

TESE DE DOUTORADO

Transição de Anderson
em Sistemas de Baixa Dimensionalidade
com Desordem Correlacionada

FRANCISCO ANACLETO BARROS FIDELIS DE MOURA

UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

TESE DE DOUTORADO

Transição de Anderson
em Sistemas de Baixa Dimensionalidade
com Desordem Correlacionada

FRANCISCO ANACLETO BARROS FIDELIS DE MOURA

Tese apresentada no Departamento de Física
da Universidade Federal de Pernambuco como
parte dos créditos para a obtenção do
título de Doutor em Ciências.

Orientador: Prof. Maurício Domingues Coutinho-Filho
Co-orientador: Marcelo Leite Lyra

Recife - Pernambuco - Brasil

Março - 2003

Departamento de Física - UFPE

Dedico esta tese à meus pais

Severino e Maria



AGRADECIMENTOS

Neste espaço quero demonstrar minha eterna gratidão a várias pessoas. Para não esquecer ninguém teria que escrever diversas páginas, só com agradecimentos. No entanto irei agradecer às pessoas que merecem um destaque especial:

Ao meu orientador, Prof. Dr. Maurício Domingues Coutinho-Filho por sua total dedicação a minha tese de Doutorado. Agradeço pela orientação durante o trabalho e por sua paciência para com minhas idiossincrasias e minha maneira não linear de trabalho. Como professor quero agradecer pelas disciplinas nas quais fui seu aluno e pelos estímulos durante meu exame de qualificação. Não posso esquecer de agradecer pela ótima oportunidade que me foi dada para ir ao México durante o *III International Workshop on Disordered Systems*. Gostaria de agradecer ainda por sua amizade e gosto pela minha música.

Ao meu co-orientador Prof. Dr. Marcelo Lyra, da Universidade Federal de Alagoas. O Prof. Marcelo Lyra é o estrado de minha vida científica e só tenho a agradecer-lo pela co-orientação diária nestes quatro anos de trabalho. Como eu já disse várias vezes, Marcelo Lyra é um exemplo inigualável para as gerações futuras. Agradeço ainda pela grande amizade e pela eterna paciência com minhas dificuldades. Agradeço também a família de Marcelo (Alda, Mariana e Amanda), por ter dividido ele comigo durante quase dez anos.

Ao Prof. Dr. Ernesto Raposo, que foi um excelente colaborador. Sempre presente e paciente com minhas dificuldades. Gostaria também de agradecer pelas boas conversas sobre violão, cavaquinho afinado em ré ou mí, mpb, arranjos para violão de 7 cordas e chorinho.

Ao Prof. Dr. Antônio Murilo, por seus valorosos comentários.

Aos outros professores do DF-UFPE.

Ao Prof. Dr. André Maurício, do Departamento de Física de Sergipe. Agradeço por importantes sugestões durante a implementação dos métodos numéricos de matriz de transferência e funções de Green.

Ao Prof. Dr. Kalyan Kundu, por suas valorosas informações e todas as referências.

Ao Prof. Dr. Sergio L. A. de Queiroz por todas as referências e comentários.

A todos os funcionários do DF-UFPE, em especial Sr. Ivo, Sr. Humberto, Linet, Ana, Paula pela paciência e auxílio fundamentais ao meu trabalho.

A Leonardo Viana, a "pedra fundamental do LFTC". Sem Leonardo o LFTC não funciona. Agradeço pelo apoio computacional durante este trabalho, pela paciência com todas minhas dúvidas na época no exame de qualificação e pela estimada amizade.

A Alexandre Carvalho, que me ajudou muito durante o exame de qualificação tirando dúvidas e me estimulando. Agradeço pela amizade e pelas ótimas conversas ao longo do curso.

A Gustavo Camelo, um *expert* em física e computação com uma sensibilidade impressionante. Obrigado pelo total apoio computacional durante estes quatro anos e pelas ótimas conversas sobre música e violão.

A Rodrigo Lima, pelo apoio, estímulo e amizade desde o tempo de Graduação. Agradeço também pelas ótimas conversas.

A Renê Montenegro, pelas ótimas conversas no laboratório e pela amizade.

A Marcio Cabral e Alexandre Rosas que sempre foram super solícitos em todas as minhas perguntas e dificuldades computacionais. Agradeço também pelas boas conversas sobre música e política.

A Mario Henrique, um gênio não só da física, que sempre conversou comigo com

grande simplicidade.

A Carlos Alberto, por todo apoio durante o exame de qualificação e pelas ótimas conversas sobre música, guitarra baiana, Armandinho, chorinho....

A Cláudio Furtado, pelo apoio e estímulo durante o exame de qualificação.

A Paulo Kurica, pelo apoio e estímulo durante o início do doutorado.

A João Araújo, por sua amizade e estímulos a minha vida e meu trabalho. Agradeço também pelas ótimas rodas de choro em sua casa.

A todos os outros colegas de curso que ao longo do tempo tornaram-se amigos.

Ao CNPq, CAPES e FACEPE pelo apoio financeiro.

A meus padrinhos Manoel Vitor Tabosa e Margarida de Barros pelo apoio constante.

A meus pais, Dona Daia e Sr. Birino e minha irmã Ninha, pelo amor, entusiasmo constante e apoio incondicional a minha vida e meu trabalho.

A meus amigos da música, Beto, Dalva Torres, Bozó, Walter, Kesia, Carol, Sabata, Kelly Rosa, Marco César, Henrique Annes.

A Sr. Araújo e Dona Rute, por sua amizade, estímulos e ajuda indispensável à minha vida.

Quero agradecer a Deus, a quem dedico minha vida.

Resumo

Os autoestados de um elétron em um sistema com desordem não correlacionada são exponencialmente localizados para qualquer grau de desordem e dimensão menor ou igual a 2. A presença de desordem em outros sistemas físicos também induz à localização de excitações coletivas, tais como mágnon e modos vibracionais. Recentemente, uma série de versões do modelo de Anderson têm mostrado que a presença de correlações de longo alcance sobre a distribuição de desordem podem estabilizar estados deslocalizados. Neste trabalho analisaremos os efeitos de correlação de longo alcance sobre três sistemas físicos nos quais, a presença de desordem, induz à localização de quantidades físicas: 1) O modelo de Heisenberg ferromagnético unidimensional com desordem nos acoplamentos entre os spíns. 2) Cadeia Harmônica com massas aleatórias. 3) O modelo de Anderson unidimensional e bidimensional. Correlações de longo alcance foram introduzidas nesses sistemas construindo-se distribuições de desordem apropriadas com densidade espectral $S(k) \propto 1/k^\alpha$. Mostramos que o modelo de Heisenberg apresenta uma fase de ondas de spin livres na região de baixas energias, para $\alpha > 1$. Nesta fase metálica as ondas de spin exibem dinâmica balística na cadeia. Evidenciamos também que, neste mesmo regime, a cadeia harmônica apresenta uma fase de modos vibracionais estendidos na região de baixas frequências, causando transporte balístico de energia. Em ambos os modelos estudamos o comportamento super- e sub-difusivo para $\alpha < 1$. No modelo de Anderson 1d nós confirmamos a fase metálica para $\alpha > 2$ e mostramos que este valor crítico depende exponencialmente da força da desordem. Finalmente, nosso estudo do modelo de Anderson 2d com desordem diagonal revelou a presença de uma transição Metal-isolante em $\alpha = 2$ e, no caso de desordem nas amplitudes de hopping, uma transição tipo Kosterlitz-Thouless em $\alpha = 0$.

Abstract

The one-electron eigenstates in a system with an uncorrelated disorder distribution are exponentially localized for any degree of disorder for dimensions smaller than 2. The presence of disorder in other physical systems also induces the localization of collective excitations such as magnon and vibrational modes. Recently, a series of versions of the Anderson model showed that the presence of long-range correlations in the disorder distribution can stabilize delocalized states. In this work, we analyze the effects of long-range correlations on three physical systems in which disorder is known to induce localization of collective excitation modes: 1) Heisenberg ferromagnetic chain with disorder in the spin couplings. 2) Harmonic Chain with random masses. 3) The one-dimensional and bi-dimensional Anderson model. The long-range correlations were introduced in these systems constructing appropriated disorder distributions with spectral density $S(k) \propto 1/k^\alpha$. We show that the Heisenberg model presents a phase of free spin waves in the region of low energies, for $\alpha > 1$. In this metallic phase, the spin waves show a ballistic dynamics in the chain. We also evidence that harmonic chains present a phase of extended vibrational modes in the low frequencies region, causing ballistic transport of energy. In both models, we study the super and sub-diffusive behavior for $\alpha < 1$. In the 1d Anderson model we confirm the metallic phase for $\alpha > 2$ and show that this critical value depends exponentially on the degree of disorder. Finally, our study of the 2d Anderson model with diagonal disorder disclosed the presence of a Metal-insulator transition in $\alpha = 2$ and, for the case of disorder in the hopping amplitude, a Kosterlitz-Thouless metal-insulator transition in $\alpha = 0$.

Sumário

Folha de rosto	i
Dedicatória	ii
Agradecimentos	iii
Resumo	vi
Abstract	vii
1 Transição de Anderson em Sistemas Desordenados	4
1.1 Introdução	4
1.2 Transição de Anderson	7
1.2.1 Modelo de Anderson	8
1.2.2 Medidas do Grau de Localização	11
1.2.3 Teoria de Escala para a Transição de Anderson.	13
1.3 Modelo de Anderson com Correlações	19
1.3.1 Matriz de Transferência Unidimensional	21
1.3.2 Correlações de Longo Alcance no Modelo de Anderson	24
1.4 Mágns e Modos Vibracionais em Sistemas Desordenados	33
2 Natureza das Ondas de Spin em Ferromagnetos com desordem correlacionada	41

2.1	Introdução	41
2.2	Mágnons em Cadeias Ferromagnéticas Desordenadas	42
2.2.1	Método do Grupo Renormalização Usando o Operador de Green.	48
2.2.2	Densidade de Estados	54
2.2.3	Singularidades no Comprimento de Localização e Densidade de Estados	56
2.2.4	Mapeamento na Cadeia Eletrônica	59
2.3	Cadeia Ferromagnética com Desordem Correlacionada	60
2.4	Dinâmica de Ondas de Spin	65
3	Natureza dos Modos Vibracionais em Cadeias Harmônicas com Desordem Correlacionada	72
3.1	Introdução	72
3.2	Cadeia Harmônica com Desordem Não Correlacionada	73
3.3	Cadeia Harmônica com Desordem Correlacionada	76
3.4	Transporte de Energia	80
4	Modelo de Anderson com Correlações de Longo Alcance : Novos Resultados	89
4.1	Modelo de Anderson 1d com Correlações de Longo Alcance:Novos Resultados	89
4.1.1	Coeficiente de Transmissão	91
4.1.2	Dinâmica Eletrônica	98
4.2	Correlações de Longo Alcance no Modelo de Anderson 2d	100
4.2.1	Métodos Numéricos	102
4.2.2	Análise de Tamanho Finito	111

4.2.3	Correlações de Longo Alcance no Plano $x - y$	113
4.2.4	Dinâmica Eletrônica	118
4.3	Desordem Correlacionada nas Amplitudes de Hopping em Sistemas 2d: Transição Kosterlitz-Thouless	122
5	Sumário, Conclusões e Perspectivas	128
	Referências	135

Capítulo 1

Transição de Anderson em Sistemas Desordenados

1.1 Introdução

A maior parte dos estudos teóricos em sólidos se baseia nos fundamentos, métodos e conceitos da Mecânica Estatística e de Mecânica Quântica aplicados a modelos com invariância translacional. Em geral, as quasi-partículas ou excitações coletivas nesses modelos, como por exemplo elétrons, mágnons ou fônons, são descritas por funções de onda estendidas por todo sistema. Este tipo de modelagem é uma boa aproximação se o sólido em estudo for um cristal perfeito. Entretanto, uma grande parte dos sólidos encontrados na natureza, e mesmo os produzidos em laboratório, contém defeitos que destroem a invariância translacional e modificam as propriedades físicas previstas pelos modelos teóricos mencionados. Um exemplo disso é o modelo de bloch que prevê uma resistência nula para cristais perfeitos. Este

resultado é bastante diferente dos encontrados em cristais reais. Portanto, é importante incluir nos modelos teóricos a presença dos defeitos. O tratamento analítico de modelos com desordem, tanto na Mecânica Quântica quanto na Mecânica Estatística, é bastante complexo devido à presença de funções de variáveis aleatórias que caracterizam a desordem. No final década de cinquenta, Anderson [1, 2, 3, 4, 5] introduziu um modelo contendo os ingredientes básicos para se estudar as transições entre os estados metálicos e isolantes da matéria. O modelo de Anderson considera os elétrons movendo-se sobre a influência de um potencial aleatório. A interação Coulombiana entre os elétrons é desprezada. Mesmo com muitas simplificações, o modelo de Anderson é considerado até hoje a estratégia mais eficiente para se estudar os efeitos da desordem sobre as propriedades de transporte eletrônico. Efeitos adicionais, como o de correlação eletrônica [6, 7, 8, 9], são levados em conta em uma etapa mais aprofundada na descrição do sistema de interesse. Anderson mostrou que a natureza dos estados eletrônicos apresenta forte dependência com o grau de desordem existente [1]. Em geral, para desordem fraca as funções de onda eletrônicas são estendidas e o comportamento do sistema é tipicamente metálico [2, 3, 4, 5]. Para desordem forte os estados eletrônicos são exponencialmente localizados e o material torna-se isolante. Para um grau de desordem intermediário o sistema pode apresentar uma transição metal-isolante, dependendo da dimensão do sistema.

O modelo de Anderson prevê que todos os estados eletrônicos são exponencialmente localizados, para qualquer grau de desordem, em sistemas com dimensão menor ou igual que 2. O caso limite $d = 2$ pode apresentar uma transição metal isolante se o termo de acoplamento spin-órbita for considerado [10]. Entretanto, nos últimos dez anos, uma série de extensões do modelo de Anderson unidimensional têm sido propostas nas quais foram encontrados alguns estados estendidos

ressonantes [11, 12, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20] e também fases metálicas [21, 22, 23]. O novo ingrediente presente nestes modelos unidimensionais é a existência de correlações de curto e longo alcance na distribuição da desordem. A existência de uma fase metálica, mesmo em sistemas uni-dimensionais vem chamando a atenção da comunidade científica [24, 25] e motivando o estudo de sistemas com desordem correlacionada em outras áreas do conhecimento. Como exemplo podemos citar os estudos sobre a transmissão de micro-ondas em guias retangulares com espalhadores correlacionados [26] e, mais recentemente, a conjectura de que as correlações de longo alcance são responsáveis pelo transporte eletrônico no DNA [27].

Neste trabalho analisaremos os efeitos de correlações de longo alcance em vários sistemas físicos nos quais a presença de desordem induz à localização de quasi-partículas ou excitações coletivas. Nesta tese estudaremos basicamente três sistemas: 1) O modelo de Heisenberg unidimensional com estado fundamental ferromagnético e acoplamentos aleatórios entre os spins. Em consequência, as ondas de spin com energia não nula são localizadas devido à desordem nos acoplamentos. Vamos introduzir correlações de longo alcance nos acoplamentos e estudar numericamente como o grau de localização e a dinâmica das ondas de spin são afetados pelas correlações. 2) Cadeia Harmônica com massas aleatórias. Neste sistema os modos vibracionais com frequência não nula são também localizados devido à aleatoriedade das massas. A localização dos modos é um dos mecanismos fundamentais que controla o transporte de energia e, portanto, a condutividade térmica numa cadeia harmônica. Vamos introduzir correlações de longo alcance na distribuição das massas e estudar os efeitos dessas correlações sobre os modos vibracionais e o transporte de energia. 3) O modelo de Anderson 1d e 2d com correlações de longo alcance. Vamos apresentar um estudo complementar sobre a natureza dos estados

eletrônicos no modelo de Anderson unidimensional e também algumas generalizações do caso bidimensional.

Esta tese está organizada da seguinte forma: No restante deste capítulo vamos apresentar, a título de motivação para nosso trabalho, uma revisão teórica sobre as propriedades de transporte eletrônico no modelo de Anderson com desordem não correlacionada e com correlações. Apresentaremos também uma descrição sobre a relação entre a localização no modelo de Anderson e a localização de mágnons numa cadeia ferromagnética e modos vibracionais numa cadeia harmônica. No capítulo 2, vamos apresentar nosso estudo sobre a natureza das ondas de spin no modelo de Heisenberg com acoplamentos correlacionados. No capítulo 3, iremos apresentar os resultados para a cadeia Harmônica. No capítulo 4, vamos mostrar os resultados para o modelo de Anderson uni-dimensional e algumas generalizações para o caso 2d. Finalmente, no capítulo 5, apresentaremos nossas considerações finais e perspectivas.

1.2 Transição de Anderson

Os estados estacionários de um elétron em um cristal sem desordem, ou seja, numa rede com perfeita simetria translacional, podem ser obtidos a partir da equação de Schrödinger [28]:

$$H\psi = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r) \right] \psi = E\psi, \quad (1.1)$$

onde $U(r)$ é um potencial com periodicidade $U(r+R) = U(r)$ e R é um vetor de Bravais típico da rede. As ondas de bloch, soluções da Eq. (1.1) são estendidas por todo espaço, o elétron podendo mover-se para qualquer posição da rede transportando carga e energia. Anderson mostrou que a natureza da função de onda pode mudar

de estendida, como no caso das ondas de bloch, para localizada. Se uma função de onda é localizada suas amplitudes são não nulas somente em uma pequena região da rede.

Vamos discutir de forma qualitativa o papel da desordem na localização dos estados eletrônicos. Considere o modelo de bloch com potencial periódico nulo ($U(r) = 0$), ou seja, um elétron livre. Se introduzirmos uma única barreira de potencial, a função de onda será parcialmente transmitida e parcialmente refletida pela barreira. Se, ao invés de uma única barreira, introduzirmos duas barreiras de potencial, a função de onda sofrerá duas reflexões. As duas barreiras geram ondas refletidas e incidentes que podem sofrer interferências destrutivas ou construtivas a depender da diferença de fase existente. Estas interferências podem mudar bastante o padrão da função de onda. Se um potencial aleatório estiver presente, o que pode ser representado por barreiras de potencial em posições aleatórias ou com intensidades aleatórias, a função de onda sofrerá várias reflexões as quais não mantêm coerência de fase. Estas reflexões causam interferências destrutivas que induzem uma localização exponencial da função de onda. A função de onda se concentra em uma pequena região e tem valor desprezível em qualquer outra região do sólido. Neste regime, o sistema esta na fase isolante. No caso de ondas estendidas, onde o elétron é itinerante na cadeia, temos a fase metálica. O modelo de Anderson tridimensional apresenta uma transição metal-isolante para um valor crítico da "força" da desordem. Na próxima seção vamos apresentar uma breve revisão do modelo de Anderson.

1.2.1 Modelo de Anderson

O modelo de Anderson [1, 2, 3, 4, 5] considera apenas os elementos essenciais para se estudar a natureza dos estados eletrônicos em sistemas desordenados. O Hamiltoniano contém um termo cinético que descreve o *hopping* do elétron entre sítios vizinhos na presença de um potencial aleatório. A ideia geral é estudar diversos fenômenos em metais que aparecem devido a presença de desordem. Na representação de Wannier (*tight binding*), o Hamiltoniano de Anderson pode ser escrito como

$$H = \sum_i \epsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{i \neq j} t_{ij} |i\rangle\langle j|. \quad (1.2)$$

O estado $|i\rangle$ representa o orbital atômico centrado no sítio i . O conjunto de orbitais atômicos $|i\rangle$ são ortogonais entre si e representam uma base na qual podemos expandir os autoestados de H . O termo ϵ_i é a energia do sítio i , t_{ij} é o elemento de matriz do Hamiltoniano entre os sítios i e j . O elemento de matriz t_{ij} é chamado de integral de transferência entre os sítios i e j (outra denominação para t_{ij} é amplitude de *hopping*) e decresce muito rapidamente com a distância entre eles. A característica fundamental da Eq. (1.2) é que as energias ϵ_i são escolhidas aleatoriamente dentro de um intervalo de largura W . O parâmetro W é chamado de largura da desordem. Como discutiremos na seção 1.2.3, o modelo de Anderson tridimensional apresenta uma transição metal isolante em $W = W_c$, onde W_c é o valor crítico de W tal que o sistema torna-se metálico para $W < W_c$. A obtenção dos autoestados eletrônicos ψ do Hamiltoniano H envolve a solução da equação de Schroedinger com um termo aleatório. Utilizando a expansão dos autoestados nas bases de orbitais ($\psi = \sum_i c_i |i\rangle$) obtemos a equação de Schroedinger ($H\psi = E\psi$) para este Hamiltoniano:

$$E c_i = \epsilon_i c_i + \sum_j t_{ij} c_j. \quad (1.3)$$

Vamos analisar a Eq. (1.3) em dois casos limites, supondo que os potenciais estão distribuídos sobre uma rede regular e que só existem integrais de transferência, de mesma magnitudes, entre os z primeiros vizinhos. Logo, a Eq. (1.3) fica

$$E c_i = \epsilon_i c_i + t \sum_{j=1}^{j=z} c_{i+j}, \quad (1.4)$$

onde t é a integral de transferência entre qualquer par de sítios da rede, tomada como unidade de energia, inclusive para a largura da desordem W . O problema sem desordem (estados estendidos) pode ser resolvido como caso limite da Eq. (1.4). No caso cristalino, $W = 0$, as energias ϵ_i são todas iguais (podem ser escolhidas $\epsilon_i = 0$). Para uma cadeia linear a Eq. (1.4) se reduz a

$$E c_i = t (c_{i-1} + c_{i+1}). \quad (1.5)$$

Funções exponenciais complexas obedecem equações semelhantes a Eq. (1.5). Escolhendo $c_n = c_0 e^{ink}$, (1.5) é satisfeita se $E = 2t \cos(k)$. Isto corresponde a banda cristalina da teoria de Bloch ($-2t < E < +2t$). Portanto, no caso de cadeias unidimensionais ($z = 2$) a largura da banda cristalina é $B = 4t$. De forma geral, a largura da banda cristalina para uma rede de dimensão d com número de coordenação z é $B = 2z t$. Outro caso limite é $W \neq 0$ e $t = 0$. Com o acoplamento removido teríamos os orbitais atômicos como solução do problema (estados localizados).

O problema não trivial (t e W não nulos) foi estudado por Anderson através de teoria de perturbação. Ao longo dos anos, este problema tem sido estudado por uma grande variedade de técnicas analíticas e numéricas. Neste trabalho utilizaremos, em particular, métodos de funções de Green, matriz de transferência

e diagonalização direta. Através desses formalismos, que serão apresentados nas próximas seções e nos capítulos 2, 3 e 4 podemos calcular quantidades como a razão participação ξ e o comprimento de localização λ . Estas quantidades medem o grau de localização dos autoestados do Hamiltoniano H . Na próxima seção vamos apresentar uma descrição detalhada dessas quantidades.

1.2.2 Medidas do Grau de Localização

A existência de uma transição metal-isolante em um dado sistema é caracterizada pela mudança na natureza estendida-localizada dos autoestados do Hamiltoniano. Para se obter uma descrição quantitativa é crucial descrever o caráter estendido ou localizado de um certo estado por um único número. Uma forma simples de fazer esta descrição é resolver a equação de Schroedinger $H|\Psi_i\rangle = E_i|\Psi_i\rangle$ e investigar os autoestados $|\Psi_i\rangle$. Entretanto, a presença de desordem no hamiltoniano dificulta um tratamento analítico da equação de Schroedinger. Uma alternativa é utilizar a expansão dos autoestados $|\Psi_i\rangle$ nos orbitais atômicos ($|\Psi_i\rangle = \sum_{j=1}^N c_j^{(i)} |j\rangle$) e a equação de Schroedinger para escrever uma representação matricial do Hamiltoniano H . Podemos diagonalizar numericamente H na presente base e calcular um número que meça o grau de localização dos estados $|\Psi_i\rangle$. Este número é chamado de razão participação ξ [5]:

$$\xi = \frac{\sum_j |c_j|^2}{\sum_j |c_j|^4}. \quad (1.6)$$

Para compreender como a participação está relacionada com o grau de localização vamos analisar o caso de uma cadeia pura onde todos os autoestados são estendidos com c_j constante. Lembrando que o numerador de (1.6) é igual a 1 para manter a

normalização dos autoestados do Hamiltoniano e $\sum_j |c_j|^2 = 1$, temos que $|c_j| = \frac{1}{\sqrt{N}}$. Substituindo na expressão da participação obtemos:

$$\xi = \frac{1}{\sum_j |c_j|^4} = \frac{1}{\sum_j \frac{1}{N^2}} = N. \quad (1.7)$$

Portanto, ξ é o número de sítos onde as amplitudes c_j da função de onda são diferentes de zero. Para funções de onda localizadas em uma certa região do espaço ξ é finito no limite termodinâmico [5].

Outra medida de localização comumente utilizada é o comprimento de localização λ que é definido a partir do comportamento assintótico da função de onda [5, 4]. Em grandes distâncias a função de onda apresenta um decaimento exponencial do tipo

$$\Psi_i(r) = \psi(r) \exp(-r/\lambda), \quad (1.8)$$

onde 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 grupo de renormalização e matriz de transferência, que serão utilizados em nosso trabalho.

Devemos também enfatizar que o comportamento dinâmico de um sistema desordenado pode indicar a existência de estados estendidos no sistema. Considere o modelo de Anderson 1d como exemplo. Suponha que em $t = 0$, um elétron é colocado no sítio m de modo que $|c_m(t = 0)|^2 = 1$, $c_i(t = 0) = 0$ para $i \neq m$. Assumindo que é possível resolver a equação de Shroedinger dependente do tempo para este problema,

$$i\hbar \frac{dc_j(t)}{dt} = \epsilon_j c_j(t) + t_{j-1,j} c_{j-1}(t) + t_{j,j+1} c_{j+1}(t), \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad (1.9)$$

vamos examinar $c_m(t)$ para $t \rightarrow \infty$. Se a probabilidade de encontrar o elétron no sítio m após transcorrido um longo período de tempo for zero, isto é $c_m(t \rightarrow \infty) = 0$, 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 difundido por toda a rede e pode ser encontrado apenas nas vizinhanças de m (estado localizado). A quantidade $|c_m(t)|^2$ é chamada de probabilidade de retorno ao ponto de partida. Uma maneira direta de obter $|c_m(t)|^2$ é efetuar a integração numérica do conjunto de equações de movimento usando o método de Runge-Kutta [29].

1.2.3 Teoria de Escala para a Transição de Anderson.

Vamos apresentar a teoria de escala que foi originalmente utilizada por Abrahams, Anderson, Licciardello, e Ramakrishnan [2] para se obter a dependência da transição de Anderson com a dimensão. A hipótese básica desta teoria de escala é que uma única quantidade característica, a condutância generalizada g , controla a transição de estado estendido para localizado em $T = 0$. A teoria de escala foi aplicada na reformulação do modelo de Anderson feita por Thouless [30]. Na abordagem de Thouless as unidades básicas são agora caixas de volume l^d que contêm muitos sítios. O sólido é formado de várias caixas acopladas uma às outras. As energias características do modelo de Anderson W e t são mapeadas respectivamente no espaçamento médio entre os níveis ΔE e no deslocamento δE causado por mudanças nas condições de contorno. Um elegante argumento eurístico, baseado no princípio da incerteza, conecta δE com a condutividade σ no limite macroscópico. Através

do princípio da incerteza pode-se estabelecer:

$$\delta E = \hbar/t_D, \quad (1.10)$$

onde t_D é o tempo necessário para um pacote de onda eletrônico difundir até os contornos de uma caixa de lado L . Considerando que o elétron realiza um movimento Browniano dentro da caixa podemos escrever:

$$t_D = L^2/D, \quad (1.11)$$

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

$$\sigma = e^2 D n(E), \quad (1.12)$$

e combinando as Eqs. (1.10)-(1.12), temos

$$\delta E = \frac{\sigma \hbar}{e^2 (L^2 n(E))}. \quad (1.13)$$

A densidade de estados média pode ser escrita como função do espaçamento médio entre os níveis

$$n(E) = 1/(L^d \Delta E). \quad (1.14)$$

A razão $\Delta E/\delta E$ é agora adotada como sendo uma medida da força da desordem no sistema, análoga a razão W/t no modelo de Anderson tradicional. Estados estendidos são sensíveis a mudanças nas condições de contorno ($\delta E > \Delta E$), enquanto que estados localizados não o são ($\delta E < \Delta E$). O parâmetro de desordem, g^{-1} , é

definido por

$$\frac{1}{g(L)} \equiv \frac{\Delta E}{\delta E}. \quad (1.15)$$

Substituindo as Eq. (1.13) e (1.14) na Eq. (1.15) podemos observar a dependência de escala do parâmetro g :

$$g(L) = (\hbar/e^2) \sigma L^{d-2}. \quad (1.16)$$

A Eq. (1.16) se aplica apenas a estados estendidos no limite macroscópico, desde que a Eq. (1.13) só é verdadeira neste limite. O termo $L^{d-2} \sigma$ 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 examina 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 . A teoria de escala assume que, dado g_0 em uma escala de comprimento L_0 , podemos obter g numa escala maior $L = L_0 b$. Na nova escala $L_0 b$ a condutância g é completamente determinada pelo valor anterior g_0 e pelo fator de escala b . O comportamento de escala da função g pode ser obtido a partir da função $\beta(g)$:

$$\beta(g) = \frac{d \ln g(L)}{d \ln L}. \quad (1.17)$$

Para β positivo, g cresce com o crescimento de L ; para β negativo, g decresce com o crescimento de L . O comportamento qualitativo de $\beta(g)$ está representado na figura 1.1 para $d = 1, 2$ e 3 . A curva mostrada na figura 1.1 foi proposta por Abrahams *et al* [2]. O comportamento qualitativo da função $\beta(g)$ pode ser determinado a partir dos seus limites assintóticos ($g \rightarrow \infty$ e $g \rightarrow 0$). Para g grande

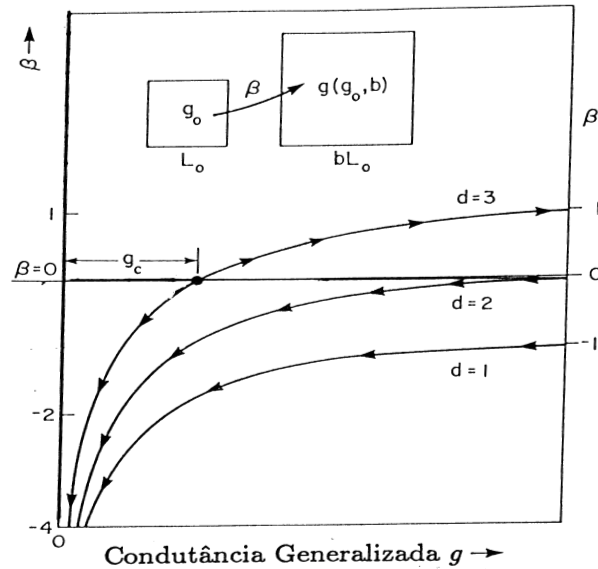


Figura 1.1: O comportamento qualitativo de $\beta(g)$ para $d = 1, 2$ e 3 na teoria de escala apresentada por Abrahams, Anderson, Licciardello e Ramakrishnam.

podemos usar a Eq. (1.16) e mostrar que

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \beta(g) = d - 2. \quad (1.18)$$

Logo, $\beta(\infty)$ é $+1$ em $d = 3$, 0 em $d = 2$ e -1 em $d = 1$, como mostrado na figura 1.1. Para g pequeno, ou seja, no limite de fraco 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 decaem exponencialmente

com L , de forma que $g(L) \propto e^{-\gamma L}$. Usando a Eq. (1.17), temos,

$$\lim_{g \rightarrow 0} \beta(g) = \ln g. \quad (1.19)$$

e portanto, $\beta(g)$ se aproxima de $-\infty$ quando g tende a zero, independente da dimensão. Assumindo que $\beta(g)$ tenha variação lenta e monotônica entre os limites $g \rightarrow \infty$ e $g \rightarrow 0$, nossa análise reproduz o comportamento qualitativo da figura 1.1. 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: Abaixo de 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. Este diagrama mostra claramente 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 perto desta transição em $3d$ também foi obtido a partir da teoria de escala [5]. Em analogia com as teorias de transições de fase de segunda ordem, a condutividade em corrente contínua σ_{DC} e o comprimento de localização λ , próximos da energia crítica de transição (*mobility edge*) tem um comportamento tipo lei de potência:

$$\begin{aligned} \sigma_{DC} &\propto (E - E_c)^s \\ \lambda &\propto (E - E_c)^{-\nu}. \end{aligned} \quad (1.20)$$

Os valores dos expoentes $s = \nu = 1$ foram numericamente obtidos usando uma

expansão em $d + \epsilon$ por Wegner [31] e também por técnicas de expansão diagramática por Vollhard e Wölfle [5]. Recentemente, considerações sistemáticas de variáveis irrelevantes e correções não-lineares na teoria de escala têm refinado os resultados da teoria de escala, obtendo o expoente crítico com maior precisão numérica $\nu \approx 1.57$ [32, 33, 34, 35].

Existem muitos experimentos na literatura [5] onde transições metal-Isolante com desordem vêm sendo observadas. Os exemplos mais proeminentes são os experimentos realizados em silício dopados com fósforo ou bário [5, 8, 9, 36, 37, 38]. Nestes experimentos a desordem é oriunda das posições aleatórias dos átomos dopantes. A força ou largura da desordem pode ser modificada variando a concentração de dopantes N_P ou através de um campo. Em ambos os casos a distância entre os dopantes muda e isto modifica a largura da desordem W . No caso experimental a energia crítica E_c do sistema é a concentração crítica dos dopantes N_P^c ou o valor do campo H_c para os quais a transição acontece. Durante muitos anos foi sugerido que a existência de dois tipos de materiais: semicondutores não compensados com $\nu = 0.5$ e semicondutores compensados e materiais amorfos com $\nu = 1$ [5, 8, 36]. Recentemente foi observado um expoente $\nu = 1$ para o silício dopado com fósforo não compensado ($Si : P$) [37] e $\nu = 1.6$ para silício dopado com Bário ($Si : B$) [38]. Portanto, não só a classificação do tipo de material como também o valor do expoente são questões que permanecem abertas. Em geral, a diferença no expoente vem sendo atribuída à presença de outros efeitos no experimento como por exemplo a interação Coulombiana entre os elétrons [37]. Em sólidos reais os elétrons correlacionam seus movimentos uns com os outros de forma a evitar configurações muito energéticas. Estas correlações são responsáveis pela transição de Mott [6, 9]. Propriedades de localização como um efeito de interferência vem sendo observados

em escala macroscópica através de experimentos de propagação de ondas eletromagnéticas ou ondas de água [5]. O padrão de ondas na água pode ser completamente espalhado ou restrito a uma pequena região da superfície dependendo se os espalhadores forem periódicos ou aleatórios. Devemos também mencionar o impacto que as ideias e conceitos acima descritos tiveram no desenvolvimento da teoria quântica de transporte em nanoestruturas [39].

1.3 Modelo de Anderson com Correlações

As previsões do modelo de Anderson, isto é, a existência de estados localizados em $1d$ e $2d$ para qualquer quantidade de desordem e a possibilidade da ocorrência de uma transição metal-isolante em $3d$ têm sido comprovadas tanto através de métodos analíticos como numéricos. A localização dos estados eletrônicos em cadeias uni-dimensionais foi demonstrada analiticamente por K. Ishii [40] e é uma consequência natural do teorema de Furstenberg sobre produtos de variáveis aleatórias não correlacionadas. Entretanto, uma série de trabalhos têm sido recentemente propostos nos quais a presença de desordem correlacionada e/ou sequências pseudo-aleatórias são responsáveis por um comportamento não usual no modelo de Anderson uni-dimensional. Em 1976, Theodorou e Cohen [41] mostraram que um modelo *tight-binding* unidimensional com as amplitudes de hopping aleatórias apresenta um energia crítica, no centro da banda, onde a função de onda é estendida. Entretanto, Fleishman and Licciardello [42] mostraram que neste caso a função de onda tem um comportamento assintótico do tipo $\psi_n \propto e^{-\lambda\sqrt{n}}$. Portanto, apesar do comprimento de localização definido como $1/l_c = -\lim_{n \rightarrow \infty} (\log \psi_n/n)$ ser di-

vergente, este estado deve ser considerado como localizado já que o coeficiente de transmissão vai a zero no limite termodinâmico [43].

Em meados da década de 80 vários trabalhos envolvendo modelos *tight-binding* unidimensionais com potenciais incomensuráveis revelaram a presença de uma transição metal-isolante. Por exemplo, um potencial do tipo $\epsilon_n = V \cos k|n|^\nu$ onde $k = 2\pi\alpha$ e α é um número irracional entre 0 e 1 apresenta vários aspectos interessantes [44, 45, 46]. Para $0 < \nu < 1$ 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 para $V > 2$. Para $\nu = 1$ os estados eletrônicos são localizados se $V > 2$ e estendidos se $V < 2$. Para $1 < \nu < 2$ todos os estados são localizados, mas o coeficiente de Lyapunov se aproxima de zero no centro da banda. Finalmente, para $\nu > 2$ 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. Em 1989, Flores [11] 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 (deslocalização) se forem introduzidas correlações entre as energias dos sítios e os termos de hopping. Este resultado é uma generalização da energia crítica de transmissão, que aparece no centro da banda, quando existe apenas desordem no hopping. Ainda em 1989 Dunlap *et al* [12] estudaram o Hamiltoniano de Anderson uni-dimensional para uma liga binária. Na liga binária, as energias dos sítios do sistema podem ser ϵ_A ou ϵ_B com probabilidades p e $1 - p$. Os sítios com energia ϵ_A sempre aparecem aos pares. Foi mostrado que se $|\epsilon_A - \epsilon_B| \leq 2t$ onde

t é a amplitude de hopping, o sistema apresenta uma energia ressonante onde a função de onda é deslocalizada. Em 1992, Bovier [14] estudou o modelo *tight binding* uni-dimensional com distribuição de desordem tipo dímeros. Usando teoria de perturbação foi analisado o comportamento da densidade de estados e do coeficiente de Lyapunov (inverso da largura da função de onda) obtendo resultados semelhantes. Uma série de trabalhos envolvendo correlações tipo dímeros surgiram desde então sempre com os mesmos resultados: Divergência do comprimento de localização em algumas energias críticas [15, 16, 17, 18, 19, 20]. A diferença fundamental entre o modelo de Anderson original e os modelos de dímeros é a existência de correlações nas energias dos sítios. Um formalismo numérico bastante eficiente que demonstra a existência das energias ressonantes em cadeias binárias [47] é o formalismo de matriz de transferência, o qual discutiremos em seguida.

1.3.1 Matriz de Transferência Unidimensional

Vamos considerar um modelo *tight binding* uni-dimensional cujo Hamiltoniano pode ser escrito como

$$H = \sum_j \epsilon_j |j\rangle\langle j| + \sum_j [t_{j,j+1} |j\rangle\langle j+1| + t_{j-1,j} |j\rangle\langle j-1|], \quad (1.21)$$

onde $|j\rangle$ é o orbital atômico centrado no sítio j e ϵ_j é o potencial aleatório. Usando a expansão $|\psi\rangle = \sum_l c_l |l\rangle$, a equação de Schroedinger pode ser escrita como

$$t_{l,l+1}c_{l+1} + t_{l-1,l}c_{l-1} = (E - \epsilon_l)c_l. \quad (1.22)$$

Esta última equação pode ser rescrita em uma forma matricial utilizando técnicas de matriz de transferência

$$\begin{pmatrix} c_{l+1} \\ c_l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{(E-\epsilon_l)}{t_{l,l+1}} & -\frac{t_{l-1,l}}{t_{l,l+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_l \\ c_{l-1} \end{pmatrix},$$

Ou, usando uma redefinição de variáveis, temos,

$$C_{l+1} = T_l C_l, \quad (1.23)$$

onde

$$C_{l+1} = \begin{pmatrix} c_{l+1} \\ c_l \end{pmatrix}$$

, e T_l é a matriz de transferência definida por

$$T_l = \begin{pmatrix} \frac{(E-\epsilon_l)}{t_{l,l+1}} & -\frac{t_{l-1,l}}{t_{l,l+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Logo, dado uma condição inicial $C_0 = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_0 \end{pmatrix}$ podemos obter as amplitudes da função de onda nos sítios $N-1$ e N através do produto de todas as matrizes de transferência:

$$C_N = \prod_l^N T_l \times C_0. \quad (1.24)$$

O expoente de Lyapunov γ , ou o inverso do comprimento de localização λ , dos autoestados é definido por

$$\gamma = \frac{1}{\lambda} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \frac{|C_N|}{|C_0|}. \quad (1.25)$$

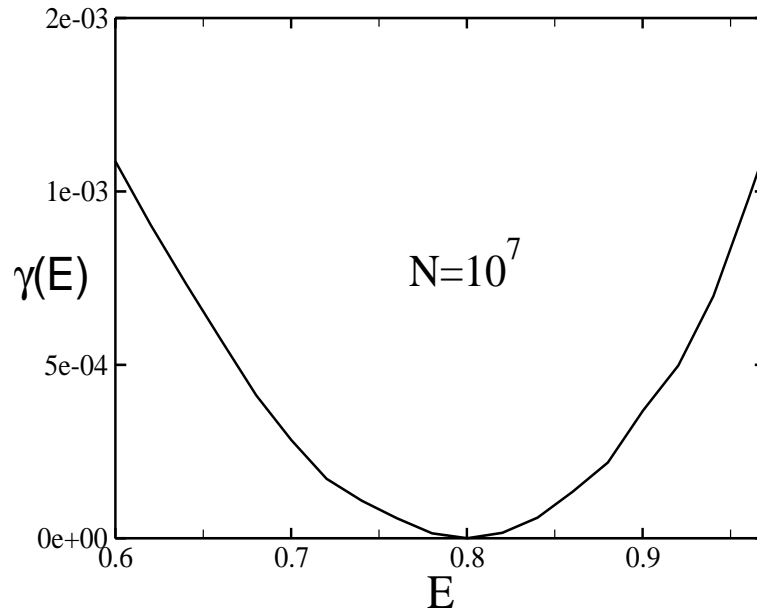


Figura 1.2: O expoente de Lyapunov γ versus E para o modelo de dímeros aleatórios. Os sítios podem ter energias $\epsilon_A = 0.8$ com probabilidade p e $\epsilon_B = 0$ com probabilidade $1 - p$. O sítio com energia ϵ_A sempre aparece em pares. Observe que o Lyapunov é zero em uma única energia ressonante $E = \epsilon_A = 0.8$.

Se no limite termodinâmico o expoente de Lyapunov é finito, a largura da função de onda é também finita e o estado é localizado. Se a função de onda é estendida o expoente de Lyapunov deve ir a zero no limite termodinâmico.

Vamos aplicar este formalismo no modelo de dímeros aleatórios para obter as energias ressonantes. Consideraremos uma cadeia de N sítios, com dois diferentes valores de energia: ϵ_A com probabilidade p e ϵ_B com probabilidade $1 - p$. O sítio com energia ϵ_A sempre aparece aos pares. Vamos considerar os termos de hopping $t_{i,i+1} = 1.0$ para $i = 1, \dots, N$. A figura. 1.2 mostra o expoente de Lyapunov γ para $N = 10^7$, $p = 0.5$, $\epsilon_A = 0.8$ e $\epsilon_B = 0.0$. O expoente de Lyapunov é finito em todas as energias exceto na energia $E = 0.8$. Este valor é o valor do dímero ϵ_A .

Vamos centrar nossa atenção neste modo de energia $E = \epsilon_A = 0.8$. Para os sítios do tipo A o termo $E - \epsilon_A = 0$ da matriz de transferência é zero. Para esta energia o produto de duas matrizes de transferência é igual a $-I$. Desta forma, os dímeros do tipo A não espalham a função de onda com energia $E = \epsilon_A$, apenas alteram sua fase. Devido ao comportamento do comprimento de localização perto da ressonância ($1/\gamma(E) \propto (E - E_c)^2$) este sistema apresenta \sqrt{N} estados não espalhados [12], onde N é o tamanho da cadeia. Wu e Phillips [15] mostraram que a distribuição de desordem na polianilina é descrita exatamente por este modelo de dímeros aleatórios. A existência destes estados estendidos ressonantes foram verificadas por Bellani *et al* [13] em experimentos com super-redes de dímeros aleatórios (GaAs-AlGaAs).

Recentemente, Cressoni e Lyra [48] estudaram cadeias recozidas onde a correlação entre as energias dos sítios é dada por $\langle \epsilon_i \epsilon_j \rangle \propto e^{-|i-j|/\xi}$. Foi mostrado que o comprimento de localização cresce com o comprimento de correlação ξ , mas todos os estados permanecem localizados dado a ausência de ressonâncias típicas.

1.3.2 Correlações de Longo Alcance no Modelo de Anderson

Como foi mostrado na secção anterior a presença de correlações de curto alcance na distribuição de desordem modifica as propriedades eletrônicas do sistema gerando algumas energias ressonantes. Efeitos relacionados com a presença de correlações de longo alcance em sistemas desordenados foram recentemente analisados. Sequências com correlações de longo alcance não apresentam um comprimento de escala característico [49] e sua densidade espectral é aproximadamente uma lei de potência da forma $S(k) = 1/k^\alpha$. A função $S(k)$ é obtida através da transformada de Fourier da função correlação de dois pontos $\langle \epsilon_i \epsilon_j \rangle$ e $k = 1/\lambda$, onde λ é o

comprimento de onda das ondulações na sequência. Em 1994, M. C. Varriale e A. Theumann [50] estudaram um gás de elétrons d -dimensional, em $T = 0$, na presença de potenciais aleatórios com correlações espaciais de longo alcance que decaem com a separação $|x|$ de acordo com uma lei do tipo $|x|^{-d-\sigma}$, onde σ é um parâmetro. Usando um formalismo Lagrangeano e teoria de perturbação foi demonstrado a existência de transição de Anderson em altas dimensões ($d > 4$). No início de 1998, Russ *at al* [51] estudaram um modelo de Anderson uni-dimensional onde as energias dos sítios apresentam uma função de correlação dada por $C(l) \propto \langle \epsilon_i \epsilon_{i+l} \rangle \propto l^{-\gamma}$ 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.

Ainda em 1998, Moura e Lyra [21] estudaram o modelo de Anderson uni-dimensional com correlações de longo alcance na diagonal do Hamiltoniano. Para introduzir as correlações de longo alcance, as energias dos sítios foram escolhidas como sendo um movimento Browniano fracionário. Esta sequência apresenta uma densidade espectral tipo lei de potência, $S(k) = 1/k^\alpha$, onde o parâmetro α controla o grau de correlação na sequência. Utilizando um formalismo de grupo de renormalização eles mostraram que este sistema pode exibir uma fase de estados estendidos no centro da banda se $\alpha > 2$. Pela primeira vez uma verdadeira transição metal isolante em sistemas uni-dimensionais desordenados foi encontrada. O mesmo grupo generalizou o estudo para cadeias com hopping aleatório mostrando que a presença de correlações de longo alcance nas integrais de transferência induz uma transição metal-isolante para $\alpha > 1$. Vamos utilizar o formalismo de matriz de transferência apresentado na secção 1.3.1 para reproduzir a transição metal-isolante encontrada nas Refs. [21, 22]. Como mencionado, a sequência de energias dos sítios foi consid-

erada como o traço de um movimento Browniano fracionário com uma densidade espectral $S(k) = 1/k^\alpha$. Vamos fazer uma breve revisão sobre estas sequências.

O conceito de movimento Browniano fracionário (MBF) foi introduzido por Mandelbrot [52, 53] como uma generalização de uma função aleatória $x(t)$. Vamos denotar por $B_H(t)$ a posição de uma partícula que descreve um movimento Browniano fracionário de expoente de Hurst H , após t passos. O incremento médio é igual a zero ($\langle B_H(t) - B_H(t_0) \rangle = 0$) e a variância nos incrementos $V(t - t_0)$ é dada por

$$V(t - t_0) = \langle [B_H(t) - B_H(t_0)]^2 \rangle = 2D\tau(|t - t_0|/\tau)^{2H}, \quad (1.26)$$

onde τ é o intervalo entre duas observações sucessivas da posição da partícula e D é a constante de difusão. Em uma função aleatória $X(t)$ o expoente de Hurst H é igual a $1/2$ enquanto que no MBF o expoente H é um número real dentro do intervalo $[0, 1]$. É importante lembrar que existem correlações de longo alcance entre os passos de um MBF enquanto que no caso de um movimento Browniano simples a correlação é nula. A função que mede a correlação entre os incrementos $(B_H(0) - B_H(-t))$ e $(B_H(t) - B_H(0))$ é proporcional a $\langle [B_H(0) - B_H(-t)][B_H(t) - B_H(0)] \rangle$. Por conveniência vamos escolher que $B_H(0) = 0$ e usar um sistema de unidades especial de modo que $\tau = 1$ e $2D\tau = 1$. Logo, a expressão para a função de correlação entre os incrementos no futuro ($B_H(t)$) e os incrementos no passado ($-B_H(-t)$) será:

$$C(t) = \left[\frac{\langle -B_H(-t)B_H(t) \rangle}{B_H(t)^2} \right] = (2^{2H-1} - 1). \quad (1.27)$$

Podemos notar que para $H = 1/2$ a função de correlação é zero para todo t . Este resultado já era esperado pois o movimento Browniano simples é recuperado em $H = 1/2$ e não existe correlações entre incrementos passados e futuros. Entretanto, para

H diferente de $1/2$ a função de correlação $C(t)$ é diferente de zero. Um movimento Browniano fracionário pode ser *persistente* ($H > 1/2$) ou *antipersistente* ($H < 1/2$). No caso *persistente*, se durante algum tempo no passado os incrementos forem positivos, ou seja a caminhada sofreu crescimento, os incrementos futuros tendem a ser positivos. Conseqüentemente, incrementos negativos no passado implicam em incrementos negativos no futuro. No caso *antipersistente*, o comportamento é contrário, incrementos negativos no passado implicam em incrementos positivos no futuro e vice-versa. Para gerar uma sequência temporal aleatória $x(t_i)$ que apresente densidade espectral tipo lei de potência ($S(w) = 1/w^\alpha$), Moura e Lyra [21] utilizaram um formalismo de transformada de Fourier discreta descrito nas Refs. [54, 55, 56, 57, 58, 59, 60]. Suponha que a posição da partícula seja observada nos instantes $t_i = i\tau$, e que tenha N valores num período $T = N\tau$. A densidade espectral tipo lei de potência é imposta pela equação abaixo [57]

$$x_i = x(t_i) = \sum_{k=1}^{N/2} (S(\omega_k)\Delta\omega)^{1/2} \cos(\omega_k t_i + \phi_k). \quad (1.28)$$

Esta equação acima é a decomposição de Fourier discreta da sequência x_i . As frequências ω_k são múltiplos da frequência fundamental $\Delta\omega = 2\pi/T$ ($\omega_k = k\Delta\omega$). As $N/2$ fases ϕ_k , uniformemente distribuídas no intervalo $[0, 2\pi]$, representam a única fonte de ruído da série. Escolhendo $\tau = 1$ e $S(w_k) = 1/w_k^\alpha$ a equação para os termos da série pode ser escrita como

$$x_i = \sum_{k=1}^{N/2} [k^{-\alpha} \left| \frac{2\pi}{N} \right|^{1-\alpha}]^{1/2} \cos\left(\frac{2\pi ik}{N} + \phi_k\right). \quad (1.29)$$

O parâmetro α controla as correlações desta sequência. Quando $\alpha = 0$ temos uma

sequência aleatória, sem correlações entre os eventos (ruído branco), quando $\alpha = 2$ recuperamos o movimento Browniano simples sem correlações entre os incrementos. Para introduzir correlações de longo alcance no modelo de Anderson, Moura e Lyra consideraram, em um primeiro estudo, as energias dos sítios ϵ_i como sendo os números x_i gerados pela Eq. (1.29). Entretanto, segundo a Eq. (1.29) a variância nos incrementos desta sequência cresce com o tamanho da série ($\langle (x_{i+L} - x_i)^2 \rangle \propto N^{2H}$). De forma a obter uma distribuição de energias com variância independente do tamanho ($\Delta\epsilon_i = \sqrt{\langle \epsilon_i^2 \rangle - \langle \epsilon_i \rangle^2} = C$) eles normalizaram a sequência definida pela Eq. (1.29) removendo a dependência das amplitudes de Fourier com o tamanho da cadeia N . Logo, a equação para gerar as energias dos sítios (ϵ_i) pode ser escrita como

$$\epsilon_i = \sum_{k=1}^{N/2} \frac{\mathcal{C}(\alpha)}{k^{-\alpha}} \cos\left(\frac{2\pi nk}{N} + \phi_k\right), \quad (1.30)$$

onde a constante $\mathcal{C}(\alpha)$, que agora multiplica os termos da série, será escolhida de modo que $\Delta\epsilon_i = 1$. Um gráfico de ϵ_i versus i é mostrado na figura 1.3(a) para $\alpha = 0, 0.5, 1.5$ e $N = 2 \times 10^5$. A densidade espectral ($S(k) \propto 1/k^\alpha$) para $\alpha = 0, 0.5, 1.5$ é mostrada na figura 1.3(b). $S(k)$ foi obtida a partir da transformada de Fourier numérica de ϵ_i [$S(k) = (\epsilon_k)^2$ onde ϵ_k são as componentes de Fourier]. Vamos aplicar o formalismo de matriz de transferência para calcular o expoente de Lyapunov para o modelo de Anderson com as energias dos sítios descritas pela Eq. (1.30). Vamos considerar todas as amplitudes de hopping iguais a um ($t = 1$). A figura 1.4(a) mostra o expoente de Lyapunov para cadeias de 50000, 100000 e 200000 sítios e parâmetro de correlação $\alpha = 2.5$. Observamos a existência de uma faixa de energias onde o expoente de Lyapunov é zero, isto é, existe uma fase de estados estendidos perto do centro da banda. Se a fase de estados estendidos for produto de efeitos

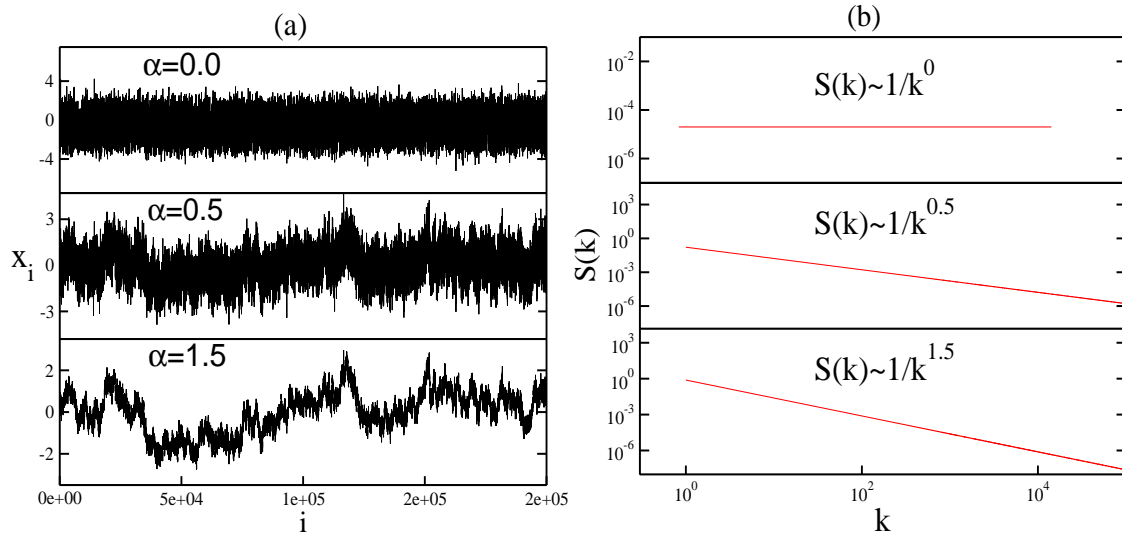


Figura 1.3: (a) Sequências geradas pela Eq. 1.30 com $N = 2 \times 10^5$ e parâmetro de correlação $\alpha = 0, 0.5, 1.5$. (b) Densidade espectral $S(k)$ obtida numericamente. Observe o comportamento $S(k) \propto 1/k^\alpha$ para $\alpha = 0, 0.5, 1.5$.

de tamanho finito, esta não deve permanecer no limite termodinâmico. Observe entretanto que os resultados para diferentes tamanhos apresentam uma superposição perfeita. O diagrama de fases deste modelo foi obtido por Moura e Lyra [21] através do cálculo de $\gamma(E)$ para vários valores de α e a consequente localização da posição das energias críticas. A figura 1.4(b) mostra uma reprodução do diagrama de fases no plano $(E/t, \alpha)$. Para qualquer sequência de energias com incrementos persistentes ($\alpha > 2$) existe uma faixa de energias onde $\gamma(E) = 0.0$ [21]. Uma generalização deste estudo para sistemas com amplitudes de hopping aleatória foi feita pelos mesmos autores [21] em meados de 1999. Eles consideraram as amplitudes de hopping como sendo os números obtidos a partir da Eq. (1.30) ou seja $t_{i,i+1} = \epsilon_i$. Para evitar algum $t_{i,i+1}$ nulo, o valor médio da sequência foi deslocado ($\langle t_{i,j} \rangle = 4.0$) mas a normalização da variância é mantida. Uma reprodução dos resultados para o caso

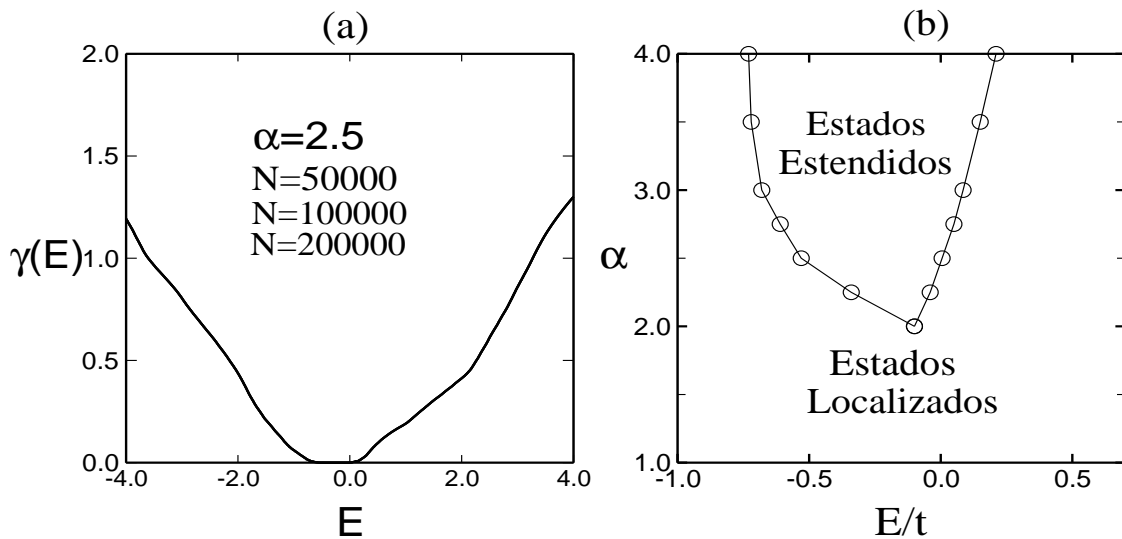


Figura 1.4: (a) Expoente de Lyapunov γ versus energia E para cadeias de 50000, 100000 e 200000 sítios e distribuição de desordem com parâmetro de correlação $\alpha = 2.5$. Observe a existência de uma faixa de energias onde o Expoente de Lyapunov é nulo. (b) Diagrama de fase no plano $(E/t, \alpha)$ para o modelo de Anderson com correlações de longo alcance nas energias dos sítios. Para $\alpha > 2$ existe uma fase de estados estendidos no centro da banda.

de hopping correlacionado é mostrado na figura 1.5(a) para $\alpha = 1.5$ e $N = 50000$, 100000 e 200000 sítios. Neste caso, o sistema apresenta uma transição metal isolante para $\alpha > 1$. O diagrama de fase para este modelo é apresentado na figura 1.5(b). As energias críticas agora são medidas em unidades da variância Δt da distribuição de hopping. Ainda em 1999 resultados semelhantes a estes foram obtidos pelo grupo de Izrailev e Krokhnin [23]. Utilizando uma teoria de perturbação de segunda ordem eles obtiveram uma transição metal isolante em sistemas com desordem correlacionada.

A presença de uma verdadeira fase metálica em sistemas com correlações de longo alcance na distribuição de desordem vem chamando a atenção da comunidade científica e motivando muitos estudos mesmo que em outras áreas da

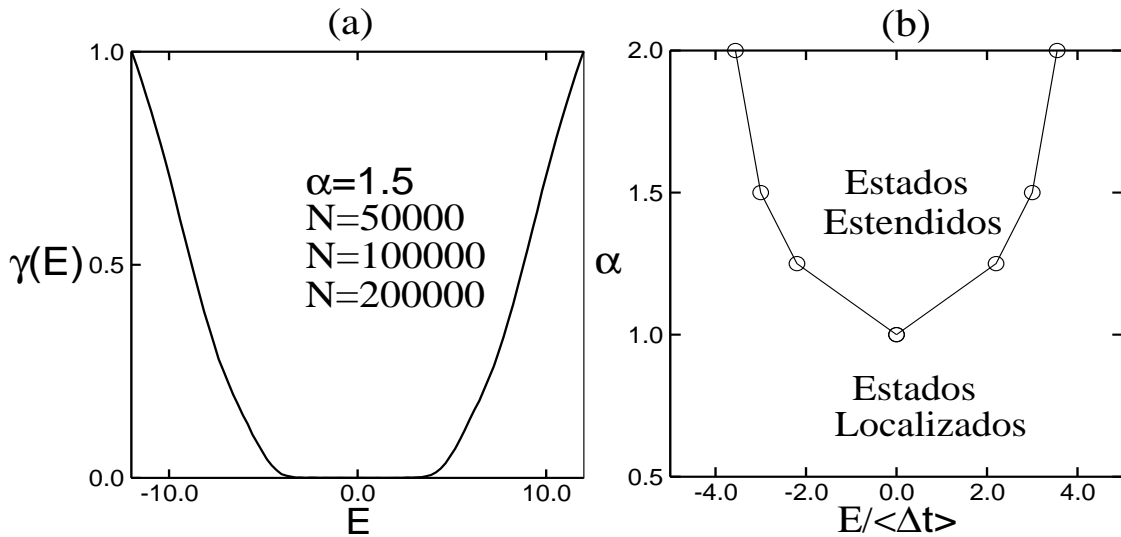


Figura 1.5: (a) Expoente de Lyapunov γ versus energia E para cadeias de 50000, 100000 e 200000 sítios e distribuição de hopping com com parâmetro de correlação $\alpha = 1.5$. (b) Diagrama de fase no plano $(E/t, \alpha)$ para o modelo de Anderson com correlações de longo alcance nas amplitudes de hopping. Para $\alpha > 1$ existe uma fase de estados estendidos no centro da banda.

física. Podemos citar a observação experimental de transmissão de micro-ondas em guias retangulares com espalhadores correlacionados [26]. O aparato experimental é mostrado na figura 1.6(a). Os espalhadores colocados no guia de ondas são parafusos micrométricos cujo as dimensões são correlacionadas. A figura 1.6(b) mostra o coeficiente de transmissão para os modos no guia de ondas. Eles encontraram uma faixa de frequências $[\omega_c^1, \omega_c^2]$ onde os modos são transmitidos. Uma generalização inicial do modelo proposto por Moura e Lyra [21] para sistemas bi-dimensionais foi apresentado por Shiong *et al* [25]. Eles estudaram um sistema quasi-unidimensional $N \times M$ onde N é o comprimento e M a largura, com correlações de longo alcance na direção maior (direção N). Eles mostraram que, no regime de fortes correlações, este sistema exhibe uma transição tipo Kosterlitz-Thouless, cujo comprimento de lo-

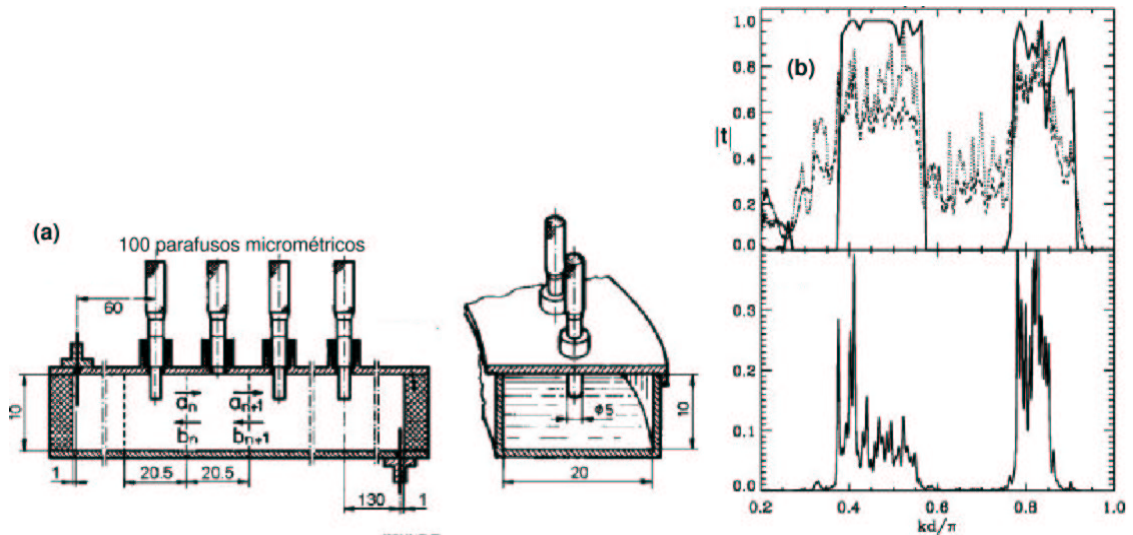


Figura 1.6: (a) Aparato experimental da ref. [26]. (b) Coeficiente de transmissão para os modos no guia de ondas com espalhadores correlacionados.

calização diverge com $\lambda \propto \exp(c/\sqrt{E - E_c})$. No capítulo 4 vamos reproduzir este resultado utilizando um formalismo de matriz de transferência bi-dimensional. Recentemente foi estudada uma versão do modelo de Anderson cuja distribuição de desordem apresenta uma forma particular de correlações de longo alcance [27]. Neste modelo uma distribuição binária de energias dos sítios ϵ_1 e ϵ_2 é gerada através do “método de transformada de Fourier modificada” [61]. Utilizando um formalismo de matriz de transferência eles mostraram que este sistema também apresenta uma transição metal isolante no limite de correlações fortes. Neste trabalho foi conjecturado que este tipo de transição é responsável pelo transporte eletrônico na cadeia do DNA. No final de 2002 a resistividade ρ do modelo de Anderson com correlações de longo alcance nas energias dos sítios proposto na Ref. [21], foi calculada através de um formalismo de matriz de transferência modificado [62]. Eles encontraram que para $\alpha > 2$ existe uma faixa de energias $[E_c^1, E_c^2]$ no centro da banda onde a resis-

tividade apresenta um decaimento $\rho \propto N^{-\nu}$ onde N e o tamanho do sistema e ν e um expoente muito proximo de 1 ($\nu \approx 0.95$). Eles concluíram que os estados estendidos encontrados por Moura e Lyra [21] representam estados com resistencia nula no limite termodinamico. No capıtulo 4 vamos calcular o coeficiente de transmissao e estudar a dinamica eletronica no modelo de Anderson com correlaoes de longo alcance estudado nas Ref. [21, 22]. Apresentaremos tambem algumas generalizaoes deste problema para sistemas bi-dimensionais.

1.4 Magnons e Modos Vibracionais em Sistemas Desordenados

Os resultados da teoria de escala para o modelo de Anderson unidimensional com desordem na diagonal nao correlacionada preve que todos os estados sao exponencialmente localizados. Como apresentamos na seccao 1.3.2, a generalizaao proposta por Moura e Lyra [21] mostra uma transiao metal-isolante, mesmo em sistemas 1d, induzida pela presenca de correlaoes na distribuiao de desordem. Este resultado motiva o estudo da propagaao de excitaoes tipo magnon, fonos, luz ou ondas acusticas em meios com desordem correlacionada. Em uma dimensao existem varias analogias entre a propagaao de ondas e problemas de transporte eletronico em sistemas desordenados. Por exemplo, a equaao de movimento para um magnon no modelo de Heisenberg ferromagnetico pode ser exatamente mapeada no problema de um eletron em um Hamiltoniano *tight-binding* onde os termos de hopping sao aleatorios e distribuidos sempre em pares [63]. Este modelo eletronico com hopping aleatorio dimerizado e uma generalizaao do conhecido modelo de dimeros

aleatorio proposto por Dunlap [12] no final da decada de 80.

Em 1929 bloch introduziu o conceito de onda de spin (magnon) estudando uma cadeia de N spins acoplados com seus primeiros vizinhos por uma energia J . A energia de interaao entre dois spin \vec{S}_i e \vec{S}_j e dada por $h = -J_{i,j}\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$. O hamiltoniano deste sistema pode ser escrito como [63, 64]:

$$H = - \sum_{n=-N/2}^{N/2} J_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j. \quad (1.31)$$

Este e o modelo de Heisenberg que mostrou que a energia do campo molecular de Weiss resulta da interaao (*exchange*) entre os spins. Para uma distribuiao de acoplamentos $J_{i,j} > 0$ o estado fundamental e ferromagnetico. bloch verificou que em baixas temperaturas, o estado com um desvio em um unico spin sao as excitaoes de mais baixa energia do sistema. Estas excitaoes sao chamadas de ondas de spin e sao quantizadas em energia : magnons. Se os acoplamentos sao constantes ($J_{i,j} = constante$) as ondas de spin propagam-se por toda a cadeia, semelhante as funoes de bloch para problemas eletronicos. Entretanto em solidos reais a presenca de defeitos induz uma aleatoriedade nos acoplamentos entre os spins. A propagaao de ondas de spin no modelo de Heisenberg ferromagnetico com desordem nos acoplamentos entre os spins tem sido objeto de estudo ha muitos anos [63, 64, 65, 66]. No caso de desordem nao correlacionada os acoplamentos J sao aleatoriamente escolhidos num intervalo (J_{min}, J_{max}) segundo uma distribuiao de probabilidade $P(J)$. E bem estabelecido que todos os modos com energia nao nula ($E > 0$) sao localizados devido a desordem, enquanto que a largura λ do modo com ($E = 0$) apresenta uma divergencia [63, 66]. A largura λ das ondas de spin e equivalente ao comprimento de localizaao da funao de onda eletronica definido na

secao 1.2.2. O comportamento funcional de λ , bem como da densidade de estados (DOS) perto de $E = 0$ depende do tipo de distribuiao de probabilidade $P(J)$ [63]. Por exemplo, se $P(J)$ e escolhida de tal forma que os dois primeiros momentos $\langle 1/J \rangle$ e $\langle 1/J^2 \rangle$ sao finitos, a largura das ondas de spın λ diverge proporcional a $1/E$ e a densidade de estados e proporcional a $1/\sqrt{E}$ [63]. A dinamica das ondas de spin nesta mesma cadeia foi estudada por Evangelou [66] a partir do calculo numerico do deslocamento medio quadratico no tempo $\sigma^2(t)$. Se a distribuiao de probabilidade $P(J)$ e escolhida de tal forma que ao menos o primeiro momento $\langle 1/J \rangle$ e finito, o sistema apresenta uma dinamica superdifusiva ($\sigma^2(t) \propto t^{3/2}$) no limite de tempos longos ($t \propto \infty$).

A equaao de Schrodinger ($H|\phi \rangle = E|\phi \rangle$) para as excitaoes de ondas de spın nesta cadeia pode ser exatamente mapeada na equaao de Schrodinger para um problema eletronico com desordem nas integrais de hopping. Este mapeamento foi apresentado por Ziman [63] e sera apresentado com detalhes no capıtulo 2. O mapeamento exato deste problema numa cadeia eletronica permite o estudo das propriedades de localizaao das ondas de spın utilizando tecnicas que foram desenvolvidas para sistemas eletronicos, como matriz de transferencia e tecnicas de funoes de Green e tambem o calculo da funao participaao. Efeitos de correlaoes nos acoplamentos entre os spıns foram recentemente analisados por Lyra *et al* [68]. Utilizando um procedimento de diagonalizaao direta do Hamiltoniano eles calcularam a funao participaao para este sistema. As correlaoes foram introduzidas utilizando o mesmo formalismo apresentado na secao 1.3.2. Eles encontraram uma fase de ondas de spin nao espalhadas para sequencias de acoplamentos com parametro de correlaao $\alpha > 1$. Entretanto, nao foi possıvel descrever completamente a transiao e encontrar as energias crıticas pois este estudo foi restrito a sistema pequenos

$N < 2000$ devido a dificuldade em diagonalizar matrizes grandes. A presenca de correlaces de longo alcance em sistemas magnticos  um tpico de pesquisa com grande interesse atual [67]. No captulo 2 vamos apresentar um estudo detalhado sobre a natureza e a dinmica das ondas de spn no modelo de Heisenberg unidimensional com correlaco de longo alcance nos acoplamentos J . Vamos aplicar um procedimento de renormalizaco que permite calcular o comprimento de localizaco dos modos para sistemas grandes e estimar com boa preciso numrica as energias crticas. Atravs de um procedimento de integraco numrica e diagonalizaco exata calcularemos o desvio mdio quadrtico $\sigma^2(t)$ e estudaremos como a dinmica  afetada pelas correlaces de longo alcance.

A equaco para os modos vibracionais em uma cadeia harmnica desordenada tambm tem um mapeamento exato em problemas eletrnicos [69]. A relevncia da pesquisa, tanto analtica quanto computacional, de modos vibracionais em cadeias com desordem e/ou anarmonicidade tem origem na possibilidade de se entender os modos inelsticos que aparecem em vidros ou outras substncias com arranjos atmicos aleatrios [70]. O estudo terico de modos vibracionais em cadeias harmnicas desordenadas tem sido objeto de estudo durante vrias dcadas [71, 72, 73, 74, 75, 76, 77, 78, 79, 80, 81, 82, 83, 84]. Por outro lado os efeitos da presenca de anarmonicidade sobre os modos normais foram extensivamente estudados na literatura desde Fermi, Pasta e Ulam em 1955 [85] at os famosos trabalhos de Toda [86]. Toda introduziu um termo exponencial na forca de interaco entre os tomos. Esta rede no linear de Toda obedece equaces de movimento que so exatamente solveis em termos de funces elpticas.

Em nosso trabalho vamos concentrar nossa atenco numa cadeia com N tomos que interagem atravs de uma forca harmnica, ou seja, uma forca propor-

cional a distancia entre os atomos $f = \beta_{i,j}(u_j - u_i)$, onde u_j e u_i representam as posicoes de dois atomos consecutivos. A desordem neste modelo pode ser colocada de duas formas: atraves de uma distribuicao de massas aleatorias e constantes de forca iguais ($\beta_{i,j} = 1$) ou massas iguais $m_i = m$ e constantes de forca aleatorias [70]. A equacao de movimento para as amplitudes u_n pode ser escrita como

$$m_n \frac{d^2 u_n}{dt^2} = \beta_{n-1}(u_n - u_{n-1}) + \beta_n(u_{n+1} - u_n). \quad (1.32)$$

Assumindo uma dependencia temporal com uma unica frequencia [$u_n = u_n \exp(-i\omega t)$] podemos obter uma equacao estacionaria para os modos:

$$(\beta_{n-1} + \beta_n - \omega^2 m_n)u_n = \beta_{n-1}u_{n-1} + \beta_n u_{n+1} \quad . \quad (1.33)$$

Esta equacao pode ser mapeada na equacao de Schrodinger para um problema eletronico semelhante a Eq. (1.22). Este mapeamento foi apresentado por Dean [69] e pode ser facilmente reproduzido definindo-se uma nova variavel $c_n = m_n^{1/2} u_n$. Substituindo-a na equacao acima teremos

$$(\beta_{n-1} + \beta_n - \omega^2 m_n)(c_n/m_n^{1/2}) = \beta_{n-1}(c_{n-1}/m_{n-1}^{1/2}) + \beta_n(c_{n+1}/m_{n+1}^{1/2}) \quad . \quad (1.34)$$

Multiplicando (1.34) por $1/m_n^{1/2}$ e definindo $t_{n-1,n} = -\beta_{n-1}/\sqrt{m_{n-1}m_n}$, $t_{n,n+1} = -\beta_n/\sqrt{m_n m_{n+1}}$, $\epsilon_n = (\beta_{n-1} + \beta_n)/m_n$ e $E = \omega^2$ temos exatamente a Eq. (1.22):

$$t_{n,n+1}c_{n+1} + t_{n-1,n}c_{n-1} = (E - \epsilon_n)c_n. \quad (1.35)$$

Utilizando o formalismo de matriz de transferencia, Matsuda e Ishii mostraram que os modos vibracionais da cadeia harmonica com frequencia nao nula ($\omega > 0$) sao

localizados [73] e proximo de $\omega = 0$ existem \sqrt{N} estados estendidos pois o comprimento de localizaao λ dos modos diverge como $\lambda \propto 1/\omega^2$. Eles tambem mostraram que a condutividade termica nesta cadeia e fortemente dependente destes modos vibracionais no espalhados. O efeito de correlaoes em cadeias harmonicas tem sido objeto de grande interesse no meio academico. Em 1994 Kundu e Datta mostraram que correlaoes na distribuiao de massas produz um novo conjunto de modos vibracionais estendidos [74]. No modelo de Kundu e Datta as massas podem assumir valores m_0 e m_1 com probabilidade p e $1 - p$. A correlaao e introduzida atraves do tipo de distribuiao das massas m_1 que podem aparecer em duplas (dimeros) ou segmentos de tres massas (trimeros). Eles mostraram que, no caso de dimeros, aparecem \sqrt{N} modos no espalhados em torno da frequencia $\omega_c = m_1$ e no caso de trimeros aparecem $N^{3/4}$ novos estados. Se $m_1 = 0$ eles mostraram que a cadeia harmonica apresenta $N^{5/6}$ modos estendidos em torno de $\omega_c = 0$. Modos no espalhados foram tambem encontrados em cadeias harmonicas com correlaoes tipo dimeros na distribuiao de constantes de forca. [75]. Outras formas de correlaoes em cadeias harmonicas foram tambem analisadas. Por exemplo, Lyra e Cressoni [76] analisaram o efeito de correlaoes induzidas por recozimento termico (*thermal annealing*). Eles mostraram que o comprimento de localizaao dos modos vibracionais apresenta um decaimento exponencial para distancias maiores que o comprimento de correlaao termica. Utilizando argumentos analticos Datta e Kundu [77] demonstraram que o transporte de energia em cadeias harmonicas com desordem correlacionada e no correlacionada esta diretamente relacionado com os modos vibracionais no espalhados e com as condioes iniciais do sistema. O transporte de energia foi estudado atraves do segundo momento da distribuiao espacial de energia $M_2(t)$. Inicialmente o sistema e perturbado atraves de um impulso (P) sobre uma dada massa

da cadeia, ($P_{n_0} = P^0 \delta_{n,n_0}$) ou atraves de um deslocamento (Q) em uma massa da cadeia ($Q_{n_0} = Q^0 \delta_{n,n_0}$). A evoluo da energia na cadeia  governada pelas equaes de Hamilton. Integrando-se estas equaes podemos obter a energia $h_n(t)$ em cada massa e calcular o segundo momento da distribuio na forma:

$$M_2(t) = \sum_{n=1}^N (n - n_0)^2 h_n(t). \quad (1.36)$$

Kundu e Datta mostraram que para uma cadeia com desordem no correlacionada, $M_2(t) \propto t^{3/2}$ se a condio inicial  de impulso e $M_2(t) \propto t^{1/2}$ se a condio inicial  de deslocamento. A dependncia de $M_2(t)$ com a condio inicial foi tambm obtida na Ref. [79]. Se a distribuio de massas apresentar correlaes o transporte de energia muda, podendo atingir o expoente mximo $M_2(t) \propto t^{11/6}$ para o caso de correlaes tipo trmeros: $m_1 m_1 m_1$ com $m_1 = 0$ e excitao inicial tipo momento. Este mximo expoente est relacionado com os $N^{5/6}$ modos estendidos em torno de $\omega_c = 0$, como demonstrado na Ref. [74]. Na Ref. [77] todos os resultados para $M_2(t)$ obtidos analiticamente foram confirmados por simulao numrica da evoluo da energia na cadeia. O segundo momento est relacionado com a constante de difuso na cadeia atravs da relao $D(t) \propto dM_2(t)/dt$ [74, 87]. Por outro lado, a condutividade trmica esta relacionada com a constante de difuso e portanto com o segundo momento da distribuio de energia $M_2(t)$ [87]. Recentemente a condutividade trmica de cadeias harmnicas e anarmnicas com massas aleatrias no correlacionadas [81] e tambm de cadeias com massas alternadas [82, 84] foram numericamente investigadas. A dependncia da condutividade com o tamanho da cadeia e o valor da condutividade trmica no limite termodinmico so questes que permanecem controversas [83]. O segundo momento est relacionado com a constante

de difusao na cadeia atraves da relaao $D(t) \propto dM_2(t)/dt$ [74, 87]. Por outro lado, a condutividade termica esta relacionada com a constante de difusao e portanto com o segundo momento da distribuiao de energia $M_2(t)$ [87]. Recentemente a condutividade termica de cadeias harmonicas e anarmonicas com massas aleatorias nao correlacionadas [81] e tambem de cadeias com massas alternadas [82, 84] foram numericamente investigadas. A dependencia da condutividade com o tamanho da cadeia e o valor da condutividade termica no limite termodinamico sao questoes que permanecem controversas [83].

No capitulo 3 desta tese vamos apresentar um estudo detalhado da natureza dos modos vibracionais em cadeias harmonicas com correlaoes de longo alcance na distribuiao de massas, utilizando o formalismo de matriz de transferencia para calcular o comprimento de localizaao dos modos vibracionais. Estudaremos tambem o transporte de energia nesta cadeia atraves do calculo numerico do segundo momento da distribuiao de energia $M_2(t)$.

Capítulo 2

Natureza das Ondas de Spin em Ferromagnetos com desordem correlacionada

2.1 Introdução

Neste capítulo vamos estudar a natureza das ondas de spin no modelo de Heisenberg ferromagnético em $d = 1$ com correlações de longo alcance na distribuição dos acoplamentos J entre os spins. Utilizaremos o formalismo do grupo de renormalização numérico para calcular o comprimento de localização dos modos e estudar como o grau de localização neste modelo é afetado pela presença de correlações na distribuição de desordem. Estudaremos também a dinâmica das ondas de spin nesta cadeia. Na próxima seção vamos apresentar uma breve revisão sobre o modelo de Heisenberg, a equação de movimento para um mágnon neste modelo, o formalismo do grupo de renormalização neste contexto e o método de Dean para calcular a

densidade de estados.

2.2 Magnons em Cadeias Ferromagneticas Desordenadas

Consideraremos uma cadeia linear contendo N ions de spin $\vec{S} = S_x\vec{x} + S_y\vec{y} + S_z\vec{z}$. O hamiltoniano que descreve a interacao entre os spins destes ions e dado pela equacao abaixo:

$$H = - \sum_{n=-N/2}^{N/2} J_n \vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1}. \quad (2.1)$$

Vamos introduzir os operadores S_n^+ e S_n^- definidos por

$$\begin{cases} S_n^+ = S_n^x + iS_n^y, \\ S_n^- = S_n^x - iS_n^y. \end{cases}$$

Usando as relacoes de comutacao dos operadores de spin ($[S_k^x, S_l] = iS_k^z\delta_{k,l}$) podemos demonstrar as seguintes relacoes:

$$\begin{aligned} [S_k^+, S_l^+] &= 2S_k^z\delta_{k,l}, & [S_k^z, S_l^+] &= S_k^+\delta_{k,l}, \\ [S_k^z, S_l^-] &= -S_k^-\delta_{k,l}, & [S_k^+, S_l^+] &= [S_k^-, S_l^-] = 0. \end{aligned}$$

Para estudar as excitacoes do sistema, vamos considerar agora que um desvio de spin e introduzido no sıtio n . Introduzir este desvio corresponde a aplicar o operador S_n^- ao estado fundamental, no qual todos os spins se encontram perfeitamente alinhados. Nosso objetivo e obter a equacao de Schrodinger para um magnon numa cadeia ferromagnetica. Vamos aplicar o Hamiltoniano definido na Eq. 2.1 ao estado

$|\phi_n \rangle$, definido por $|\phi_n \rangle = \vec{S}_n |\phi_0 \rangle$:

$$\begin{aligned}
H|\phi_n \rangle &= - \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} \vec{S}_l \cdot \vec{S}_{l+1} |\phi_n \rangle = \\
&= - \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} [S_l^z S_{l+1}^z + \frac{1}{2}(S_l^+ S_{l+1}^- + S_l^- S_{l+1}^+)] |\phi_n \rangle = \\
&= - \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^z S_{l+1}^z |\phi_n \rangle - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^+ S_{l+1}^- |\phi_n \rangle \\
&\quad - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^- S_{l+1}^+ |\phi_n \rangle .
\end{aligned} \tag{2.2}$$

Calculando os tres somatorios separadamente:

i) $H_1 = - \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^z S_{l+1}^z |\phi_n \rangle$: Explicitando os termos $l = n-1$ e $l = n$ obtemos

$$\begin{aligned}
H_1 &= - \sum_{l=1}^{n-2} J_{l,l+1} S_l^z S_{l+1}^z |\phi_n \rangle - (J_{n-1,n} S_{n-1}^z S_n^z |\phi_n \rangle) \\
&\quad - (J_{n,n+1} S_n^z S_{n+1}^z |\phi_n \rangle) - \sum_{l=n+1}^N J_{l,l+1} S_l^z S_{l+1}^z |\phi_n \rangle .
\end{aligned} \tag{2.3}$$

Lembrando que S_i^z aplicado ao estado $|\phi_n \rangle$, com $i \neq n$, tem valor maximo S na direao z , temos

$$\begin{aligned}
H_1 &= - \sum_{l=1}^{n-2} J_{l,l+1} S^2 |\phi_n \rangle - \sum_{l=n+1}^N J_{l,l+1} S^2 |\phi_n \rangle - (J_{n-1,n} S_{n-1}^z S_n^z |\phi_n \rangle) \\
&\quad - (J_{n,n+1} S_n^z S_{n+1}^z |\phi_n \rangle) .
\end{aligned} \tag{2.4}$$

Utilizando as relacoes de comutacao entre S^z e S^- , obtemos

$$H_1 = - \sum_{l=1}^{n-2} J_{l,l+1} S^2 |\phi_n \rangle - \sum_{l=n+1}^N J_{l,l+1} S^2 |\phi_n \rangle - J_{n-1,n} S_{n-1}^z (S_n^- S_n^z |\phi_0 \rangle - S_n^- |\phi_0 \rangle) - J_{n,n+1} S_{n+1}^z (S_n^- S_n^z |\phi_0 \rangle - S_n^- |\phi_0 \rangle). \quad (2.5)$$

Lembrando a relacao $S_n^z |\phi_0 \rangle = S |\phi_0 \rangle$ na equacao anterior, teremos:

$$H_1 = - \sum_{l=1}^{n-2} J_{l,l+1} S^2 |\phi_n \rangle - \sum_{l=n+1}^N J_{l,l+1} S^2 |\phi_n \rangle - J_{n-1,n} S_{n-1}^z (S - 1) |\phi_n \rangle - J_{n,n+1} S_{n+1}^z (S - 1) |\phi_n \rangle \quad (2.6)$$

Aplicando os operadores S_{n+1}^z e S_{n-1}^z no estado $|\phi_n \rangle$ temos

$$H_1 = - \sum_{l=1}^{n-2} J_{l,l+1} S^2 |\phi_n \rangle - \sum_{l=n+1}^N J_{l,l+1} S^2 |\phi_n \rangle - J_{n-1,n} S^2 |\phi_n \rangle - J_{n,n+1} S^2 |\phi_n \rangle + J_{n-1,n} S |\phi_n \rangle + J_{n,n+1} S |\phi_n \rangle. \quad (2.7)$$

Podemos agrupar os quatro primeiros termos desta ultima equacao em um so somatorio e a equacao para H_1 resulta

$$H_1 = - \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S^2 |\phi_n \rangle + S (J_{n-1,n} + J_{n,n+1}) |\phi_n \rangle. \quad (2.8)$$

O somatorio $-\sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S^2$ e igual a energia (E_0) do estado fundamental $|\phi_0 \rangle$. Portanto a expressao final para H_1 e

$$H_1 = E_0 |\phi_n \rangle + S (J_{n-1,n} + J_{n,n+1}) |\phi_n \rangle. \quad (2.9)$$

ii) $H_2 = -\sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^+ S_{l+1}^- |\phi_n \rangle$: Substituindo $|\phi_n \rangle = S_n^- |\phi_0 \rangle$ e utilizando as relaoes de comutaao entre os operadores S^+ e S^- , teremos

$$\begin{aligned} H_2 &= -\frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_{l+1}^- (2S_l^z \delta_{ln} |\phi_0 \rangle) + S_n^- S_l^+ |\phi_0 \rangle \\ &= -\sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_{l+1}^- (2S_l^z \delta_{ln} |\phi_0 \rangle) \end{aligned} \quad (2.10)$$

Na equaao acima $S_l^+ |\phi_0 \rangle = 0$ pois o estado $|\phi_0 \rangle$ contem todos os spins na direao (+). A funao delta seleciona os termos do somatorio com $l = n$:

$$\begin{aligned} H_2 &= -J_{n,n+1} S_{n+1}^- S_n^z |\phi_0 \rangle = -J_{n,n+1} S S_{n+1}^- |\phi_0 \rangle \\ &= -J_{n,n+1} S |\phi_{n+1} \rangle. \end{aligned} \quad (2.11)$$

iii) $H_3 = -\frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^- S_{l+1}^+ |\phi_n \rangle$: De forma analoga, obtemos

$$H_3 = -\frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^- [2S_{l+1}^z \delta_{l+1,n} + S_n^- S_{l+1}^+] |\phi_0 \rangle. \quad (2.12)$$

Na expressao acima o termo que contem $S_{l+1}^+ |\phi_0 \rangle$ e nulo pois todos os spins estao apontando na direao (+). Portanto

$$H_3 = -\sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^- S_{l+1}^z \delta_{l+1,n} |\phi_0 \rangle. \quad (2.13)$$

Usando a funcao delta e lembrando que $S_{n-1}^-|\phi_0\rangle = \phi_{n-1}$, teremos

$$\begin{aligned} H_3 &= -J_{n-1,n} S_{n-1}^- S_n^z |\phi_0\rangle = -J_{n-1,n} S S_{n-1}^- |\phi_0\rangle \\ &= -J_{n-1,n} S |\phi_{n-1}\rangle. \end{aligned} \tag{2.14}$$

Coletando os resultados acima obtemos :

$$\begin{aligned} H|\phi_n\rangle = E_0|\phi_n\rangle + S[(J_{n-1,n} + J_{n,n+1})|\phi_n\rangle - J_{n,n+1}|\phi_{n+1}\rangle \\ - J_{n-1,n}|\phi_{n-1}\rangle]. \end{aligned} \tag{2.15}$$

Da equacao acima verificamos que $|\phi_n\rangle$ nao e autoestado de H , pois um desvio no sıtio n nao fica localizado em n , propagando-se ao longo da cadeia atraves de seus vizinhos $n + 1$ e $n - 1$. Esta propagacao estabelece a excitacao coletiva do sistema, ou seja, a onda de spin. Portanto precisamos determinar que estado represente esta configuracao. Vamos representar por $|\Phi\rangle$ uma onda de spin. Podemos expandir esta onda de spin usando os estados $|\phi_n\rangle$

$$|\Phi\rangle = C(S, N) \sum_{n=1}^N c_n |\phi_n\rangle \tag{2.16}$$

onde os numeros c_n representam as amplitudes de probabilidade de ocorrer um desvio no sıtio n . Vamos demonstrar que $|\Phi\rangle$ e autoestado de H usando a equacao de Schrodinger:

$$H|\Phi\rangle = E|\Phi\rangle. \tag{2.17}$$

Usando as Eq. (2.17) e (2.16) temos

$$\begin{aligned}
H|\Phi\rangle &= C(S, N) \sum_{n=1}^N c_n H|\phi_n\rangle \\
&= C(S, N) \sum_{n=1}^N \{E_0 + S[(J_{n-1,n} + J_{n,n+1})c_n|\phi_n\rangle \\
&\quad - J_{n,n+1}c_n|\phi_{n+1}\rangle - J_{n-1,n}c_n|\phi_{n-1}\rangle]\} = E|\Phi\rangle. \quad (2.18)
\end{aligned}$$

Desta equaao anterior obtemos

$$\begin{aligned}
\sum_{n=1}^N (J_{n-1,n} + J_{n,n+1})c_n|\phi_n\rangle - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1}c_n|\phi_{n+1}\rangle \\
- \sum_{n=1}^N J_{n-1,n}c_n|\phi_{n-1}\rangle = \frac{E - E_0}{S} \sum_{n=1}^N c_n|\phi_n\rangle. \quad (2.19)
\end{aligned}$$

Fazendo $n = n + 1$ no segundo somatorio e $n = n - 1$ no terceiro somatorio obtemos,

$$\sum_{n=1}^N \{(J_{n-1,n} + J_{n,n+1})c_n - J_{n,n+1}c_{n+1} - J_{n-1,n}c_{n-1}\}|\phi_n\rangle = \frac{(E - E_0)}{S} \sum_{n=1}^N c_n|\phi_n\rangle \quad (2.20)$$

Portanto, fazendo $\mathcal{E} = E - E_0$ e $S = 1/2$ temos a equaao de Schrodinger para o modelo escrita em funao dos numeros c_n :

$$(J_{n-1,n} + J_{n,n+1})c_n - J_{n,n+1}c_{n+1} - J_{n-1,n}c_{n-1} = 2\mathcal{E}c_n \quad (2.21)$$

Esta relaao de recorrencia entre os numeros c_n pode ser usada, entre outros aspectos importantes, para se obter uma representaao matricial do Hamiltoniano H na base $(|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, \dots, |\phi_n\rangle)$. Esta representaao consiste em uma matriz tridiagonal, ou seja, todos os termos da matriz sao nulos exceto os termos da diag-

onal principal ($H_{n,n} = J_{n-1,n} + J_{n,n+1}$) e das duas primeiras diagonais secundarias ($H_{n,n+1} = H_{n+1,n} = -J_{n,n+1}$). Esta matriz de H pode ser muito util para estudos numericos baseados em diagonalizacao direta. Usando rotinas apropriadas como a *tqli* [89] pode-se obter todos os autovetores e autovalores da matriz Hamiltoniana H e calcular a funcao participacao ξ . Como foi apresentado no capıtulo 1, a participacao diverge de forma linear com o tamanho da cadeia se o estado for estendido e e uma constante para estados localizados. Este tipo de procedimento vem sendo frequentemente utilizado para estudar as propriedades de localizacao de magnons em cadeias ferromagneticas desordenadas [68]. Nos iremos aplicar um procedimento de renormalizacao que originalmente foi utilizado para calcular o expoente de Lyapunov no modelo de Anderson.

2.2.1 Metodo do Grupo Renormalizacao Usando o Operador de Green.

O metodo e deduzido a partir das equacoes de movimento para o operador de Green associado ao hamiltoniano. Para compreender o papel do operador de Green em modelos Hamiltonianos vamos analisar o seguinte exemplo: suponha que os autoestados de um Hamiltoniano H_0 (Hamiltoniano de referencia) sao conhecidos:

$$H_0|\phi_n\rangle = E_0|\phi_n\rangle. \quad (2.22)$$

Considere agora um segundo Hamiltoniano H definido por

$$H = H_0 + V, \quad (2.23)$$

ou seja, o operador H e o Hamiltoniano do sistema de referencia na presenca de uma interacao V . A equacao de autovalores para o Hamiltoniano H e definido por

$$H|\psi_n \rangle = E|\psi_n \rangle . \quad (2.24)$$

Os autoestados de H estao relacionados com os autoestados do modelo de referencia pela relacao

$$|\psi_n \rangle = |\phi_n \rangle + VG|\phi_n \rangle , \quad (2.25)$$

onde G e o operador de Green associado ao Hamiltoniano $G = \frac{1}{E-H}$. Entao, os autoestados de um Hamiltoniano H , onde $H = H_0 + V$ e os autoestados de H_0 sao conhecidos, podem sempre ser obtidos usando os operadores de Green. Para deduzir o metodo de renormalizacao, vamos escrever as equacoes de movimento para os elementos de matriz do operador de Green. Uma discussao mais detalhada pode ser encontrada na referencia [88]. A partir da Eq. 2.12 podemos obter a seguinte relacao entre operadores

$$EG(E) = I + HG(E). \quad (2.26)$$

Vamos agora obter o conjunto de equacoes de movimento para os elementos de matriz do operador de Green $G(E)$. O elemento de matriz $G_{l,m} = \langle l|G(E)|m \rangle$ e dado por,

$$EG_{l,m} = \delta_{l,m} + \langle l|HG(E)|m \rangle . \quad (2.27)$$

Para condensar as equacoes usaremos a notacao $A_{l,m} = \langle l|A|m \rangle$, onde A e um operador qualquer. Usando a relacao de completeza, $\sum_k |k \rangle \langle k| = I$ no produto $HG(E)$ temos,

$$EG_{l,m} = \delta_{l,m} + \sum_k H_{l,k} G_{k,m}, \quad (2.28)$$

onde usamos mais uma vez a notacao $\langle l|A|m \rangle = A_{lm}$. Sem perda de generalidade vamos escrever as equaoes de movimento para os elementos $l,0$ do operador de Green

$$EG_{l,0} = \delta_{l,0} + \sum_k H_{l,k} G_{k,0}. \quad (2.29)$$

O Hamiltoniano H so tem termos diferente de zero na diagonal principal ($H_{l,l} = (J_{l-1,l} + J_{l,l+1}) = \epsilon_l$) e nas diagonais secundarias ($H_{n,n+1} = H_{n+1,n} = -J_{n,n+1}$) logo, podemos escrever a equaao de movimento para os elementos de matriz do operador de Green:

$$(E - \epsilon_l)G_{l,0} = \delta_{l,0} - J_{l-1,l} G_{l-1,0} - J_{l,l+1} G_{l+1,0}. \quad (2.30)$$

Para $l = 0, 1, 2, \dots$ teremos um conjunto infinito de equaoes acopladas, apresentadas a seguir:

$$\begin{aligned} (E - \epsilon_0)G_{0,0} &= 1 - J_{0,-1} G_{-1,0} - J_{0,-1} G_{1,0} \\ (E - \epsilon_1)G_{1,0} &= -J_{1,0} G_{0,0} - J_{1,2} G_{2,0} \\ &\vdots \\ (E - \epsilon_{2l-1})G_{2l-1,0} &= \delta_{2l-1,0} - J_{2l-1,2l-2} G_{2l-2,0} - J_{2l-1,2l} G_{2l,0} \\ (E - \epsilon_{2l})G_{2l,0} &= \delta_{2l,0} - J_{2l,2l-1} G_{2l-1,0} - J_{2l,2l+1} G_{2l+1,0} \\ (E - \epsilon_{2l+1})G_{2l+1,0} &= \delta_{2l+1,0} - J_{2l+1,2l} G_{2l,0} - J_{2l+1,2l+2} G_{2l+2,0} \\ &\vdots \end{aligned} \quad (2.31)$$

Observe que, para um dado i , a equaao de $G_{i,0}$ e acoplada as equaoes de $G_{i+1,0}$ e $G_{i-1,0}$. Portanto, podemos remover do conjunto de equaoes o elemento de matriz $G_{i,0}$ associado ao spin localizado no stio i . Apos este processo, teremos efetuado um processo de dizimaao do spin do stio i e precisamos renormalizar os parametros

ϵ_{i-1} e ϵ_{i+1} associados aos spins localizados nos sıtios $i - 1$ e $i + 1$, bem como o acoplamento entre eles. Para compreender como as equacoes que renormalizam estas quantidades sao deduzidas a partir das equacoes de movimento apresentadas anteriormente, vamos dizimar formalmente o sıtio $2l + 1$, substituindo a equacao de G_{2l+1} na equacao de $G_{2l,0}$.

$$(E - \epsilon_{2l})G_{2l,0} = \delta_{2l,0} - J_{2l,2l-1}G_{2l-1,0} - J_{2l,2l+1} \left(\frac{-J_{2l+1,2l}G_{2l,0} - J_{2l+1,2l+2}G_{2l+2,0}}{E - \epsilon_{2l+1}} \right).$$

Observamos que, apos as substituicoes so restaram os elementos de matriz $G_{2l,0}$, $G_{2l-1,0}$ e $G_{2l+2,0}$. Agrupando melhor estes termos, teremos,

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

Lembrando que $\epsilon_{2l,2l}$ e real e que $J_{2l,2l-1} = J_{2l-1,2l}$ e $J_{2l+1,2l} = J_{2l,2l+1}$, podemos escrever a equacao anterior como

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

Note que apos a dizimacao a equacao de movimento (2.30) mantem sua estrutura original. O coeficiente que aparece no termo $G_{2n,0}$ e o parametro ϵ_{2l} renormalizado. O coeficiente do termo $G_{2l+2,0}$ e o acoplamento efetivo entre o spin $2l$ e o spin $2l + 2$, apos a dizimacao do spin $2l + 1$. Podemos escrever a equacao que renormaliza o termo da diagonal do Hamiltoniano ϵ_{2l} como sendo

$$\epsilon_{2l}^{(1)}(E) = \epsilon_{2l} + J_{2l,2l+1} \frac{1}{E - \epsilon_{2l+1}} J_{2l,2l+1}. \quad (2.34)$$

O ndice superescrito (1) indica que apenas um spin foi dizimado. Substituindo a equaao para $G_{2l+1,0}$ na equaao de $G_{2l+2,0}$ e repetindo este mesmo procedimento podemos encontrar a equaao que renormaliza o parmetro ϵ_{2l+2} na forma

$$\epsilon_{2l+2}^{(1)}(E) = \epsilon_{2l+2} + J_{2l+1,2l+2} \frac{1}{E - \epsilon_{2l+1}} J_{2l+1,2l+2}. \quad (2.35)$$

O acoplamento efetivo entre os spins $2l$ e $2l + 2$ 

$$J_{2l,2l+2}^{(eff)}(E) = J_{2l,2l+1} \frac{1}{E - \epsilon_{2l+1}} J_{2l+1,2l+2}. \quad (2.36)$$

Os demais spins no sofreram nenhuma mudanca. Podemos continuar a remover os spins iterativamente ate que tenhamos no final apenas os dois spins extremos de uma cadeia com $N + 1$ stios. Removendo sequencialmente os stios $1, 2, \dots, N - 1$ as equaoes que renormalizam as energias e acoplamento efetivo dos dois stios restantes so

$$\epsilon_0^{(N-1)}(E) = \epsilon_0^{N-2}(E) + J_{0,N-1}^{(eff)} \frac{1}{E - \epsilon_{N-1}^{(N-2)}(E)} J_{0,N-1}^{(eff)}, \quad (2.37)$$

$$\epsilon_N^{(N-1)}(E) = \epsilon_N + J_{N-1,N} \frac{1}{E - \epsilon_{N-1}^{(N-2)}(E)} J_{N-1,N}, \quad (2.38)$$

$$J_{0,N}^{(eff)}(E) = J_{0,N-1}^{(eff)} \frac{1}{E - \epsilon_{N-1}^{(N-2)}(E)} J_{N-1,N}. \quad (2.39)$$

Onde $\epsilon_0^{(N-1)}(E)$ e $\epsilon_N^{(N-1)}(E)$ representam os parmetros ϵ_0 e ϵ_N aps $N - 1$ dizimaoes e $J_{0,N}^{(eff)}(E)$  o acoplamento efetivo entre os spins 0 e N .

A natureza localizada ou deslocalizada das ondas de spin pode ser investigada atravs do clculo expoente de Lyapunov $\gamma(E)$ que  uma medida do inverso do comprimento de localizaao λ das ondas de spin. Se no limite termodinmico o

expoente de Lyapunov e finito, a largura da funcao de onda, ou seja, a largura das ondas de spin e tambem finita e o estado e localizado. Se a funcao de onda e estendida o expoente de Lyapunov deve ir a zero no limite termodinamico. O expoente de Lyapunov pode ser escrito em funcao dos elementos de matriz do operador de Green como [88]

$$\gamma(E) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{N} \ln \left| \frac{G_{N,N}(E)}{G_{0,N}} \right| \right]. \quad (2.40)$$

Os elementos de matriz $G_{N,N}$ e $G_{0,N}$ podem ser obtidos em funcao de $J_{0,N}^{(eff)}(E)$. Apos os spins terem sido dizimados o Hamiltoniano efetivo para os dois sıtios restantes pode ser escrito como

$$H^{(eff)}(E) = \begin{pmatrix} \epsilon_0^{(N-1)}(E) & t_{0,N}^{(eff)} \\ t_{0,N}^{(eff)}(E) & \epsilon_N^{(N-1)}(E) \end{pmatrix}$$

Vamos utilizar este operador $H^{(eff)}$ para calcular o operador de Green efetivo $G^{(eff)}$. Este procedimento requer apenas a inversao do operador $E - H^{(eff)}$. Apos esta inversao temos os elementos $G_{N,N}(E)$ e $G_{0,N}(E)$ necessarios ao calculo de γ :

$$G_{N,N}(E) = \frac{E - \epsilon_0^{(N-1)}(E)}{(E - \epsilon_0^{(N-1)}(E))(E - \epsilon_N^{(N-1)}(E)) - J_{0,N}^{(eff)} J_{0,N}^{(eff)}}, \quad (2.41)$$

$$G_{0,N}(E) = \frac{J_{0,N}^{(eff)}}{(E - \epsilon_0^{(N-1)}(E))(E - \epsilon_N^{(N-1)}(E)) - J_{0,N}^{(eff)} J_{0,N}^{(eff)}}. \quad (2.42)$$

Logo, substituindo as duas equaoes anteriores na Eq. 2.40 teremos:

$$\gamma(E) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{N} \ln \left| \frac{E - \epsilon_0^{(N-1)}(E)}{J_{0,N}^{(eff)}(E)} \right| \right] \quad (2.43)$$

No limite de $N \rightarrow \infty$, o termo $\frac{1}{N} \ln (E - \epsilon_0^{(N-1)})$ tende a zero uma vez que o parametro ϵ_0 renormalizado e finito. Logo, fica assim estabelecida uma relacao entre $\gamma(E)$ e $J_{0,N}^{(eff)}(E)$

$$\gamma(E) = - \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{N} \ln |J_{0,N}^{(eff)}(E)| \right]. \quad (2.44)$$

Portanto, o procedimento de renormalizacao permite o calculo direto do expoente de Lyapunov. O algoritmo numerico e bastante simples e estavel, basta iterar as equacoes que renormalizam os termos da diagonal do Hamiltoniano ϵ e os acoplamentos J entre os spins. Apos um grande numero de iteracoes, em geral acima de $N = 10^4$, o expoente $\gamma(E)$ pode ser obtido atraves de uma regressao linear da quantidade $\ln |J_{0,N}^{(eff)}(E)|$ versus o tamanho da cadeia N .

2.2.2 Densidade de Estados

Nesta secao vamos apresentar o metodo de Dean [69], um potente formalismo, baseado no teorema dos autovalores negativos, que permite calcular a densidade de estados (DOS) em qualquer sistema fisico cujo Hamiltoniano seja tridiagonal. Este formalismo foi bastante utilizado para se obter as propriedades espectrais no modelo de Anderson 1d, em cadeias Harmonicas e tambem pode ser utilizado no modelo de Heisenberg. Para obter a densidade de estados precisamos resolver a equacao caracteristica para o Hamiltoniano

$$\det(H - \lambda I) = 0. \quad (2.45)$$

A equao anterior  equivalente a

$$\left| \begin{array}{cccccccc} (\epsilon_{1,1} - \lambda) & J_{1,2} & 0 & & & & & \\ J_{2,1} & (\epsilon_{2,2} - \lambda) & J_{2,3} & 0 & \dots & & & \\ 0 & J_{3,2} & (\epsilon_{3,3} - \lambda) & J_{3,4} & 0 & \dots & & \\ & & & & & & & \\ & & & & & & J_{N-1,N} & (\epsilon_{N-1,N-1} - \lambda) & J_{N,N} \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & & 0 & J_{N,N} & (\epsilon_{N,N} - \lambda) \end{array} \right| = 0$$

Vamos considerar inicialmente a seqencia de polinomios $g_0(\lambda) = 1$, $g_1(\lambda)$, $g_2(\lambda)$, \dots , $g_N(\lambda)$, onde

$$g_i(\lambda) = \left| \begin{array}{cccccccc} (\epsilon_{1,1} - \lambda) & J_{1,2} & 0 & & & & & \\ J_{2,1} & (\epsilon_{2,2} - \lambda) & J_{2,3} & 0 & \dots & & & \\ 0 & J_{3,2} & (\epsilon_{3,3} - \lambda) & J_{3,4} & 0 & \dots & & \\ & & & & & & & \\ & & & & & & & \\ & & & & & & J_{i-1,i} & (\epsilon_{i-1,i-1} - \lambda) & J_{i,i} \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & & 0 & J_{i,i} & (\epsilon_{i,i} - \lambda) \end{array} \right|$$

e $i = 1, 2, \dots, N$. Observe que o polinomio $g_i(\lambda) = 0$ para $i = N$  a equao secular que desejamos resolver. Usando o metodo de cofatores podemos mostrar que os

polinomios $g_i(\lambda)$ obedecem a seguinte relacao de recorrencia:

$$g_i(\lambda) = (\epsilon_{i,i} - \lambda)g_{i-1}(\lambda) - J_{i-2,i-1}^2 g_{i-2}(\lambda), \quad (2.46)$$

$i = 1, 2, \dots, N$. O teorema de Sturm estabelece que se a e b sao dois numeros reais e $b > a$, o numero de solucoes da equacao $g_N(\lambda) = 0$ (equacao secular) dentro do intervalo $a \leq \lambda < b$ e igual a $\rho(b) - \rho(a)$ onde $\rho(\xi)$ e o numero de variacoes de sinal entre termos consecutivos da sequencia $g_0, g_1(\xi), g_2(\xi), \dots, g_N(\xi)$. Portanto, podemos obter a densidade de estados integrada (IDOS) como sendo

$$IDOS = \rho(\lambda) - \rho(-\infty) = \rho(\lambda) \quad (2.47)$$

Para obter o numero de variacoes de sinal entre termos consecutivos da sequencia de polinomios $g_i(\lambda)$ vamos reescrever a relacao de recorrencia (2.46) como

$$h_i(\lambda) = (\epsilon_{i,i} - \lambda) - J_{i,i+1}^2 / h_{i-1}(\lambda) \quad (i = 1, 2, \dots, N), \quad (2.48)$$

onde $h_i(\lambda) = g_i(\lambda)/g_{i-1}(\lambda)$. Podemos obter todos os termos da sequencia $h_0, h_1(\lambda), h_2(\lambda), \dots, h_N(\lambda)$ executando a relacao de recorrencia (2.48) numericamente. As mudancas de sinal entre termos consecutivos da sequencia $g_i(\lambda)$ equivale a valores negativos de $h_i(\lambda)$. A densidade de estados pode ser obtida atraves de uma simples derivacao numerica.

2.2.3 Singularidades no Comprimento de Localizacao e Densidade de Estados

No comeo da decada de 80 Ziman [63] mostrou que a equao de Schrodinger para o problema de um magnon numa cadeia ferromagnetica desordenada pode ser mapeada em uma equao para uma cadeia eletronica com desordem apenas nos termos de hopping. A cadeia eletronica equivalente ao problema de magnons apresenta uma distribuio de hopping dimerizada com $t_i = t_{i+1}$. Ziman considerou uma cadeia ferromagnetica descrita pela Eq. (2.21) com os acoplamentos J aleatoriamente escolhidos dentro do intervalo $(0, 1)$ e obedecendo uma distribuio de probabilidade normalizada tipo lei de potencia

$$P(J) = (1 - \delta)J^{-\delta}, \quad (2.49)$$

onde $\delta \leq 1$. Esta distribuio de probabilidade permite estudar os limites de desordem fraca $\delta < 0$ e desordem forte, $\delta > 0$, neste ultimo caso os valores de J proximos a zero sao altamente provaveis. Utilizando teoria de perturbao e tecnicas de matriz de transferencia foram obtidas as singularidades do comprimento de localizao λ :

$$\begin{aligned} \lambda &= E^{-(1-\delta)/(2-\delta)}, & (i) \quad 0 < \delta < 1 \\ \lambda &= E^{-\frac{1}{2}(1-\delta)}, & (ii) \quad -1 < \delta < 0 \\ \lambda &= E^{-1}, & (iii) \quad \delta < -1, \end{aligned} \quad (2.50)$$

e da densidade de estados (DOS):

$$\begin{aligned} DOS &= E^{-1/(2-\delta)}, & (i) \quad 0 < \delta < 1 \\ DOS &= E^{-\frac{1}{2}}, & (ii) \quad \delta < 0. \end{aligned} \quad (2.51)$$

No regime $0 < \delta < 1$ os valores de J proximos de zero sao bastante provaveis

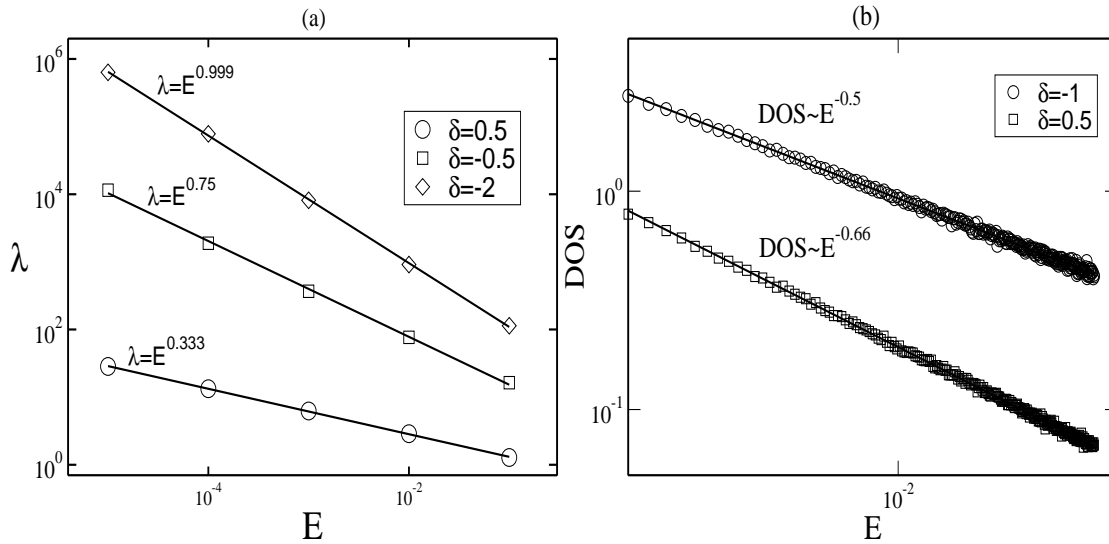


Figura 2.1: (a) Comprimento de localizaao λ versus E para cadeias com $N = 2 \times 10^6$. Os acoplamentos aleatorios sao escolhidos no intervalo $(0, 1)$ segundo uma distribuiao de probabilidade tipo lei de potencia $P(J) = (1 - \delta)J^{-\delta}$ ($\delta = 0.5, -0.5$ e -2). (b) Densidade de Estados (DOS) versus E para cadeias com $N = 2 \times 10^6$. A mesma distribuiao $P(J)$ foi utilizada com expoentes $\delta = -1$ e 0.5 . Nossos dados numericos reproduzem as singularidades do comprimento de localizaao e da Densidade de estados apresentadas nas Eq. (2.50) e (2.51).

e os dois primeiros momentos $\langle 1/J \rangle$ e $\langle 1/J^2 \rangle$ sao divergentes enquanto que no regime $-1 < \delta < 0$ apenas o primeiro momento $\langle 1/J \rangle$ e finito. No ultimo caso, $\delta < -1$ os dois momentos da distribuiao de acoplamentos $\langle 1/J \rangle$ e $\langle 1/J^2 \rangle$ sao finitos. Vamos aplicar o procedimento de renormalizaao e o metodo de Dean para reproduzir numericamente as singularidades de λ e DOS. A Fig 2.1 mostra o comprimento de localizaao λ obtido a partir do grupo de renormalizaao e a densidade de estados (DOS) para cadeias com $N = 2 \times 10^6$ spins e diferentes expoentes na distribuiao de probabilidade. Para o comprimento de localizaao utilizamos $\delta = 0.5, -0.5$ e -2 e para a densidade de estados $\delta = -1$ e 0.5 . Na

figura 2.1 os simbolos representam nossos dados numericos enquanto que a linha e um ajuste tipo lei de potencia dos dados. Utilizando as formulas obtidas por Ziman, os expoentes de λ nestes tres casos seriam 0.3333, 0.75 e 1.0, respectivamente. Os expoentes de DOS nos dois casos seriam 0.5 e 0.666, respectivamente. Podemos ver que o ajuste tipo lei de potencia reproduz de forma satisfatoria estes expoentes.

2.2.4 Mapeamento na Cadeia Eletronica

A equaao de Schrodinger para o problema de magnon Eq. (2.21) e equivalente ao seguinte problema eletronico

$$E^e b_n = t_{n-1,n} b_{n-1} + t_{n,n+1} b_{n+1} \quad (2.52)$$

onde os termos de hopping sao aleatorios mas distribuidos em pares ou seja $t_{0,1} = t_{1,2}$, $t_{2,3} = t_{3,4}$ e assim por diante. Este mapeamento pode ser verificado dizimando os sitios impares do conjunto de equaoes (2.21). Vamos fazer, como exemplo, uma dizimaao dos sitios $n = 1$ e $n = 3$. Primeiro vamos fazer as seguintes mudanas de variaveis nos sitios pares e na energia. $b_0 = -c_0$, $b_2 = -c_1$, $b_4 = -c_2$ e $(E^e) = \sqrt{2E^m}$. Agora basta eliminar do conjunto de equaoes os sitios impares $n = 1$ e $n = 3$. Para tal vamos escrever as tres primeiras equaoes

$$\sqrt{2E^m} b_1 = t_{0,1} (-c_0) + t_{1,2} (-c_1), \quad (2.53)$$

$$\sqrt{2E^m} (-c_1) = t_{1,2} b_1 + t_{2,3} b_3, \quad (2.54)$$

$$\sqrt{2E^m} (b_3) = t_{2,3} (-c_1) + t_{3,4} (-c_2) \quad (2.55)$$

vamos multiplicar a equação (2.54) por $\sqrt{2E^m}$ e substituir os termos $b_1\sqrt{2E^m}$ e $b_3\sqrt{2E^m}$. O resultado final pode ser escrito como

$$2E^m(-c_1) = t_{1,2}[t_{0,1}(-c_0) + t_{1,2}(-c_1)] + t_{2,3}[t_{2,3}(-c_1) + t_{3,4}(-c_2)] \quad (2.56)$$

Agrupando os termos que contem c_0 , c_1 e c_2 temos

$$(-2E^m + t_{1,2}^2 + t_{2,3}^2)c_1 = -t_{1,2}t_{0,1}c_0 - t_{2,3}t_{3,4}c_2 \quad (2.57)$$

Como as amplitudes de hopping aparecem em pares, vamos utilizar a seguinte mudança de variáveis: $t_{1,2}t_{0,1} = t_{1,2}^2 = J_{0,1}$ e $t_{2,3}t_{3,4} = t_{2,3}^2 = J_{2,3}$, para deixar a Eq. (2.57) idêntica a equação para o mágnon (2.21) para $n=1$ e $\mathcal{E} = E^m$

$$2E^m c_1 = (J_{0,1} + J_{2,3})c_1 - J_{0,1}c_0 - J_{2,3}c_2. \quad (2.58)$$

Na próxima seção vamos introduzir correlações de longo alcance na distribuição de acoplamentos e mostrar, utilizando o formalismo de normalização, que as correlações de longo alcance podem estabilizar uma fase de ondas de spins livres neste sistema .

2.3 Cadeia Ferromagnética com Desordem Correlacionada

Vamos estudar a natureza das ondas de spin na presença de acoplamentos correlacionados. Para introduzir as correlações de longo alcance utilizaremos o mesmo procedimento descrito no capítulo 1. Os acoplamentos J_n serão obtidos a partir da

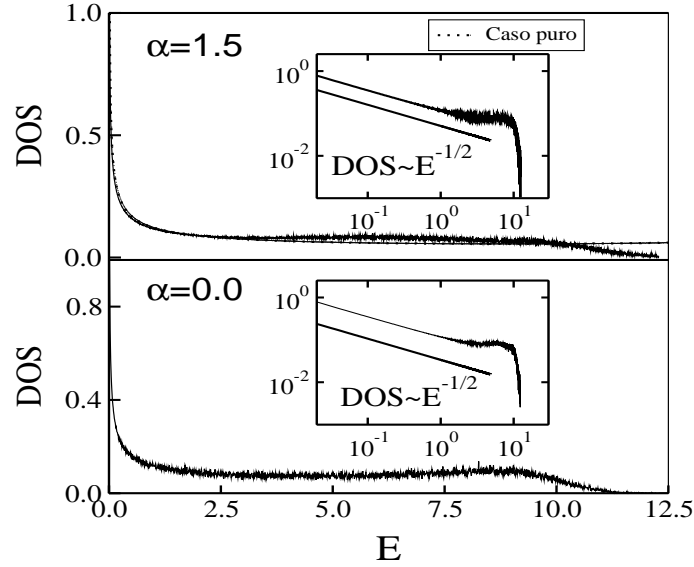


Figura 2.2: A densidade de estados (DOS) para cadeia com $N = 10^5$ sítios obtida através do método de Dean. Podemos observar que a DOS torna-se menos rougosa quando α é aumentado e que suas singularidades na região de baixas energias não são alteradas devido a presença de correlações de longo alcance na distribuição dos acoplamentos.

equação

$$J_n = \sum_{k=1}^{N/2} \frac{\mathcal{C}(\alpha)}{k^{-\alpha}} \cos\left(\frac{2\pi nk}{N} + \phi_k\right). \quad (2.59)$$

Para evitar acoplamentos nulos nesta sequência vamos escolher $\langle J_n \rangle = 4.5$. Como foi apresentado no capítulo 1, a variância desta sequência foi normalizada $\Delta J_n = 1$. Utilizamos o procedimento do grupo de renormalização para calcular o expoente de Lyapunov dentro da banda de energias permitidas nesta cadeia. A banda de energias permitidas pode ser encontrada através da densidade de estados (DOS), que foi calculada usando o método de Dean [69]. Na figura 2.2 temos a densidade de estados normalizada para cadeias com $N = 10^5$ sítios. A densidade de estados apresenta

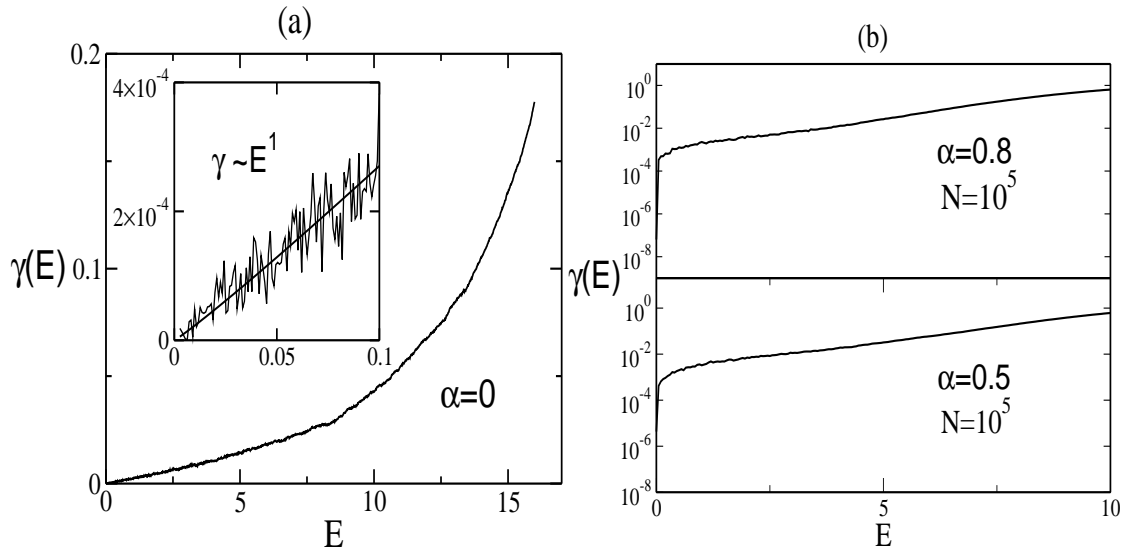


Figura 2.3: (a) Expoente de Lyapunov γ versus E para cadeias com $N = 10^5$ e $\alpha = 0$. O expoente de Lyapunov é finito para todas as energias exceto para $E = 0$. Perto de $E = 0$, γ se anula de forma linear $\gamma \propto E^1$ (ver o *inset*). (b) Expoente de Lyapunov γ versus E em escala log-linear para cadeias com $N = 10^5$ e $\alpha = 0.5$ e 0.8 . O expoente de Lyapunov continua finito portanto não existem ondas de spin estendidas para $0 < \alpha \leq 1$.

valores não nulos entre as energias 0 e aproximadamente 12.5. Obter exatamente a máxima energia permitida para esta cadeia não é um problema trivial pois em geral a densidade de estados apresenta, no final da banda, um decaimento exponencial. No *insete* da figura 2.2 podemos ver que, no início da banda, a densidade de estados diverge com $1/\sqrt{E}$ para todos os valores de α estudados. Isso mostra que as singularidades da densidades de estados na região de baixas energias não são alteradas pela presença da correlações de longo alcance na distribuição dos acoplamentos entre os spins J_n . Este resultado já era esperado [63] pois os acoplamentos J_n definidos pela Eq. (2.59) têm $\langle 1/J \rangle$ e $\langle 1/J^2 \rangle$ finitos para qualquer grau de correlação. Podemos notar também uma diminuição da flutuação na densidade de estados quando o

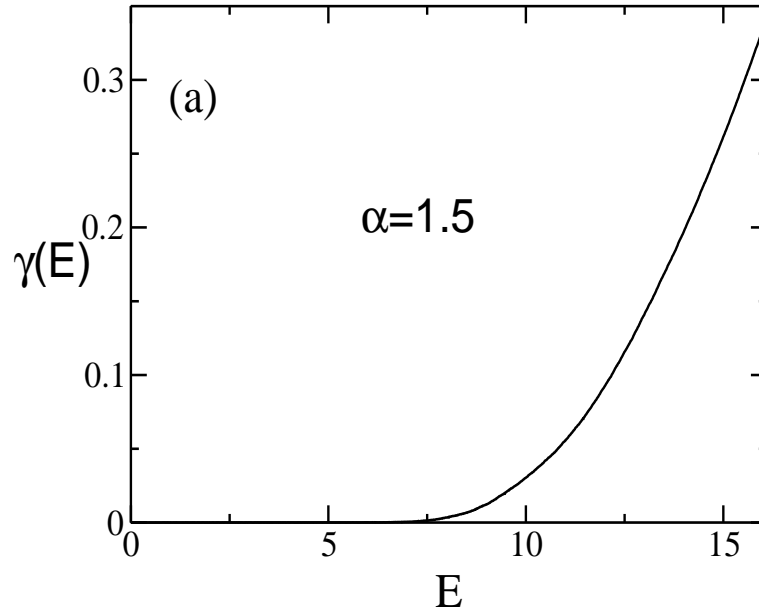


Figura 2.4: Expoente de Lyapunov γ versus E para cadeias com $N = 10^5$ e $\alpha = 1.5$. γ se anula dentro de uma faixa de finita de energias. Este comportamento revela a presença de ondas de spin estendidas na região de baixas energias.

parâmetro α , que controla o grau de correlação na desordem, é aumentado. Para $\alpha = 1.5$ temos uma parte não flutuante na região de baixas energias semelhante ao caso de uma cadeia pura com $J_n = \text{constante}$. Estudos anteriores mostraram que a suavização da densidade de estados está conectada com a presença de estados estendidos [16]. A figura 2.3(a) mostra o expoente de Lyapunov γ em função da energia E para cadeias com $N = 10^5$ sítios e parâmetro de correlação $\alpha = 0$. Neste caso, o expoente de Lyapunov é finito para todas as energias exceto para $E = 0$. Perto de $E = 0$ o expoente de Lyapunov se anula de forma linear ($\gamma \propto E^1$) como mostra o *inset* da figura 2.3(a). Este resultado está em plena concordância com os resultados obtidos na referência [63] e demonstrados na seção 2.2.2 para cadeias ferromagnéticas com distribuições de acoplamentos J que apresentam os dois primeiros

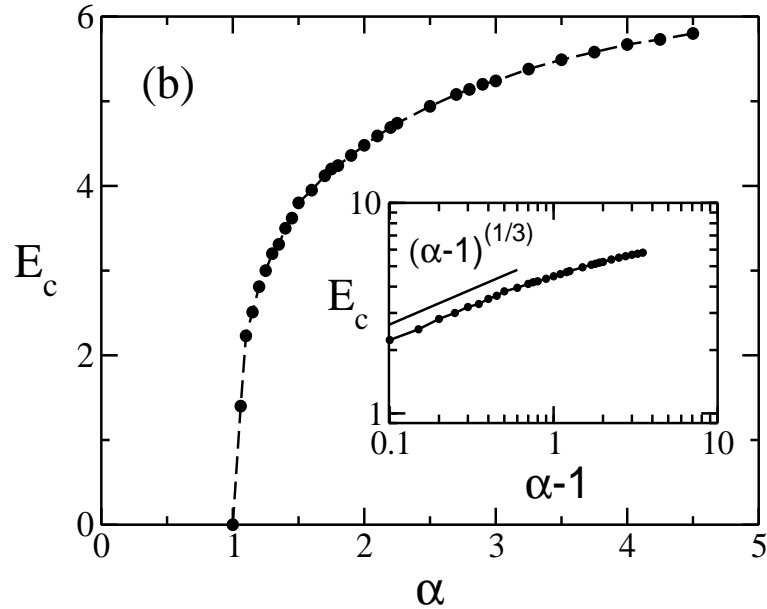


Figura 2.5: Diagrama de fases no plano (E_c, α) , onde E_c é o *mobility edge* (medido em unidades de ΔJ) e $N = 10^5$ sítios. A fase de ondas de spin estendidas aparece quando $\alpha > 1$ e $E < E_c$.

momentos $\langle 1/J \rangle$ and $\langle 1/J^2 \rangle$ não divergentes. A figura 2.3(b) mostra o expoente de Lyapunov γ versus E para cadeias com $N = 10^5$ sítios e parâmetros de correlação $\alpha = 0.5, 0.8$. Nossos resultados numéricos indicam que, para $E > 0$, não existem ondas de spin estendidas para $0 < \alpha \leq 1$. O comportamento do sistema é qualitativamente diferente se o parâmetro α é maior que 1 ($\alpha > 1$). Na figura 2.4 mostramos o expoente γ versus E para $\alpha = 1.5$ e $N = 10^5$. Observe que o expoente de Lyapunov é zero na região de baixa energia. Este resultado numérico é um forte indício da existência de uma fase de ondas de spin estendidas nesta região. Em nossos cálculos numéricos utilizamos cadeias com tamanhos entre 10^5 e 10^6 spins, obtemos o mesmo comportamento para o expoente $\gamma(E)$, o que indica que esta fase de ondas de spin é estável no limite termodinâmico. Vamos levantar um dia-

grama de fases no plano (E_c, α) onde a energia crítica E_c (medida em unidades da variância ΔJ) é a energia limite entre a fase estendida e a fase localizada (*mobility edge*). Este diagrama de fases do modelo pode ser obtido através do cálculo de $\gamma(E)$ para vários valores de α e a consequente localização da posição das energias críticas. Nós estimamos a energia crítica E_c como sendo a energia na qual o coeficiente de Lyapunov torna-se menor que $1/N$ onde N é o comprimento da cadeia. A Fig 2.5 mostra o diagrama de fases, sendo os erros estatísticos menores que o tamanho dos símbolos. Uma análise dos dados (ver o *inset*) sugere que, perto do parâmetro de correlação crítico $\alpha = 1$, a energia crítica E_c depende do expoente de correlação na forma $E_c \propto (\alpha - 1)^\nu$, com $\nu = 1/3$. Uma informação adicional sobre a natureza das ondas de spin nestas cadeias com desordem correlacionada pode ser obtida através do comportamento dinâmico das ondas de spin. Na próxima seção vamos estudar a dinâmica das ondas de spin através do cálculo do desvio médio quadrático no tempo $\sigma^2(t)$.

2.4 Dinâmica de Ondas de Spin

Para investigar a dinâmica das ondas de spin nesta cadeia vamos calcular o deslocamento médio quadrático no tempo ($\sigma^2(t)$). Vamos considerar que para $t = 0$ uma excitação (desvio de spin) está localizada no sítio n_0 . A função de onda que representa este estado inicial é $|\phi(t = 0)\rangle = |\phi_{n_0}\rangle$. A evolução temporal deste estado é descrita pela equação de Schrödinger ($\hbar = 1$):

$$i \frac{d|\phi(t)\rangle}{dt} = H|\phi(t)\rangle. \quad (2.60)$$

Utilizando a expansão $|\phi(t)\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle$ podemos escrever a equação de Schrödinger para a amplitude da função de ondas em cada sítio

$$i \frac{dc_n(t)}{dt} = (J_{n,n+1} + J_{n-1,n}) c_n(t) - J_{n-1,n} c_{n-1}(t) - J_{n,n+1} c_{n+1}(t) \quad n = 1, \dots, N. \quad (2.61)$$

As amplitudes da função de onda $c_n(t)$ podem ser escritas em função dos autovetores $V^{(j)}$ e autovalores E_j de H como [66]

$$c_n(t) = \langle \phi_n | \exp(-iH) \phi(t) | \phi_{n_0} \rangle = \sum_j^N V_n^{(j)} V_{n_0}^{(j)} \exp(-iE_j t). \quad (2.62)$$

Para se calcular $c_n(t)$ através da Eq. 2.63 é necessário diagonalizar o Hamiltoniano $H_{N \times N}$ para $N > 1000$, o que exige muito tempo computacional. As amplitudes da função de onda no tempo $c_n(t)$ podem também ser obtidas através da integração direta das equações de movimento. A integração do sistema (2.62) pode ser feita através de um algoritmo de Runge-Kutta de quarta ordem com incremento menor que 0.01. O erro neste procedimento é da ordem de 10^{-8} . Vamos aplicar dois procedimentos entretanto, o formalismo de integração é mais rápido e eficiente. Através da integração numérica, resultados com excelente precisão para cadeias com $N > 10^4$ são obtidos em poucas horas de cálculo computacional. O segundo momento da distribuição espacial de probabilidade (desvio médio quadrático) é dado por

$$\sigma^2(t) = \sum_n (n - n_0)^2 c_n(t) c_n^*(t). \quad (2.63)$$

A partir do desvio médio quadrático $\sigma^2(t)$ nós podemos estimar o alargamento espacial do pacote no tempo. Evangelou [66] mostrou que se a distribuição de probabilidade para os acoplamentos ($P(J)$) tem o primeiro momento ($\langle 1/J \rangle$) não di-

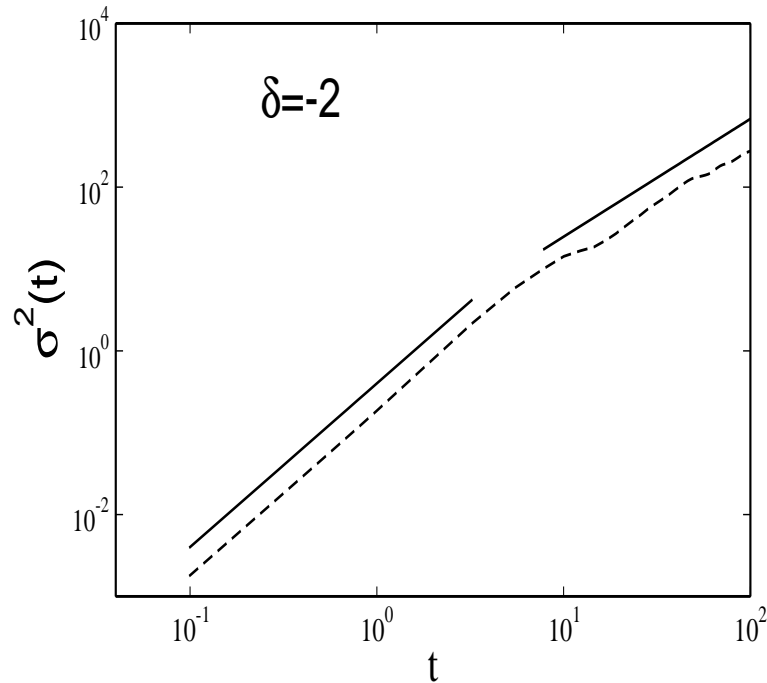


Figura 2.6: Desvio médio quadrático σ^2 versus tempo t para uma cadeia onde os acoplamentos são escolhidos dentro do intervalo $(0, 1)$, obedecendo uma distribuição de probabilidade $P(J) = (1 - \delta)J^{-\delta}$. Para $\delta < 0$ o primeiro momento $\langle 1/J \rangle$ é sempre finito e o sistema apresenta uma dinâmica superdifusiva ($\sigma^2(t) \propto t^{3/2}$) para tempos longos.

vergente, $\sigma^2(t) \propto t^{3/2}$. Para demonstrar numericamente esta propriedade no caso das ondas de spin, os acoplamentos J foram aleatoriamente escolhidos dentro do intervalo $(0, 1)$ e obedecendo uma distribuição de probabilidade normalizada tipo lei de potência $P(J) = (1 - \delta)J^{-\delta}$, o mesmo sistema estudado por Ziman [63]. Para $\delta < 0$ ($\langle 1/J \rangle$ é sempre finito). Na figura 2.6 reproduzimos um dos resultados da referência [66] para $\delta = -2$. Podemos ver o comportamento super difusivo, $\sigma^2(t) \propto t^{3/2}$, para tempo longos. Para tempos pequenos nós encontramos uma difusão balística: $\sigma(t)^2 \propto t^2$. Isto indica que neste estágio inicial as ondas de spin

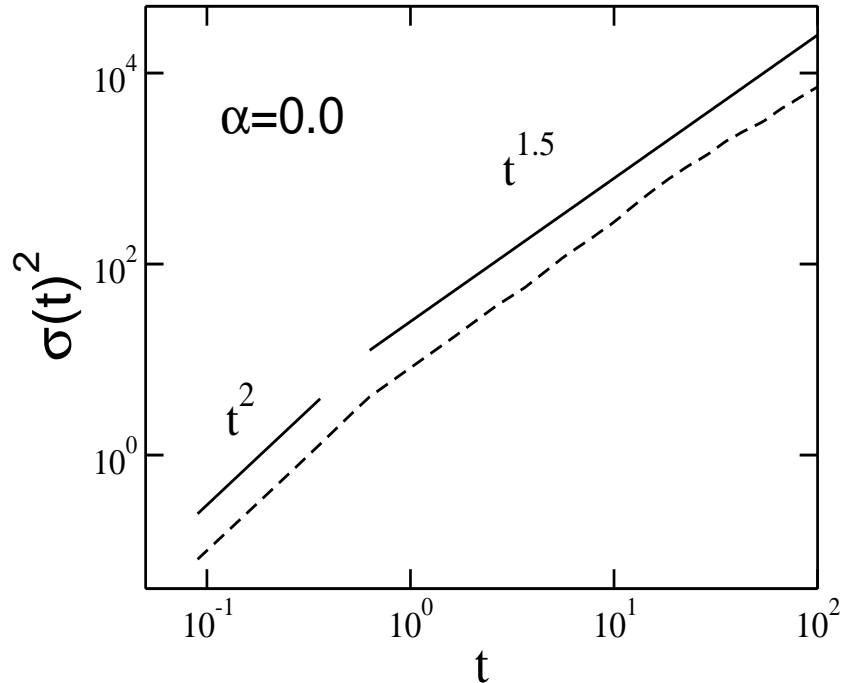


Figura 2.7: Desvio médio quadrático σ^2 versus tempo t para $\alpha = 0$ obtido através da integração das equações de movimento. Utilizamos o procedimento de cadeia expandida para eliminar os efeitos de borda. O pacote apresenta uma dinâmica balística inicial e depois um comportamento superdifusivo ($\sigma^2 \propto t^{3/2}$) para tempos longos.

não percebem a presença de desordem [66]. Estudaremos agora como este comportamento dinâmico é alterado pela presença de correlações na distribuição de acoplamentos. No caso de acoplamentos aleatórios não correlacionados ($\alpha = 0$) vamos utilizar o procedimento de integração numérica numa cadeia com tamanho inicial $N = 500$, localizando a excitação inicial no centro da cadeia $|\phi(t = 0)\rangle = |\phi_{N/2}\rangle$. Quando as probabilidades $c_1(t)$ ou $c_N(t)$ excederem 10^{-100} , ou seja o pacote começa a chegar nas bordas, nós adicionamos mais sítios expandindo a cadeia. Este procedimento, chamado de *self-expanded chain* é geralmente utilizado para evitar efeitos

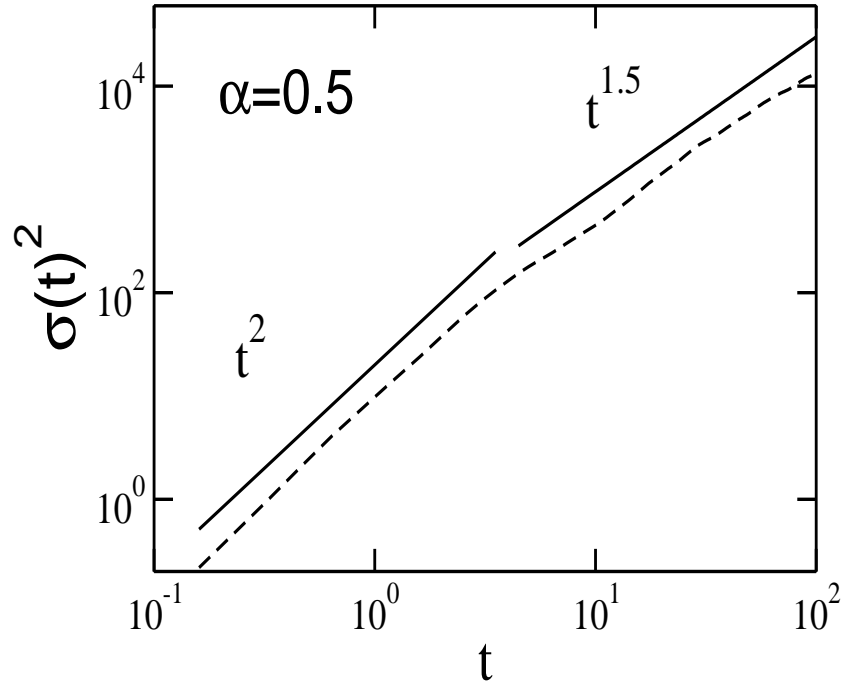


Figura 2.8: Desvio médio quadrático σ^2 versus tempo t para $\alpha = 0.5$ obtido através da integração das equações de movimento em cadeia com $N = 20000$ sítios. O sistema apresenta uma dinâmica balística mais longa entretanto o comportamento superdifusivo ($\sigma^2 \propto t^{3/2}$) é ainda encontrado para tempos longos.

de bordas. Para $\alpha > 0$ este procedimento é menos eficiente pois é complicado expandir a cadeia e manter a transformada de Fourier dos acoplamentos como uma lei de potência bem definida ($S(k) \propto 1/k^\alpha$). Portanto, para evitar os efeitos de bordas quando $\alpha > 0$ vamos utilizar cadeias com $N > 10^4$. Nós também encontramos, para qualquer $\alpha \geq 0$, uma difusão balística [$\sigma(t)^2 \propto t^2$] para tempos pequenos. Na figura 2.7 nós mostramos o desvio médio quadrático versus tempo para $\alpha = 0$ calculado usando integração numérica das equações de movimento. Neste caso a dinâmica apresenta um comportamento super-difusivo para tempos longos: $\sigma(t)^2 \propto t^{3/2}$. Este resultado está em acordo com os resultados obtidos na referência [66] pois a sequência

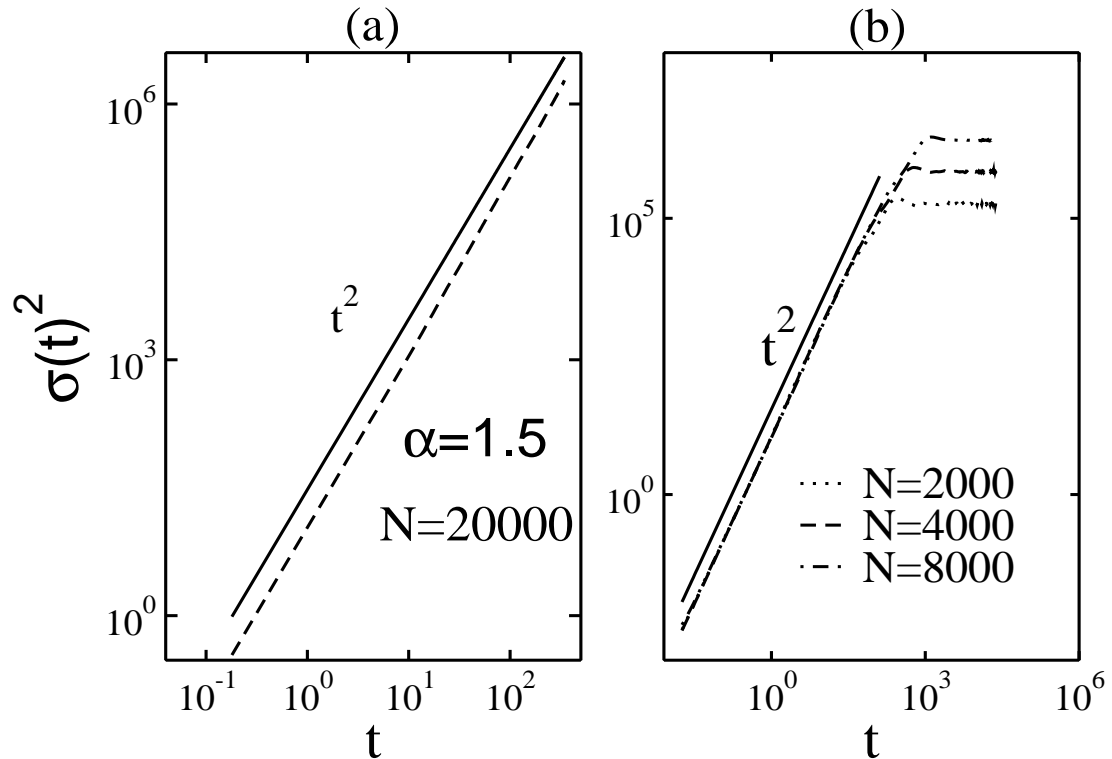


Figura 2.9: (a) Desvio médio quadrático σ^2 versus tempo t para $\alpha = 0.5$ e $N = 20000$ obtido através da integração numérica das equações de movimento. (b) O mesmo resultado obtido através de diagonalização exata em cadeias com $N = 2000$ (linha pontilhada), 4000 (linha tracejada) e 8000 (linha com ponto-traço) sítios. O comportamento balístico ($\sigma^2 \propto t^2$) é encontrado em todos os tempos.

de acoplamentos descrita pela Eq. (2.59) apresenta $\langle 1/J \rangle$ finito para qualquer valor do parâmetro α . A figura 2.8 mostra os dados para $\sigma(t)^2$ obtidos a partir do formalismo de integração numérica para $\alpha = 0.5$ e 2×10^4 sítios. Neste caso, o comportamento balístico inicial é mais prolongado. Entretanto, para tempos longos o sistema apresenta ainda uma dinâmica super difusiva.

No regime de correlações fortes ($\alpha > 1$), o comportamento é completamente diferente. A figura 2.9 mostra que para $\alpha = 1.5$ o pacote tem um alargamento

balístico para todos os tempos. Neste presente caso, apresentamos os resultados através da integração numérica em uma cadeia com $N = 2 \times 10^4$ sítios e diagonalização exata para $N = 2000, 4000$ e 8000 sítios. No caso de diagonalização exata é mais complicado eliminar os efeitos de borda pois as cadeias são menores. Como nós mostramos na seção anterior para qualquer $\alpha > 1$ o sistema apresenta uma fase de ondas de spin estendidas na região de energia baixa. Este novo comportamento dinâmico representa mais um forte indício sobre a natureza estendida das ondas de spin nesta cadeia. Este regime balístico para $\alpha > 1$ pode ser melhor compreendido utilizando um argumento apresentado nas referências [12, 66]. Em nosso caso vamos utilizar o problema eletrônico equivalente para obter o coeficiente de difusão deste sistema com desordem correlacionada. O coeficiente de difusão D do elétron pode ser estimado integrando-se $v(k)\lambda(k)$ sobre os vetores de onda k associados com os estados estendidos que efetivamente participam do transporte, onde $v(k)$ and $\lambda(k)$ são respectivamente a velocidade e o caminho livre médio. Em uma cadeia finita com tamanho N os estados estendidos tem $\lambda(k) \simeq N$. A integração é feita sobre a fração finita de estados que são deslocalizados, com $\Delta k = \text{constante}$. No problema eletrônico equivalente, a densidade de estados é uma função não singular na região onde os estados são estendidos logo, os modos tem velocidade constante [66]. Como $v(k)$ é constante podemos trocar N por t e escrever o coeficiente de difusão como sendo $D \propto t$. Consequentemente, o desvio médio quadrático é dado por $\langle \sigma^2(t) \rangle = Dt \propto t^2$, confirmando a natureza balística obtida em nossos cálculos numéricos.

Capítulo 3

Natureza dos Modos Vibracionais em Cadeias Harmônicas com Desordem Correlacionada

3.1 Introdução

Neste capítulo apresentaremos nossos resultados para a cadeia harmônica com correlações de longo alcance. Introduziremos correlações de longo alcance nas massas utilizando o formalismo descrito no capítulo 1. Através dos procedimentos de matriz de transferência e diagonalização exata, vamos calcular o comprimento de localização e a função participação para os modos vibracionais. Estudaremos também o transporte de energia nesta cadeia com massas correlacionadas. Para estudar o transporte de energia vamos calcular numericamente $M_2(t)$, o segundo momento da distribuição espacial de energia. Na seção seguinte vamos apresentar uma breve

revisão sobre os modos vibracionais em cadeias com desordem não correlacionada.

3.2 Cadeia Harmônica com Desordem Não Correlacionada

Nesta seção utilizaremos o formalismo de matriz de transferência para reproduzir um dos principais resultados de Ishii [40] para a cadeia harmônica: a divergência do comprimento de localização λ dos modos vibracionais com frequência nula ($\lambda \propto 1/\omega^2$). Vamos considerar uma cadeia harmônica com N massas. A equação de movimento para o deslocamento u_n da n -ésima massa com frequência de vibração ω é dada por [73, 74]

$$(\beta_{n-1} + \beta_n - \omega^2 m_n)u_n = \beta_{n-1}u_{n-1} + \beta_n u_{n+1} \quad , \quad (3.1)$$

onde m_n é o valor da massa no n -ésimo sítio e β_n é o valor da constante da mola entre as massas m_n e m_{n+1} . Neste estudo vamos fixar todas as constantes de mola iguais a unidade $\beta_n = 1$. Aplicaremos o formalismo de matriz de transferência unidimensional, semelhante ao apresentado no capítulo 1, para se estudar a natureza dos modos vibracionais deste sistema. Vamos escrever a Eq. (3.1) de uma forma matricial

$$\begin{pmatrix} u_{n+1} \\ u_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 - m_n \omega^2 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_n \\ u_{n-1} \end{pmatrix} . \quad (3.2)$$

Para uma dada frequência ω , existe uma matriz de transferência T_n 2×2 que conecta

os deslocamentos das massas nos sítios $n - 1$ e n com o deslocamento no sítio $n + 1$:

$$T_n = \begin{pmatrix} 2 - m_n \omega^2 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

Se os deslocamentos u_0 and u_1 são conhecidos, o valor de u_n pode ser obtido através do produto de todas as matrizes de transferência:

$$Q_N = \prod_{n=1}^N T_n. \quad (3.4)$$

O grau de localização de cada modo é medido através do expoente de Lyapunov γ [73, 74, 78]:

$$\gamma = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \frac{|Q_N c(0)|}{|c(0)|}, \quad (3.5)$$

onde $c(0) = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_0 \end{pmatrix}$ é uma condição inicial genérica. Em nossos estudos utilizaremos no mínimo 10^5 matrizes de transferência para calcular o expoente de Lyapunov. A natureza dos modos vibracionais pode também ser investigada através do cálculo da função razão participação ξ . Como já foi descrito no capítulo 1, ξ apresenta uma divergência linear com o tamanho da cadeia N quando o estado é estendido e é uma constante para estados localizados. ξ é definido como [5, 75, 76]

$$\xi(\omega) = \frac{\sum_{n=1}^N u_n^2}{\sum_{n=1}^N u_n^4}, \quad (3.6)$$

onde os deslocamentos u_n são aqueles associados as autofrequências ω de uma cadeia de N massas. Para obter estes deslocamentos vamos aplicar um formalismo numérico de diagonalização sobre a matriz secular dos modos $A_{N \times N}$ definida por [72, 74]

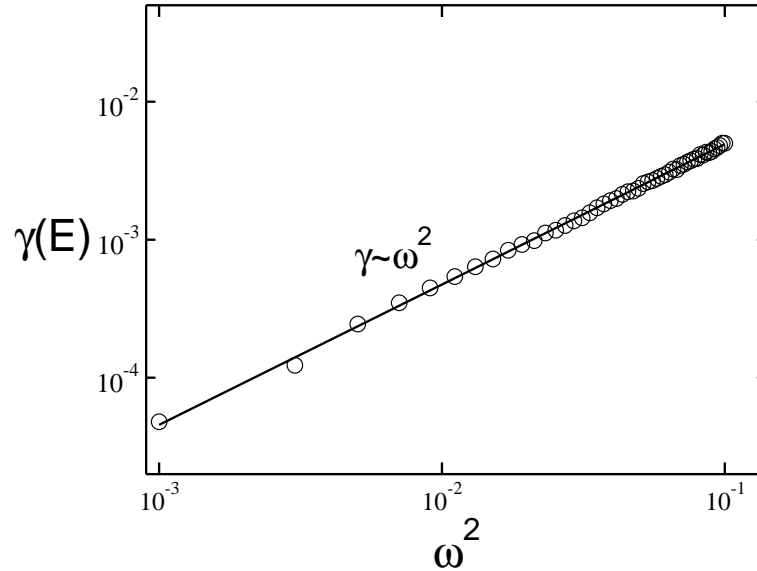


Figura 3.1: Expoente de Lyapunov γ versus energia E para cadeia com 10^6 massas aleatórias não correlacionadas. As massas foram aleatoriamente escolhidas dentro do intervalo $[1, 4.5]$ obedecendo uma distribuição uniforme. Os símbolos indicam os dados e a linha cheia um ajuste. Observe que o expoente de Lyapunov se anula de forma quadrática $\gamma \propto \omega^2$.

$$\begin{cases} A_{i,i} = \frac{(\beta_i + \beta_{i-1})}{m_i} = \frac{2}{m_i}, \\ A_{i,i+1}^2 = A_{i+1,i}^2 = \frac{\beta_i^2}{(m_i m_{i+1})} = \frac{1}{(m_i m_{i+1})}, \\ A_{i,j} = 0 \quad j \neq i + 1. \end{cases} \quad (3.7)$$

Esta matriz $A_{N \times N}$ foi obtida a partir do mapeamento do problema da cadeia harmônica numa equação tipo *tight-binding* eletrônica. Este mapeamento já foi discutido na seção 1.4 do capítulo 1. Para diminuir a flutuação no cálculo da razão participação faremos médias usando 100 amostras ou mais. A matriz secular $A_{N \times N}$ é uma matriz tridiagonal portanto utilizaremos o algoritmo *tqli* [89] para efetuar a diagonalização. No cálculo da participação utilizaremos sistemas menores ($N < 10^4$)

pois a diagonalização numérica de matrizes grandes exige tempo computacional excessivo. Vamos calcular o expoente de Lyapunov para uma cadeia harmônica com massas aleatórias não correlacionadas. Consideraremos uma distribuição de massas aleatoriamente escolhidas em um intervalo $[m_{min}, m_{max}]$ obedecendo uma distribuição uniforme. Para o cálculo do expoente de Lyapunov utilizaremos neste caso cadeias com 10^6 massas, $m_{min} = 1$ e $m_{max} = 4.5$. A figura 3.1 mostra o expoente de Lyapunov γ em função da energia E para esta cadeia não correlacionada. Os símbolos indicam os dados numéricos e a linha cheia um ajuste tipo lei de potência. Observe que o ajuste ($\gamma \propto \omega^2$) reproduz exatamente o resultado de Ishii [40] para uma cadeia harmônica com desordem não correlacionada.

3.3 Cadeia Harmônica com Desordem Correlacionada

Vamos introduzir as correlações de longo alcance nas massas utilizando o mesmo formalismo apresentado no capítulo 1. As massas serão escolhidas a partir do traço do movimento Browniano Fracionário [54, 58, 55]:

$$m_n = \sum_{k=1}^{N/2} \frac{\mathcal{C}(\alpha)}{k^{-\alpha}} \cos\left(\frac{2\pi nk}{N} + \phi_k\right). \quad (3.8)$$

Para evitar massas nulas vamos fixar o valor médio desta sequência em $\langle m_n \rangle = 5$. O procedimento de normalização, descrito no cap. 1, necessário para manter a variância fixa $\Delta m_n = 1$ será utilizado. Nosso interesse é calcular o Expoente de Lyapunov e a razão participação para diversos valores do expoente de correlação α .

A densidade de estados (DOS) para este modelo foi obtida aplicando-se o

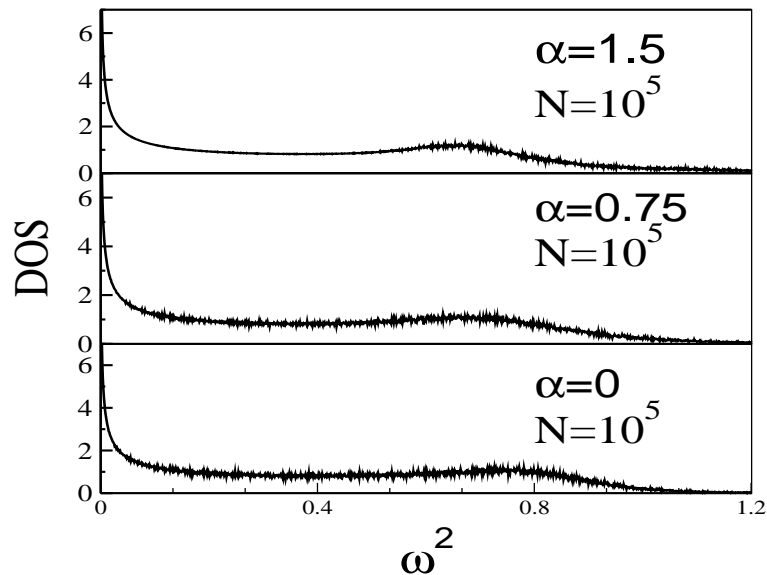


Figura 3.2: Densidade de Estados Normalizada (DOS) como função de ω^2 para $N = 10^5$. Para calcular DOS utilizamos o método de Dean. A densidade de Estados torna-se menos rugosa quando o parâmetro α é aumentado. Para $\alpha = 1.5$ podemos observar uma parte sem flutuação perto do centro da banda.

método de Dean na matriz $A_{N \times N}$ definida pelas Eqs. (3.7). A figura 3.2 mostra a densidade de estados normalizada DOS em função de ω^2 para cadeias com $N = 10^5$ sítios. Note que DOS torna-se menos rugosa quando o parâmetro α é aumentado. Em geral fortes flutuações na densidade de estados estão relacionadas com a presença de estados localizados, enquanto que a ausência de flutuação na DOS está usualmente conectada com estados deslocalizados [66, 74]. A figura 3.3 mostra o expoente de Lyapunov γ versus ω^2 para $\alpha = 0$, ou seja, uma cadeia com massas aleatórias e não correlacionadas. Observe que o expoente de Lyapunov é sempre finito para todas as frequências e se anula em $\omega = 0$ como $\gamma \propto \omega^2$ (ver o *inset* da figura 3.3). Estes resultados estão em plena concordância com os resultados da referência Ref. [73]. A figura 3.4 mostra a razão participação rescalada ξ/N versus

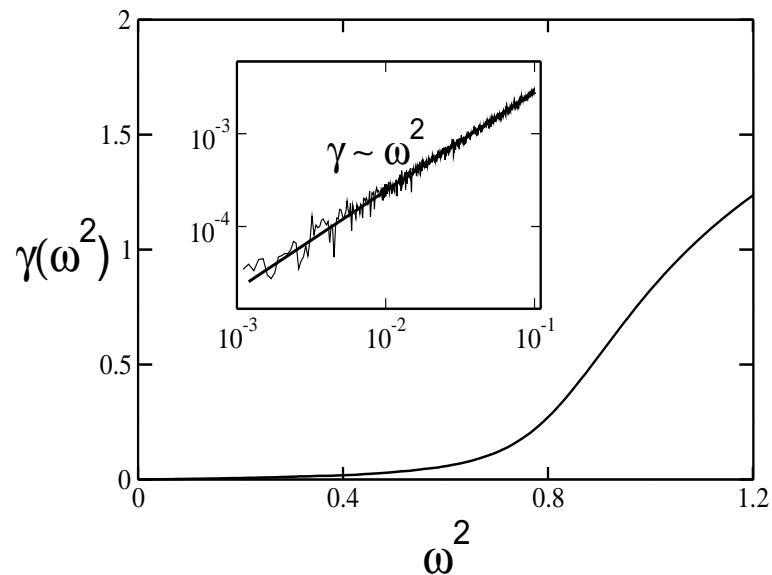


Figura 3.3: Expoente de Lyapunov γ versus ω^2 para $\alpha = 0$ ou seja, uma cadeia com massas aleatórias não correlacionadas, e $N = 2 \times 10^5$ sítios. O expoente γ é finito para frequências não nulas e vai a zero de forma quadrática ($\gamma \propto \omega^2$) para $\omega \rightarrow 0$ (ver *inset*).

ω^2 para $\alpha = 0$. Observe que $\xi(\omega^2 = 0)/N$ permanece finito no limite termodinâmico entretanto, para qualquer frequência não nula os modos vibracionais são localizados com $\xi/N \rightarrow 0$, $N \rightarrow \infty$. Estes resultados para a função participação confirmam os resultados obtidos através do cálculo do expoente de Lyapunov. Para investigarmos os efeitos de correlações de longo alcance na desordem calculamos o expoente de Lyapunov e a razão participação para $\alpha > 0$. A figura 3.5(a) mostrar o expoente de Lyapunov como função de ω^2 para $\alpha = 0.75$ e $N = 2 \times 10^5$. A fig 3.5(b) mostrar a razão participação versus ω^2 para $\alpha = 0.75$ e $N = 200, 400, 800, 1600$. Apesar do expoente de Lyapunov γ ser muito pequeno na região de baixas frequências, a razão participação rescalada se anula para $\omega^2 > 0$ e N grande. Portanto, todos os modos com frequência não nula permanecem localizados. Nós obtemos este mesmo resulta-

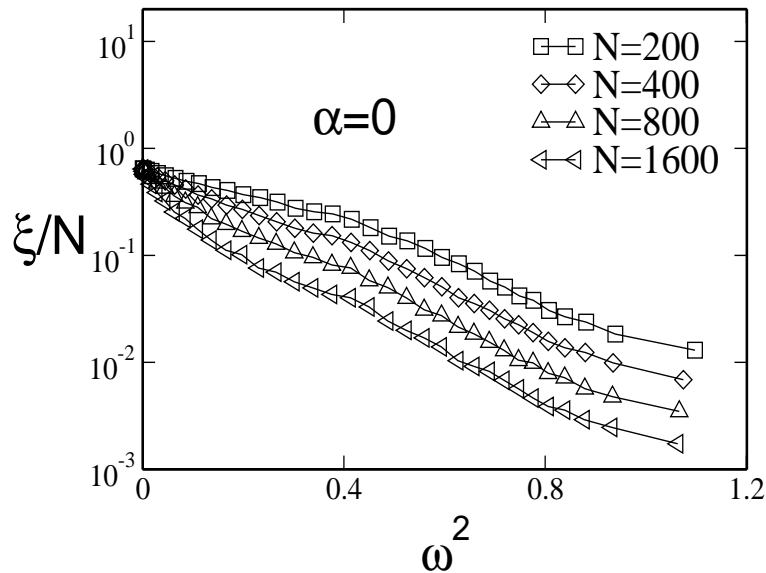


Figura 3.4: Razão participação rescalada pelo tamanho da cadeia (ξ/N) versus ω^2 para $\alpha = 0$ (massas aleatórias sem correlação). Em nossos estudos numéricos utilizamos cadeias com $N = 200, 400, 800, 1600$. Para modos vibracionais com $\omega > 0$, $\xi/N \rightarrow 0$ quando N diverge. Este resultado confirma a natureza localizada destes modos.

dos para todos os valores do parâmetro de correlação $\alpha \leq 1$. Entretanto, a natureza dos modos muda drasticamente quando $\alpha > 1$. A figura 3.6(a) mostra γ versus ω^2 para $\alpha = 1.5$ e $N = 2 \times 10^5$ sítios. O expoente de Lyapunov se anula dentro de uma faixa finita de frequências. Este resultado é um forte indício numérico que este sistema apresenta modos vibracionais estendidos. A razão participação rescalada ξ/N [ver figura 3.6(b)] apresenta um colapso bem definido na região de baixa frequência. Este resultado é mais um forte indício que o sistema apresenta uma fase de modos vibracionais estendidos e que esta fase é estável no limite termodinâmico.

Na cadeia harmônica com desordem não correlacionada a localização dos modos é um dos mecanismos fundamentais que controla o transporte de energia, e

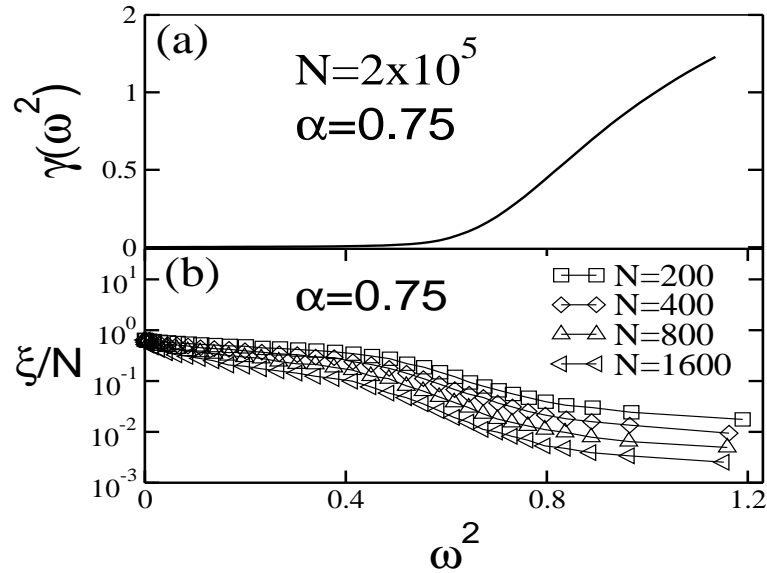


Figura 3.5: (a) Expoente de Lyapunov γ versus ω^2 para $\alpha = 0.75$ e $N = 2 \times 10^5$ sites. (b) Razão participação rescalada ξ/N versus ω^2 para $\alpha = 0.75$ e $N = 200, 400, 800, 1600$. O expoente de Lyapunov γ , no início da banda, é muito pequeno quando α é próximo de 1. Entretanto, todos os modos com $\omega > 0$ são localizados pois $\xi/N \rightarrow 0$ quando N diverge.

portanto, a condutividade térmica na cadeia harmônica. A presença destes modos vibracionais não espalhados pode alterar o transporte de energia. Na próxima seção estudaremos diretamente os efeitos destas correlações sobre o transporte de energia na cadeia harmônica.

3.4 Transporte de Energia

Para estudarmos a evolução temporal da energia nesta cadeia harmônica vamos calcular o segundo momento da distribuição espacial de energia [77, 79]. Esta

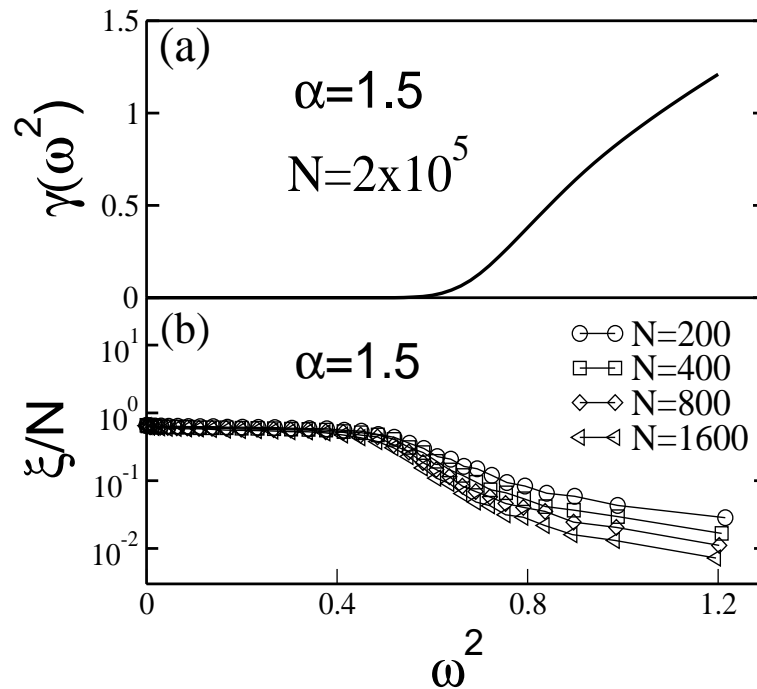


Figura 3.6: (a) Expoente de Lyapunov γ versus ω^2 para $\alpha = 1.5$ e $N = 2 \times 10^5$ sítios. γ se anula dentro de uma faixa de frequências, revelando a presença de modos vibracionais estendidos. (b) Razão participação rescalada ξ/N como função de ω^2 para $\alpha = 1.5$ e $N = 200, 400, 800, 1600$. A fase de modos vibracionais estendidos é confirmada pelo colapso da participação na região de frequência baixa.

quantidade está relacionada com a condutividade térmica pela fórmula de Kubo [87, 77]. Vamos considerar que o Hamiltoniano clássico H da cadeia harmônica pode ser escrito como

$$H = \sum_{n=1}^N h_n(t) , \quad (3.9)$$

onde a energia $h_n(t)$ é a porção da energia total sobre a massa do sítio n (m_n). A energia $h_n(t)$ é igual a energia potencial das molas que estão acopladas na massa m_n mais a energia cinética desta massa. Logo podemos escrever uma expressão formal

para $h_n(t)$:

$$h_n(t) = \frac{P_n^2}{2m_n} + \frac{\beta_n}{4}[(Q_{n+1} - Q_n)^2 + (Q_n - Q_{n-1})^2]. \quad (3.10)$$

Os termos P_n e Q_n representam o momento e o deslocamento da massa no sítio n . As equações de movimento para P_n e Q_n podem ser obtidas a partir das equações de Hamilton abaixo:

$$\dot{P}_n(t) = -\frac{\partial H}{\partial Q_n} = \beta_n[(Q_{n+1} - Q_n) - (Q_n - Q_{n-1})], \quad (3.11)$$

$$\dot{Q}_n(t) = \frac{\partial H}{\partial P_n} = \frac{P_n(t)}{m_n}. \quad (3.12)$$

A razão $h_n(t)/H$ entre a energia concentrada no sítio n ($h_n(t)$) e a energia total do sistema H pode ser utilizada para definir o segundo momento da distribuição espacial de energia $M_2(t)$ [77]. Em $t = 0$ a energia H é introduzida na cadeia através de uma perturbação, esta perturbação pode ser dada ao sistema através de um impulso (P) sobre uma dada massa da cadeia ($P_{n_0} = P^0 \delta_{n,n_0}$) ou através de um deslocamento (Q) em uma massa da cadeia ($Q_{n_0} = Q^0 \delta_{n,n_0}$). Logo podemos escrever $M_2(t)$ como sendo

$$M_2(t) = \sum_{n=1}^N (n - n_0)^2 [h_n(t)/H], \quad (3.13)$$

onde n_0 é o sítio da cadeia onde inicialmente ($t = 0$) a perturbação ocorreu. Vamos aplicar um formalismo de integração numérica para resolver as equações diferenciais para $P(t)$ e $Q(t)$ (Eqs. (3.11) e (3.12)) e calcular $h(t)$ através da Eq. (3.10). Para realizar a integração deste sistema de equações iremos utilizar o algoritmo de Runge-Kutta de quarta ordem com incremento temporal Δt . Durante a integração vamos calcular também a energia total $H(t)$ através da Eq. (3.9) e comparar com a energia inicial da cadeia $H(t = 0)$. A razão entre estas duas quantidades define o incremento

temporal Δt exigido durante a integração. Vamos ajustar o incremento dentro do intervalo $10^{-5} < \Delta t < 10^{-3}$ de modo que $|1 - H(t)/H(t = 0)| < 10^{-8}$ em todos nossos cálculos. O segundo momento da distribuição espacial $M_2(t)$ tem a mesma importância que o desvio médio quadrático do pacote eletrônico em cristais ou materiais amorfos [77]. Em uma dada cadeia harmônica onde a energia foi introduzida através de uma condição inicial de impulso, a energia se propaga mais rápido do que em cadeias com excitação inicial tipo deslocamento. Este resultado foi validado por argumentos analíticos e cálculos numéricos [77, 79]. Vamos calcular numericamente $M_2(t)$ para vários valores do parâmetro α e considerar os dois tipos de condição inicial: Excitação inicial tipo impulso e Excitação inicial tipo deslocamento.

Excitação inicial tipo impulso

Vamos considerar a mesma cadeia harmônica descrita na seção 3.3. As constantes de força são todas iguais a 1 ($\beta_n = 1$) e as massas são geradas a partir da Eq. (3.8). Introduziremos um impulso inicial no centro da cadeia $P_{n_0}(t = 0) = \delta_{n_0, N/2}$ e estudaremos numericamente a evolução da energia. Em nossos cálculos para $\alpha = 0$ vamos utilizar o método da cadeia auto-expandida com tamanho inicial $N = 1000$ para eliminar os efeitos de bordas. Durante a integração numérica vamos manter a fração da energia nas bordas da cadeia [$h_0(t)/H$ e $h_N(t)/H$] menores que 10^{-300} em todos os tempos da integração. Para qualquer $\alpha > 0$ não é possível utilizar o método de cadeia auto-expandida, portanto vamos utilizar uma cadeia grande com $N = 10000$ massas e interromper a integração quando as quantidades [$h_0(t)/H$ e $h_N(t)/H$] excederem 10^{-300} . A figura 3.7 mostra o segundo momento da distribuição de energia rescalado $M_2(t)/t^{1.5}$ versus tempo t para $\alpha = 0$ (linha

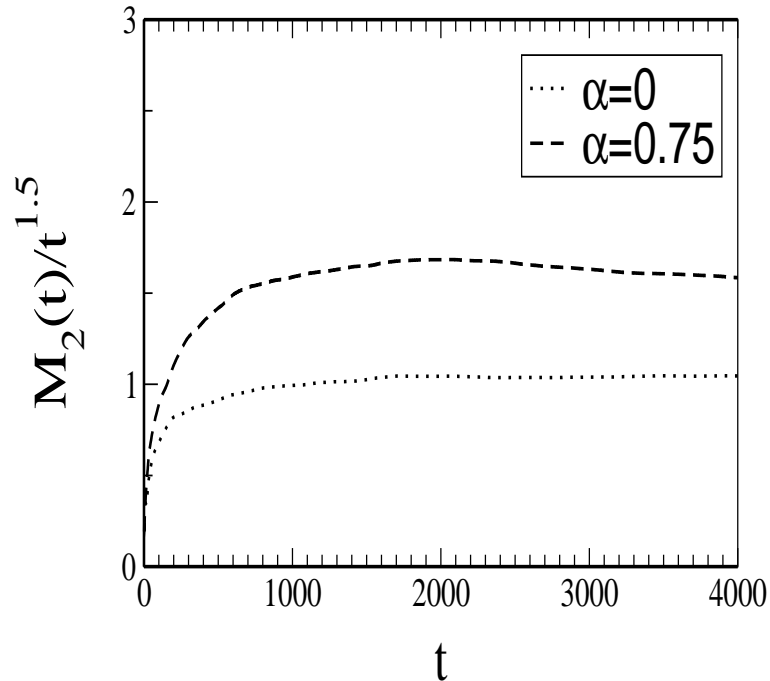


Figura 3.7: Segundo momento da distribuição de energia rescalado $M_2(t)/t^{1.5}$ versus tempo t para $\alpha = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha = 0.75$ (linha tracejada) com condição inicial tipo impulso. Para $0 \leq \alpha \leq 1$ nós encontramos apenas um comportamento superdifusivo no limite de tempos longos.

pontilhada) e $\alpha = 0.75$ (linha tracejada). O caso ($\alpha = 0$) corresponde a uma cadeia com massas aleatórias sem correlação e $\alpha = 0.75$ a uma cadeia com distribuição de massas com um fraco grau de correlações. Como podemos ver, nós encontramos um comportamento superdifusivo para $\alpha = 0$. Este resultado está de acordo com os resultados analíticos e numéricos para o transporte de energia em cadeias harmônicas com massas não correlacionadas e excitação inicial tipo impulso [77]. Para $\alpha = 0.75$ o segundo momento da distribuição de energia ainda apresenta um comportamento superdifusivo $M_2(t) \propto t^{1.5}$, pois o grau de correlação nas massas é fraco. Por outro lado, para $\alpha > 1$, nós encontramos uma mudança no tipo de transporte de ener-

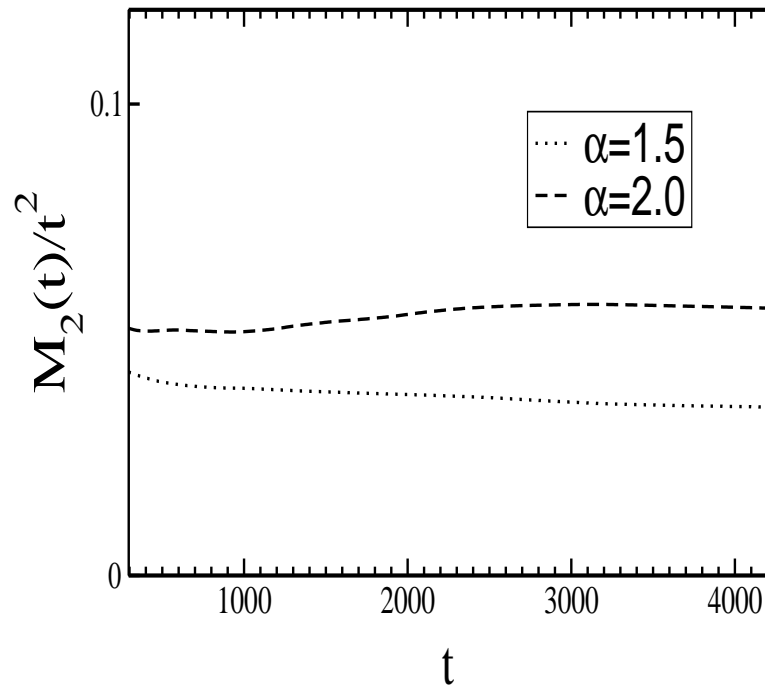


Figura 3.8: Segundo momento da distribuição de energia rescalado $M_2(t)/t^2$ versus tempo t para $\alpha = 1.5$ (linha pontilhada) e $\alpha = 2.0$ (linha tracejada) com condição inicial tipo impulso. Para $\alpha > 1$ temos um comportamento balístico no limite de tempos longos.

gia. A figura 3.8 mostra o segundo momento da distribuição de energia rescalado $M_2(t)/t^2$, para $\alpha = 1.5$ (linha pontilhada) e $\alpha = 2.0$ (linha tracejada). No regime de $\alpha > 1$ nós mostramos na seção 3.3 que esta cadeia harmônica apresenta uma fase de modos vibracionais estendidos na região de baixas frequências. Associado a estes estados estendidos o segundo momento $M_2(t)$ apresenta um comportamento balístico.

Excitação inicial tipo deslocamento

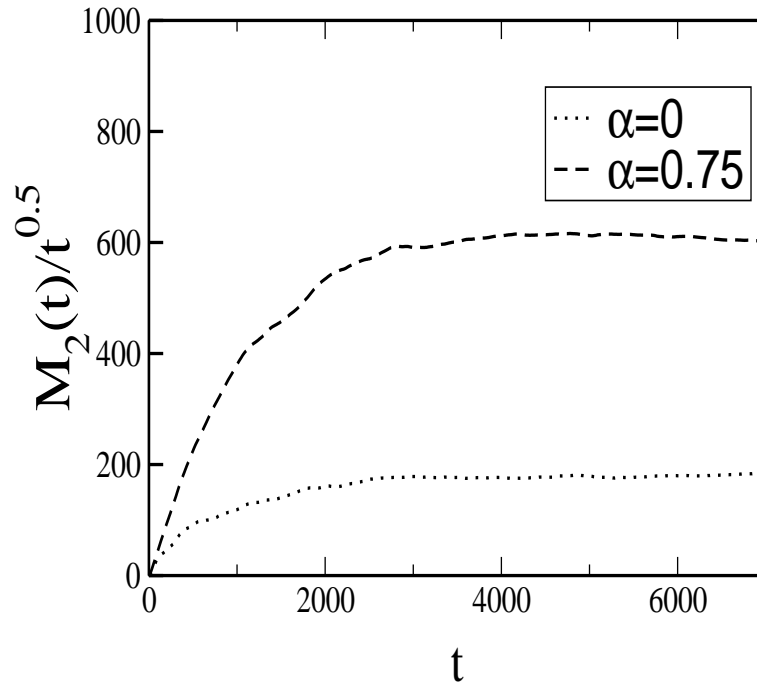


Figura 3.9: Segundo momento da distribuição de energia rescalado $M_2(t)/t^{0.5}$ versus tempo t para $\alpha = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha = 0.75$ (linha tracejada) com condição inicial tipo deslocamento. O comportamento subdifusivo é encontrado no limite de tempos longos.

O comportamento dinâmico do segundo momento $M_2(t)$ em cadeias harmônicas com desordem não correlacionada e condição inicial tipo deslocamento é completamente diferente do comportamento dinâmico de $M_2(t)$ no caso de condição inicial tipo impulso [77, 79]. De fato, através de um formalismo analítico foi mostrado que $M_2(t) \propto t^{0.5}$ em uma cadeia harmônica com desordem não correlacionada e condição inicial tipo deslocamento [77]. Este comportamento subdifusivo também foi obtido através de técnicas numéricas. Para $\alpha = 0$ (linha pontilhada) nós reproduzimos este comportamento, como podemos ver na figura 3.8 através do segundo

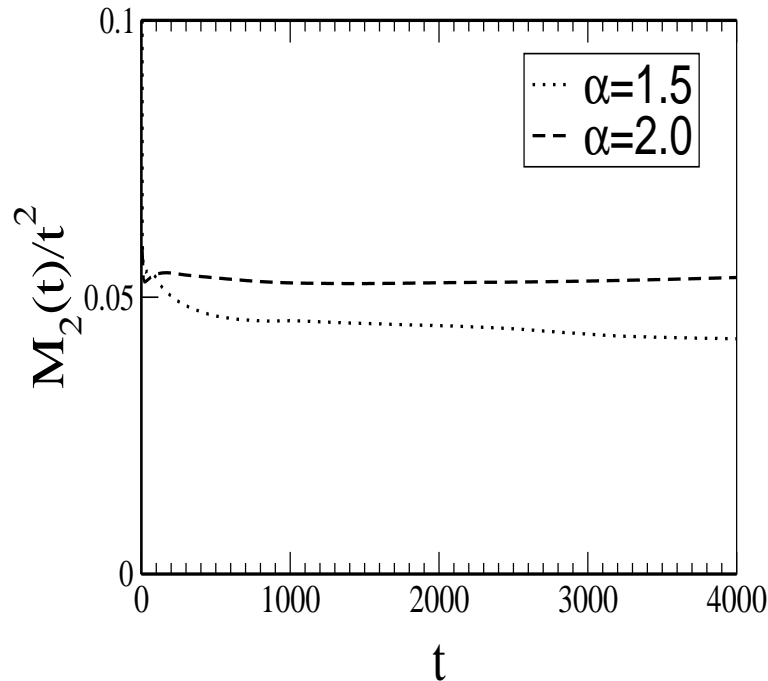


Figura 3.10: Segundo momento da distribuição de energia rescalado $M_2(t)/t^2$ versus tempo t para $\alpha = 1.5$ (linha pontilhada) e $\alpha = 2.0$ (linha tracejada) com condição inicial tipo deslocamento. Para $\alpha > 1$ nós encontramos um comportamento balístico no limite de tempos longos.

momento rescalado $M_2(t)/t^{0.5}$ versus tempo t com condição inicial tipo deslocamento $Q_{n_0}(t=0) = \delta_{n_0, N/2}$. Ainda na figura 3.9 podemos ver o segundo momento rescalado, $M_2(t)/t^{0.5}$, para $\alpha = 0.75$ (linha tracejada). Em nossos cálculos numéricos nós encontramos que este comportamento subdifusivo $M_2(t) \propto t^{0.5}$ é mantido para $0 \leq \alpha < 1$. Para correlações fortes ($\alpha > 1$), que induzem novos modos vibracionais estendidos, o transporte de energia é mais rápido do que neste regime subdifusivo. Nossos cálculos numéricos indicam que para $\alpha > 1$ o segundo momento $M_2(t)$ novamente assume um comportamento balístico, $M_2(t) \propto t^2$, como mostra a figura 3.10. O segundo momento está relacionado com a constante de difusão

na cadeia e esta, por sua vez, relacionada com a condutividade térmica através da fórmula de Kubo [87]. Portanto, o transporte de energia balístico na cadeia no regime de $\alpha > 1$ pode influenciar fortemente a condutividade térmica de cadeias harmônicas desordenadas.

Capítulo 4

Modelo de Anderson com Correlações de Longo Alcance : Novos Resultados

4.1 Modelo de Anderson 1d com Correlações de Longo Alcance:Novos Resultados

Como apresentamos na seção 1.3.2 do capítulo 1, o modelo de Anderson 1d com correlações de longo alcance nas energias foi estudado na Ref. [21]. Neste sistema a sequência de energias dos sítios ϵ_i foi gerada através de um formalismo de transformada de Fourier discreta e apresenta um espectro de potência $S(k) \propto 1/k^\alpha$. Para $\alpha > 2$ e considerando a variância das energias fixa $\Delta\epsilon_i = 1$, este sistema apresenta uma transição metal isolante [21]. A existência desta transição foi question-

ada na Ref. [90]. Neste trabalho, os autores publicaram um estudo sobre a natureza dos estados eletrônicos neste modelo quando a variância não é normalizada. Eles concluíram que, se a variância diverge, os estados são localizados e somente se a variância é fixa existe uma transição de estados localizados para estados aparentemente estendidos [90]. O primeiro resultado encontrado por eles, estados localizados para variância grande, nada mais é que um dos resultados da teoria usual de localização. Mesmo no modelo de Anderson 3d, os estados são localizados se a variância ou a largura da desordem W for grande comparada com a amplitude de hopping ($W \gg t$) [2]. A segunda conjectura apresentada na Ref. [90], transição de estados localizados para estados aparentemente estendidos, é baseada numa crítica ao procedimento de normalização da variância das energias dos sítios utilizado na Ref. [21]. Eles concluíram de forma errônea que a normalização imposta gera uma suavização da desordem, e que esta suavização da desordem é responsável por estados aparentemente estendidos. O procedimento de normalização é necessário somente para manter a largura da banda de estados permitidos ou seja, a faixa de energias B onde a densidade de estados é diferente de zero, fixa no limite termodinâmico. Se a largura ou variância da distribuição de desordem depender do tamanho do sistema a largura B da banda de estados também dependerá. Com a variância da desordem fixa, o sistema apresenta, no limite de $N \rightarrow \infty$, uma desordem macroscópica e largura da banda de estados independente do tamanho da cadeia [21]. Mais recentemente um extensivo estudo da resistividade deste modelo [21] mostrou que os estados estendidos têm resistência nula e que a origem deste comportamento está ligado às correlações de longo alcance na desordem [62]. Nesta seção vamos apresentar um estudo adicional sobre a natureza dos estados eletrônicos no modelo de Anderson 1d com correlações de longo alcance. Vamos calcular o coeficiente de transmissão

deste modelo e mostrar que os estados estendidos, obtidos através do cálculo do expoente de Lyapunov [21], têm transmitância máxima $|t(E)| \approx 1$. Utilizando este formalismo mostraremos que o valor crítico ($\alpha_c = 2$) encontrado na referência [21] depende de uma forma especial da variância da distribuição $\Delta\epsilon_i$, não sendo portanto uma característica universal do modelo.

4.1.1 Coeficiente de Transmissão

O coeficiente de transmissão ou transmitância $t(E)$ do modelo de Anderson com desordem não correlacionada apresenta um decaimento exponencial com o comprimento do sistema N . Este resultado, que foi demonstrado por Ishii [73], está de acordo com a presença de estados exponencialmente localizados neste sistema. Vamos calcular o coeficiente de transmissão para este sistema com desordem correlacionada utilizando um formalismo de matriz de transferência. Consideraremos um sistema com número infinito de sítios, $-\infty < n < \infty$. Vamos considerar também que nosso sistema está dividido em três partes cujos hamiltonianos podem ser escritos como [91]:

$$\begin{aligned} H_1 &= \sum_{n=-\infty}^{n=1} t(|n\rangle\langle n+1| + |n-1\rangle\langle n|), \quad -\infty < n \leq 1, \\ H_2 &= \sum_{n=2}^N \epsilon_n |n\rangle\langle n| + [t_{n,n+1}|n\rangle\langle n+1| + t_{n-1,n}|n\rangle\langle n-1|], \quad 2 < n < N, \\ H_3 &= \sum_{n=N+1}^{n=\infty} t(|n\rangle\langle n+1| + |n-1\rangle\langle n|), \quad N+1 < n < \infty. \end{aligned} \quad (4.1)$$

Os seja, entre os sítios 2 e N temos o modelo de Anderson. O restante do sistema

é composto de dois condutores perfeitos sem desordem. Os autoestados de H_1 e H_3 são ondas de Block que podem ser escritas como

$$c_n = Ae^{ikn} + Be^{-ikn}, \quad -\infty < n \leq 1, \quad (4.2)$$

$$c_n = Ce^{ikn} + De^{-ikn}, \quad N + 1 \leq n < \infty. \quad (4.3)$$

De acordo com a Eq. (1.23) da seção 1.3.1 a amplitude da função de onda nos sítios $N + 1$ e $N + 2$ está relacionada com as amplitudes nos sítios 0 e 1 através do produto de todas as matrizes de transferência:

$$\begin{pmatrix} c_{N+2} \\ c_{N+1} \end{pmatrix} = \prod_{l=1}^{N+1} T_l \begin{pmatrix} c_1 \\ c_0 \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

onde $Q_{N+1} = \prod_{l=1}^{N+1} T_l$ é o produto das matrizes de transferência. Substituindo as Eqs. (4.2) e (4.3) na última equação, temos,

$$\begin{pmatrix} Ce^{ik(N+2)} + De^{-ik(N+2)} \\ Ce^{ik(N+1)} + De^{-ik(N+1)} \end{pmatrix} = Q_{N+1} \begin{pmatrix} Ae^{ik} + Be^{-ik} \\ A + B \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

Para escrever a Eq. (4.5) de outra forma vamos definir as seguintes matrizes $S(k)$ e $M(k, N)$:

$$S(k) = \begin{pmatrix} e^{-ik} & e^{ik} \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.6)$$

e

$$M(k, N) = \begin{pmatrix} e^{-ik(N+1)} & 0 \\ 0 & e^{ik(N+1)} \end{pmatrix}. \quad (4.7)$$

Utilizando estas matrizes podemos escrever facilmente as identidades a seguir:

$$\begin{pmatrix} Ae^{ik} + Be^{-ik} \\ A + B \end{pmatrix} = S(k) \begin{pmatrix} B \\ A \end{pmatrix}, \quad (4.8)$$

$$\begin{pmatrix} Ce^{ik(N+2)} + De^{-ik(N+2)} \\ Ce^{ik(N+1)} + De^{-ik(N+1)} \end{pmatrix} = M(k, N)S(K) \begin{pmatrix} D \\ C \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

Vamos substituir estas duas últimas identidades na Eq. (4.5),

$$M(k, N)S(K) \begin{pmatrix} D \\ C \end{pmatrix} = Q_{N+1}S(k) \begin{pmatrix} B \\ A \end{pmatrix}, \quad (4.10)$$

e multiplicar toda a equação por $S(k)^{-1}M(k, N)^{-1}$ para obter

$$\begin{pmatrix} D \\ C \end{pmatrix} = P(k, N) \begin{pmatrix} B \\ A \end{pmatrix}. \quad (4.11)$$

A nova matriz de transferência $P(k, N)$ pode ser escrita como

$$P(k, N) = \begin{pmatrix} e^{ik(N+1)} & 0 \\ 0 & e^{-ik(N+1)} \end{pmatrix} S(k)^{-1}Q_{N+1}S(k). \quad (4.12)$$

Para calcularmos a transmitância nós consideramos o elétron movendo-se de $-\infty$ até ∞ com energia $E = 2t \cos(k)$. No trecho $n > N + 1$ só existem ondas na direção positiva de n , logo $D=0$. A razão entre as quantidades $|C/A|^2$ é a transmitância

$t(E)$ do sistema. Utilizando a Eq. (4.11) podemos escrever $t(E)$ como sendo

$$|t(E)| = \left| \frac{-P_{21}(k, N)}{P_{12}(k, N)P_{11}(k, N)} + P_{22}(k, N) \right|^2. \quad (4.13)$$

Vamos aplicar este formalismo para calcular a transmitância $t(E)$ para o modelo de Anderson 1d com correlações de longo alcance. Vamos considerar o hamiltoniano descrito pela Eq. (1.21) com as energias dos sítios ϵ_j descritas pelo traço do movimento Browniano [Eq. (1.30)]. O mesmo procedimento de normalização da variância foi utilizado ($\Delta\epsilon_j = 1$). Para ter uma boa estabilidade numérica utilizamos cadeias com $N = 2 \times 10^5$ sítios. Se o hamiltoniano apresentar apenas estados localizados, ou seja, $\alpha < 2$, nós obtemos sempre uma transmitância nula $t(E) < 10^{-20}$. Entretanto, no regime em que este sistema apresenta uma fase metálica, ou seja, $\alpha > 2$, nós encontramos estados com uma transmitância máxima $|t(E)| \approx 1$. Os resultados de $|t(E)|$ versus E para $\alpha = 2.25, 2.5, 2.7, 3$ podem ser observados na figura 4.1. Numericamente nossos dados tem precisão de 10^{-4} ou seja $|t(E)| = 0.9999$. Nós também plotamos o expoente de Lyapunov para este sistema. Para calcularmos o expoente de Lyapunov γ utilizamos o comportamento assintótico do produto de matrizes de transferência Q_{N+1} : $\gamma = \lim_{N \rightarrow \infty} (1/N) \log |Q_{N+1} C_0 / C_0|$. Este formalismo já foi apresentado na seção 1.3.1. Observe que a fase de estados cuja transmitância é máxima, $|t(E)| \approx 1$, corresponde exatamente à fase de estados estendidos prevista pelo cálculo do expoente de Lyapunov.

Uma questão importante é saber se o valor crítico do parâmetro de correlação α_c depende da largura da desordem utilizada. Neste modelo a largura da desordem é controlada pela variância $\Delta\epsilon_j$ da distribuição de desordem. No trabalho original de Moura e Lyra [21] não foi analisado se existe alguma dependência do valor crítico $\alpha_c = 2$ com a variância $\Delta\epsilon_j$ ou se este valor é universal. A figura 4.2 mostra o

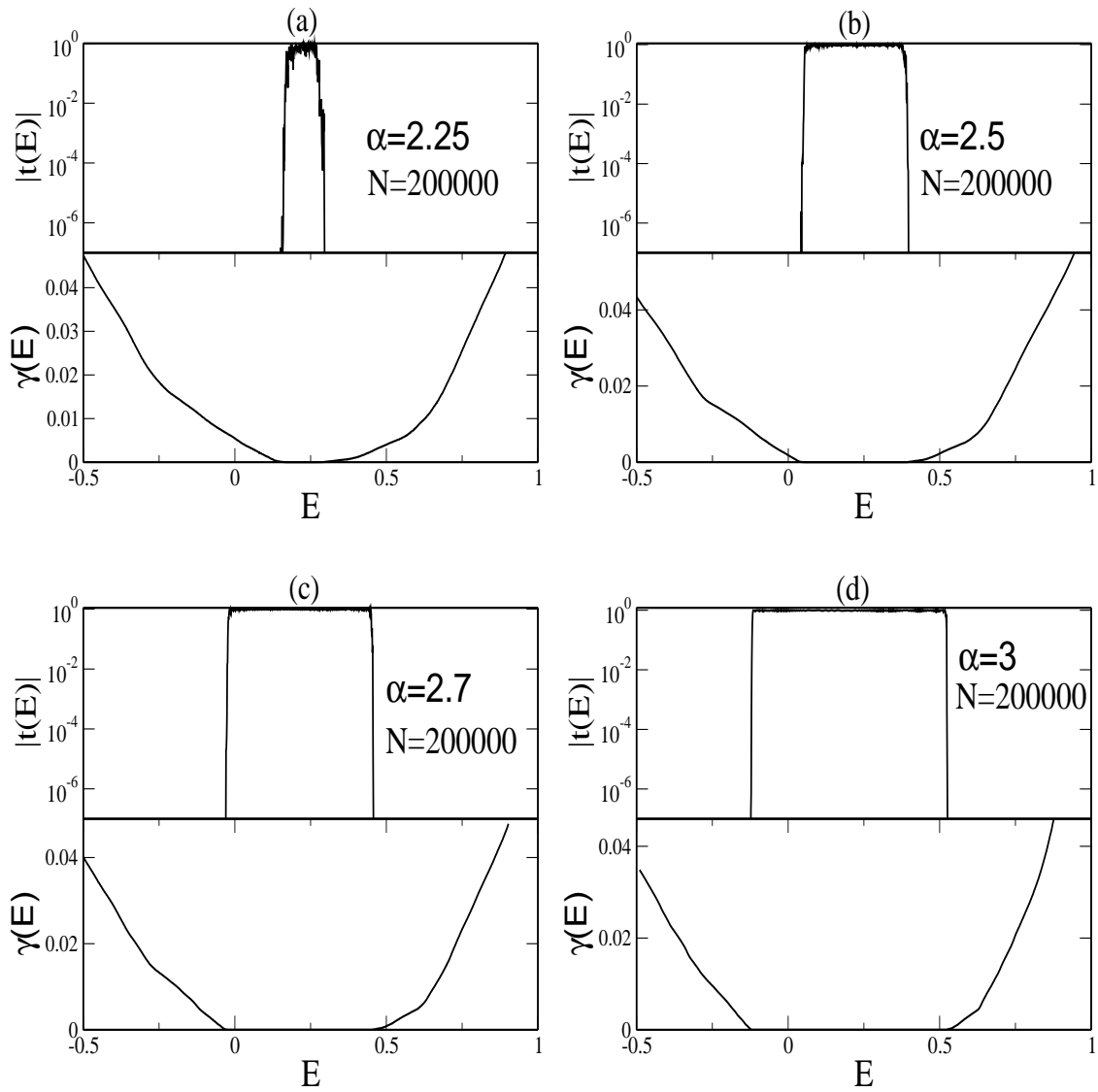


Figura 4.1: Transmitância $|t(E)|$ e expoente de Lyapunov γ versus E para sistemas com parâmetro de correlação $\alpha =$:(a)2.25, (b) 2.5 (c)2.7 e (d)3. Todas os sistemas têm $N = 2 \times 10^5$ sítios e variância da distribuição de energias $\Delta\epsilon_j = 1$.

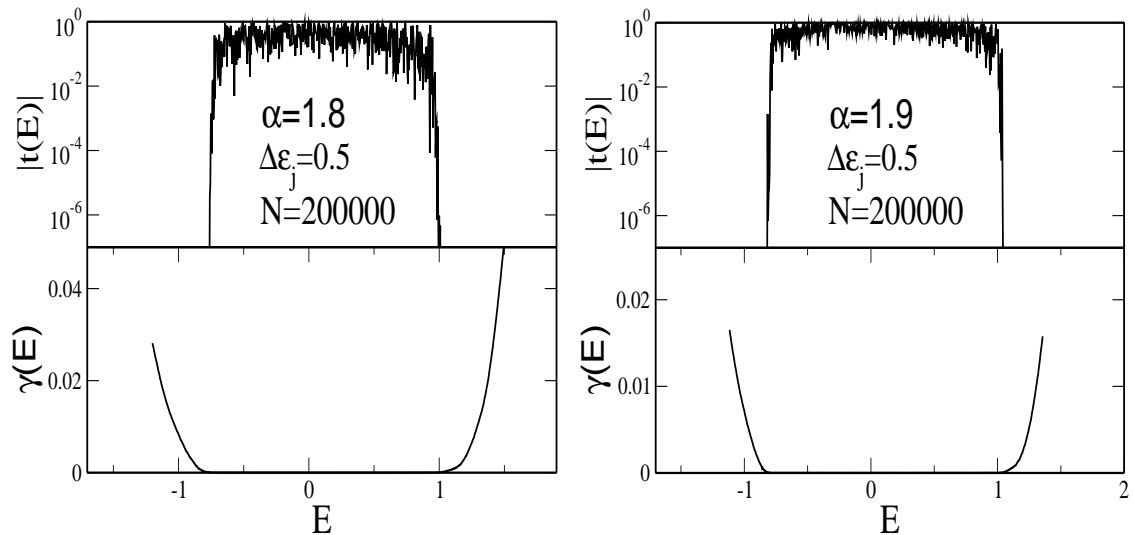


Figura 4.2: (a) Transmitância $|t(E)|$ e expoente de Lyapunov γ para $\alpha = 1.8$ e $\alpha = 1.9$ e $N = 2 \times 10^5$ sítios. A variância destas sequências foi normalizada de modo que $\Delta\epsilon_j = 0.5$. Observe a existência de uma fase de estados estendidos no centro da banda mesmo para $\alpha < 2$.

coeficiente de transmissão $|t(E)|$ e o expoente de Lyapunov γ para sistemas com $\alpha < 2$ e $\Delta\epsilon_j = 0.5$. Observe que o sistema pode apresentar estados estendidos neste regime de $\alpha < 2$. Estamos considerando que os estados são estendidos quando o Lyapunov γ é da ordem de $1/N$ e a transmitância $|t(E)| \approx 1$. Para cada valor de $\alpha < 2$ existem uma variância máxima de desordem $\Delta_c\epsilon_j$ na qual o sistema ainda apresenta estados estendidos. Logo uma fase de estados estendidos pode também ser encontrada quando $\alpha < 2$ e $\Delta\epsilon_i < (\Delta\epsilon_i)_c$. A dependência de $\alpha_c < 2$ com a variância $(\Delta\epsilon_j)_c$ é apresentada na figura 4.3. Os símbolos indicam os pontos e a linha um ajuste não linear. Nós estudamos várias sequências com parâmetro de correlação $1.5 < \alpha_c < 2$. Utilizando α neste intervalo as variâncias críticas $(\Delta\epsilon_j)_c$ encontradas foram sempre maiores que 0.1. Dentro deste intervalo de valores

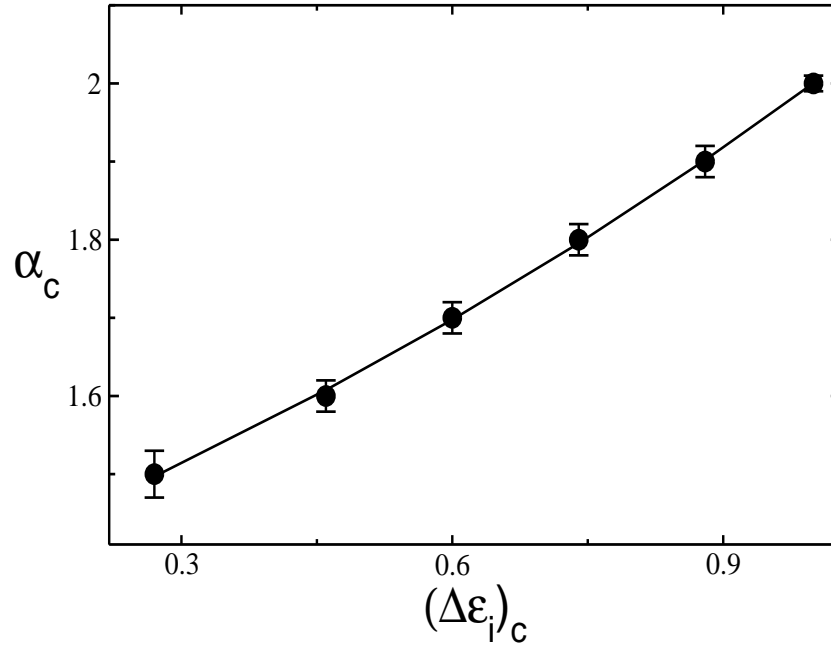


Figura 4.3: Parâmetro de correlação crítico α_c versus variância crítica $(\Delta\epsilon_j)_c$. Os símbolos indicam os dados numéricos e a linha cheia indica um ajuste exponencial.

utilizados $1.5 < \alpha_c < 2$ e $0.1 < (\Delta\epsilon_j)_c \leq 1.0$ nós fizemos uma análise dos dados numéricos através de um procedimento de ajuste exponencial (linha cheia na figura 4.3). Nosso melhor ajuste sugere que α_c dependa exponencialmente da variância crítica $(\Delta\epsilon_j)_c$:

$$\alpha_c = \alpha_0 + \delta_0 \exp[\beta_0(\Delta\epsilon_j)_c], \quad 0.1 < (\Delta\epsilon_j)_c \leq 1.0, \quad (4.14)$$

onde $\alpha_0 = 0.576077$, $\delta_0 = 0.783665$ e $\beta_0 = 0.59749$. Entretanto nós não temos nenhum argumento analítico que corrobore esta dependência.

4.1.2 Dinâmica Eletrônica

Nesta seção vamos estudar a dinâmica do elétron no modelo de Anderson com correlações de longo alcance. Como foi discutido na seção 1.2.2, a dinâmica de um elétron em sistemas desordenados representa uma forte assinatura da natureza localizada ou estendida dos autoestados do Hamiltoniano. Vamos calcular a probabilidade de retorno até a origem $P(t)$ e o desvio médio quadrático $\sigma_2(t)$ para o modelo de Anderson e estudar os efeitos das correlações de longo alcance sobre a dinâmica. O procedimento para se calcular estas quantidades foi descrito na seção 1.22 e consiste basicamente em considerar que em $t = 0$, o elétron é colocado no sítio m de modo que $|c_m(t = 0)|^2 = 1$, $c_i(t = 0) = 0$ para $i \neq m$. c_j são as amplitudes da função de onda no sítio j . A equação que governa a dinâmica eletrônica neste sistema é a equação de Shroedinger dependente do tempo:

$$i\hbar \frac{dc_j(t)}{dt} = \epsilon_j c_j(t) + t_{j-1,j} c_{j-1}(t) + t_{j,j+1} c_{j+1}(t), \quad j = 1, 2, \dots, N. \quad (4.15)$$

A probabilidade de retorno até a origem $P(t)$ é dada por

$$P(t) = |c_m(t)|^2, \quad (4.16)$$

e o desvio médio quadrático é dado por

$$\sigma^2(t) = \sum_{i=1}^N (i - m)^2 |c_i(t)|^2. \quad (4.17)$$

Se a probabilidade $P(\infty)$ de se encontrar o elétron no sítio m no limite de $t \rightarrow \infty$ for zero, isto é, $P(\infty) = |c_m(t \rightarrow \infty)|^2 = 0$, o elétron foi difundido através da cadeia. Se

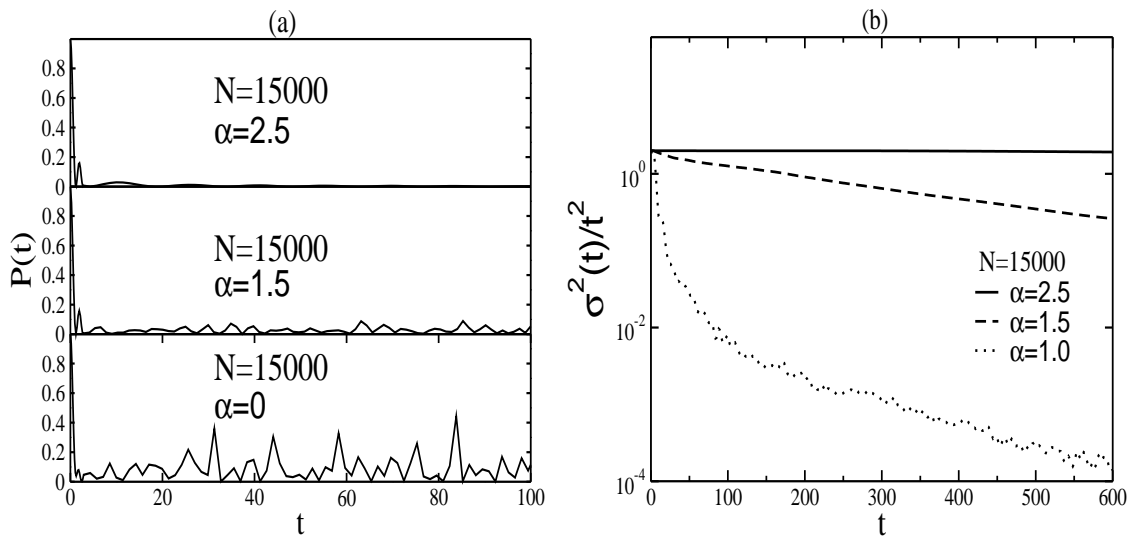


Figura 4.4: (a) Probabilidade de retorno até a origem $P(t)$. (b) Desvio médio quadrático rescalado $\sigma^2(t)/t^2$ para $\alpha = 0, 1.5, 2.5$ e $N = 15000$ sítios. Observe que, para $\alpha = 2.5$, $P(t)$ vai rapidamente a zero e $\sigma^2(t) \propto t^2$.

$P(\infty) \neq 0$, então o elétron não foi difundido por toda a rede e pode ser encontrado no sítio m e nas vizinhanças de m . O desvio médio quadrático $\sigma_2(t)$ é uma medida do alargamento do pacote eletrônico neste sistema. Como já apresentado no capítulo 2 o desvio médio quadrático das ondas de spin apresenta um alargamento balístico se os estados são estendidos. Uma maneira direta de obter as amplitudes da função de onda eletrônica $c_j(t)$ é fazer a integração numérica do conjunto de equações de movimento Eq. (4.15) usando o método de Runge-Kutta. Durante a integração numérica vamos calcular a integral da função de onda $I(t) = \sum_{j=1}^N |c_j(t)|^2$. Para garantir a precisão numérica desejada neste cálculo ($|I(t) - 1| < 10^{-10}$) vamos aplicar o formalismo de Runge-Kutta com intervalos de tempos $\Delta t < 10^{-2}$. O sítio m será escolhido como o centro da cadeia $m = N/2$. Para evitar os efeitos de borda vamos utilizar sistemas com $N > 10^4$ e interromper a integração numérica quando uma das

probabilidades $|c_1(t)|^2$ e $|c_N(t)|^2$ for maior que zero. Consideraremos que as energias dos sítios são descritas pelo traço do movimento Browniano fracionário Eq. (1.30) e as amplitudes de hopping são todas iguais a unidade $t_{i,i+1} = t = 1$. A Fig. 4.4 mostra a probabilidade de retorno até a origem, $P(t)$, e o desvio médio quadrático rescalado $\sigma^2(t)/t^2$ para $\alpha = 0, 1.5, 2.5$ e $N = 15000$ sítios. Observe que para $\alpha < 2$ a probabilidade de retorno apresenta um comportamento oscilatório, enquanto que para $\alpha = 2.5$, $P(t)$ rapidamente vai para zero. Para qualquer $\alpha < 2$ o desvio médio quadrático apresenta um comportamento típico de localização: $\sigma^2(t) = \text{constante}$ quando $t \rightarrow \infty$. Para $\alpha = 2.5$ o desvio quadrático médio $\sigma^2(t)$ apresenta um comportamento balístico, $\sigma^2(t) \propto t^2$, em todos os tempos estudados. Portanto, os estados estendidos apresentados na Ref. [21] têm coeficiente de transmissão $t(E) \approx 1$ e apresentam uma dinâmica balística. Em nossa opinião estes resultados refurtam dúvidas na literatura [90] sobre a veracidade da transição metal-isolante induzida por correlações de longo alcance [21] em sistemas unidimensionais.

4.2 Correlações de Longo Alcance no Modelo de Anderson 2d

Nesta seção vamos apresentar algumas generalizações do modelo de Anderson unidimensional com desordem correlacionada proposto nas referências [21, 22] para o caso bidimensional. Em 1999 Xiong *at al* [25] apresentaram uma primeira generalização para o caso 2d. Eles consideraram o Hamiltoniano de Anderson num

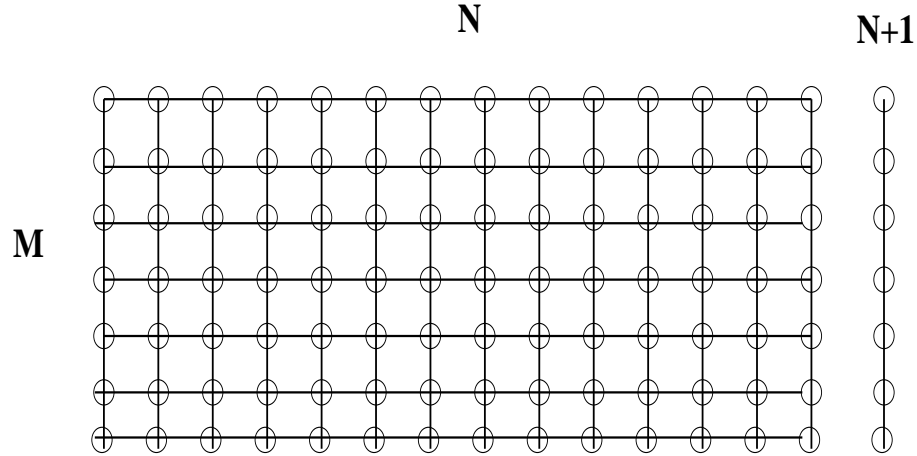


Figura 4.5:

plano $x - y$

$$H = \sum_{i,m} \epsilon_{im} |im\rangle\langle im| + t \sum_{\langle im,jn\rangle} (|im\rangle\langle jn| + |jn\rangle\langle im|) \quad (4.18)$$

onde i e m são números inteiros que representam respectivamente as posições x e y dos sítios no plano. $\langle im, jn \rangle$ é uma notação para indicar que a soma é feita sobre os primeiros vizinhos e ϵ_{im} é a energia do sítos (i, m) . A amplitude de hopping t é a unidade de energia. Os autores [25] consideram que o sistema tem a forma de uma longa faixa com a direção y muito maior que a direção x . Um exemplo ilustrativo desta geometria pode ser visto na Fig. 4.5. O estudo do Hamiltoniano de Anderson em uma geometria quasi-unidimensional como esta (uma faixa $N \times M$ com $N \gg M$) foi objeto de grande interesse na década de 80 [5] devido a possibilidade de se calcular o comprimento de localização dos autoestados em longas faixas, tipicamente $N > 10^5$ e $M < 100$, e extrapolar o comportamento obtido nesta geometria $N \times M$ para uma geometria verdadeiramente 2d (uma caixa $N \times N$). Esta extrapolação é feita através

de uma análise de tamanhos finitos [5]. Os métodos numéricos para se calcular o comprimento de localização nesta geometria serão apresentados na próxima secção. As correlações de longo alcance foram introduzidas na direção maior através da seguinte superposição:

$$\epsilon_{im} = \eta_m + \nu_{im}, \quad (4.19)$$

onde ν_{im} são números aleatórios que obedecem a uma distribuição uniforme e são escolhidos dentro do intervalo $[-W/2, W/2]$. O termo η_m é uma sequência de energias correlacionadas definidas pelo traço do movimento Browniano fracionário

$$\eta_m = \sum_{k=1}^{N/2} \frac{\mathcal{C}(\alpha)}{k^{-\alpha}} \cos\left(\frac{2\pi mk}{N} + \phi_k\right). \quad (4.20)$$

Portanto, este sistema apresenta correlações de longo alcance na direção maior (direção y). Para se calcular o comprimento de localização os autores utilizaram um formalismo de matriz de transferência bidimensional [25, 5] que será apresentado na próxima secção.

4.2.1 Métodos Numéricos

(a) Método de Matriz de Transferência 2d

O formalismo de Matriz de Transferência tem sido bastante utilizado no cálculo do comprimento de localização λ para o modelo de Anderson 2D. Existem várias vantagens em utilizar este método mas, sem dúvida alguma, a maior delas é que não é necessário calcular os autoestados do Hamiltoniano. Outro aspecto interessante do formalismo de matriz de transferência é que a precisão numérica no

cálculo de λ pode ser controlada durante o procedimento. Em outro caso, onde os autoestados do Hamiltoniano Eq. (4.18) são calculados através de diagonalização numérica o erro é estimado após o cálculo e, em geral, são necessárias médias sobre várias amostras para se reduzir a flutuação nas quantidades físicas. O ponto de partida para se deduzir o formalismo de matriz de transferencia é escrever a equação de Shroedinger estacionária ($H|\Phi \rangle = E|\Phi \rangle$):

$$t_{i,i+1}c_{i+1} = (E - H_i)c_i - t_{i-1,i}c_{i-1}. \quad (4.21)$$

No caso unidimensional c_{i+1} , c_i e c_{i-1} representam respectivamente as amplitudes da função de onda $|\Phi \rangle$ nos sítios $i + 1$, i e $i - 1$. O termo $t_{i-1,i}$ representa o hopping entre os sítios $i - 1$ e i , $t_{i,i+1}$ representa o hopping entre os sítios i e $i + 1$ e H_i representa a energia do sítio. Vamos considerar que o sistema tem a geometria igual a uma tira $N \times M$ onde $N \gg M$ (ver figura 4.5). Então vamos generalizar a Eq. (4.21) definindo a classe de vetores \vec{c}_i onde $i = 1, \dots, N$. Um dado vetor \vec{c}_m contém as M amplitudes da função de onda sobre a linha m do sistema. A equação Eq. (4.21) pode ser escrita como

$$\mathbf{t}_{i,i+1}\vec{c}_{i+1} = (E\mathbf{I} - \mathbf{H}_i)\vec{c}_i - \mathbf{t}_{i-1,i}\vec{c}_{i-1}, \quad (4.22)$$

onde $\mathbf{t}_{i,i+1}$ agora é uma matriz $M \times M$ cuja diagonal representa os M termos de hopping entre as linhas i e $i + 1$, \mathbf{H}_i é uma matriz tridiagonal $M \times M$ que representa o Hamiltoniano da i -ésima linha isolada, como se ela não estivesse acoplada com o

sistema. Podemos escrever esta última equação da seguinte forma matricial:

$$\begin{pmatrix} \vec{c}_{i+1} \\ \vec{c}_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\mathbf{t}_{i,i+1}}(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_i) & -\frac{\mathbf{t}_{i-1,i}}{\mathbf{t}_{i,i+1}} \\ \mathbf{I} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{c}_i \\ \vec{c}_{i-1} \end{pmatrix}. \quad (4.23)$$

Desta forma podemos definir a matriz de transferência para este sistema 2d:

$$\mathbf{T}_i = \begin{pmatrix} \frac{1}{\mathbf{t}_{i,i+1}}(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_i) & -\frac{\mathbf{t}_{i-1,i}}{\mathbf{t}_{i,i+1}} \\ \mathbf{I} & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.24)$$

$$\begin{pmatrix} \vec{c}_N \\ \vec{c}_{N-1} \end{pmatrix} = \mathbf{T}_N \mathbf{T}_{N-1} \mathbf{T}_{N-2} \dots \mathbf{T}_1 \begin{pmatrix} \vec{c}_1 \\ \vec{c}_0 \end{pmatrix} = \prod_{n=1}^N \mathbf{T}_n \begin{pmatrix} \vec{c}_1 \\ \vec{c}_0 \end{pmatrix}. \quad (4.25)$$

A matriz $Q_N = \prod_{m=1}^N \mathbf{T}_m$ é o produto de todas as matrizes de transferência do sistema. Observe que para se calcular cada matriz T_m é necessário inverter a matriz de hopping $\mathbf{t}_{m,m+1}$, o que não causa problema pois esta é diagonal. O teorema de Oseledec [5] se aplica a matriz Q_N e prevê a existência da matriz limite Γ definida por:

$$\Gamma = \lim_{L \rightarrow \infty} (Q_N^\dagger Q_N)^{\frac{1}{2N}}, \quad (4.26)$$

cujo logaritmo natural dos autovalores de Γ são os expoentes de Lyapunov da matriz de transferência Q_N . O menor expoente de Lyapunov é o comprimento de localização λ . Em princípio precisamos apenas calcular o produto de todas as matrizes de transferência para N grande, calcular a matriz Γ e fazer uma diagonalização numérica. Infelizmente o procedimento numérico é relativamente complexo, os autovalores de $Q_N^\dagger Q_N$ crescem em diferentes taxas de modo que o menor autovalor, a

partir do qual vamos calcular o comprimento de localização, torna-se comparável a erros numéricos. Esta dificuldade pode ser removida aplicando-se um procedimento de ortonormalização sobre as colunas B_i do produto matricial Q_N . O procedimento deve ser aplicado a cada n_M multiplicações

$$\bar{B}_i = [B_i - \sum_{j<i} (\bar{B}_j \cdot B_i) \bar{B}_j] / b^{(i)}, \quad (4.27)$$

onde

$$b^{(i)} = |B_i - \sum_{j<i} (\bar{B}_j \cdot B_i) \bar{B}_j|. \quad (4.28)$$

Logo, cada coluna de Q_N é ortonormalizada em relação as outras. No limite de N grande a primeira coluna converge para o autovetor correspondente ao maior autovalor, a segunda coluna converge para o autovetor correspondente ao segundo maior autovalor e assim por diante. A matriz Q_N apresenta um conjunto de M pares de autovalores [5, 92], por isso a M -ésima coluna da matriz Q_N representará o autovetor relacionado com o menor autovalor de Q_N . O comprimento de localização λ_M para a faixa com largura M pode ser encontrado a partir deste menor autovalor [5, 92], que pode ser calculado recursivamente:

$$c_n^M = \ln b_n^M + c_{n-1}^M, \quad (4.29)$$

$$\lambda_M = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N}{c_n^M}. \quad (4.30)$$

Entretanto, se N é finito as expressões acima fornecem um valor aproximado de λ_M

com erro estimado a partir da seguinte equação [92]:

$$\frac{\Delta\lambda_M}{\lambda_M} = \sqrt{\frac{\mathbf{C}_n^M}{(c_n^M)^2} - \frac{1}{N_0}}, \quad (4.31)$$

onde \mathbf{C}_n^M é calculado durante o processo recursivo usando a expressão

$$\mathbf{C}_n^M = (\ln b_n^M)^2 + \mathbf{C}_{n-1}^M, \quad (4.32)$$

e o termo N_0 que aparece na Eq. (4.31) é o número de vezes que o processo de ortonormalização foi aplicado. O intervalo n_M entre as ortonormalizações pode ser ajustado durante o cálculo recursivo. Tipicamente n_M é ajustado entre $5 < n_M < 20$ de maneira a obter um erro estatístico aceitável ($\Delta\lambda_M/\lambda_M < 5\%$). Este formalismo de matriz de transferência tem uma limitação para o caso de hopping nulos onde a matriz de hopping é não singular. Esta dificuldade foi contornada por Mackinnon [5, 92] através de um método de funções de Green para calcular o comprimento de localização de um sistema quasi-unidimensional que apresente hopping nulos. Uma discussão mais detalhada sobre este método pode ser encontrada na Ref. [39].

(b) Método de Funções de Green

O sistema sob estudo é a mesma tira longa $N \times M$ mostrada na figura 4.5 onde M é a largura da tira e $N \gg M$ é o seu comprimento. Denotando H^N pelo hamiltoniano da tira de tamanho $N \times M$, o hamiltoniano resultante após a adição

de mais uma fatia pode ser escrito como [5, 92, 39]

$$H^{N+1} = H^N + V_{N,N+1} + H_{N+1}^0, \quad (4.33)$$

onde $V_{N,N+1}$ é a matriz dos hoppings que acopla a $(N + 1)$ -ésima fatia ao sistema com N fatias. O termo H_{N+1}^0 é o hamiltoniano da $(N + 1)$ -ésima fatia isolada. A função de Green para o sistema de tamanho $N + 1$, G^{N+1} , é determinada a partir da função de Green para o sistema do tamanho N (G^N), e da função de Green para a fatia isolada, G^0 . A matriz de Green que relaciona a primeira fatia (1) e a $(N + 1)$ -ésima fatia pode ser calculada pelas seguintes equações [5, 92, 39]:

$$G_{1,N+1}^{(N+1)} = G_{1,N}^N V_{N,N+1} G_{N+1,N+1}^N, \quad (4.34)$$

$$G_{N+1,N+1}^{(N+1)} = (\mathbf{E}\mathbf{1} - H_{N+1,N+1}^0 - V_{N,N+1} G_{N,N}^N V_{N,N+1}^T)^{-1}, \quad (4.35)$$

$$G_{1,1}^1 = \mathbf{1}, \quad (4.36)$$

$$G_{0,0}^0 = 0. \quad (4.37)$$

O resolvente $G_{1,N}^N$ pode ser usado para definir o coeficiente de Lyapunov $\gamma_M(E)$ (inverso do comprimento de localização) para uma tira $N \times M$ [5, 92, 39]:

$$\gamma_M(E) = \frac{1}{\lambda_M} = -\frac{1}{2} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \text{Tr} |G_{1,N}^N|^2. \quad (4.38)$$

Este método não necessita de um procedimento de ortonormalização como no caso da matriz de transferência entretanto, requer a inversão de matrizes $M \times M$ não esparsas a cada interação. Isto torna o processo mais lento que a matriz de transferência e também pode acumular erros numéricos se a rotina de inversão não for suficientemente precisa. Para inverter as matrizes da Eq. (4.35) utilizaremos a

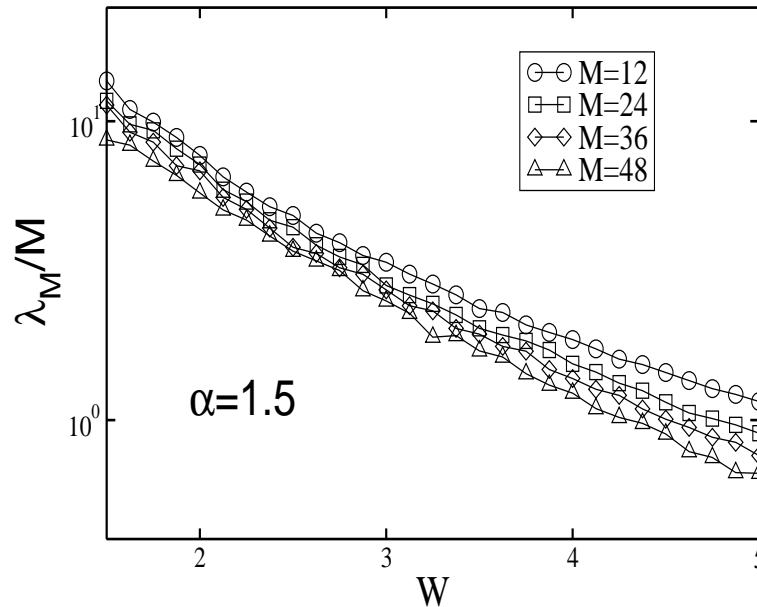


Figura 4.6: O comprimento de localização rescalado λ_M/M versus W para $E = 0$, $\alpha = 1.5$ e $M = 12, 24, 36, 48$. As curvas de λ_M/M para valores de M menores estão sempre por cima das curvas de λ_M/M para valores maiores.

rotina do livro *numerical recipes* [89].

Vamos testar estes métodos numéricos reproduzindo os resultados de Xiong *et al* [25]. Consideraremos o Hamiltoniano descrito pela Eq. (4.18) com amplitude de hopping $t = 1$ e energias dos sítios descritas pela Eq. (4.19). Vamos estudar o comportamento do comprimento de localização λ_M em função da largura da faixa M e da largura da desordem W associada com as energias $\nu_{i,m}$. Consideraremos a energia do elétron como sendo $E = 0$ e a sequência com correlações η_m definida pela Eq. (4.20), com $N > 10^5$ e utilizaremos os formalismos do método de matriz de transferência e de funções de Green. Com estas prescrições obtivemos os mesmos resultados para λ_M através dos dois métodos. A figura 4.6 mostra o comprimento de localização rescalado λ_M/M versus W para $E = 0$, $\alpha = 1.5$ e $M = 12, 24, 36, 48$.

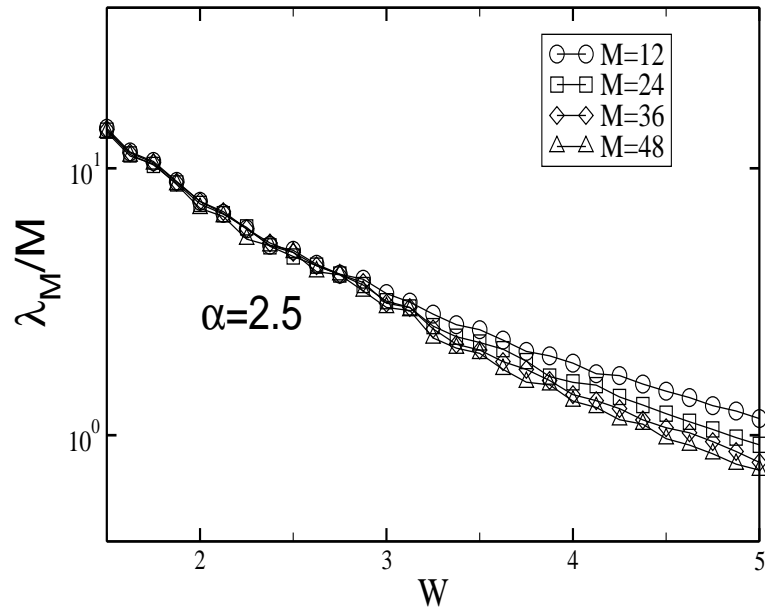


Figura 4.7: O comprimento de localização rescalado λ_M/M versus W para $E = 0$, $\alpha = 2.5$ e $M = 12, 24, 36, 48$. Para $W < 3$ as curvas de λ_M/M colapsam para diferentes valores de M . Este colapso é um forte indício da presença estados estendidos neste sistema.

Observe que dentro das flutuações numéricas as curvas de λ_M/M para valores de M menores estão sempre por cima das curvas de λ_M/M para valores maiores. Isto indica que no limite termodinâmico ($M \rightarrow \infty$) não existem estados estendidos com desordem fixa W . A figura 4.7 mostra o comprimento de localização rescalado λ_M/M versus W para $E = 0$, $\alpha = 2.5$ e $M = 12, 24, 36, 48$. Observe que para qualquer largura de desordem $W < W_c \approx 3$ as curvas de λ_M/M colapsam para diferentes valores de M . Este resultado é um forte indício numérico que existem estados estendidos neste sistema pois λ_M diverge com M . A existência de estados neste modelo foi analisada pelos autores da Ref. [25] para uma largura de desordem fixa, por exemplo $W = 2$. A figura 4.8 mostra o comprimento de localização rescalado

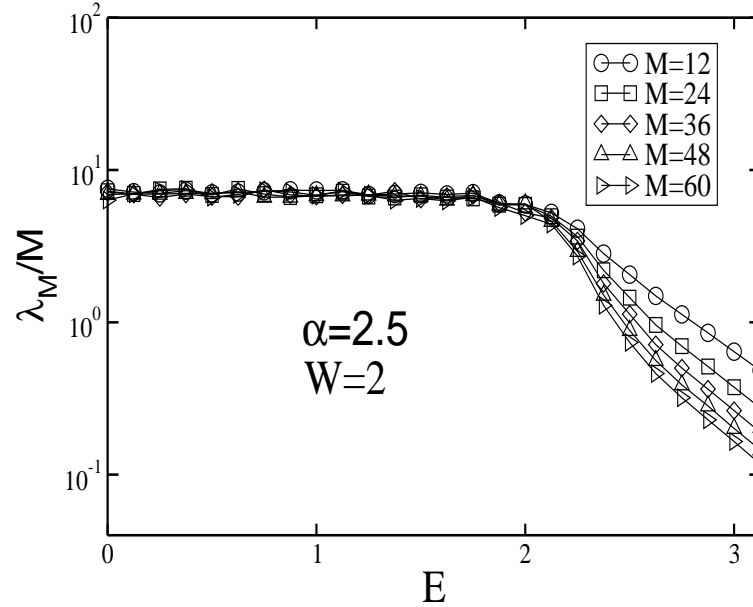


Figura 4.8: O comprimento de localização rescalado λ_M/M versus E para $\alpha = 2.5$, $W = 2.0$ e $M = 12, 24, 36, 48, 60$. Para $E < 2$ as curvas de λ_M/M colapsam para diferentes valores de M confirmando a existência de estados estendidos neste modelo.

λ_M/M versus E para $\alpha = 2.5$, $W = 2.0$ e $M = 12, 24, 36, 48, 60$. Observe que o comprimento de localização apresenta um comportamento semelhante ao apresentado na fig 4.7: para $E < E_c \approx 2$ as curvas de λ_M/M colapsam para diferentes valores de M . Com estes resultados foi concluído que este sistema apresenta uma transição metal-solante em $\alpha_c = 2$ e para desordem $W_c \approx 3$. A ordem da transição foi estudada através de uma análise de tamanho finito [5, 92] feita sobre os dados da Fig. 4.8.

4.2.2 Análise de Tamanho Finito

Para extrapolar as propriedades de localização obtidas a partir de uma geometria quasi-unidimensional ($N \times M$) para sistemas 2d ($N \times N$) podemos fazer uma análise do comportamento de escala do comprimento de localização rescalado $\Lambda(M, W) = \lambda_M(M, W)/M$ [5]. $\Lambda(M, W)$ é o comprimento de localização medido em unidades da largura M da faixa. A análise consiste em assumir que os efeitos de uma mudança de escala em M ($M^* \rightarrow bM$) ou uma mudança no grau de desordem W sobre $\Lambda(M, W)$ podem ser representados através de uma única função universal de λ_∞/M [5]:

$$\Lambda(M, W) = f\left(\frac{\lambda_\infty}{M}\right), \quad (4.39)$$

onde λ_∞ é o comprimento de localização no limite termodinâmico, ou seja, independente da largura M . Vamos medir λ_∞ no modelo de Xiong *et al* [25] para exemplificar a análise de tamanho finito. A figura 4.9(a) mostra um gráfico em escala logarítmica de λ_M/M versus $1/M$ para diversas energias próximas da energia crítica. Este diagrama foi obtido a partir dos dados da figura 4.8. Para encontrar a função universal $f(\lambda_\infty/M)$ a origem do eixo ($\ln(1/M)$) deve ser deslocada para $\ln(\lambda_\infty(E))$ [5] de forma que as curvas para diferentes energias sejam colapsadas em uma única função. Isto é, para cada energia E vamos multiplicar o eixo $1/M$ por $\lambda_\infty(E)$ de maneira a obter o colapso. Este colapso é apresentado na figura 4.9(b). Um gráfico do comprimento de localização no limite termodinâmico $\lambda_\infty(E)$ versus $E - E_c$ é apresentado na figura 4.9(c) onde os símbolos representam os valores de $\lambda_\infty(E)$ enquanto que a linha representa um processo de ajuste. O tipo de ajuste define o ordem da transição entre os estados localizados e estendidos [25, 5]. Em

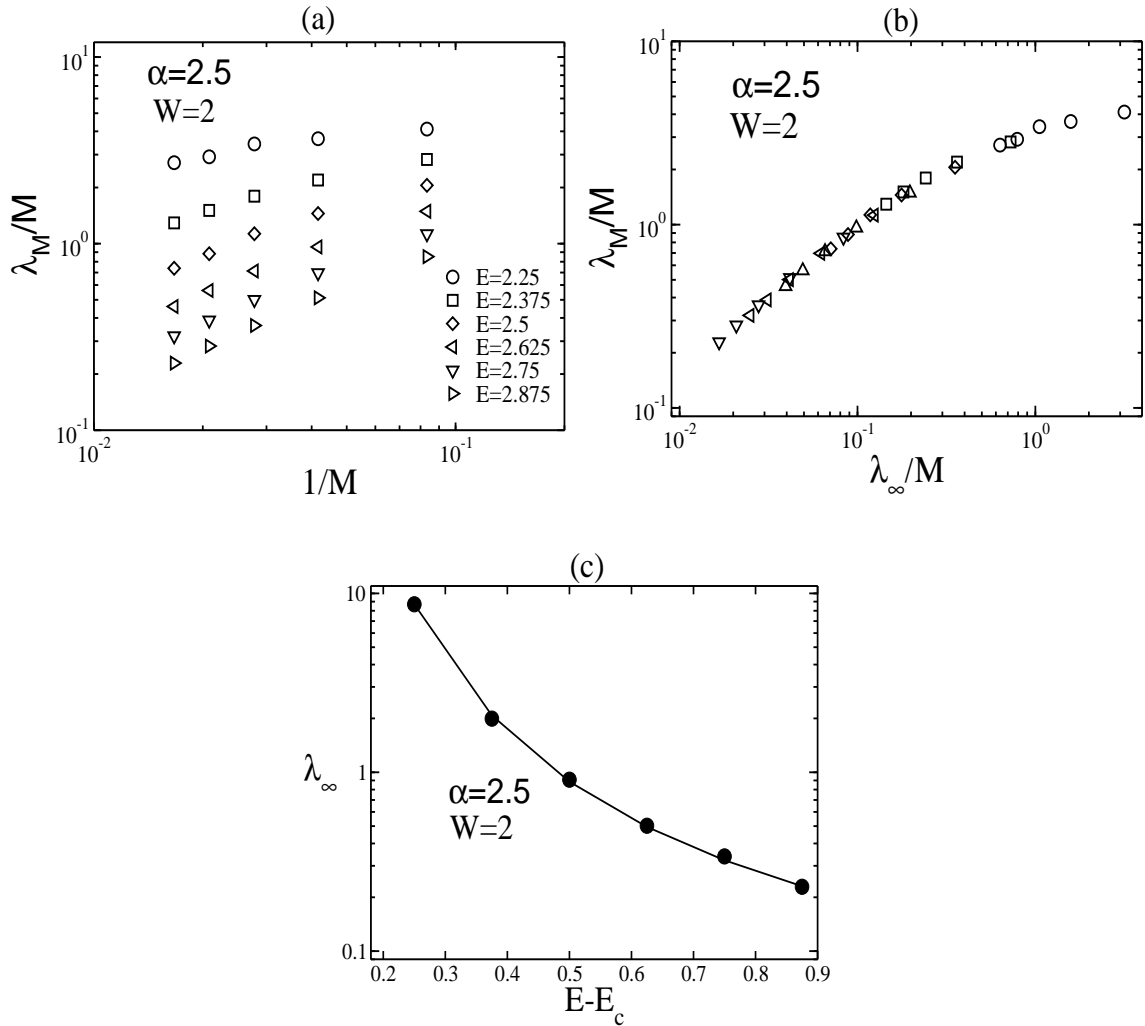


Figura 4.9: (a) λ_M/M versus $1/M$ para energias próximas da energia crítica. (b) Colapso das diversas curvas de λ_M/M . (c) Comprimento de localização no limite termodinâmico λ_∞ versus $E - E_c$.

muitos sistemas desordenados, no modelo de Anderson 3d por exemplo, o comprimento de localização apresenta uma divergência, próximo da energia crítica, tipo lei de potência ($\lambda_\infty(E) \propto (E - E_c)^{-\nu}$). Neste sistema o comprimento de localização

apresenta uma divergência exponencial perto de E_c [25]:

$$\lambda_\infty \propto \exp(\theta_0/\sqrt{E - E_c}), \quad (4.40)$$

onde $E_c = 2.02$ e $\theta_0 = 3.89$. Esta dependência é a assinatura da transição tipo Kosterlitz-Thouless. Com estes resultados os autores [25] concluíram que a presença de correlações de longo alcance em uma das dimensões de um sistema bidimensional induz uma transição tipo Kosterlitz-Thouless.

4.2.3 Correlações de Longo Alcance no Plano $x - y$

Para se estudar os efeitos de correlações de longo alcance nas duas direções de um sistema bidimensional, ou seja correlações no plano $x - y$, vamos considerar o hamiltoniano da Eq. (4.18) com as energias $\epsilon_{i,j}$ apresentando uma densidade espectral $S(k_N, k_M) = (1/\sqrt{k_N^2 + k_M^2})^\alpha$. Para obtermos uma sequência de energias $\epsilon_{i,j}$ com esta densidade espectral utilizaremos uma generalização do movimento Browniano Fracionário para sistemas 2d [93]. A equação para gerar as energias pode ser escrita como:

$$\epsilon_{i,j} = \sum_{k_N=1}^{N/2} \sum_{k_M=1}^{M/2} \rho(k_N, k_M) \cos\left(\frac{2\pi i k_N}{N} + \frac{2\pi j k_M}{M} + \phi_{i,j}\right), \quad (4.41)$$

onde

$$\rho(k_N, k_M) = \left[\frac{2\pi}{NM} \times [(2\pi k_N/N)^2 + (2\pi k_M/M)^2]^{-\alpha/2} \right]^{1/2}. \quad (4.42)$$

Basicamente esta é uma generalização direta da equação Eq. (1.29), que é uma transformada de Fourier discreta, para o caso bidimensional. $\phi_{i,j}$ são $N \times M$ fases

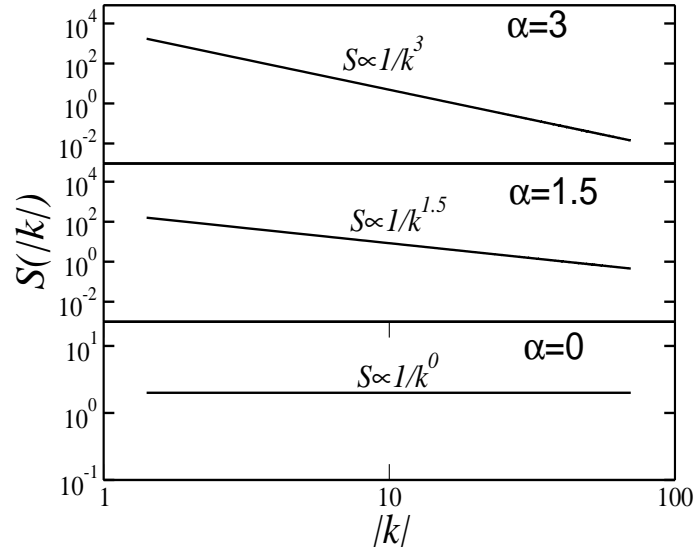


Figura 4.10: Densidade espectral $S(|k|)$ versus $|k|$ obtida numericamente. Observe o comportamento $S(|k|) \propto 1/|k|^\alpha$ para $\alpha = 0, 1.5, 3$.

aleatórias uniformemente distribuídas no intervalo $[0, 2\pi]$. No caso 2d, o expoente α é dado por $\alpha = 2H + d$ onde H é o expoente de Hurst H para os incrementos. A variância $\Delta\epsilon_{i,j}$ das energias também apresenta uma dependência com as dimensões (N, M) do sistema. Logo, para obter sequências com uma variância independente do tamanho do sistema vamos aplicar o mesmo procedimento de normalização utilizado na Ref. [21]. Se $N = M$ vamos apenas remover a dependência das componentes de Fourier com o tamanho do sistema. A equação para gerar as energias pode ser escrita como:

$$\epsilon_{i,j} = \sum_{k_N=1}^{N/2} \sum_{k_M=1}^{M/2} \frac{\mathcal{C}(\alpha)}{(k_N^2 + k_M^2)^{\alpha/4}} \cos\left(\frac{2\pi i k_N}{N} + \frac{2\pi j k_M}{M} + \phi_{i,j}\right), \quad (4.43)$$

onde a constante $\mathcal{C}(\alpha)$ é escolhida de modo que a variância seja $\Delta\epsilon_{i,j} = 1$. Se $N \neq M$

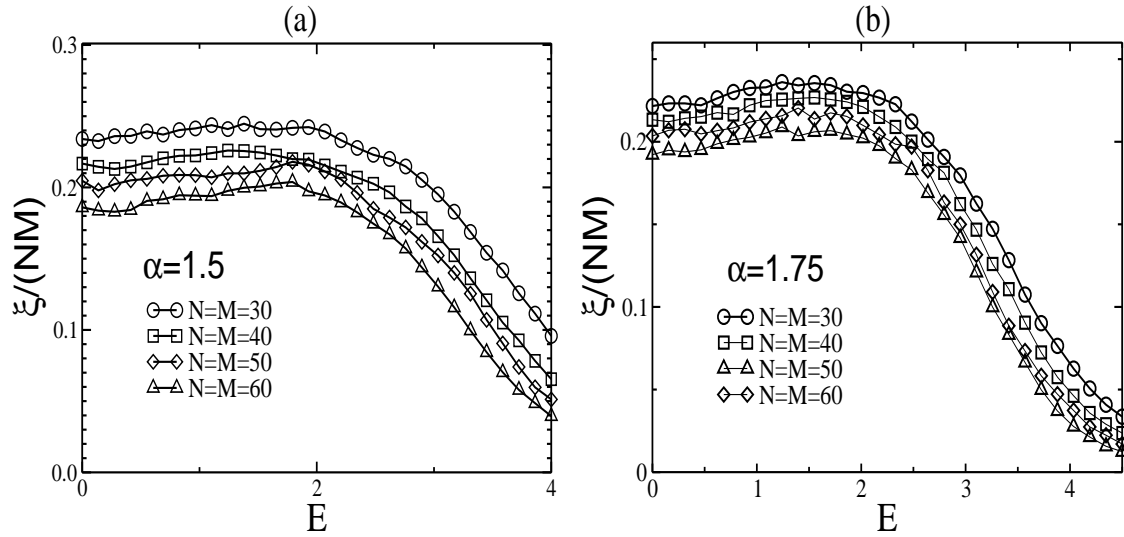


Figura 4.11: (a) Razão participação rescalada $\xi/(NM)$ versus energia E para $\alpha = 1.5$ e $N = M = 30, 40, 50, 60$ sítios. (b) Razão participação rescalada $\xi/(NM)$ versus energia E para $\alpha = 1.75$ e $N = M = 30, 40, 50, 60$ sítios. Para $\alpha < 2$ não existem estados estendidos neste sistema pois a participação não apresenta uma divergência linear com o número de sítios NM .

o procedimento de normalização será diferente: calcularemos as energias a partir da Eq. (4.42) e normalizaremos numericamente a variância das energias. A Fig. 4.10 mostrar o espectro de potência $S(|k|)$ versus $|k| = \sqrt{k_N^2 + k_M^2}$ da sequência gerada pela Eq. (4.43) para $N = M = 100$ e $\alpha = 0, 1.5, 3$. Para calcular $S(|k|)$ utilizamos o formalismo apresentado na Ref. [93], o qual consiste em efetuar uma transformada de Fourier numérica da Eq. (4.43) e calcular o espectro de potência através da fórmula:

$$S(|k|) = |\epsilon_{k_N, k_M}|^2, \quad (4.44)$$

onde ϵ_{k_N, k_M} é a transformada de Fourier da Eq. (4.43). Observe na Fig. 4.10 que o espectro de potência obedece exatamente a lei de potência $S(|k|) \propto 1/|k|^\alpha$.

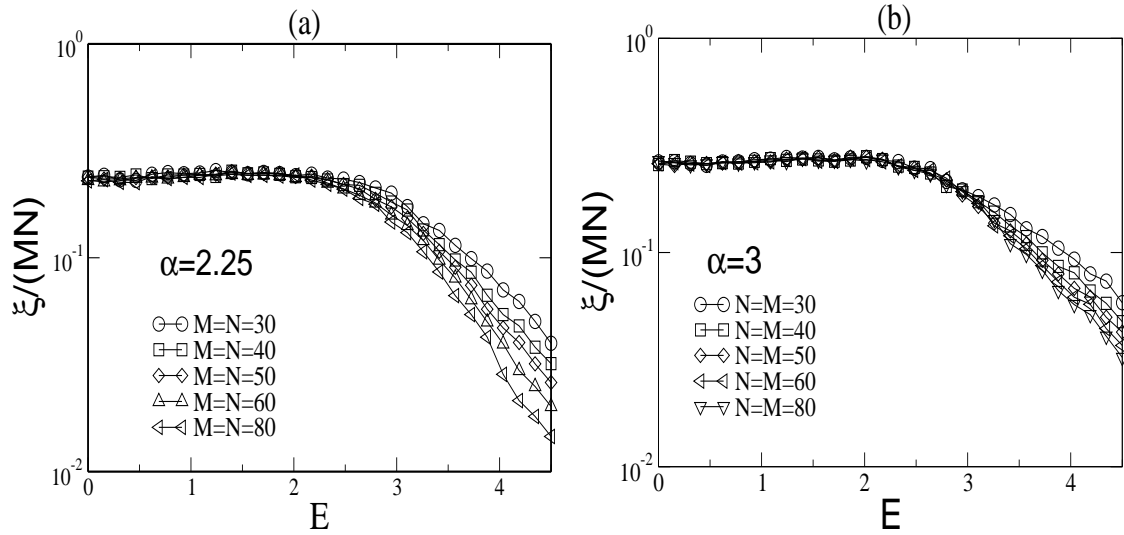


Figura 4.12: (a) Razão participação rescalada $\xi/(NM)$ versus energia E para $\alpha = 2.25$ e $N = M = 30, 40, 50, 60, 80$ sítios. (b) Razão participação rescalada $\xi/(NM)$ versus energia E para $\alpha = 3$ e $N = M = 30, 40, 50, 60, 80$ sítios. Para qualquer $\alpha > 2$, o sistema apresenta estados estendidos na região de baixas energias pois a razão participação diverge linearmente com o número de sítios.

Vamos agora estudar a natureza dos autoestados do Hamiltoniano de Anderson em um sistema $N \times M$ Eq. (4.18) utilizando um formalismo de diagonalização exata. Escreveremos uma representação matricial da Eq. (4.18), efetuaremos a diagonalização numérica e calcularemos a função participação ξ que, para sistemas bidimensionais, é definida por:

$$\xi = \frac{\sum_{i,j} |c_{i,j}|^2}{\sum_{i,j} |c_{i,j}|^4}, \quad (4.45)$$

onde $c_{i,j}$ é a amplitude da função de onda ($|\Phi\rangle$) no sítio (i, j) do plano ($|\Phi\rangle = \sum_{i,j} c_{i,j} |i, j\rangle$). Como apresentamos na seção 1.2.2, a participação apresenta uma divergência linear com o número de sítios do sistema se os estados são estendidos.

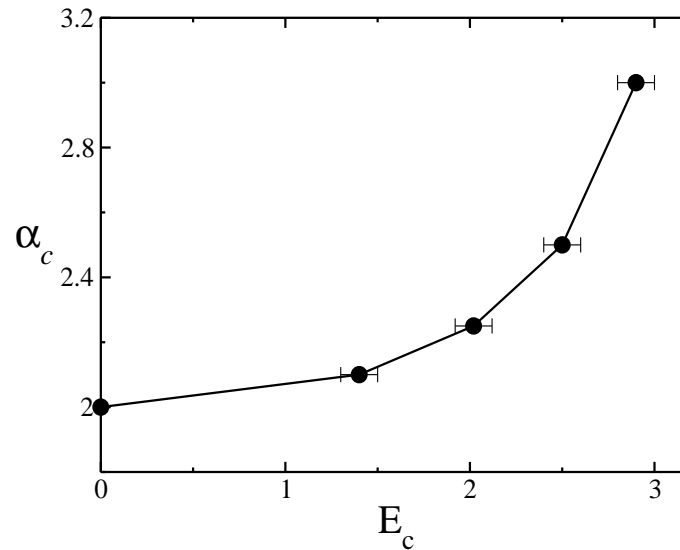


Figura 4.13: Diagrama de fase no plano α, E_c . Para $\alpha > 2$ existe uma fase de estados estendidos no centro da banda.

Devido a dimensionalidade do sistema, nossa diagonalização fica limitada à sistemas com N e M menores que 100. A representação matricial de H (Eq. 4.18) é uma matriz tridiagonal em blocos. Para efetuar a diagonalização de forma mais precisa e rápida vamos utilizar rotinas apropriadas para matrizes de banda [89]. Centraremos nossa atenção em sistemas com $N = M < 100$. Para reduzir as flutuações no cálculo da função participação efetuamos médias sobre mais de 50 amostras em todos os casos estudados. A Fig. 4.11 mostra a participação rescalada $\xi/(NM)$ versus energia E para $\alpha = 1.5$ (Fig. 4.12a) e $\alpha = 1.75$ (Fig. 4.12b) e $N = M = 30, 40, 50, 60$. Observe que dentro das flutuações numéricas as curvas de $\xi/(NM)$ para valores de N e M menores estão sempre por cima das curvas de $\xi/(NM)$ para valores maiores. Isto é um forte indício que no limite termodinâmico ($N = M \rightarrow \infty$) não existem estados estendidos nestes casos. Para $\alpha > 2$ o resultado é qualitativamente

diferente. A Fig. 4.12 mostra a participação rescalada $\xi/(NM)$ versus energia E para $\alpha = 2.25$ (Fig. 4.11a) e $\alpha = 3$ (Fig. 4.11b). Neste caso estudamos sistema com dimensões $N = M = 30, 40, 50, 60, 80$ sítios. Observe que a participação rescalada $\xi/(NM)$ apresenta um colapso na região de baixas energias. Esse resultado numérico é um forte indício que estes estados são estendidos. A figura 4.13 mostra o diagrama de fases para este modelo. Segundo a teoria de escala para o modelo de Anderson 2d, os estados são localizados para qualquer grau de desordem. Nossos resultados indicam que, na presença de desordem correlacionada, o sistema pode apresentar estados estendidos. Portanto, estes indícios numéricos levam a crer que a teoria de escala é violada se a distribuição de desordem apresentar correlações de longo alcance. Na próxima seção faremos uma análise complementar deste problema através do estudo da dinâmica eletrônica neste modelo.

4.2.4 Dinâmica Eletrônica

Apresentaremos nesta seção um estudo sobre a dinâmica eletrônica em sistemas 2d ($N \times N$) com desordem correlacionada. Vamos considerar que o elétron inicia seu movimento de um sítio (i_0, j_0) localizado no centro do sistema ou seja, $i_0 = j_0 = N/2$. Vamos considerar que todas as amplitudes de hopping são iguais a unidade. O estado eletrônico $|\Phi(t)\rangle$ no tempo é governado pela equação de Schrodinger. Utilizando a expansão $|\Phi(t)\rangle = \sum_{i,j} c_{i,j}(t)|i,j\rangle$ podemos escrever a equação de Schrodinger 2d para este sistema:

$$i\hbar \frac{dc_{i,j}(t)}{dt} = \epsilon_{i,j}c_{i,j}(t) + t(c_{i,j-1}(t) + c_{i,j+1}(t) + c_{i-1,j}(t) + c_{i+1,j}(t)), \quad i, j = 1, 2, \dots, N. \quad (4.46)$$

Semelhante ao estudo que foi feito no sistema 1d, vamos calcular o desvio médio quadrático do pacote eletrônico bidimensional $\sigma^2(t)$. Neste caso bidimensional o desvio médio quadrático é definido por

$$\sigma^2(t) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [(i - i_0)^2 + (j - j_0)^2] |c_{i,j}(t)|^2. \quad (4.47)$$

Vamos integrar numericamente o conjunto de equações diferenciais (Eq. 4.46) utilizando o método de Runge-Kutta. Para controlar a precisão numérica vamos calcular a integral da função de onda no tempo $I(t) = \sum_{i,j} |c_{i,j}(t)|^2$. Neste cálculo vamos utilizar a seguinte precisão numérica $|1 - I(t)| < 10^{-8}$. Vamos estudar $\sigma^2(t)$ no Modelo de Anderson com correlações de longo alcance nas duas direções e no modelo de Anderson bidimensional com correlações de longo alcance em uma das direções ou seja, o modelo estudado na Ref. [25]. Inicialmente calcularemos $\sigma^2(t)$ para o caso onde as energias de ligação $\epsilon_{i,j}$ são geradas pela Eq. (4.43), ou seja, o sistema com correlações nas duas direções. Para eliminar os efeitos de borda o ideal é gerar sistemas grandes ($N^2 > 10^6$) sítios. Entretanto fica difícil gerar um sistema $N \times N$ com $N > 1000$ através da Eq. (4.43). Neste caso vamos estudar sistemas menores e fazer uma análise de tamanho finito. Outra dificuldade computacional é que, devido ao número de equações no sistema 4.46 (N^2 equações), fica complicado fazer a integração numérica em sistemas grandes, com $N^2 \gg 10^6$ sítios, e manter a precisão desejada. A Fig. 4.14 mostra o desvio médio quadrático rescalado $\sigma^2(t)/N^2$ versus o tempo rescalado t/N para $\alpha = 2.5$, $\alpha = 3$ e $N^2 = 50^2$, 100^2 , 200^2 e 400^2 sítios. Observe que as curvas para diferentes valores de N estão colapsadas. Este colapso sugere que $t \propto N$. Como $\sigma^2(t) \propto N^2$, pois a integração numérica foi efetuada até o pacote chegar nas bordas do sistema, podemos concluir que $\sigma^2(t) \propto t^2$.

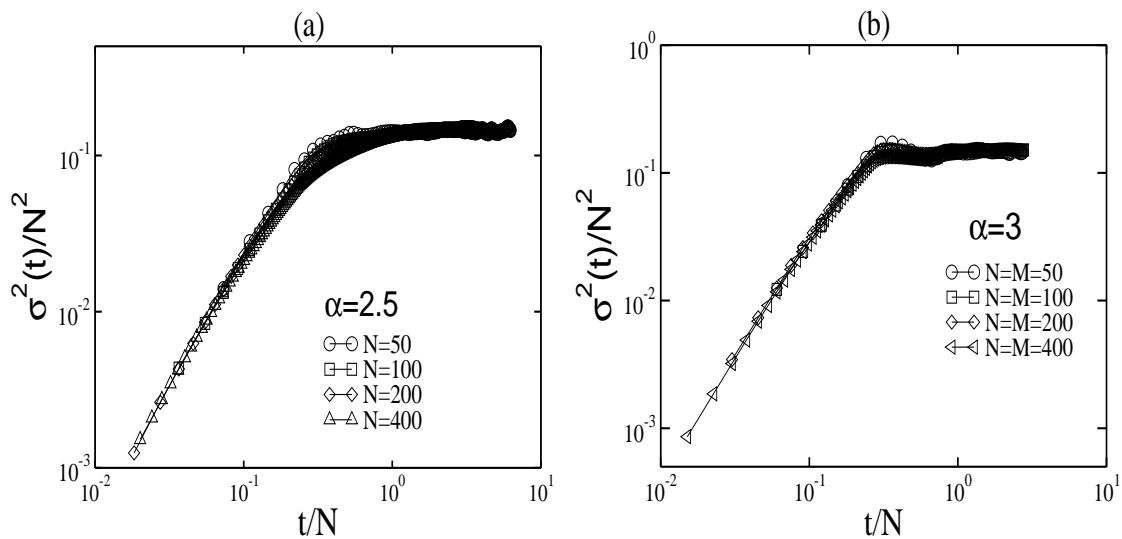


Figura 4.14: Desvio médio quadrático rescalado $\sigma^2(t)/N^2$ versus o tempo rescalado t/N para $\alpha = 2.5$ e $\alpha = 3$. As curvas para diferentes valores de N estão colapsadas o que sugere uma dinâmica balística $\sigma^2(t) \propto t^2$.

Ou seja para $\alpha > 2$ nossos resultados numéricos indicam que este sistema apresenta uma dinâmica balística [$\sigma^2(t) \propto t^2$].

De acordo com a seção 4.2.3, neste regime de $\alpha > 2$ a função razão participação apresenta um colapso na região de baixas energias. Estes dois resultados, a divergência da função participação e dinâmica balística representam fortes indícios de uma verdadeira fase metálica no modelo de Anderson com correlações nas duas direções. Nós também estudamos o comportamento de $\sigma^2(t)$ no modelo proposto pela Ref. [25]. As energias dos sítios são obtidas através da superposição descrita pela Eq. 4.19. Conforme a Ref. [25] e também nossos cálculos na seção 4.2.1, este sistema apresenta uma transição Kosterlitz-Thouless para $\alpha > 2$ e $W < 3$ na região de baixas energias $E < E_c \approx 2$. Entretanto, nossos cálculos numéricos para o desvio médio quadrático mostram uma difusão normal [$\sigma_2(t) \propto t$] neste sistema.

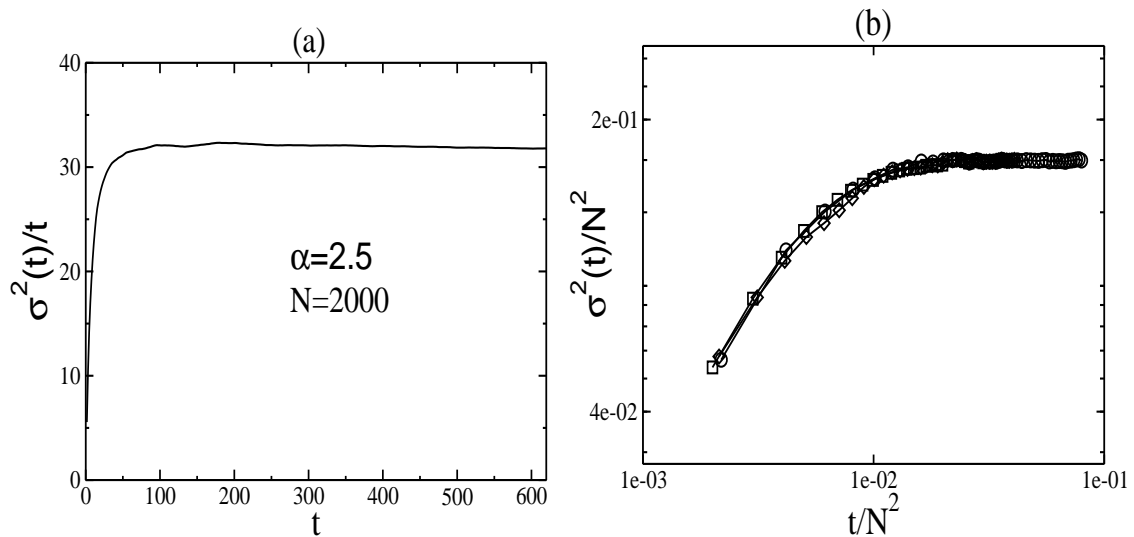


Figura 4.15: (a) Desvio médio quadrático rescalado $\sigma_2(t)/t$ versus tempo t para o modelo de Anderson 2d com correlações em uma das direções. Nesta figura $\alpha = 2.5$, $W = 2.0$ e $N = 2000$. (b) Desvio médio quadrático rescalado $\sigma^2(t)/N^2$ versus o tempo rescalado t/N^2 para $\alpha = 2.5$, $W = 2$ e $N = 100, 200$ e 400 sítios. As curvas para diferentes valores de N estão colapsadas o que sugere uma dinâmica difusiva $\sigma^2(t) \propto t$.

A Fig 4.15(a) mostra o desvio médio quadrático rescalado $\sigma_2(t)/t$ versus tempo t para $\alpha = 2.5$ e $W = 2.0$. Observe que o sistema apresenta uma difusão normal para tempos longos. Para confirmar este resultado nós estudamos sistemas menores e fizemos uma análise de tamanho finito. A Fig 4.15(b) mostra o desvio médio quadrático rescalado, $\sigma_2(t)/N^2$, versus tempo rescalado, t/N^2 , com $N^2 = 100^2, 200^2$ e 400^2 sítios. O colapso das curvas para diferentes valores de N sugere que $t \propto N^2$. Portanto como $\sigma_2(t) \propto N^2$, o comportamento de difusão normal é confirmado.

4.3 Desordem Correlacionada nas Amplitudes de Hopping em Sistemas 2d: Transição Kosterlitz-Thouless

Outra classe de sistema que apresenta propriedades de localização diferentes das encontradas no modelo de Anderson 2d com desordem não correlacionada são os sistemas com simetria Quiral [94, 95, 96, 97, 100]. Nestes sistemas o hamiltoniano é semelhante ao modelo de Anderson 2d Eq. (4.18) só que as amplitudes de Hopping são aleatórias e a desordem na diagonal é nula. O Hamiltoniano deste tipo de sistema pode ser escrito como

$$H = \sum_{\langle im, jn \rangle} t_{im, jn} (|im \rangle \langle jn| + |jn \rangle \langle im|), \quad (4.48)$$

onde a notação $\langle im, jn \rangle$ indica que o somatório é feito sobre sítios vizinhos. As amplitudes de hopping $t_{im, jn}$ são uniformemente distribuídas no intervalo $[t_{min}, t_{max}]$ e a largura da desordem W é controlada pela diferença $t_{max} - t_{min}$. No caso unidimensional este sistema apresenta um estado especial no centro da banda, onde a função de onda tem um comportamento assintótico do tipo $\psi_n \propto e^{-\lambda\sqrt{n}}$ [41, 42, 43]. Souloulis *at al* [98] consideraram o hamiltoniano (4.48) num sistema $N \times M$ com $N \gg M$. Utilizando os métodos de matriz de transferência e funções de Green, eles mostraram que este sistema apresenta uma energia crítica em $E = 0$. Nesta energia o comprimento de localização λ diverge com a largura M utilizada no formalismo numérico $\lambda \propto M$. Mais recentemente, utilizando um preciso formalismo de matriz de transferência 2d, este resultado foi confirmado por Eilmes *at al* [99]. No contexto

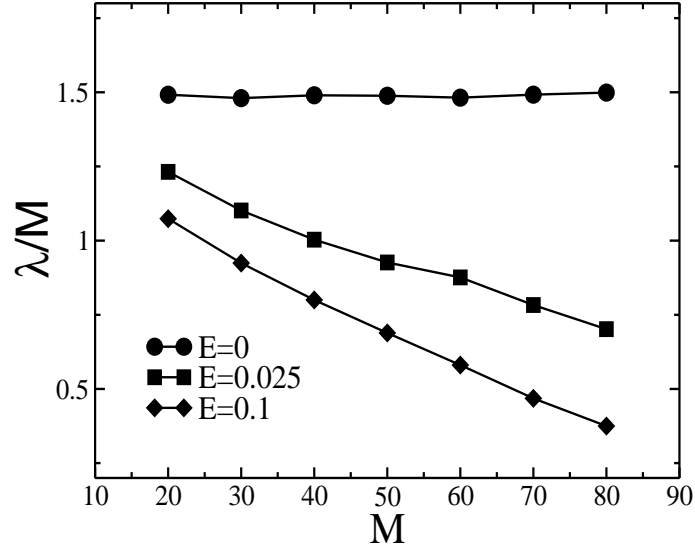


Figura 4.16: Comprimento de localização rescalado λ_M/M versus M para energias no centro da banda. O sistema tem as amplitudes de hopping aleatórias uniformemente distribuídas no intervalo $[0, 1]$. λ_M foi calculado utilizando-se dois métodos, matriz de transferência 2d e funções de Green. Observe que o sistema apresenta uma energia crítica em $E = 0$ pois $\lambda_M(E = 0) \propto M$.

de sistemas mesoscópicos, um estudo analítico detalhado sobre o transporte em pontos quânticos com simetria *Chiral* foi apresentado recentemente por Macedo-Junior e Macêdo [100].

Inicialmente vamos reproduzir alguns dos resultados obtidos nas Ref. [98, 99, 97] utilizando os métodos numéricos apresentados na seção 4.2.1. Considerando que as amplitudes de hopping são uniformemente distribuídas no intervalo $[0, 1]$ calculamos λ_M utilizando os dois métodos, matriz de transferência 2d e funções de Green. Utilizamos $N = 2 \times 10^5$ para reduzir os erros numéricos. Em todos os dados uma precisão numérica de 2% ou melhor foi obtida. A Fig. 4.16 mostra λ_M/M versus M para energias no centro da banda. Observe que, para $E = 0$ reproduzimos

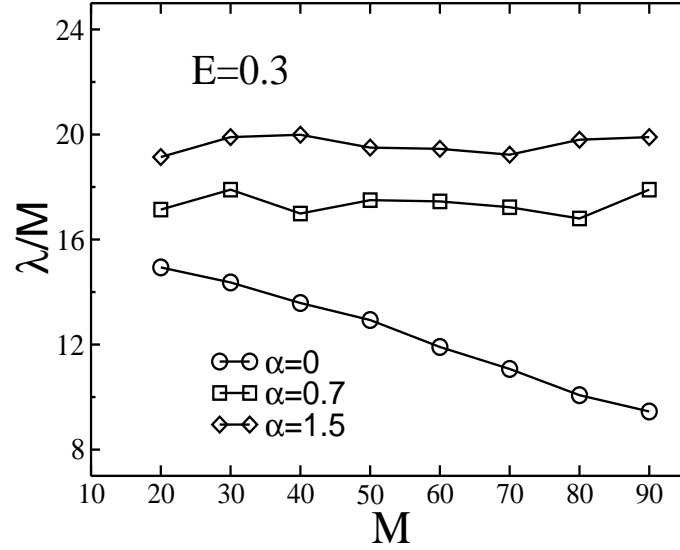


Figura 4.17: Comprimento de localização rescalado λ_M/M versus M para uma energia no centro da banda ($E = 0.3$). O sistema $N \times M$ tem as amplitudes de hopping aleatórias com correlações ao longo na direção maior. λ_M foi calculado utilizando os métodos de matriz de transferência 2d e funções de Green. Observe que para $\alpha = 0.7$ e 1.5 $\lambda_M \propto M$.

exatamente o resultados obtido nas Refs. [98, 99, 97], ou seja, $\lambda_M \propto M$.

Vamos agora introduzir correlações de longo alcance na direção maior do sistema (direção N) e estudar como estas correlações afetam o comprimento de localização λ_M do sistema. As amplitudes de hopping correlacionadas serão geradas pela equação a seguir:

$$t_{im,jn} = \eta_j + \tau_{im,jn} + T, \quad (4.49)$$

onde $\tau_{im,jn}$ são variáveis aleatórias uniformemente distribuídas no intervalo $[-W/2, W/2]$ e η_j é uma sequência gerada pela Eq. (4.20). T é um parâmetro que pode ser escolhido para controlar o valor médio da das amplitudes de hopping ($\langle t_{im,jn} \rangle = T$). Vamos aplicar o formalismo de matriz de transferência neste sis-

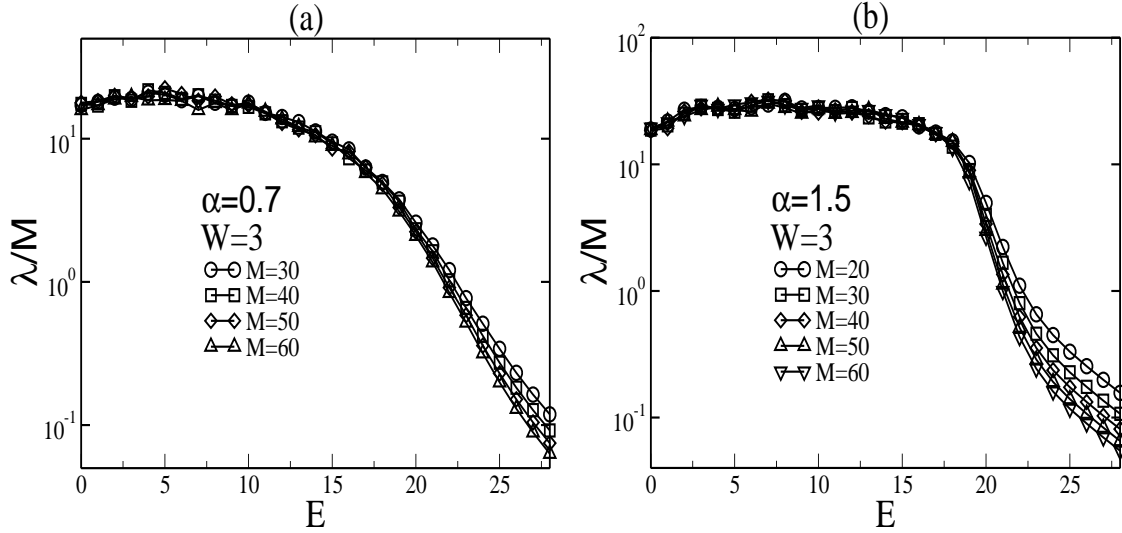


Figura 4.18: (a) Comprimento de localização rescalado λ_M/M versus E para $\alpha = 0.7$, $W = 3.0$ e $M = 20, 30, 40, 50, 60$. (b) Comprimento de localização rescalado λ_M/M versus E para $\alpha = 1.5$, $W = 3.0$ e $M = 20, 30, 40, 50, 60$. Para $E < E_c$ as curvas de λ_M/M colapsam para diferentes valores de M , confirmando a existência de estados estendidos neste modelo.

tema com correlações de longo alcance em uma das direções. Em todos os casos $N = 3 \times 10^5$ para reduzir os erros numéricos. A Fig. 4.17 mostra o comprimento de localização rescalado λ_M/M versus M para $E = 0.3$, $\alpha = 0, 0.7, 1.5$, $W = 3$ e $T = 7.5$. O valor de $T > 0$ foi escolhido para evitar amplitudes hopping nulas no sistema. Observe que para $\alpha = 0.7$ e 1.5 $\lambda_M \propto M$. Este resultados é um forte indício que este sistema apresenta estados estendidos induzidos pelas correlações de longo alcance. Para $\alpha = 0$ e $E \neq 0$ o sistema apresenta estados localizados. A figura 4.18 mostra o comprimento de localização rescalado λ_M/M versus E para $W = 3$, $\alpha = 0.7$ Fig 4.18(a) e $\alpha = 1.5$ Fig 4.18(b). As larguras utilizadas foram $M = 20, 30, 40, 50, 60$. Observe que dentro das flutuações numéricas as curvas λ_M/M apresenta um comportamento semelhante ao apresentado na fig 4.8: para $E < E_c$

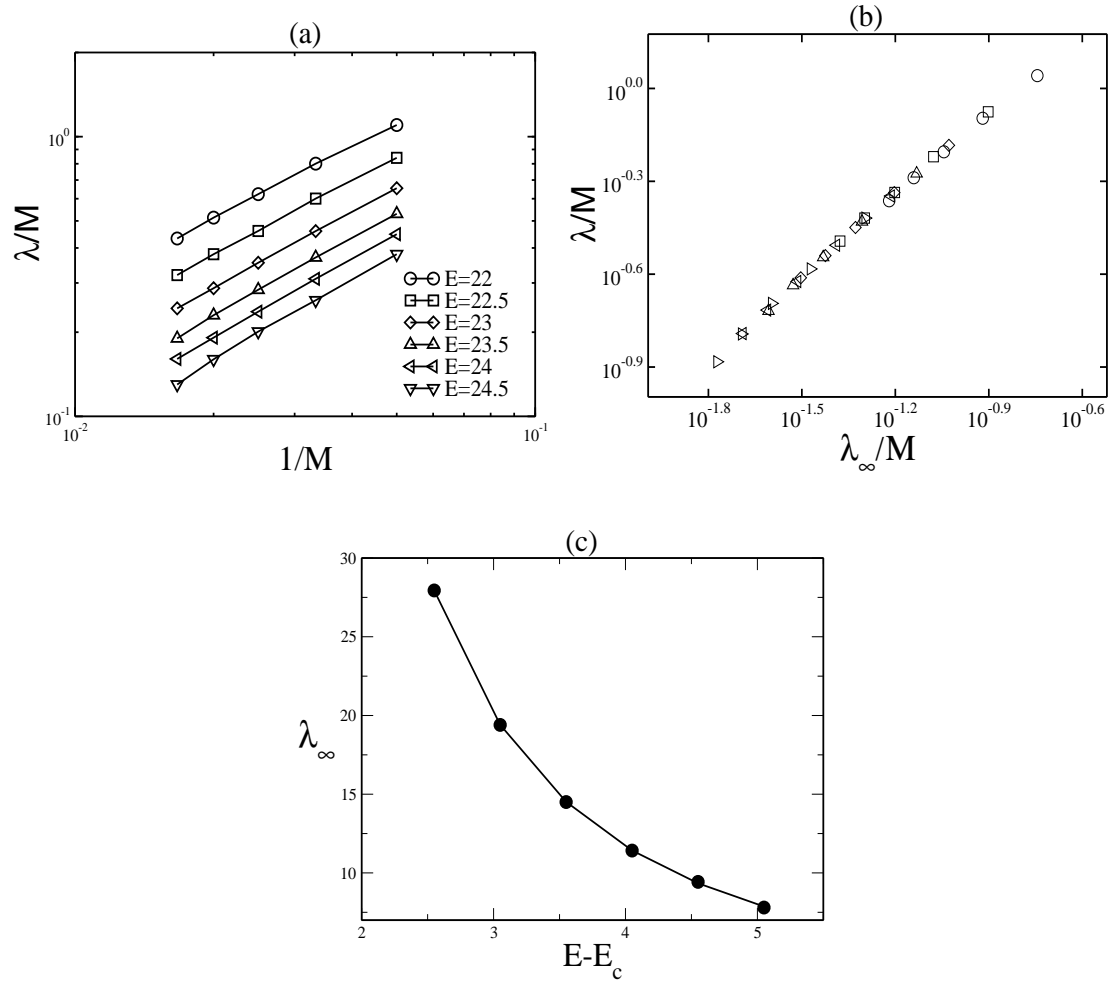


Figura 4.19: (a) λ_M/M versus $1/M$ para energias próximas da energia crítica. (b) Colapso das diversas curvas de λ_M/M . (c) Comprimento de localização no limite termodinâmico λ_∞ versus $E - E_c$.

as curvas de λ_M/M colapsam para diferentes valores de M .

Os resultados acima indicam que no limite termodinâmico ($M \rightarrow \infty$) o sistema apresenta estados estendidos com desordem fixa W . Vamos aplicar a análise

de tamanho finito mostrada na seção 4.2.2 para medir o comprimento de localização no limite termodinâmico λ_∞ . A Fig. 4.19 mostra os passos da análise de tamanho finito para medir o comprimento de localização no limite termodinâmico λ_∞ . Utilizamos os dados da Fig. 4.18. A Fig. 4.19(c) mostra λ_∞ versus $E - E_c$. Os símbolos indicam os dados para λ_∞ e a linha cheia um ajuste. Nosso melhor ajuste sugere que:

$$\lambda_\infty \propto \exp(\delta_0/\sqrt{E - E_c}), \quad (4.50)$$

onde $\delta_0 = 5.76$ e $E_c \approx 20.1$, isto é, uma assinatura da transição tipo Kosterlitz-Thouless. Portanto, nossos resultados numéricos indicam que correlações de longo alcance em uma das direções de um sistema com simetria chiral ou seja, hopping aleatório, apresenta uma transição de estados localizados para estados críticos. Em contraste com os resultados obtidos na Ref. [25], a transição metal-isolante em modelos com correlações de longo alcance nas amplitudes de hopping ocorre quando o parâmetro que controla o grau de correlações é nulo ($\alpha = 0$).

Capítulo 5

Sumário, Conclusões e Perspectivas

Nesta tese analisamos os efeitos de correlações de longo alcance em três sistemas nos quais a presença de desordem não correlacionada induz à localização de quasi-partículas ou excitações coletivas: i) Modelo de Heisenberg ferromagnético unidimensional com desordem nos acoplamentos entre os spíns. No caso de acoplamentos aleatórios não correlacionados, as ondas de spin com energia não nula são localizadas. ii) Cadeia Harmônica com massas aleatórias. Neste sistema os modos vibracionais com frequência não nula são também localizados se as massas forem aleatórias e não correlacionadas. iii) Modelo de Anderson unidimensional e bidimensional. No modelo de Anderson, a teoria de escala prevê estados localizados para $d \leq 2$. O modelo de Heisenberg 1d ferromagnético e a cadeia harmônica podem ser exatamente mapeados num hamiltoniano *tight-binding* eletrônico com uma forma particular de desordem nas amplitudes de hopping e na diagonal. Para introduzir as correlações de longo alcance recorreremos à teoria do movimento Browniano fracionário. O traço de um movimento Browniano fracionário apresenta densidade espectral $S \propto 1/k^\alpha$, onde o parâmetro α , que controla o grau de correlações, está

relacionado com o expoente de Hurst ($\alpha = 2H + 1$). Portanto, construímos, para cada sistema, uma distribuição de desordem apropriada com a densidade espectral mencionada. No caso magnético, as correlações foram introduzidas nos acoplamentos J entre os spins, na cadeia harmônica nas massas m , no modelo de Anderson as correlações foram introduzidas nas energias ϵ dos sítios. Em todos os casos a variância da desordem foi normalizada igual a um, exceto no caso (modelo de Anderson 1d) em que investigamos a dependência do valor crítico de α com esta normalização. Em seguida vamos apresentar de forma sucinta um sumário e as conclusões de nosso estudo nesses sistemas

Modelo de Heisenberg unidimensional com Correlação de Longo Alcance nos Acoplamentos Aleatórios entre os Spins

No estudo da natureza das ondas de spin deste sistema com N spins ($N < 10^6$) aplicamos o método de grupo de renormalização e calculamos o comprimento de localização λ . Nossos resultados numéricos indicam que, para $\alpha > \alpha_c = 1$, este sistema apresenta uma fase de ondas de spin livres na região de baixas energias. Uma análise de nossos dados numéricos sugere que, perto do parâmetro de correlação crítico $\alpha_c = 1$, a energia crítica E_c entre a fase estendida e a fase localizada, depende do expoente de correlação na forma $E_c \propto (\alpha - 1)^\nu$, com $\nu = 1/3$. Evidenciamos também a dinâmica de ondas de spin na cadeia. Através da integração numérica da equação de Schrödinger dependente do tempo para este modelo calculamos o desvio médio quadrático $\sigma^2(t)$. Nossos resultados indicam que, no regime de fortes correlações, $\alpha > \alpha_c = 1$, as ondas de spin apresentam uma dinâmica balística na cadeia [$\sigma^2(t) \propto t^2$]. Este resultado para $\sigma^2(t)$ foi confirmado através de um procedimento de diagonalização exata. Utilizando o mapeamento do Hamiltoniano de

Heisenberg 1d num hamiltoniano eletrônico e argumentos eurísticos nós obtemos a constante de difusão como sendo $D \propto t$, confirmando a natureza balística da difusão [$\sigma^2(t) \propto Dt \propto t^2$]. Para $\alpha < \alpha_c$ o sistema apresenta um comportamento super-difusivo [$\sigma^2(t) \propto t^{3/2}$] no limite de tempos longos. Os principais resultados deste estudo podem ser encontrados na Ref. [101]. É importante mencionar que quando terminamos este trabalho tivemos o conhecimento de um recente estudo sobre difusão em sistemas governados pela equação de Langevin generalizada com memôria de longo alcance [102]. Neste trabalho os autores apresentaram uma conjectura para se obter o expoente ν da difusão [$\sigma^2(t) \propto t^\nu$]. A análise de nossos dados, feita pelos autores [102], reproduz tanto o comportamento super-difusivo [$\sigma^2(t) \propto t^{3/2}$] para $\alpha < 1$ quanto o comportamento balístico no regime de $\alpha > 1$. Um de nossos interesses futuros consiste em estudar a natureza das ondas de spin no modelo de Heisenberg bidimensional com correlações nos acoplamentos.

Cadeia Harmônica com Correlações de Longo Alcance nas Massas Aleatórias

Utilizando o formalismo de matriz de transferência e diagonalização exata nós calculamos o comprimento de localização λ e a razão participação ξ dos modos vibracionais para o sistema com N massas ($N < 10^6$). Nossos resultados numéricos indicam que, para $\alpha > \alpha_c = 1$, o sistema apresenta uma fase de modos vibracionais estendidos na região de baixas frequências. Nós também estudamos o transporte de energia nesta cadeia com massas correlacionadas. Vários trabalhos na literatura demonstraram que o transporte de energia em cadeias harmônicas com desordem nas massas está diretamente relacionado com os modos vibracionais não espalhados e com as condições iniciais do sistema. Inicialmente o sistema é perturbado através

de um impulso (P) sobre uma dada massa da cadeia, ($P_{n_0} = P^0 \delta_{n,n_0}$) ou através de um deslocamento (Q) em uma dada massa da cadeia ($Q_{n_0} = Q^0 \delta_{n,n_0}$). Integrando numericamente as equações de movimento calculamos o segundo momento da distribuição espacial de energia $M_2(t)$. Mostramos que, para $\alpha > \alpha_c = 1$, o transporte de energia na cadeia é balístico [$M_2(t) \propto t^2$], independente da condição inicial. No regime de fracas correlações, $\alpha < \alpha_c$, nós obtivemos o mesmo comportamento já existente na literatura: [$M_2(t) \propto t^{3/2}$] para condição inicial tipo impulso e [$M_2(t) \propto t^{1/2}$] para condição inicial tipo deslocamento. Estudos anteriores sobre o segundo momento da distribuição de energia em cadeias harmônicas com desordem correlacionada obtiveram um expoente máximo $M_2(t) \propto t^{11/6}$ para o caso de correlações nas massas tipo trímeros: $m_1 m_1 m_1$ com $m_1 = 0$ e excitação inicial tipo momento [77]. Nosso modelo apresenta um transporte balístico no regime $\alpha > \alpha_c = 1$, o qual está associado com a fase de modos vibracionais estendidos na região de baixas frequências. Este resultado sugere que a condutividade térmica, que está relacionada com o segundo momento $M_2(t)$ através da fórmula de Kubo [87], pode ser drasticamente modificada pela presença de correlações de longo alcance na distribuição de desordem. Um de nossos interesses futuros consiste em estudar diretamente a condutividade térmica em cadeias harmônicas com desordem correlacionada. Outro aspecto importante consiste em incluir efeitos de anarmonicidade no sistema e estudar tanto o segundo momento da distribuição quanto a condutividade do sistema.

Modelo de Anderson 1d e 2d com Desordem Correlacionada de Longo Alcance

Caso 1d

Em nosso estudo adicional sobre o modelo de Anderson 1d com correlações [21] utilizamos o formalismo de matriz de transferência modificado e calculamos o coeficiente de transmissão $t(E)$ deste sistema com N sítios ($N < 10^6$). Para $\alpha > \alpha_c = 2$ existe uma fase de estados cuja transmitância é máxima, $|t(E)| \approx 1$, em plena concordância com a fase de estados estendidos prevista pelo cálculo do expoente de Lyapunov [21]. Combinando o cálculo da transmitância com o cálculo do expoente de Lyapunov, nós obtivemos que o valor crítico $\alpha_c = 2$, obtido na Ref. [21], não é uma quantidade universal. De fato, nós encontramos fortes indícios numéricos de que existe uma fase de estados estendidos para $\alpha < 2$. A condição para a existência desta nova fase é que a variância da distribuição de energias seja menor que uma certa variância crítica $(\Delta\epsilon_i)_c$. Além disso, nossos dados numéricos sugerem que α_c apresenta uma dependência exponencial com a variância da desordem. Nós também evidenciamos a dinâmica no modelo de Anderson 1d com correlações de longo alcance. Resolvendo numericamente a equação de Schrödinger dependente do tempo nós calculamos o desvio médio quadrático do pacote eletrônico $\sigma^2(t)$. Nossos resultados indicam que a existência de uma transição de Anderson em 1d induz um alargamento balístico do pacote [$\sigma^2(t) \propto t^2$]. Os resultados da transmitância máxima dos estados estendidos e da dinâmica balística refutam as críticas na literatura [90] sobre a existência de uma transição de Anderson em sistemas unidimensionais com desordem correlacionada da forma usada em nosso trabalho.

Caso 2d

Um dos grandes desafios em nosso trabalho de tese foi o estudo sobre a natureza dos estados eletrônicos no modelo de Anderson 2d com correlações de longo alcance nas energias dos sítios. Utilizando diagonalização exata nós calculamos a função razão participação para os autoestados. Nossos resultados numéricos indicam que, para $\alpha > \alpha_c = 2$, o modelo de Anderson 2d apresenta uma fase de estados estendidos. Integrando numericamente a equação de Schrödinger dependente do tempo nós calculamos o desvio médio quadrático $\sigma^2(t)$ para este sistema, evidenciando uma dinâmica balística [$\sigma^2(t) \propto t^2$] para $\alpha > \alpha_c$. Estes resultados numéricos indicam que a teoria de escala, que prevê estados localizados em $d \leq 2$, é violada se a distribuição de desordem apresentar correlações de longo alcance do tipo utilizado em nosso trabalho. Devido a dimensionalidade do sistema, nosso processo de diagonalização ficou limitado a sistemas $N \times N$ relativamente pequenos ($N^2 < 100^2$ sítios). Desta forma nós não conseguimos descrever de forma mais precisa como a largura da banda de estados estendidos depende do parâmetro α e também estudar a universalidade do valor crítico $\alpha_c = 2$ no caso 2d. Estas são questões para investigações futuras.

Estudamos também o modelo de Anderson 2d com correlações de longo alcance em apenas uma das direções do sistema, para o qual existe uma previsão de transição tipo Kosterlitz-Thouless no regime de fortes correlações [25]. Resolvendo numericamente a equação de Schrödinger dependente do tempo para sistemas $N \times N$ ($N^2 < 2000^2$), encontramos que a dinâmica na presença dos estados estendidos é difusiva [$\sigma^2(t) \propto t^1$]. Este resultado merece uma reflexão cuidadosa no contexto de um melhor entendimento das propriedades da transição Kosterlitz-Thouless neste

sistema.

Finalmente, estudamos um modelo *tight-binding* com correlações de longo alcance nas amplitudes de hopping. Consideramos o Hamiltoniano numa geometria quasi-unidimensional $N \times M$ com $N \leq 3 \times 10^5$ e $M < 100$. Introduzimos correlações nas amplitudes de hopping na direção maior do sistema (direção N). As amplitudes de hopping foram obtidas através de uma superposição de uma sequência com densidade espectral $S(k) \propto 1/k^\alpha$ e uma sequência aleatória sem correlações. Utilizando o formalismo de matriz de transferência 2d, calculamos o comprimento de localização λ para este sistema. Nossos resultados numéricos indicam que este sistema apresenta uma transição tipo Kosterlitz-Thouless em $\alpha = \alpha_c = 0$. Devido a dificuldades numéricas nós não estudamos o comportamento dinâmico do elétron neste sistema com hopping aleatório, bem como a universalidade do valor crítico $\alpha_c = 0$. Outro aspecto importante é o cálculo da função participação para este sistema. Estes tópicos serão objetos de futuras investigações.

Referências Bibliográficas

- [1] P.W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).
- [2] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.G. Licciardello e T.V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979).
- [3] R. Zallen, *The Physics of Amorphous Solids* (Wiley, New York 1983)
- [4] I. M. Lifshitz, S. A. Gredeskul e L. A. Pastur, *Introduction to the Theory of Disordered Systems* (Wiley, New York, 1988).
- [5] B. Kramer e A. MacKinnon, Rep. Prog. Phys. **56**, 1469 (1993).
- [6] N. F. Mott e E. A. Davis *Electronic Processes in Non-Crystalline Materials*, (Clarendon Press, Oxford, 1971). Veja também N. F. Mott, *Metal-insulator Transitions* (Taylor e Francis, London, 1974).
- [7] B. L. Altshuler *et al*, Coherent Effects in Disordered Conductors, em *Quantum Theory of Solids*, editado por I. M. Lifshits, (**MIR** Publishers, Moscow, 1982). Capítulo 3, p. 130.
- [8] T. V. Ramakrishnan e P. A. Lee, Rev. Mod. Phys. **57**, 287 (1985).
- [9] D. Belitz e T. R. Kirkpatrick, Rev. Mod. Phys. **66**, 261 (1994).

- [10] Y. Asada, K. Slevin, e T. Obtsuki, Phys. Rev. Lett. **89**, 256601 (2002). Phys. S. N. Evangelou, Phys. Rev. Lett. **75**, 13 (1995). S. Hikami, A.I. Larkin e Y. Nagaoka, Prog. Theor. Phys. **63**, 707 (1980).
- [11] J. C. Flores, J. Phys.: Condens. Matter. **1**, 8471 (1989).
- [12] D.H. Dunlap, H.L. Wu and P. Phillips, Phys. Rev. Lett. **65**, 88 (1990).
- [13] V. Bellani, E. Diez, R Hey, L. Toni, , L. Tarricone, G .B. Parravicini, F. Dominguez-Adame e R. Gómez-Alcacá, Phys. Rev. Lett **82**, 2159 (1999). V. Bellani, E. Diez, A. Parisini , L. Tarricone , R. Hey , G .B. Parravicini , F. Dominguez-Adame, Physica E, **7** (3-4), (2000) 823.
- [14] A. Bovier, J. Phys. A **25**, 1021 (1992).
- [15] H.-L. Wu e P. Phillips, Phys. Rev. Lett. **66**, 1366 (1991).
- [16] S.N. Evangelou e D.E. Katsanos, Phys. Lett. A **164**, 456 (1992).
- [17] J.C. Flores e M. Hilke, J. Phys. A: Math. Gen. **26**, L 1255 (1993).
- [18] M. Hilke, J. Phys. A: Math. Gen. **27**, 4773 (1994).
- [19] F. C. Lavarda, M. C. dos Santos, D. S. Galvão e B. Laks, Phys. Rev. Lett. **73**, 1267 (1994).
- [20] J. Heinrichs, Phys. Rev. B **51**, 5699 (1995).
- [21] F. A. B. F. de Moura e M. L. Lyra, Phys. Rev. Lett. **81**, 3735 (1998); *ibid.* **84**, 199 (2000).
- [22] F. A. B. F. de Moura e M. L. Lyra, Physica A **266**, 465 (1999).

- [23] F. M. Izrailev e A. A. Krokhin, Phys. Rev. Lett. **82**, 4062 (1999); F. M. Izrailev, A. A. Krokhin, e S. E. Ulloa, Phys. Rev. B **63**, 41102 (2001).
- [24] D. Taras-Semchuk e K. B. Efetov, Phys. Rev. B **64**, 115301 (2001).
- [25] W. S. Liu, T. Chen, e S. J. Xiong, J. Phys. Condens. Matter **11**, 6883 (1999).
- [26] U. Kuhl, F. M. Izrailev, A. Krokhin, e H. J. Stöckmann, Appl. Phys. Lett. **77**, 633 (2000).
- [27] P. Carpena, P. Bernaola-Galán, P. Ch. Ivanov, e H. E. Stanley, Nature **418**, 955 (2002).
- [28] N.W. Ashcroft e N.D. Mermin, *Solid State Physics* (Winston, Philadelphia 1976).
- [29] Veja, por exemplo, D. M. Cláudio e J. M. Martins, Cálculo Numérico Computacional, (Editora Atlas 1994)
- [30] D. J. Thouless, Physics Reports **13**, 93 (1974).
- [31] F. Wegner, Z. Phys. B **25**, 327 (1976).
- [32] K. Slevin e T. Ohtsuki, Phys. Rev. Lett. **82**, 382 (2001).
- [33] K. Slevin, P. Marko e, T. Ohtsuki, Phys. Rev. Lett. **86**, 3594 (2001).
- [34] S. L. A. de Queiroz, Phys. Rev. B **63**, 214202 (2001).
- [35] K. Slevin, T. Ohtsuki e, T. Kawarabayashi, Phys. Rev. Lett. **84**, 3915 (2000).

- [36] G. A. Thomas e M. A. Paalanen, *Recent Developments in the Metal-Insulator Transition* em Localization, Interaction, and Transport Phenomena, Spring Series in Solid-State Sciences editado por B. Kramer, G. Bergmann, e Y. Bruynseraede, **61** p. 77 (1984).
- [37] S. Waffenschmidt, C. Pfeiderer, e H. V. Löhneysen, Phys. Rev. Lett. **83**, 3005 (1999).
- [38] S. Bogdanovich, M. P. Sarachik, e R. N. Bhatt, Phys. Rev. Lett. **82**, 137 (1999).
- [39] D. Ferry e S. M. Goodnick, *Transport in Nanostructures*, Cambridge University Press 1997. Capítulo 3, pag. 174.
- [40] K. Ishii, Prog. Theor. Phys. Suppl. **53**, 77 (1973).
- [41] G. Theodorou e M. Cohen, Phys. Rev. B. **13**, 4597 (1976).
- [42] L. Fleishman e D. C. Licciardello, J. Phys. C **10** L125 (1977).
- [43] C. M. Soukoulis e E. N. Economou, Phys. Rev. B **24** 5698 (1981).
- [44] M. Griniasty e S. Fishman, Phys. Rev. Lett. **60**, 1334 (1988).
- [45] S. Das Sarma, Song He e X.C. Xie, Phys. Rev. Lett. **61**, 2144 (1988).
- [46] D.J. Thouless, Phys. Rev. Lett. **61**, 2141 (1988).
- [47] M. Hilke, J. Phys. A **27**, 4773 (1994).
- [48] J.C. Cressoni e M.L. Lyra, Phys. Rev. B **53**, 5067 (1996); *ibid*, J. Phys.: Condens. Matter **8**, L83 (1996).

- [49] Veja por exemplo; M. Paczuski, S. Maslov e P. Bak, Phys. Rev. E **53**, 414 (1996) e as referências nele contidas.
- [50] M. C. Varriale e A. Theumann, Phys. Rev. B **52** 4631, (1995); J Phys A-Math. Gen. **23**, L719-L725 (1990); M.C. Varriale, *Transição de localização em potenciais aleatórios com correlações de longo alcance*, Tese de doutorado, UFRGS , Porto Alegre (1994).
- [51] S. Russ, J. W. Kantelhardt, A. Bunde, S. Havlin e I. Webman, Physica A **266**, 492-496 (1999).
- [52] B. B Mandelbrot e J. W. Van Ness SIAM Rev. **10** 422 (1968)
- [53] B. B Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature* (Freeman, New York 1983).
- [54] J. Feder, *Fractals* (Plenum Press, New York 1988); A. Tsonis, *Chaos: from theory to applications* (Plenum Press, New York 1992).
- [55] N.P. Greis e H.S. Greenside, Phys. Rev. A **44**, 2324 (1991).
- [56] T. Higuchi, Physica D **31**, 277 (1988).
- [57] C.G. Fox, Pure Appl. Geophys. **131**, 211 (1989).
- [58] A.R. Osborne e A. Provenzale, Physica D **35**, 357 (1989).
- [59] *The Science of Fractal Images*, editado por Heinz-Otto Peitgen e Dietmar Saupe (Springer-Verlag, New York 1988).
- [60] T. Higuchi, Physica D **46**, 254 (1988)

-
- [61] H. A. Makse, S. Havlin, M. Schwartz, e H. E. Stanley, Phys. Rev. E **53**, 5445 (1996).
- [62] G. P. Zhang e S.-J. Xiong, Eur. Phys. J. B **29**, 491 (2002).
- [63] T. A. L. Ziman, Phys. Rev. Lett. **49**, 337 (1982).
- [64] G. Theodorou, J. Phys. C **15**, L1315 (1982).
- [65] M. Cieplak e G. Ismail, J. Phys. C **20**, 1309 (1987).
- [66] S. N. Evangelou e D. E. Katsanos, Phys. Lett. A **164**, 456 (1992); S. N. Evangelou, A. Z. Wang, e S. J. Xiong, J. Phys.: Condens. Matter **6**, 4937 (1994).
- [67] H. Rieger and F. Iglói, Phys. Rev. Lett. **83**, 3741 (1999).
- [68] R. P. A. Lima, M. L. Lyra, E. M. Nascimento, e A. D. de Jesus, Phys. Rev. B **65**, 104416 (2002).
- [69] P. Dean, Rev. Mod. Phys. **44**, 127 (1972); Proc. Roy. Soc. **254** 123, (1960).
- [70] D. C. Mattis, 1993, *The Many-Body Problem*, (World Scientific Publishing). Pag. 112-124.
- [71] F. J. Dyson, Phys. Rev. **92**, 1331 (1952).
- [72] P. Dean, Proc. Phys. Soc. **84**, 727 (1964).
- [73] H. Matsuda e K. Ishii, Prog. Theor. Phys. Suppl. **45**, 56 (1970); K. Ishii, Prog. Theor. Phys. Suppl. **53**, 77 (1973).
- [74] P. K. Datta e K. Kundu, J. Phys.: Condens. Matter **6**, 4465 (1994).

- [75] F. Dominguez-Adame, E. Macià, e A. Sánchez, *Phys. Rev. B* **48**, 6054 (1993).
- [76] J. C. Cressoni e M. L. Lyra, *Phys. Rev. B* **53**, 5067 (1996); *J. Phys.: Condens. Matter* **8**, L83 (1996).
- [77] P. K. Datta e K. Kundu, *Phys. Rev. B* **51**, 6287 (1995).
- [78] S. N. Evangelou e E. N. Economou, *J. Phys. A: Math. Gen.* **26**, 2803 (1993).
- [79] M. Wagner, G. Zart, J. Vazquez-Marquez, G. Vilianni, W. Frizzera, O. Pilla, e M. Montagna, *Philos. Mag. B* **65**, 273 (1992).
- [80] M. J. de Oliveira e A. Petri, *Int. J. Mod. Phys. B*, **11** 2195 (1997).
- [81] B. Li, H. Zhao, e B. Hu, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 63 (2001); A. Dhar, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5882 (2001);
- [82] P. L. Garrido, P. I. Hurtado, e B. Nadrowski, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5486 (2001); A. V. Savin, G. P. Tsironis, e A. V. Zolotaryuk, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 154301 (2002).
- [83] A. Dhar, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 249401 (2002); P. L. Garrido e P. I. Hurtado, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 249402 (2002); H. B. Li, Y. H. Wang, e H. Zhao, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 079401 (2002); P. L. Garrido e P. I. Hurtado, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 079402 (2002).
- [84] O. Narayan e S. Ramaswamy, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 200601 (2002).
- [85] E. Fermi, J. Pasta e, S. Ulam, Los Alamos Sci. Lab. Report No. LA-1940. D. C. Mattis, 1993 *The Many-Body Problem*,(World Scientific Publishing). Capítulo 7. Pag. 851.

- [86] M. Toda, J. Phys. Soc. Japan **22**, 431 (1967); *ibid* **23**, 501 (1967).
- [87] P. B. Allen e J. L. Feldman, Phys. Rev. B **48**, 12581 (1993).
- [88] K. A. Chao, R. Riklund, and Y. Y. Liu, Phys. Rev. B **32**, 5979 (1985). R. Farchioni *et al.*, Phys. Rev. B **45**, 6383 (1992).
- [89] *Numerical Recipes in Fortran 77: The Art of Scientific Computing*, (Cambridge University Press). Capítulo 11.
- [90] J. W. Kantelhardt, S. Russ, A. Bunde, S. Havlin, e I. Webman, Phys. Rev. Lett. **84**, 198 (2000).
- [91] Y. Liu e K. A. Chao, Phys. Rev. B **34**, 5247 (1986).
- [92] A. MacKinnon, Z. Phys: Condensed Matter bf 59, 385 (1985); B. Kramer e A. MacKinnon Z. Phys: Condensed Matter bf 53, 1 (1983); Phys. Rev. Lett. **47**, 1546 (1981).
- [93] D. R. McGaughey e G. J. M. Aitken, Physica A **311**, 369 (2002)
- [94] F. Wegner, Phys Rev B **19**, 783 (1979).
- [95] R. Gade, Nuc. Phys. B **398**, 499 (1993).
- [96] M. Inui, S. A. Trugman e, E. Abrahams, Phys. Rev. B **49**, 3190 (1994).
- [97] V. Z. Cerovski, Phys. Rev. B, bf 62 12775 (2000).
- [98] C. M. Soukoulis. I Webman, G, S. Grest e E. N. Economou, Phys. Rev. B **26** 1838 (1982).
- [99] A. Eilmes, R. A. Römer, e M. Schreiber, Eur. Phys. J. B **1**, 29 (1998).

-
- [100] A. F. Macedo-Junior e A. M. S. Macêdo, Phys. Rev. B, **66** 041307 (2002).
- [101] F. A. B. F. de Moura, M. D. Coutinho-Filho, E. P. Raposo, e M. L. Lyra, Phys. Rev. B **66**, 014418 (2002).
- [102] R. Morgado, F. A. Oliveira, G. G. Batrouni, e A. Hansen, Phys. Rev. Lett **89**, 100601 (2002).