, Eq. 3.8 na seguinte forma

$$\mu = e^{-\gamma\Delta t} \quad (3.10)$$

$$\sigma_x^2 = \left(\frac{C}{2\gamma}\right)(1 - \mu^2) \quad (3.11)$$

Com o uso do algoritmo de Box-Muller, calculamos $\alpha_n(t)$ como segue,

$$\alpha_n = \left(\sqrt{2 \ln \frac{1}{r_n}} \cos 2\pi a_n \right) \quad (3.12)$$

sendo r_n e a_n números aleatórios definidos no intervalo inteiro $[0,1]$. Para finalizar esse procedimento numérico, normalizamos a sequência $\{x_n\}$ para obter média nula, $\langle x_n \rangle = 0$

e a variância sendo a unidade. Tendo agora a sequência normalizada $\{x_n\}$, construímos um modelo simétrico ternário, que vem a ser gerado através de uma transformação que mapeia os elementos da sequência correlacionada de longo alcance normalizada $\{x_n\}$, em três diferentes valores de massas $m_n = \{m_1, m_2, m_3\}$ através do mapa abaixo.

$$m_n = \begin{cases} m_1 & \text{se } x_n < (-b), \\ m_2 & \text{se } (-b) \leq x_n \leq b, \\ m_3 & \text{se } x_n > b. \end{cases} \quad (3.13)$$

onde $b > 0$ é o parâmetro de mapa, que ajusta a probabilidade de ocupação de cada possível valor das massas $m_n = \{m_1, m_2, m_3\}$. O mapa ternário dado em 3.13 não muda as propriedades de correlação da sequência OU original $\{x_n\}$.

Em nosso estudo vamos considerar os parâmetros γ e C relacionados pela expressão $C = (\varepsilon\gamma)^2$ com $\varepsilon = 1$, isto é, o caso em que a razão $\sqrt{C}/\gamma = \varepsilon$ fica constante. Em nossa análise focaremos no intervalo de correlação entre $(\gamma \sim 5)$ e $(\gamma \sim 10^{-3})$. O parâmetro de mapa b , será responsável por intensificar ou reduzir a desordem na cadeia a depender da sequência $\{x_n\}$, se relacionando com as massas: $m_1 = 0.5$, $m_2 = 1.0$ e $m_3 = 1.5$.

3.3 Propriedades de Localização

Uma importante ferramenta utilizada para medir o grau de localização de sistemas não periódicos é o método de matriz de transferência (MMT), onde podemos calcular o comprimento de localização λ . O MMT é obtido com uso de reformulação de matriz recursiva da equação de deslocamentos escalados, Eq. 3.2,

$$\begin{pmatrix} u_{n+1} \\ u_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 - m_n\omega^2 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_n \\ u_{n-1} \end{pmatrix}. \quad (3.14)$$

Para uma frequência específica ω , uma matriz de transferência 2×2 T_n conecta os deslocamentos nos sítios $n - 1$ e n , e esse ao sítio $n + 1$:

$$T_n = \begin{pmatrix} 2 - m_n\omega^2 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.15)$$

Como, os valores iniciais para u_0 e u_1 são conhecidos, o valor de u_n pode ser obtido pela repetição das interações ao longo da cadeia, como descrito pelo produto de matrizes de transferência,

$$Q_N = \prod_{n=1}^N T_n. \quad (3.16)$$

Tendo essas quantidades, podemos calcular o comprimento de localização de cada modo vibracional, como definido em [45, 60, 61], temos

$$\lambda = \left[\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \left(\frac{|Q_N c(0)|}{|c(0)|} \right) \right]^{-1}. \quad (3.17)$$

Onde $c(0) = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_0 \end{pmatrix}$ é uma condição inicial generalizada. Tipicamente são usadas 10^8 matrizes de transferência para calcular o comprimento de localização.

3.4 Fluxo de Energia

O Hamiltoniano total da cadeia Harmônica considerada é representado por

$$H = \sum_{n=1}^N h_n(t), \quad (3.18)$$

onde o Hamiltoniano de um n -ésimo sítio $h_n(t)$, é dado por

$$h_n(t) = \frac{p_n^2}{2m_n} + \frac{1}{4}[(q_{n+1} - q_n)^2 + (q_n - q_{n-1})^2]. \quad (3.19)$$

As quantidades p_n e q_n acima, são o momento e deslocamento, respectivamente, de uma massa no n -ésimo sítio da cadeia. Onde o primeiro termo do segundo membro da equação acima, representa a parte cinética e o segundo termo a parte potencial do hamiltoniano $h_n(t)$. Daí, $h_n(t)$ caracteriza a parte da energia total no sítio n com massa m_n . Para calcular as equações de movimento com respeito a p_n e q_n usamos as equações de Hamilton para o sistema:

$$\dot{p}_n(t) = -\frac{\partial H}{\partial q_n} = [(q_{n+1} - q_n) - (q_n - q_{n-1})], \quad (3.20)$$

$$\dot{q}_n(t) = \frac{\partial H}{\partial p_n} = \frac{p_n(t)}{m_n}. \quad (3.21)$$

Para se estudar o fluxo de energia na cadeia harmônica vamos calcular o segundo momento de distribuição espacial de energia [62, 108]. Obtemos o segundo momento $M_2(t)$, como comumente é representado, avaliando a razão $h_n(t)/H$ entre a energia concentrada no sítio n e a energia total na cadeia H em um instante t , como definido por Datta [62]. $M_2(t)$ pode ser interpretado como a probabilidade de encontrar um pacote de energia localizado, de comprimento unitário, no sítio n e tempo t , pode também ser compreendido pela analogia com o deslocamento médio quadrático do pacote de onda de um elétron em um cristal [62]. O comportamento de escala de $M_2(t)$ com o tempo t , indica que quanto menor o expoente de t , mais lenta é a propagação de energia na cadeia [62]. Considerando que em $t = 0$ a energia H é introduzida na cadeia por meio de uma perturbação, onde a mesma é efeito de uma excitação inicial dada ao sistema, como um impulso (p) em uma certa massa da cadeia ($p_{n_0} = p^0 \delta_{n,n_0}$). Contudo, escrevemos $M_2(t)$ como:

$$M_2(t) = \sum_{n=1}^N (n - n_0)^2 [h_n(t)/H]. \quad (3.22)$$

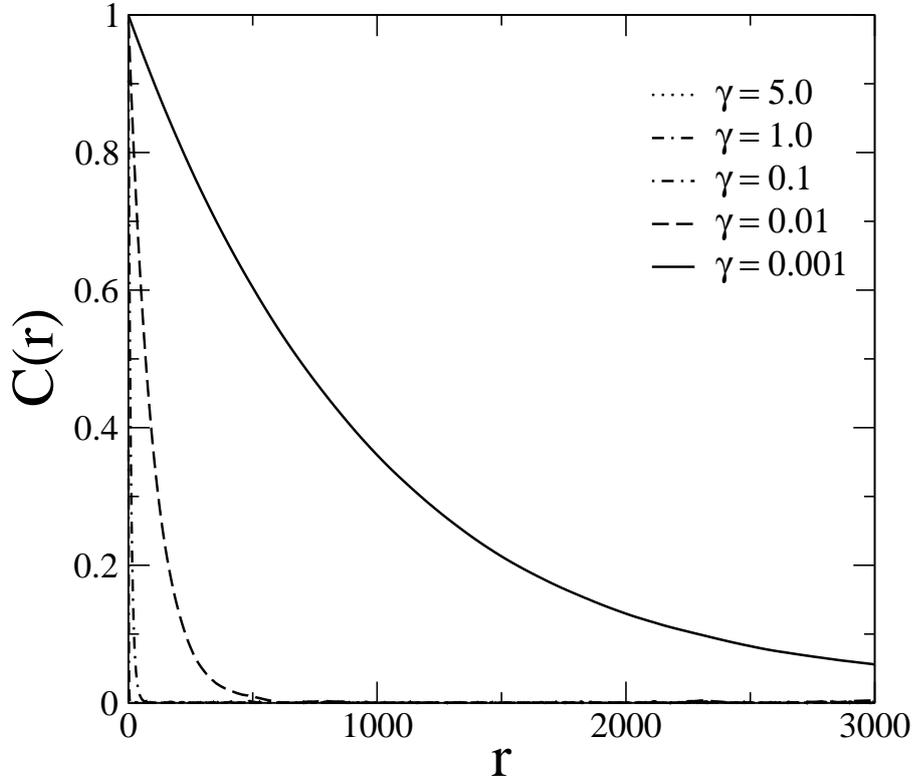
onde n_0 representa o sítio onde a perturbação deve ocorrer, ($t = 0$). Para calcular as quantidades $p_n(t)$ e $q_n(t)$, indicadas pelas Eqs. 3.20 e 3.21, respectivamente, e portanto obter $h_n(t)$, Eq. 3.19, faremos uma integração numérica sobre as equações diferenciais para $p_n(t)$ e $q_n(t)$, utilizando o algoritmo de Runge-Kutta de oitava ordem com incremento temporal Δt . No processo de integração numérica, poderemos obter também a energia total da cadeia $H(t)$, Eq. 3.18, comparando então com a energia inicial $H(t = 0)$. O incremento Δt é definido a partir da razão dessas duas grandezas, que se faz necessário durante o processo de integração. O incremento a ser utilizado em nosso estudo está no intervalo $10^{-3} < \Delta t < 10^{-2}$. Como já apresentado na Seção 1.4, estudos feitos em cadeias harmônicas aleatórias com uma excitação inicial dada por um impulso, mostram que a energia propagada na cadeia tem comportamento superdifusivo ($M_2(t) \sim t^{3/2}$) [95]. Em sistemas bidimensionais o trabalho de Moura [100], identificou em uma rede aperiódica harmônica com desordem na distribuição das massas, que a energia tem propagação balística ($M_2(t) \sim t^2$). É importante frisar que os modos de vibração em uma cadeia harmônica podem ser apresentados de duas formas, como indicado em outros pontos deste trabalho. Essa caracterização é determinada pelo tipo de excitação; no caso de excitações por impulso os modos são preenchidos uniformemente, já para uma excitação por deslocamento a contribuição de um modo vibracional com frequência ω é proporcional a ω^2 [62]. A seguir apresentaremos resultados para $M_2(t)$ com uma excitação tipo impulso variando com o grau de desordem, b , e de correlação, γ .

3.5 Discussão dos Resultados

3.5.1 Aspectos da Localização

A princípio, com o intuito de comparar algumas propriedades estatísticas da distribuição Ornstein-Uhlenbeck (OU), calcularemos a função auto-correlação ($C(r) = [1/(N - r)] * \sum_{n=1}^{N-r} x_n x_{n+r}$) da sequência x_n (ver Fig. 3.1). Vemos claramente que a função auto-correlação decai mais lentamente quando γ é diminuído. Para $\gamma \gg 0$ nós recuperamos um processo aleatório decorrelacionado. Em seguida para calcular o comprimento de localização dos autoestados, usaremos a técnica de matriz de transferência para uma cadeia com N massas ($N \approx 10^8$). Neste método, flutuações estatísticas diminuem à medida que multiplicamos as matrizes de transferência. Os dados finalmente obtidos têm erros estatísticos muito baixos ($< 5\%$). Na Fig. 3.2 mostramos os dados para o comprimento de localização λ versus a frequência quadrática ω^2 para uma cadeia harmônica com distribuição desordenada de massas (OU) tendo $\gamma = 1$ e 5 , e $b = 0.25, 0.5, 0.75$ e 1.0 . Todos cálculos foram realizados com 100 configurações distintas de desordem. Para $\gamma = 1$ e

Figura 3.1: Cálculo numérico dos dois pontos da função auto correlação, definida como $C(r) = [1/(N - r)] * \sum_{n=1}^{N-r} x_n x_{n+r}$. Vemos que à medida que γ é diminuído o processo OU exibe um aumento do grau de correlação.

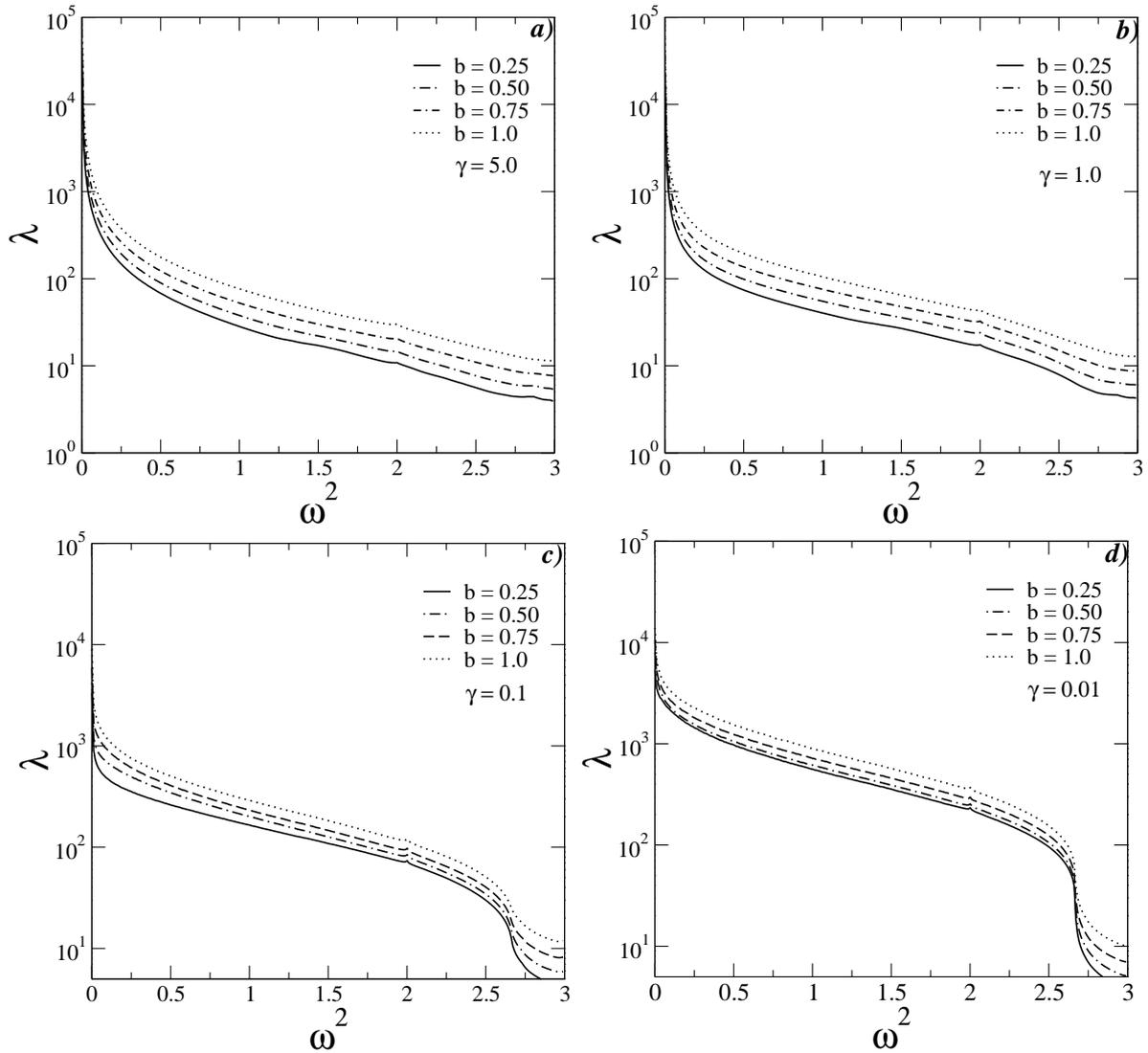


Fonte: Autor, 2012.

5 o comprimento de localização escala proporcionalmente ao tamanho do sistema (λN) apenas em $\omega = 0$, indicando que o pulso de vibração se estende por toda ou parcialmente toda a cadeia, ou seja, os modos de vibração são estendidos. Para $\gamma \gg 0$ nós obtemos resultados compatíveis com uma cadeia harmônica descorrelacionada padrão. Na Fig. 3.2(c-d) e Fig. 3.3(a) mostramos resultados do comprimento de localização λ versus a frequência quadrática ω^2 para uma cadeia com uma distribuição desordenada de massas (OU) tendo $\gamma = 0.1, 0.01$ e 0.001 , e $b = 0.25, 0.5, 0.75$ e 1.0 .

Em geral, podemos ver que o comprimento de localização é bem maior que no caso anterior (isto é, Fig. 3.2). Contudo, apesar do comprimento de localização aumentar quando γ é decrescido, apenas os modos de frequência nula continua sendo estendido. Na Fig. 3.3(b) podemos observar, para $\gamma = 0.001$, uma análise de tamanhos finitos para o comprimento de localização. Os cálculos indicam que apenas em $\omega = 0$ o comprimento de localização diverge proporcional ao tamanho do sistema ($\lambda(\omega = 0) \propto N$). Alguns autores têm considerando cadeias ternárias em um passado recente [28, 70, 71, 98]. Em geral, eles obtiveram modos estendidos no limite de b grande. Estudaremos aqui o possível aparecimento de estados estendidos no mesmo limite. Consideraremos a região frequência não nula. Na Fig. 3.4 mostramos o comprimento de localização escalado λ/N para $\omega^2 = 0.25$ versus b . Os cálculos foram feitos para $\gamma = 0.001$ e sistemas de $N = 2 \times 10^7$

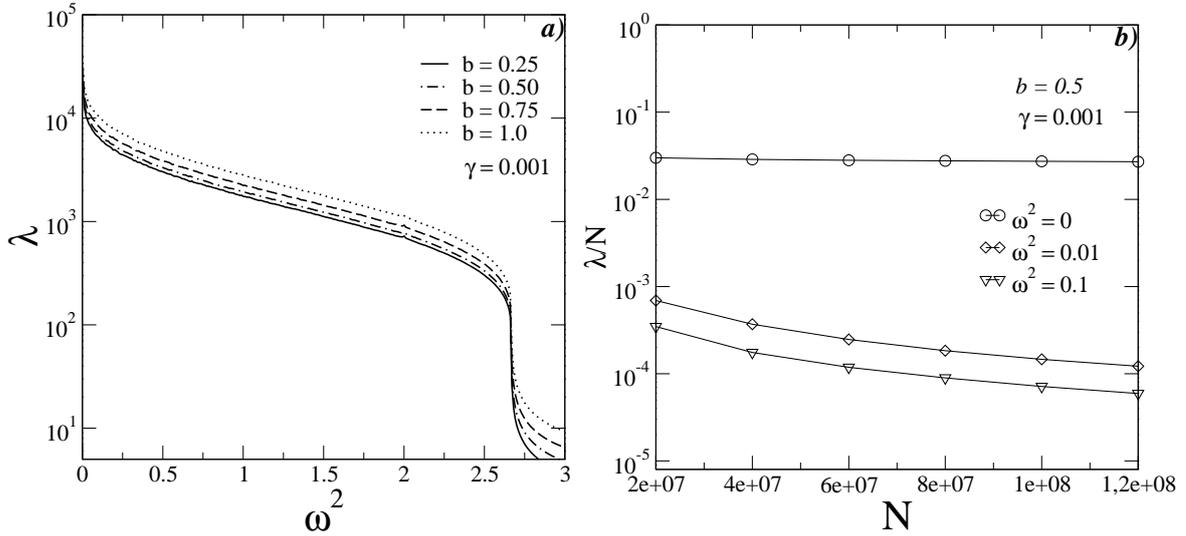
Figura 3.2: Comprimento de Localização λ versus ω^2 para uma cadeia harmônica com uma distribuição de massas desordenada (OU) tendo $\gamma = 1.0, 5.0$ e $b = 0.25, 0.5, 0.75, 1.0$. Cálculos foram feitos usando $N \approx 10^8$ e medidas algo em torno de 100 configurações de desordem. Nossos cálculos indicam que para $\gamma \gg 0$ a cadeia harmônica considerada aqui exibe comportamento similar a uma cadeia harmônica com distribuição de desordem decorrelacionada. (c,d) Comprimento de localização λ versus ω^2 para uma cadeia harmônica com distribuição desordenada de massas (OU) tendo $\gamma = 0.1; 0.01$ e $b = 0.25, 0.5, 0.75, 1.0$.



Fonte: Autor, 2012.

até 10^8 massas. Podemos ver claramente que em $b \leq 4.0$ o comprimento de localização escalado decresce quando o tamanho do sistema é aumentado; indicando assim, estados localizados. Para $b > 4.0$ nós obtemos um colapso dos dados para o comprimento de localização escalado. Esta característica é uma assinatura bem definida de modos vibracionais estendidos. Estes resultados estão em bom acordo com cálculos realizados por outros pesquisadores [70, 71, 98] sobre o transporte em distribuições desordenadas ternárias com forte correlações de longo alcance. Vamos discutir aqui estes resultados com base nas propriedades intrínsecas da sequência ternária. Nós analisamos algumas propriedades

Figura 3.3: (a) Comprimento de localização λ versus ω^2 para uma cadeia harmônica com distribuição desordenada de massas (OU) tendo $\gamma = 0.001$ e $b = 0.25, 0.5, 0.75, 1.0$. b) Define a escala de tamanho do comprimento de localização para $\gamma = 0.001$, $b = 0.5$ e $\omega^2 = 0, 0.01$ e 0.1 , onde observamos que o comprimento de localização aumenta quando γ é diminuído, contudo, apenas o modo de frequência nula continua sendo estendido.



Fonte: Autor, 2012.

locais da distribuição de massas ternárias com desordem correlacionada. Calcularemos então, o desvio padrão local Δ_{L_0} de um segmento com L_0 massas. O desvio padrão local Δ_{L_0} é definido por

$$\Delta_{L_0} = \left(\sum_{k=1}^M \Delta_{k,L_0} \right) / M, \quad (3.23)$$

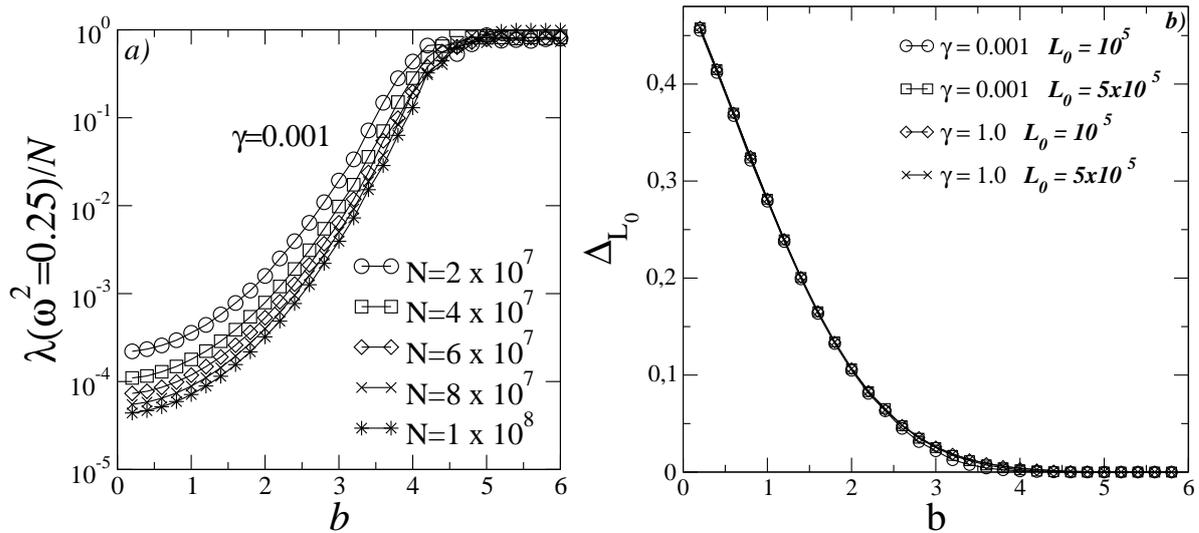
em que Δ_{k,L_0} é dado por

$$\Delta_{k,L_0} = \sqrt{ \sum_{n=(k-1)L_0+1}^{n=kL_0} (m_n^2) / L_0 - \left(\sum_{n=(k-1)L_0+1}^{n=kL_0} m_n / L_0 \right)^2 }, \quad (3.24)$$

e $M = N/L_0$. Δ_{L_0} é uma medida do intensidade da desordem local em um segmento com L_0 massas. Na Fig. 3.4(b) plotamos Δ_{L_0} versus b calculado usando as Eqs. 3.23 e 3.24 numa distribuição massas ternárias tendo $\gamma = 0.001, 1.0$ e $N = 10^7$ massas. Δ_{L_0} decresce subitamente quando o parâmetro b é aumentado. Em especial, para $b > 4.0$ o intensidade da desordem local vai a zero. Portanto, a existência de estados estendidos em $b > 4.0$ não está relacionada ao grau de correlação, mas ao desaparecimento da desordem neste limite. De fato, a transição de fase obtida em torno de $b \approx 4.0$ não é uma típica transição de Anderson, ela é uma transição entre uma topologia desordenada ($b < 4.0$)-ordenada ($b > 4.0$). Para $b > 4.0$ o sistema se torna ordenado.

Na Fig. 3.5 nós estudamos a escala do comprimento de localização com o grau de correlação γ . Nós plotamos λ versus γ para $b = 0.25, 0.5, 0.75$ e 1.0 . Nossos resultados

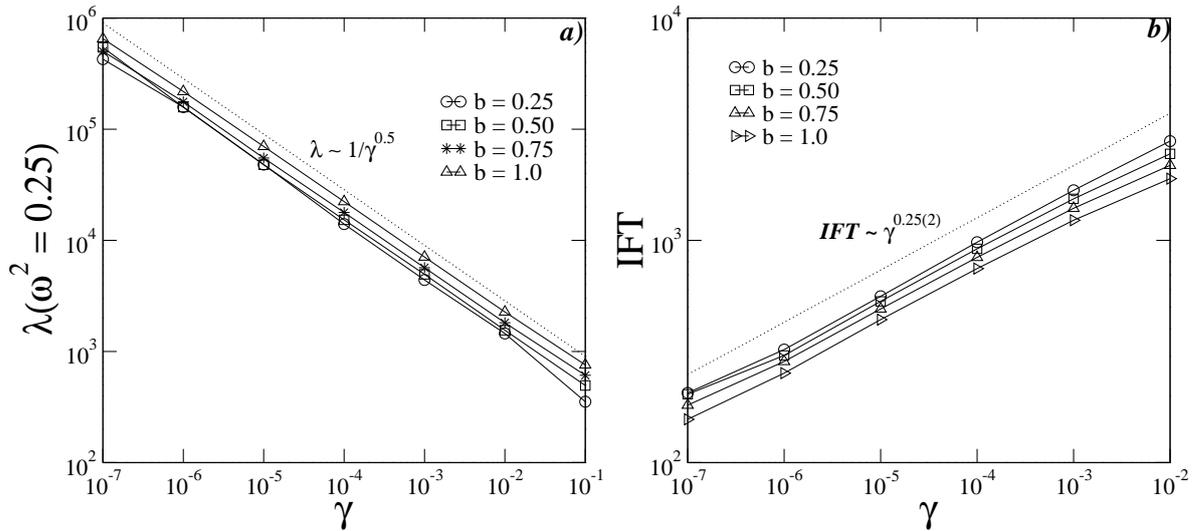
Figura 3.4: a) Comprimento de localização escalado λ/N para $\omega^2 = 0.25$ versus b . Cálculos foram feitos para $\gamma = 0.001$ e um sistema tendo de 2×10^7 até 10^8 massas. Podemos ver claramente que em $b \leq 4.0$ o comprimento de localização escalado decresce quando o tamanho do sistema é aumentado, indicando assim, estados localizados. Para $b > 4.0$ todos os dados coincidem, indicando modos vibracionais estendidos. b) Cálculos numéricos da intensidade da desordem em um segmento com L_0 massas. Para $b > 4.0$ o intensidade da desordem local vai a zero; portanto, nossos cálculos indicam que o aparecimento da transição localização-delocalização de Anderson obtida em (a), que é de fato uma transição de fase desordem-ordem.



Fonte: Autor, 2012.

indicam que o comprimento de localização escala proporcionalmente a $\gamma^{-0,5}$ dentro do intervalo de γ utilizado ($\gamma = 10^{-7}$ até 0.1). Podemos compreender estes resultados usando uma medida da desordem efetiva da rede. Seguindo as refs. [111, 112] consideraremos a Transformada de Fourier Integrada (Integrated Fourier Transform (IFT)) definida por $IFT = \int_0^{k_{max}} m_k dk$ onde m_k representa a transformada de Fourier da distribuição de massas m_n . Em uma distribuição de massas rugosa (desordenada) com $\gamma \gg 0$ teremos uma grande intensidade de IFT , enquanto em uma estrutura mais regular com $\gamma \rightarrow 0$ obteremos um espectro de Fourier estreito e conseqüentemente um menor valor de IFT . Na Fig. 3.5(b) plotamos IFT versus γ para $b = 0.25, 0.5, 0.75, 1.0$ e $N = 2^{26}$ massas. Nossos cálculos indicam que $IFT \propto \gamma^{0,25(2)}$. Vamos usar o comportamento de escala da Transformada de Fourier Integrada (IFT) e argumentos heurísticos para explicar a divergência do comprimento de localização com γ obtido na Fig. 3.5(a). Têm-se como conhecido que, em cadeias unidimensionais, o comprimento de localização diverge quando $\lambda \propto 1/W^2$ onde W é o grau de desordem. Desde que a Transformada de Fourier Integrada seja uma medida qualitativa da desordem na rede, podemos escrever $\lambda \propto 1/W^2 \propto 1/(IFT)^2 \propto 1/\gamma^{0,5}$; corroborando assim ao comportamento de escala obtido na Fig. 3.5(a). Portanto, o aumento de correlações na distribuição de massas decresce efetivamente a quantidade de desordem na rede, e assim, promove o aumento do comprimento de localização.

Figura 3.5: a) Comprimento de localização λ versus γ para $b = 0.25, 0.5, 0.75$ e 1.0 . Nossos resultados indicam que o comprimento de localização escala proporcionalmente a $\gamma^{-0.5}$. b) A quantidade efetiva de desordem na cadeia calculada usando a Transformada de Fourier Integrada, (Integrated Fourier Transform (*IFT*)). Cálculos de *IFT* versus γ foram feitos para $b = 0.25, 0.5, 0.75, 1.0$ e $N = 2^{26}$ massas. Nossos cálculos indicam que $IFT \propto \gamma^{0.25(2)}$. O comportamento de escala de *IFT* associado com a dependência bem conhecida de λ com a quantidade de desordem corroborada aos resultados obtidos em (a), (ou seja, $\lambda \propto 1/W^2 \propto 1/(IFT)^2 \propto 1/\gamma^{0.5}$).

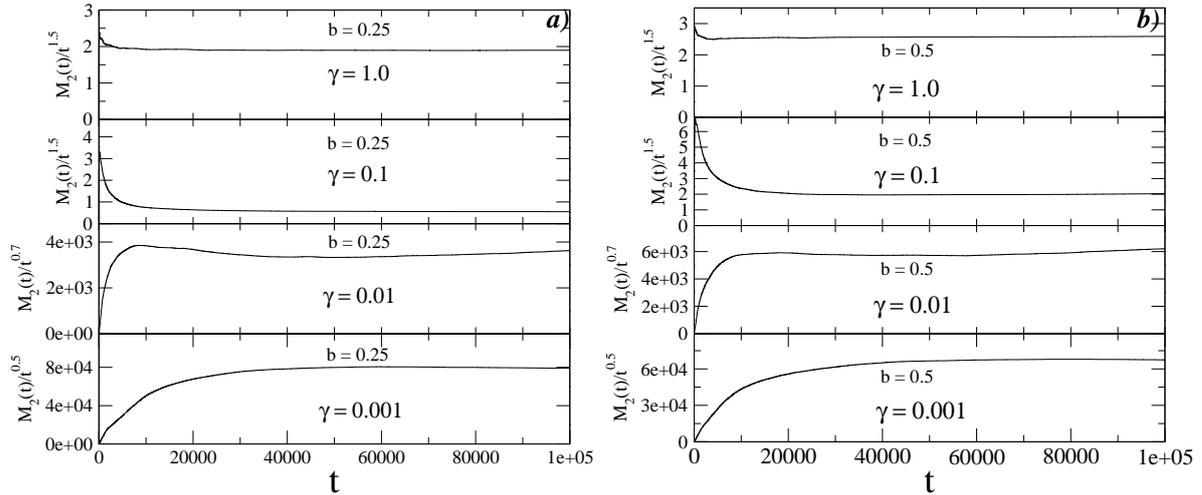


Fonte: Autor, 2012.

3.5.2 Análise do Transporte de Energia

Apresentaremos agora nossos resultados sobre a propagação de energia em uma cadeia harmônica com desordem correlacionada tipo Ornstein-Uhlenbeck. Introduzindo uma excitação do tipo impulso inicial no centro da cadeia $p_{n_0}(t = 0) = \delta_{n_0, N/2}$ e $q_n = 0$, e realizamos a solução numérica das equações de Hamilton. Esta solução foi obtida usando o método de Runge-Kutta de oitava ordem com passo de tempo $\Delta t = 0.005$ (ver com maiores detalhes as ref. [73, 74, 75]). Para garantir a precisão numérica fizemos a verificação da conservação de energia ao longo da integração. Na Fig. 3.6(a,b) plotamos o segundo momento de energia escalado $M_2/t^{\kappa(\gamma)}$ como uma função do tempo para $\gamma = 0.001, 0.01, 0.1, 1.0, b = 0.25, 0.5$ e $N = 250000$ massas. Podemos observar claramente que κ varia consideravelmente com γ . Para γ grande, obtemos exatamente os mesmos resultados como esperado para a cadeia harmônica com desordem descorrelacionada $\kappa \approx 1.5$ [62, 100, 108]. Contudo, quando o grau de correlação é aumentado, (isto é, $\gamma \rightarrow 0$) a energia se propaga de forma mais lenta com $\kappa < 1$. Este regime subdifusivo entra em contraste com a dinâmica encontrada em resultados passados [95, 100, 108, 107]. O principal ingrediente por trás dessa característica não intuitiva encontrada é o comportamento de escala do comprimento de localização no início da banda (ou seja em torno de $\omega = 0$). No estudo feito por Datta *et al* [62] foi demonstrado que a propagação da energia em cadeias harmônicas desordenadas está fortemente ligado ao número de modos não espalhados em torno da

Figura 3.6: (a,b) Segundo momento escalado $M_2/t^{\kappa(\gamma)}$ como uma função do tempo para $\gamma = 0.001, 0.01, 0.1, 1.0$; $b = 0.25, 0.5$ e $N = 250000$ massas. O expoente do segundo momento κ varia consideravelmente com γ . Para γ grande obtemos exatamente os mesmos resultados como esperado para uma cadeia harmônica com desordem descorrelacionada $\kappa \approx 1.5$ [62, 100, 108]. Contudo, quando o grau de correlação é aumentado, (isto é, $\gamma \rightarrow 0$) a energia propagada se torna mais lenta com $\kappa < 1.0$. Para compreender esta dinâmica lenta, mesmo na presença de correlação dentro da distribuição de desordem, nos podemos focar no comportamento de escala do comprimento de localização em torno da ressonância no início da banda ($\omega = 0$).

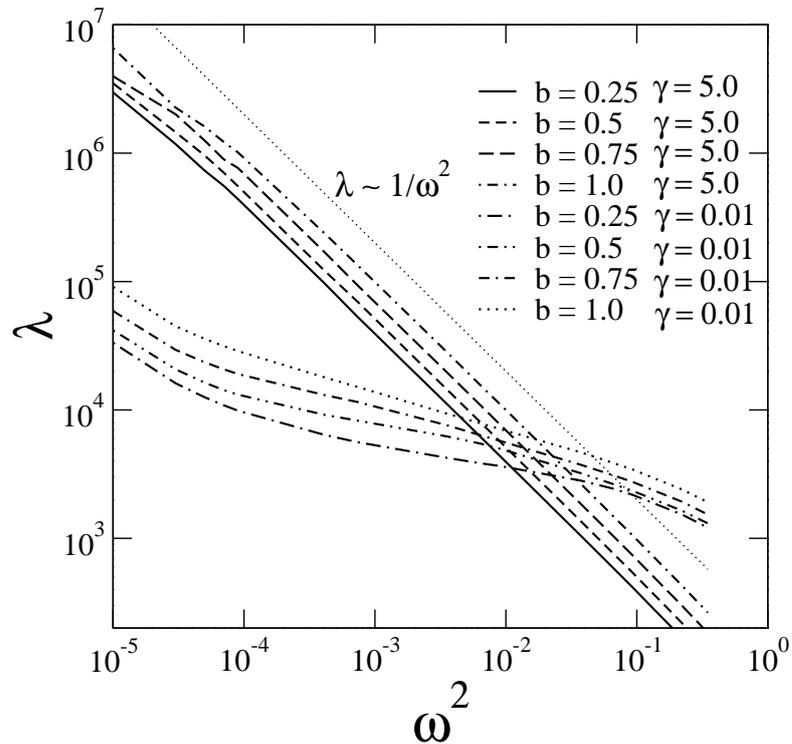


Fonte: Autor, 2012.

ressonância de frequência nula. O número de modos não espalhados tem dependência com o comportamento de escala do comprimento de localização no início da banda. Os autores em [62] demonstraram que em uma cadeia harmônica com distribuição de desordem descorrelacionada, a divergência padrão $\lambda \propto 1/\omega^2$ promove uma propagação superdifusiva da energia $M_2 \propto t^{1.5}$. Além disso, eles também demonstraram que na distribuição de desordem *dímer* de curto alcance, a divergência de λ com ω se torna mais rápida e promovendo então, uma propagação quasi-balística. Neste trabalho obtemos uma tendência oposta. Na Fig. 3.7 plotamos o comprimento de localização versus ω^2 no início da banda. Os cálculos foram realizados para $N = 10^8$ massas, $\gamma = 0.001, 5.0$ e $b = 0.25, 0.5, 0.75, 1.0$. Para $\gamma = 5.0$ recuperamos qualitativamente os resultados de uma cadeia harmônica aleatória descorrelacionada com $\lambda \propto \omega^{-2}$. Este resultado concorda com o comportamento superdifusivo do segundo momento de distribuição de energia $M_2 \propto t^{1.5}$ encontrado na Fig. 3.6 valores de γ grandes. Podemos perceber na Fig. 3.7, que em $\gamma = 0.01$ existe uma divergência mais lenta para o comprimento de localização em torno de $\omega = 0$. De fato, não é uma tarefa fácil estimar exatamente o comportamento de escala de λ com ω no caso fortemente correlacionado. Contudo, ele é claramente mais lento que $1/\omega^2$. Este resultado está de acordo com a dinâmica subdifusiva obtida na Fig. 3.6 para $\gamma \rightarrow 0$.

Neste capítulo estudamos numericamente as propriedades de transporte em cadeias clássicas com distribuição de desordem ternária correlacionada. Nossos resultados mostraram que a presença de correlações favorece o crescimento do comprimento de localização entretanto não é suficiente para promover o aparecimento de estados estendidos. Além

Figura 3.7: Aqui plotamos o comprimento de localização versus ω^2 no início da banda. Os cálculos foram realizados para $N = 10^8$ massas, $\gamma = 0.01, 5.0$ e $b = 0.25, 0.5, 0.75, 1.0$. Para $\gamma = 5.0$ recuperamos uma cadeia com desordem descorrelacionada tendo $\lambda \propto \omega^{-2}$. Este resultado está em bom acordo com o comportamento superdifusivo do segundo momento $M_2 \propto t^{1.5}$ encontrado em (a,b). Além disso, para $\gamma = 0.01$ obtemos uma lenta divergência para o comprimento de localização em torno $\omega = 0$, concordando assim, com a lenta dinâmica obtida em 3.6(a,b) para $\gamma \rightarrow 0$.



Fonte: Autor, 2012.

disso, o tipo de correlação considerada muda o comportamento de escala do comprimento de localização na região de frequências baixas. Esta mudança tem consequências drásticas sobre o fluxo de energia. Outro aspecto interessante é a natureza da transição de fase encontrada no limite de $b \gg 0$. Enquanto alguns autores na literatura [70, 71, 98] afirmaram ter encontrado indícios de uma transição de Anderson, nossos cálculos indicam que a cadeia ternária desordenada converge para uma cadeia pura neste limite.

4

CONCLUSÃO

Inicialmente estudamos os aspectos de localização de um sistema unidimensional com distribuição de desordem diagonal contendo função de correlação exponencial. O grau de correlação foi controlado pelo comprimento de correlação ζ . Para $\zeta = 0$, recuperamos o modelo de Anderson com uma distribuição de desordem diagonal não correlacionada. Para $0 < \zeta < \infty$, geramos uma distribuição de desordem com correlações de curto alcance. Ao considerar a propagação de uma função de onda em longos tempos, foi calculado o maior comprimento de localização dentro do pacote de ondas. Além disso, foi aplicada uma técnica de renormalização com base na equação de Dyson para os elementos de função de Green, com o intuito de estimar o comprimento de localização no centro da banda. Os resultados obtidos com os dois formalismos distintos estão de acordo com a precisão numérica utilizada. É importante observar que a estimativa de comprimentos de localização maiores se baseia na propagação do pacote de ondas em longos tempos, apesar de ter maior custo computacional, é uma boa técnica para estudar os aspectos do comprimento de localização em sistemas de alta dimensão. Dentro do contexto de modelos que tenham distribuição de desordem exponencialmente correlacionada, os resultados indicam que essas correlações não modificam drasticamente a divergência do comprimento de localização com a intensidade de desordem ($1/\Delta^2$). Além disso, usando uma análise de escala finita, previmos que o comprimento de localização, apesar ser grande, tem valor finito no limite termodinâmico. Nossos resultados estão qualitativamente em discrepância com estudos prévios sobre modelos com desordem diagonal e correlações exponenciais [90, 91]. Entretanto, uma comparação quantitativa de nossos resultados com os estudos feitos nas referências [90, 91] é complicada, pois, os supracitados autores utilizaram uma técnica perturbativa que exige desordem fraca, um limite pouco viável para nossa metodologia, visto que, as técnicas utilizadas neste trabalho se aplicam também à desordem forte. Adicionalmente, foi investigada a divergência do comprimento de localização com o comprimento de correlação. Para fraca desordem ($\Delta < 0.5$), o comprimento de localização é proporcional a ζ^3 . Nossos resultados foram limitados em fraca desordem para o limite de baixo comprimento de correlação $\zeta < 20$. Para analisar em detalhes a escala de $\zeta \gg 20$ no âmbito de fraca desordem, seria necessário considerar um sistema de tamanho N que é muito maior

do que nosso limite computacional ($N \gg 10^8$ sítios). Para forte desordem e pequenos comprimentos de correlação, o grau de localização aumenta também de maneira cúbica com ζ . No entanto, para uma escala intermediária do comprimento de correlação, devido a efeitos drásticos da desordem local, o comprimento de localização aparentemente satura em um valor limite menor que o tamanho do sistema. Para um grande comprimento de correlação, a desordem local deve decrescer subitamente, e o comprimento de localização retorna a aumentar. Nossos resultados mostram uma relação entre as propriedades locais da distribuição de desordem e os aspectos de localização. A presença de correlação na distribuição de desordem pode ser compreendida como uma suavização da desordem em um segmento finito da rede. Esta suavização pode ser diretamente medida monitorando a intensidade da desordem local.

Em um outro enfoque, fizemos um estudo sobre uma cadeia harmônica ternária, com uma distribuição de massas Ornstein-Uhlenbeck. A distribuição de massas ternária desordenada foi gerada a partir de um mapeamento do processo Ornstein-Uhlenbeck correlacionado em uma sequência três de valores diferentes. A probabilidade de encontrar cada valor é controlada por um parâmetro b fixo. O grau de correlação no processo Ornstein-Uhlenbeck é controlado pelo parâmetro γ . Para γ grande recuperamos uma sequência aleatória descorrelacionada e para $\gamma \rightarrow 0$ a sequência mostra correlações de longo alcance. Analisamos as propriedades de localização do modelo acima utilizando basicamente dois formalismos numéricos: solução numérica das equações de Hamilton e formalismo de matriz de transferência. Os nossos resultados indicam que a distribuição de massas ternária correlacionada considerada aqui, não promove o aparecimento de novos modos estendidos. Encontramos uma aparente transição de Anderson para $b > 4$, no entanto, usando cálculos de desordem local na distribuição desordenada de massas, demonstramos numericamente que este modelo de fato apresenta uma transição desordem-ordem para $b > 4$. Portanto, a quantidade de desordem deve desaparecer neste limite. Também calculamos o comportamento de escala do comprimento de localização com o grau de correlação γ . Usamos uma análise de Fourier que explica em detalhes o comportamento de escala encontrado ($\lambda \propto \gamma^{-0.5}$). Além disso, obtemos a dinâmica de energia para esta cadeia clássica. Nossos resultados indicam que este tipo de correlação promove um transporte de energia mais lento. Nós discutimos esta questão com base no número de modos não espalhados no início da banda. Esperamos com este trabalho, avançar sobre a linha de pesquisa presente nestes capítulos de estudo, vinculando as técnicas compreendidas aqui, a novos problemas.

De modo geral, observamos que em sistemas que tenham correlações exponenciais na distribuição de desordem, apresentam apenas estados localizados, de tal maneira que estas correlações locais tem pouco efeito sobre as propriedades eletrônicas em dimensão baixa. Já em sistemas harmônicos com desordem ternária correlacionada seguindo o processo OU, observamos a ausência de estados estendidos de frequência alta. E ainda que, as

transições metal-isolante encontradas previamente na literatura para este tipo de desordem correlacionada, segundo a presente análise não existem. Notamos também que o transporte de energia em sistemas harmônicos com desordem correlacionada OU pode inclusive ser mais lento, que a ausência de correlação. Através deste estudo, temos como perspectivas, complementar a análise da cadeia harmônica ternária através de técnicas de *DOS*. Utilizar o processo *OU* em uma cadeia eletrônica. E então, através das técnicas analíticas e numéricas conhecidas, estudar outros problemas nessa mesma linha de pesquisa.

REFERÊNCIAS

- [1] ZALLEN, R. *The Physics of Amorphous Solids*. New York: A Wiley-Interscience, 1983.
- [2] ANDERSON, P. W. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys. Rev.*, v. 109, N. 5, p. 1492 – 1505, 1958.
- [3] KRAMER, B.; MACKINNON, A. Localization: theory and experiment. *Rep. Prog. Phys.*, v. 56, p. 1469 – 1564, 1993.
- [4] ABRAHAMS, E.; ANDERSON, P. W.; LICCIARDELLO, D. G.; RAMAKRISHNAN, T. V. Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, v. 42, N. 10, p. 673 – 676, 1979.
- [5] MOTT, N. F.; DAVIS, E. A. *Electronic Processes in Non-Crystalline Materials*. Oxford: Clarendon Press, 1971. MOTT, N. F. *Metal-insulator Transitions*. London: Taylor e Francis, 1974.
- [6] ALTSHULER, B. L. *Coherent Effects in Disordered Conductors in Quantum Theory of Solids*. Moscow: MIR, 1982. p. 130. Cap. 3.
- [7] RAMAKRISHNAN, T. V.; LEE, P. A. Disordered electronic systems. *Phys. Mod. Phys.*, v. 57, N. 2, p. 287 – 337, 1985.
- [8] BELITZ, D.; KIRKPATRICK, T. R. The Anderson-Mott transition. *Rev. Mod. Phys.*, v. 66, p. 261 – 374, 1994.
- [9] EVANGELOU, S. N. Anderson Transition, Scaling, and Level Statistics in the Presence of Spin Orbit Coupling. *Phys. Rev. Lett.*, v. 75, N. 13, p. 2550–25530, 1995.
- [10] HIKAMI, S.; LARKIN, A. I.; NAGAOKA, Y. Spin-Orbit Interaction and Magnetoresistance in the Two Dimensional Random System. *Prog. Theor. Phys.*, v. 63, N. 2, p. 707 – 710, 1980.
- [11] FLORES, J. C. Transport in models with correlated diagonal and off-diagonal. *J. Phys.: Condens. Matter.*, v. 1, p. 8471 – 8479, 1989.
- [12] 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.
- [13] BELLANI, V.; et al. Experimental evidence of delocalization in correlated disorder superlattices. *Physica E*, v. 7, p. 823 – 826, 2000.

- [14] BOVIER, A. Perturbation Theory for the random dimer model. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 25, p. 1021 – 1029, 1992.
- [15] PHILLIPS, P. W.; WU, H. L. Localization and its Absence: A New Metallic State for Conducting Polymers. *Science*, v. 12, p. 1805 – 1812, 1991.
- [16] EVANGELOU, S. N.; KATSANOS, D. E. Super-diffusion in random chains with correlated. *Phys. Lett. A*, v. 164, p. 456 – 464, 1992.
- [17] 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.
- [18] HILKE, M. Local correlations in one-and two-dimensional disordered systems. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 27, p. 4773 – 4783, 1994.
- [19] LAVARDA, F. C. et al. Near resonant scattering from nonsymmetric dimers: Applications to substituted polyanilines. *Phys. Rev. Lett.*, v. 73, p. 1267 – 1270, 1994.
- [20] HEINRICHS, J. Localization, antilocalization, and delocalization in one-dimensional disordered lattices. *Phys. Rev. B*, v. 51, p. 5699 – 5710, 1995.
- [21] de MOURA, F. A. F.; LYRA, M. L. Delocalization in the 1d anderson model with long-range correlated disorder. *Phys. Rev. Lett.*, v. 81, N. 17, p. 3735 – 3738, 1998.
- [22] de MOURA, F. A. B. F.; LYRA, M. L. Correlation-induced metal-insulator transition in the one-dimensional anderson model. *Physica A*, v. 266, p. 465 – 470, 1999.
- [23] IZRAILEV, F. M.; KROKHIN, A. A. Localization and the Mobility Edge in One-Dimensional Potentials with Correlated Disorder. *Phys. Rev. Lett.*, v. 82, N. 20, p. 4062 – 4065, 1999.
- [24] IZRAILEV, F. M.; KROKHIN, A. A.; ULLOA, S. E. Mobility edge in aperiodic Kronig-Penney potentials with correlated disorder: Perturbative approach. *Phys. Rev. B*, v. 63, p. 41102-1 – 41102-4, 2001.
- [25] TARAS-SEMCHUK, D.; EFETOV, K. B. Influence of long-range disorder on electron motion in two dimensions. *Phys. Rev. B*, v. 64, p. 115301-1 – 115301-16, 2001.
- [26] WEN-SHENG, L.; CHEN, T.; XIONG, S. J. Kosterlitz–Thouless-type metal-insulator transition in two-dimensional layered media with long-range correlated disorder. *J. Phys.: Condens. Matter*, v. 11, p. 6883 – 6889, 1999.
- [27] KUHL, U.; IZRAILEV, F. M.; KROKHIN, A. A.; STÖCKMANN, H. J. Experimental observation of the mobility edge in a waveguide with correlated disorder. *Applied Phys. Lett.*, v. 77, p. 633 – 635, 2000.
- [28] CARPENA, P.; BERNAOLA-GALVÁN, P.; IVANOV, P. C.; STANLEY, H. E. Metal-insulator transition in chains with correlated disorder *Nature*, v. 418, p. 955 – 959, 2002.
- [29] ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. *Solid State Physics*. California: Saunders College, 1976.

- [30] MACKINNON, A.; KRAMER, B. One-Parameter Scaling of Localization Length and Conductance in Disordered Systems. *Phys. Rev. Lett.*, v. 47, N. 21, p. 1546 – 1549, 1981.
- [31] HOFSTETTER, E.; SCHREIBER, M. Statistical of the eigenvalue spectrum of the three-dimensional Anderson Hamiltonian. *Phys. Rev. B*, v. 48, N. 23, p. 16979 – 16985, 1993.
- [32] KRAVCHENCO, S. V.; SIMONIAN, D.; SARACHIK, M. P. Electric Field Scaling at a $B=0$ Metal-Insulator in Two Dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, v. 77, N. 24, p. 4938 – 4941, 1996.
- [33] SCHWEITZER, L.; ZHAREKESHEV, I. Kh. Scaling of level statistics and critical exponent of disordered two-dimensional symplectic systems. *J. Phys.: Condens. Matter*, v. 9, p. L441 – L445, 1997.
- [34] THOULESS, D. J. Electrons in disordered systems and the theory of localization. *Phys. Rep.*, v. 13C, N. 93, p. 93 – 142, 1974.
- [35] de MOURA, F. A. B. F. *Transição de Anderson em sistemas de baixa dimensionalidade com desordem correlacionada*. Tese (Doutorado) — UFPE, Recife, 2003.
- [36] WEGNER, F. Electrons in disordered systems. Scaling near the mobility edge *Zeits. Phys. B Condens. Matt.*, v. 25, N. 4, p. 327 – 337, 1976.
- [37] SLEVIN, K.; OHTSUKI, T. Corrections to Scaling at the Anderson Transition *Phys. Rev. Lett.*, v. 82, N. 2, p. 382 – 385, 1999.
- [38] SLEVIN, K.; MARKOS, P.; OHTSUKI, T. Reconciling Conductance Fluctuations and Scaling Theory of Localization. *Phys. Rev. Lett.*, v. 86, N. 16, p. 3594 – 3597, 2001.
- [39] de QUEIROZ, S. L. A. Reentrant behavior and universality in the Anderson transition. *Phys. Rev. B*, v. 63, p. 214202-1 – 214202-5, 2001.
- [40] SLEVIN, K.; OHTSUKI, T., KAWARABAYASHI, T. Topology Dependent Quantities at the Anderson Transition. *Phys. Rev. Lett.*, v. 84, N. 17, p. 3915 – 3918, 2000.
- [41] WAFFENSCHMIDT, S.; PFLEIDERER, C., LÖHNEYSEN, H. V. Critical Behavior of the Conductivity of Si:P at the Metal-Insulator Transition under Uniaxial Stress. *Phys. Rev. Lett.*, v. 83, p. 3005 – 3008, 1999.
- [42] BOGDANOVICH, S.; SARACHIK, M. P., BHATT, R. N. Scaling of the Conductivity with Temperature and Uniaxial stress in Si:B at Metal-Insulator Transition. *Phys. Rev. Lett.*, v. 82, p. 137 – 140, 1999.
- [43] FERRY, D.; GOODNICK, S. M.; BIRD, J. *Transport in Nanostructures*. California: Cambridge University Press, 2009. p. 183. Cap. 3.
- [44] MOTT, N. F.; TWOSE, W. D. The theory of impurity conduction. *Adv. Phys.*, v. 10, p. 107 – 163, 1961
- [45] ISHII, K. Localization of Eigenstates and Transport Phenomena in the One-Dimensional Disordered System. *Prog. Theor. Phys.*, N. 53, p. 77 – 138, 1973.

- [46] SIL, S.; KARMAKAR, S. N.; MOITRA, R. K. Extended electronic in disordered 1-d lattices: an example. *Phys. Lett. A*, v. 183, N. 4 p. 344 – 347, 1993.
- [47] SÁNCHEZ, A.; MACIÁ, E.; DOMÍNGUEZ-ADAME, F. Suppression of localization in Kronig-Penney models with correlated disorder. *Phys. Rev. B*, v. 49, N. 1, p. 147 – 157, 1994.
- [48] EVANGELOU, S. N.; ECONOMOU, E. N. Reflectionless modes in chains with large-size homogeneous impurities. *J. of Phys. A: Math. and Gen.*, v. 26, N. 12, p. 2803 – 2813, 1992.
- [49] GRINIASTY, M.; FISHMAN, S. Localization por pseudorandom potentials in one dimension. *Phys. Rev. Lett.*, v. 60, p. 1334 – 1337, 1988.
- [50] 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.
- [51] THOULESS, D. J. Localization by a with Slowly Varying Period. *Phys. Rev. Lett.*, v. 61, p. 2141 – 2143, 1988.
- [52] CRESSONI, J. C.; LYRA, M. L. Scaling behavior of the localization length in random dimer harmonic chains with thermal correlations. *Phys. Rev. B*, v. 53, p. 5067 – 5069, 1996.
- [53] PACZUSKI, M.; MASLOV, S.; BARK, P. Avalanche dynamics in evolution growth, and depinning models. *Phys. Rev. E*, v. 53, p. 414 – 443, 1996.
- [54] VARRIABLE, M. C. *Transição de localização em potenciais aleatórios com correlações de longo alcance*,. Tese (Doutorado) — UFRGS, Porto Alegre, (1994).
- [55] BUNDE, A.; HAVLIN, S.; KANTELHARDT, J. W.; RUSS, S. Localization in a highly correlated potencial landscape. *Physica A*, v. 86, p. 151 – 161, 2000.
- [56] DEAN, P. The Vibrational Properties of Disordered Systems: Numerical Studies. *Rev. of Mod. Phys.*, v. 44, N. 2, p. 127 – 168, 1972.
- [57] MATTIS, D. C. The Problem of Many-Body. *Singapore: World Scientific Publishing*, 1993. p. 112–124. Cap. 2. Ver: <http://books.google.com.br/books?hlD.+C.+Mattis>. Acesso em: 15 de abr. 2012, 20:20:30.
- [58] DYSON, F. J. The Dynamics of a Disordered Linear Chain. *Phys. Rev.*, v. 92, N. 6, p. 1331 – 1338, 1953.
- [59] DEAN, P. Vibrations of glass-like disordered chains. *Proc. Phys. Soc.*, v. 84, p. 727 – 744, 1964.
- [60] MATSUDA, H., ISHII, K. Localization of Normal Modes and Energy Transport in the Disordered Harmonic Chain. *Prog. Theor. Phys. Supp.*, N. 45, p. 56 – 86, 1970.
- [61] DATTA, P. K.; KUNDU, K. The absence of localization in one-dimensional disordered harmonic chains. *J. Phys.: Condens. Matter*, v. 6, p. 4465 – 4478, 1994.
- [62] DATTA, P. K.; KUNDU, K. Energy transport in one-dimensional harmonic chains. *Phys. Rev. B*, v. 51, N. 10, p. 6287 – 6295, 1995.

- [63] DOMÍNGUEZ-ADAME, F.; MACIÁ, E. Delocalized vibrations in classical random chains. *Phys. Rev. B*, v. 48, N. 9, p. 6054 – 6057, 1993.
- [64] LI, B.; ZHAO, H.; HU, B. Can Disordered a Finite Thermal Conductivity in 1D Lattices. *Phys. Rev. Lett*, v. 86, N. 1, p. 63 – 66, 2001.
- [65] DHAR, A. Heat Conduction in the Disordered Harmonic Chain Revisited. *Phys. Rev. Lett*, v. 86, N. 26, p. 5882 – 5882, 2001.
- [66] GARRIDO, P. L.; HURTADO, P. I.; NADROWSKI, B. Simple One-Dimensional Model of Heat Conduction which Obeys Fourier Law. *Phys. Rev. Lett*, v. 86, N. 24, p. 5486 – 5489, 2001.
- [67] SAVIN, A. V.; TSIRONIS, G. P.; ZOLITARYUK, A. V. Heat Conduction in One-Dimensional Systems with Hard-Point Interparticle Interactions. *Phys. Rev. Lett*, v. 88, N. 15, p. 154301-1 – 154301-4, 2002.
- [68] DHAR, A. Comment "Simple One-Dimensional Model of Heat Conduction which Obeys Fourier Law". *Phys. Rev. Lett*, v. 88, N. 24, p. 249401-1 – 249401-1, 2002. DHAR, A. Comment. *Phys. Rev. Lett*, v. 88, N. 24, p. 249402-1 – 249402-1, 2002.
- [69] NARAYAN, O.; RAMASWAMY, S. Anomalous Heat Conduction in One- Dimensional Momentum-Conserving Systems. *Phys. Rev. Lett.*, v. 89, N. 20, p. 200601-1 – 200601-3, 2002.
- [70] LAZO, E.; DIEZ, E. Conducting to non-conducting transition in dual transmission lines using a ternary model with long-range correlated disorder. *Physics Letters A*, v. 374, p. 3538 – 3545, 2010.
- [71] LAZO, E.; DIEZ, E. Conducting properties of classical transmission lines with Ornstein-Uhlenbeck type disorder. *Physics Letters A*, v. 375, p. 2122 – 2128, 2011.
- [72] ALLEN, P. B.; FELDMAN, J. L. Thermal conductivity of disordered harmonic solids. *Phys. Rev. B*, v. 48, p. 12581 – 12588, 1993.
- [73] HAIRER, E.; NØRSETT, S. P.; WANNER, G. *Solving ordinary differential equations. Nonstiff problems.*[Volume 1, 2nd ed.], Trondheim, Norway: Springer Series in Computational Mathematics, Springer, 2008.
- [74] BARATTO, G. *Solução de Equações Diferenciais Ordinárias Usando Métodos Numéricos.*[Versão 0.1], Santa Maria, RS, Brasil: Universidade Federal de Santa Maria – UFSM, DELC - Departamento de Eletrônica e Computação, ELC 1021 – Estudo de Casos em Engenharia Elétrica, 2007.
- [75] PRESS, W. H.; TEUKOLSKY, S. A.; VETTERLING, W. T.; FLANNERY, B. P. *Numerical Recipes in C. The Art Of Scientific Computing.*[2nd ed.], EUA: Cambridge University Press, 1992.
- [76] RÖMER, R. A; SCHULZ-BALDES, H. Weak-disorder expansion for localization lengths of quasi-1D systems. *Europhys. Lett.*, V. 68, N. 2 p. 247 – 253, 2004.
- [77] ABRAHAMS, E. Scaling at the metal–insulator transition in two dimensions. *Physica E*, v. 3, p. 69 – 78, 1998.

- [78] de MOURA, F. A. F.; COUTINHO-FILHO, M. D.; RAPOSO, E. P.; LYRA, M. L. Delocalization and spin-wave dynamics in ferromagnetic chains with long-range correlated random exchange. *Phys. Rev. B*, v. 66, p. 014418-1 – 014418-5, 2002.
- [79] de MOURA, F. A. F.; COUTINHO-FILHO, M. D.; RAPOSO, E. P.; LYRA, M. L. Delocalization in harmonic with long-range correlated random masses. *Phys. Rev. B*, v. 68, p. 012202-1 – 012202-4, 2003.
- [80] ZHANG, G., XIOGA, S. J. Localization-delocalization transition in one-dimensional system with long-range correlated diagonal disorder. *Eur. Phys. J. B*, v. 29, p. 491 – 495, 2002.
- [81] BELLANI, V.; et al. Experimental Evidence of Delocalized States in Random Dimer Superlattices. *Phys. Rev. Lett*, v. 82, p. 2159 – 2162, 1999.
- [82] LAZO, E.; ONELL, M. E. Existence of delocalized states in two interpenetrated 1-D diluted Anderson chains. *Phys. Rev. B*, v. 70, p. 075116-1 – 075116-5, 2004.
- [83] CHUBERTA, G.; WEIX, A.; FEHSKEA, H. Delocalisation transition in chains with correlated disorder. *Physica B*, v. 359–361, p. 801 – 803, 2004.
- [84] de MOURA, F. A. F.; COUTINHO-FILHO, M. D.; RAPOSO, E. P.; LYRA, M. L. Delocalization and ballistic dynamics in the two-dimensional Anderson model with long-range correlated disorder. *Europhys. Lett.*, v. 66, N. 4, p. 585 – 591, 2004.
- [85] SANTOS, I. F.; de MOURA, F. A. F.; LYRA, M. L.; COUTINHO-FILHO, M. D. Critical behavior of the two-dimensional Anderson model with long-range correlated disorder. *J. Phys.: Condens. Matter*, v. 19, N. 4, p. 476213-1 – 476213-9, 2007.
- [86] DOMÍNGUEZ-ADAME, MALYSHEV, V. A.; de MOURA, F. A. F.; LYRA, M. L. Bloch-Like Oscillations in a One-Dimensional Lattice with Long-Range Correlated Disorder. *Phys. Rev. Lett.*, v. 91, N. 19, p. 197402-1 – 197402-4, 2003.
- [87] ZHAO, Y.; DUAN, S.; ZHANG, W. Critical parameters for the one-dimensional systems with long-range correlated disorder. *Physica E*, v. 42, p. 1425 – 1430, 2010.
- [88] HERNÁNDEZ-HERREJÓN, J. C.; IZRAILEV, F. M.; TESSIERI, L. Electronic states and transport properties in the Kronig–Penney model with correlated compositional and structural disorder. *Physica E*, v. 42, p. 2203 – 2210, 2010.
- [89] ESMAILPOUR, A. Divergence of localization length in short-range correlated superlattices. *Physica E*, v. 43, p. 1334 – 1337, 2011.
- [90] IZRAILEV, F. M.; KROKHIN, A. A.; MAKAROV, N. M. Anomalous localization in low-dimensional systems with correlated disorder. *Physics Reports*, v. 512, p. 125 – 254, 2012.
- [91] KAYA, T. Hamiltonian map approach to 1D Anderson model. *Eur. Phys. J. B*, v. 67, p. 225 – 230, 2009.
- [92] FARCHIONI, R.; GROSSO, G.; PASTORI PARRAVICINI, G. Electronic structure in incommensurate potentials obtained using a numerically accurate renormalization scheme. *Phys. Rev. B*, v. 45, p. 683 – 689, 1992.

- [93] CHAO, K. A.; RIKLUND, R.; LIU, YOU-YAN. Renormalization-group results of electronic states in a one-dimensional system with incommensurate potentials. *Phys. Rev. B*, v. 32, N. 09. p. 5979 – 5986, 1985.
- [94] LAZO, E.; ONELL, M. E. Existence of delocalized states in two interpenetrated 1-D diluted Anderson chains. *Phys. Lett. A*, v. 283, p. 376 – 381, 2001.
- [95] ALBUQUERQUE, S. S.; de MOURA, F. A. F.; LYRA, M. L. Vibrational modes in harmonic chains with diluted disorder. *Physica A*, v. 357, p. 165 – 172, 2005.
- [96] de MOURA, F. A. F.; VIANA, L. P.; FRERY, A. C. Vibrational modes in aperiodic one-dimensional harmonic chains. *Phys. Rev. B*, v. 73, p. 212302-1 – 212302-4, 2006.
- [97] KAYA, T. Localization-delocalization transition in chains with long-range correlated disorder. *Eur. Phys. J. B*, v. 55, p. 49 – 56, 2007.
- [98] ESMAILPOUR, A.; CHERAGHCHI, H.; CARPENA, P.; TABAR, M. R. R. Metal-insulator transition in a ternary model with long range correlated disorder. *J. Stat. Mech.*, v. P09014, 1742 – 5468, 2007.
- [99] ZHAO, Y.; DUAN, S.; ZHANG, W. Critical parameters for the one-dimensional systems with long-range correlated disorder. *Physica E*, v. 42, p. 1425 – 1430, 2010.
- [100] de MOURA, F. A. F. Vibrational modes in a two-dimensional aperiodic harmonic lattice. *J. Phys.: Condens. Matter*, v. 22, p. 435401-1 – 435401-5, 2010.
- [101] MONTHUS, C.; GAREL, T. Anderson localization of phonons dimension $d = 1, 2, 3$: Finite-size properties of the inverse participation ratio of eigenstates. *Phys. Rev. B*, v. 81, p. 224208-1 – 224208-9, 2010.
- [102] YAN, Y.; ZHAO, H. Anomalous quantum heat transport in a one-dimensional harmonic chain with random couplings. *J. Phys.: Condens. Matter*, v. 24, p. 275401-1 – 275401-5, 2012.
- [103] KUNDU, A.; CHAUDHURI, A.; ROY, D.; DHAR, A.; LEBOWITZ, J. L.; SPOHN, H. Heat conduction and phonon localization in disordered harmonic crystals. *A Lett. J. Exp. The F. of Phys. EPL*, v. 90, p. 400001-1 – 400001-6, 2010.
- [104] NIKA, D. L.; BALANDIN, A. A. Two-dimensional phonon transport in graphene. *J. Phys.: Condens. Matter*, v. 24, p. 233203-1 – 233203-18, 2012.
- [105] ROY, D.; DHAR, A. Role of pinning potentials in heat transport through disordered harmonic chains. *Phys. Rev. E*, v. 78, p. 051112-1 – 051112-5, 2008.
- [106] DHAR, A. Heat Transport in low-dimensional systems. *Advances in Physics*, v. 19, N. 00, p. 1 – 78, 2008.
- [107] de MOURA, F. A. F.; DOMÍNGUEZ-ADAME, F. Extended modes and energy dynamics in two-dimensional lattices with correlated disorder. *Eur. Phys. J. B.*, v. 66, p. 165 – 169, 2008.
- [108] WAGNER, M.; ZAVT, G.; VAZQUEZ-MARQUEZ, J.; LÜTZE, A.; MOUGIOS, TH. Energy transport in disordered oscillatory systems. *Philo. Magaz. B*, v. 65, N. 2 p. 273 – 287, 1992.

-
- [109] ORNSTEIN, G. E; ORNSTEIN, L. S. On the Theory of the Brownian Motion. *Phys. Rev.*, v. 36, p. 823 – 840, 1930.
- [110] GILLESPIE, D. T. The mathematics of Brownian motion and Johnson noise. *Am. J. phys.*, v. 64, N. 3 p. 225 – 240, 1996.
- [111] NACIMENTO, E. M.; de MOURA, F. A. F. Suppressed transmission in aperiodically modulated multilayered dielectric structures. *Science Direct: Photonics and Nanostructures*, v. 7, p. 101 – 107, 2009.
- [112] MACIÁ, E. The role of aperiodic order in science and technolog. *Rep. Prog. Phys.*, v. 69, p. 397 – 441, 2006.