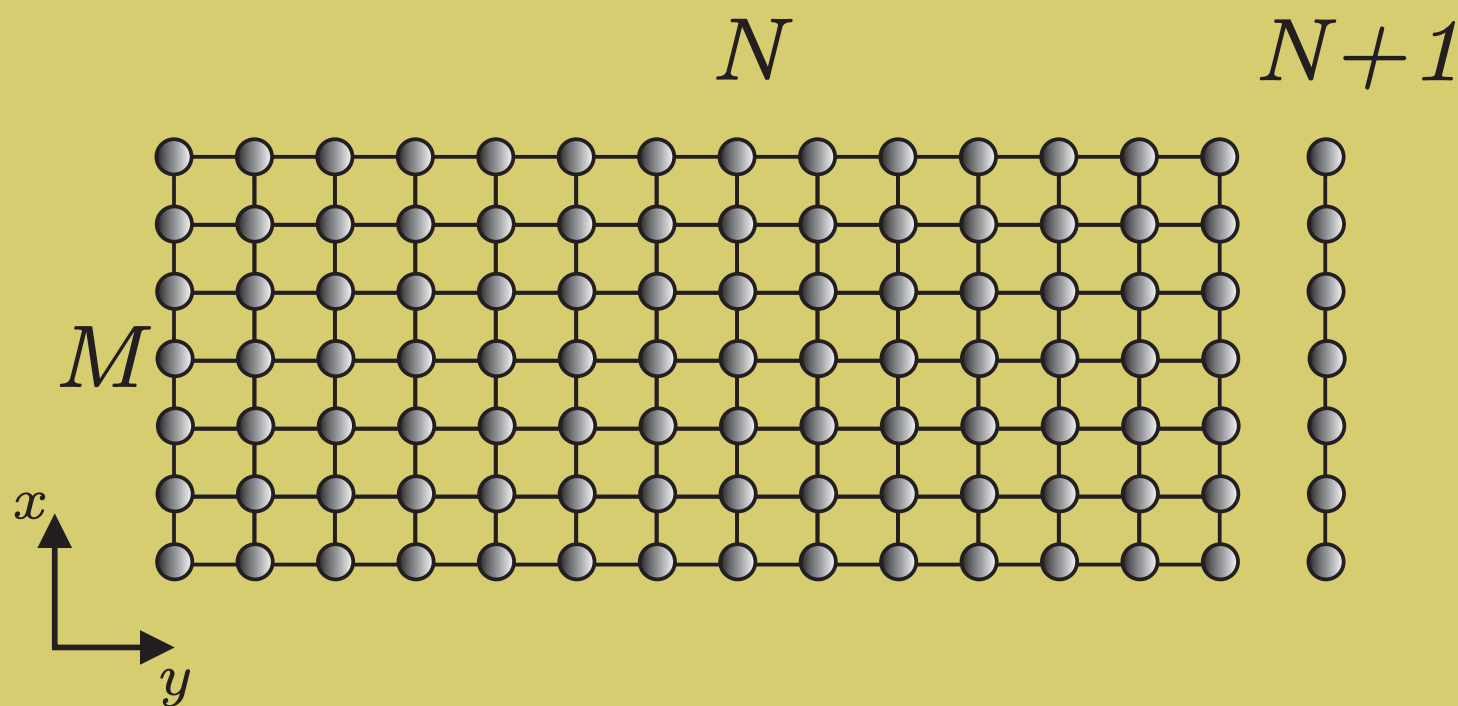


Elementos da Teoria da Localização de Anderson



Renato Ferreira Dutra
Demitry Messias dos Santos
Caio Vitor Castro Mendes
Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura

2020

ISBN:978-65-00-01651-2

ELEMENTOS DA TEORIA DE LOCALIZAÇÃO DE ANDERSON

**RENATO FERREIRA DUTRA
DEMITRY MESSIAS DOS SANTOS
CAIO VITOR CASTRO MENDES
FRANCISCO ANACLETO BARROS FIDELIS DE MOURA**

**MACEIÓ
2020**

PREFÁCIO

Este texto foi produzido com o intuito de auxiliar estudantes de graduação e/ou pós-graduação em física e/ou áreas afins dentro do contexto da teoria da localização de Anderson. Apresentamos de forma resumida a teoria básica da localização de Anderson bem como suas aplicações em sistemas harmônicos e magnéticos. A parte final do livro é dedicada aos diversos métodos numéricos que permeiam o estudo de propriedades de transporte em sistemas desordenados. Apresentamos diversas técnicas numéricas bem como orientações sobre implementação e/ou precisão numérica. Tentamos usar uma linguagem simples, entretanto mantendo uma linha formal necessária ao tema. Esperamos que este texto seja útil aos estudantes e/ou interessados em compreender a Teoria da localização, suas consequências fundamentais bem como as principais metodologias de estudo e obtenção das principais quantidades físicas.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem aos familiares pelo apoio constante. C.V.C. Mendes, D.M. Santos e R.F. Dutra agradecem ao apoio do programa de pós-graduação em Física do IF-UFAL bem como o financiamento da CAPES dentro deste programa. F.A.B.F de Moura agradece aos professores Marcelo Lyra do IF-UFAL e Maurício Coutinho do DF-UFPE pelo suporte e ensinamentos ao longo da vida acadêmica.

"Qualquer teoria da prática docente depende, num certo sentido, de uma aproximação psicanalítica, devida às fortes componentes relacionais e afetivas da profissão, mas também a tensão entre um ideal de maestria, de integridade, de coerência e de competências e uma realidade concreta com nuances muito distintas."

Sigmund Freud

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – O comportamento qualitativo de $\beta(g)$ para $D = 1, 2$ e 3 na teoria de escala apresentada por <i>Abrahams, Anderson, Licciardello e Ramakrishnam</i>	20
Figura 2 – (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 $\alpha = 0, 0.5, 1.5$	27
Figura 3 – Diagrama esquemático da geometria bidimensional ($D = 2$) para o modelo de <i>Anderson</i> bem como a ordenação dos orbitais $ n, m\rangle$ utilizados. O Hamiltoniano é escrito em uma rede $N \times N$, onde cada sítio da rede é representado pelos índices n, m . Em cada sítio da rede temos um orbital atômico $ n, m\rangle$. Fonte: Autores	43
Figura 4 – Participação reescalada ξ/N^2 , raiz quadrada do desvio médio quadrático reescalado σ/N e condutância reescalado G/N . Experimento numérico feito considerando o Hamiltoniano de <i>Anderson</i> em dimensão $D = 2$ com desordem diagonal $W = 5$ (medido em unidades do <i>hopping</i> $J = 1$). Como podemos observar todas as quantidades reescaladas diminuem a medida que o tamanho do sistema cresce. Este resultado sinaliza que no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$) todos os estados são localizados. Fonte: Autores	44
Figura 5 – Comprimento de localização: a) modelo de <i>Anderson</i> unidimensional com desordem diagonal não correlacionada, b) modelo de dímeros aleatórios e c) modelo de <i>Anderson</i> com correlação de longo alcance na distribuição de desordem. No caso (a) a desordem não correlacionada resulta em comprimento de localização pequeno no limite termodinâmico. No caso (b) encontramos uma energia ressonante. No caso (c) encontramos uma região em torno do centro da banda, onde o comprimento de localização é proporcional ao tamanho do sistema (estados metálicos). Cálculos realizados usando o método de <i>Green</i> e a matriz de transferência.	53
Figura 6 – Geometria tipo “fita” com comprimento N e largura M usada nos formalismos de matriz de transferência 2D e funções de <i>Green</i>	55
Figura 7 – Raiz quadrada do desvio médio quadrático e participação versus tempo considerando o modelo de <i>Anderson</i> unidimensional com desordem diagonal não correlacionada de largura W . Para $W = 0$ ou seja, o caso cristalino onde os estados são estendidos, temos que σ e ξ divergem linearmente. Para $W > 0$ temos que σ e ξ são constantes para tempo longo indicando assim a presença de estados localizados (isolantes).	69

Figura 8 – Participação e raiz quadrada do desvio médio quadrático reescalados versus tempo reescalado considerado o modelo unidimensional com desordem diagonal apresentando espectro de potência $S(k) \propto k^{-\alpha}$ (ou seja, correlação de longo alcance). Para $\alpha = 0$, o sistema apresenta apenas estados localizados logo ξ/N e σ/N diminuem a medida que N cresce. Para $\alpha = 3$, o sistema tem estado metálico e assim tanto ξ quanto σ propagam de forma balística.	70
Figura 9 – Ilustração do modelo de <i>Anderson</i> unidimensional sob a ação de um campo elétrico paralelo ao sistema.	72
Figura 10 – Diagrama ilustrando a dinâmica eletrônica na presença de campo elétrico dentro da zona de <i>Brillouin</i> , onde o elétron inicia seu movimento com momento k_0 . O momento cresce linearmente com o tempo até chegar no valor $+\pi$ e então é reinjetado no outro extremo da zona de <i>Brillouin</i> (com momento $-\pi$). O momento volta a evoluir linearmente até chegar novamente ao valor inicial k_0 . Este movimento oscilatório é chamado de Oscilação de <i>Bloch</i> .	74
Figura 11 – Posição eletrônica média calculada considerando o sistema unidimensional sem desordem ($W = 0$) na presença de campo elétrico $E = 0.25$ e 0.5 . Observamos claramente o movimento oscilatório (Oscilação de <i>Bloch</i>) com frequência $\omega = E$, ou seja, em total concordância com a abordagem semiclassica.	75
Figura 12 – Mesmo caso considerado na figura 11 sendo que agora incluindo desordem diagonal com $W = 2$ (em unidades de $J = 1$). Observamos claramente a ausência de uma oscilação coerente.	76
Figura 13 – Geometria bidimensional consistindo de uma rede $N \times N$ submetida a um campo elétrico \vec{E} paralelo ao plano.	77
Figura 14 – Posição média eletrônica calculada em sistemas $N \times N$ com $N = 200$ sítios. O sistema está submetido a um campo $\vec{E} = E_x n + E_y m$ com $E_x = E_y = 0.5$ e 0.75 . Consideramos o caso sem desordem diagonal, ou seja, $W = 0$. Observamos novamente uma oscilação de <i>Bloch</i> com frequência idêntica ao campo aplicado.	79

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
1.1	Introdução	14
1.2	A fenomenologia da localização de <i>Anderson</i>	15
1.2.1	Modelo de <i>Anderson</i>	16
1.2.2	Teoria de Escala para a Transição de <i>Anderson</i>	18
2	MODELO DE ANDERSON COM CORRELAÇÕES NA DESORDEM .	23
2.1	Modelo de <i>Anderson</i> com Correlações	23
2.1.1	Correlações de Longo Alcance no Modelo de <i>Anderson</i>	25
3	TEORIA DA LOCALIZAÇÃO EM SISTEMAS HARMÔNICOS E MAGNÉTICOS	31
3.1	Mágnons e Modos Vibracionais em Sistemas Desordenados	31
3.1.1	Mágnon em sistemas desordenados	31
3.1.2	Mágnons em Cadeias Ferromagnéticas Desordenadas	31
3.1.3	Modos vibracionais em sistemas desordenados	37
4	MEDIDAS DO GRAU DE LOCALIZAÇÃO : QUANTIDADES INDEPENDENTES DO TEMPO	41
4.1	Métodos envolvendo diagonalização direta do Hamiltoniano	41
4.2	O comprimento de localização	47
4.2.1	Método do Grupo Renormalização 1D Usando o Operador de <i>Green</i>	47
4.2.2	Matriz de transferência unidimensional	51
4.2.3	Método de Matriz de Transferência 2D	54
4.2.4	Método de Funções de <i>Green</i>	57
4.2.5	Coefficiente de Transmissão	58
4.2.6	Densidade de Estados	60
5	MEDIDAS DO GRAU DE LOCALIZAÇÃO: QUANTIDADES DEPENDENTES DO TEMPO	63
5.1	Evolução Temporal	63
5.1.1	Método do operador de evolução temporal	63
5.1.2	Runge-Kutta de 4ª ordem	65
5.2	Método de Taylor	66
6	EFEITO DO CAMPO ELÉTRICO	72
6.1	Modelo de Anderson com efeito do Campo Elétrico 1D	72

6.2	Modelo de Anderson 2D e 3D com efeito de Campo Elétrico	76
	REFERÊNCIAS	81

1 Introdução

1.1 INTRODUÇÃO

A fenomenologia usualmente chamada de “teoria da localização” teve início na década de cinquenta quando *P.W. Anderson* [1] apresentou relevantes contribuições acerca dos efeitos de desordem sobre a função de onda eletrônica. Até aquele momento, a maior parte dos estudos teóricos em sólidos era fundamentada em modelos quânticos contendo invariância translacional. Em sistemas com invariância translacional (sem desordem), as quasi-partículas ou excitações coletivas nesses modelos como 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, grande parte dos sólidos encontrados na natureza, ou 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 da 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 sob 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 a 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, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19] e também fases metálicas [20, 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 unidimensionais 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, 28].

Neste capítulo apresentaremos uma revisão geral sobre a teoria de localização de *Anderson*, bem como os formalismos utilizados para se estudar o efeito da desordem em sistemas de baixa dimensionalidade. A natureza localizada ou estendida dos autoestados do Hamiltoniano de *Anderson* é obtida, em geral, através de métodos numéricos. No final deste livro apresentaremos uma revisão dos principais métodos numéricos necessários ao estudo das propriedades de transporte dentro do contexto do modelo utilizado por *Anderson*.

1.2 A FENOMENOLOGIA DA LOCALIZAÇÃO 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 [29]:

$$H\psi = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r) \right] \psi = E\psi, \quad (1)$$

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) são estendidas por todo espaço. *Anderson* mostrou que a natureza da função de onda pode mudar de estendida, como no caso das ondas de *Bloch*, para o caso localizada onde a função de onda fica restrita a uma pequena região da rede (fora desta pequena região a função de onda é nula).

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, em vez 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 está 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 intensidade da desordem. Na próxima seção, vamos apresentar uma breve revisão do formalismo usado por *Anderson* para entender esta fenomenologia.

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 à presença de desordem. Na representação de *Wannier* (*tight-binding*), o Hamiltoniano de *Anderson* pode ser escrito como

$$H = \sum_i \epsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{i \neq j} J_{ij} |i\rangle\langle j|. \quad (2)$$

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 , J_{ij} é o elemento de matriz do Hamiltoniano entre os sítios i e j . O elemento de matriz J_{ij} é chamado de integral de transferência entre os sítios i e j (outra denominação para J_{ij} é amplitude de *hopping*) e decresce muito rapidamente com a

distância entre eles. A característica fundamental da Eq.(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 (também chamado de “força” da desordem). 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 se torna metálico. Ou seja, em $D = 3$ se $W < W_c$ o sistema apresenta uma banda de estados estendidos (metálicos).

A obtenção dos autoestados eletrônicos $|\psi\rangle$ do Hamiltoniano H envolve a solução da equação de Schrödinger com um termo aleatório. Utilizando a expansão dos autoestados nas bases de orbitais ($|\psi\rangle = \sum_n f_n |n\rangle$), obtemos a equação de Schrödinger ($H |\psi\rangle = E |\psi\rangle$) para este Hamiltoniano:

$$E f_n = \epsilon_i f_n + \sum_j J_{ij} f_j. \quad (3)$$

Vamos analisar a Eq.(3) em dois casos limites, supondo que os potenciais estão distribuídos sobre uma rede regular e que só existem integrais de transferência de mesma magnitude, entre os z primeiros vizinhos. Logo, a Eq.(3) fica

$$E f_n = \epsilon_i f_n + J \sum_{j=1}^{j=z} f_{n+j}, \quad (4)$$

onde J 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.(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.(4) se reduz a

$$E f_n = J (f_{n-1} + f_{n+1}). \quad (5)$$

Funções exponenciais complexas obedecem a equações semelhantes a Eq.(5). Escolhendo $f_n = f_0 e^{ink}$, Eq.(5) é satisfeita se $E = 2J \cos(k)$. Isto corresponde a banda cristalina da teoria de *Bloch* ($-2J < E < +2J$). Portanto, no caso de cadeias unidimensionais (número de vizinhos $z = 2$) a largura da banda cristalina é $B = 4 J$. De forma geral, a largura da banda cristalina para uma rede de dimensão D com número de vizinhos z é $B = 2z J$. Outro caso limite é $W \neq 0$ e $J = 0$. Com o acoplamento removido teríamos os orbitais atômicos como solução do problema (estados localizados).

O problema não trivial (J e W não nulos) foi estudado por *Anderson* através da teoria de perturbação. Ao longo dos anos, este problema tem sido estudado por uma grande variedade de técnicas analíticas e numéricas. Neste trabalho apresentaremos métodos numéricos, em particular o métodos de funções de *Green*, matriz de transferência, diagonalização direta e solução numérica

da equação de Schrödinger dependente do tempo. Utilizando estas técnicas, é possível calcular quantidades que medem o grau de localização dos autoestados do Hamiltoniano H . Dentre estas quantidades podemos citar o expoente de *Lyapunov* (γ) e a participação (ξ). O expoente de *Lyapunov* é o inverso do comprimento de localização (λ). O comprimento de localização é calculado considerando que a função de onda é exponencialmente localizada. Em sistemas desordenados, geralmente a função de onda apresenta um decaimento exponencial nas bordas. Este comportamento exponencial é usado para medir o comprimento de localização do estado eletrônico. A participação é o número de sítios que efetivamente participam do estado eletrônico. Tanto λ quanto ξ são medidas do tamanho médio da função de onda eletrônica.

A caracterização do estado como localizado ou estendido é feita com base no estudo destas quantidades e sua dependência com o tamanho do sistema. No cap. 4, vamos descrever estas quantidades bem como outras usadas para medir o grau de localização. Também vamos apresentar as metodologias necessárias para calcular tais quantidades.

1.2.2 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 temperatura zero ($T = 0$).

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 umas às outras. As energias características do modelo de *Anderson* W e J são mapeadas respectivamente no espaçamento médio entre os níveis ΔE e no deslocamento δE causado por mudanças nas condições de contorno. Um elegante argumento heurístico, baseado no princípio da incerteza, conecta δE com a condutividade σ no limite macroscópico. Através do princípio da incerteza pode-se estabelecer:

$$\delta E = \hbar/t_{D_f}, \quad (6)$$

onde t_{D_f} 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

$$t_{D_f} = L^2/D_f, \quad (7)$$

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

$$\sigma = e^2 D n(E), \quad (8)$$

e combinando as Eqs.(6),(7),(8), temos

$$\delta E = \frac{\sigma \hbar}{e^2 (L^2 n(E))}. \quad (9)$$

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

$$n(E) = 1/(L^D \Delta E). \quad (10)$$

A razão $\Delta E/\delta E$ é agora adotada como sendo uma medida de “força” da desordem no sistema, análoga a razão W/J no modelo de *Anderson* tradicional. Estados estendidos são sensíveis a mudanças nas condições de contorno ($\delta E > \Delta E$). Por outro lado, estados localizados não apresentam tal sensibilidade (ou seja, $\delta E < \Delta E$). O parâmetro de desordem g^{-1} , é definido por

$$\frac{1}{g(L)} \equiv \frac{\Delta E}{\delta E}. \quad (11)$$

Substituindo as Eq.(9),(10) na Eq.(11), podemos observar a dependência de escala do parâmetro g :

$$g(L) = (\hbar/e^2) \sigma L^{D-2}. \quad (12)$$

A Eq.(12) se aplica apenas a estados estendidos no limite macroscópico. 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 $\beta(g)$, dada por

$$\beta(g) = \frac{d \ln g(L)}{d \ln L}. \quad (13)$$

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 fig.(1) para $D = 1, 2$ e 3 . A

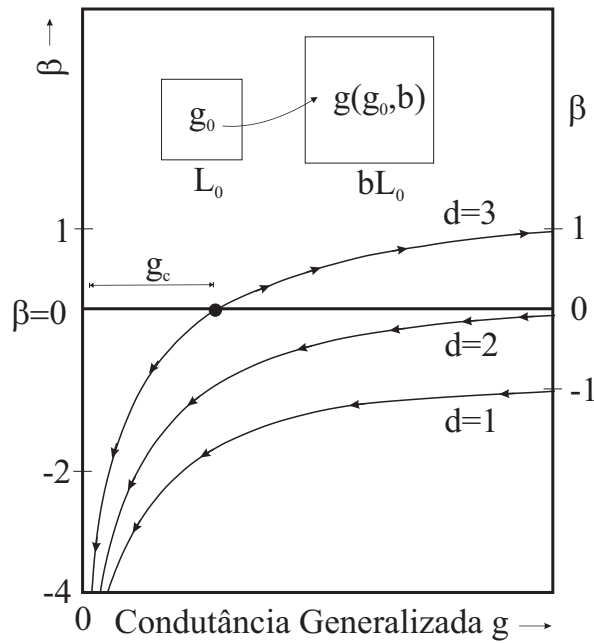


Figura 1 – O comportamento qualitativo de $\beta(g)$ para $D = 1, 2$ e 3 na teoria de escala apresentada por *Abrahams, Anderson, Licciardello e Ramakrishnam*.

curva mostrada na fig. (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 podemos usar a Eq.(12) e mostrar que

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \beta(g) = D - 2. \quad (14)$$

Logo, $\beta(g \rightarrow \infty) = 1$ em $D = 3$, $\beta(g \rightarrow \infty) = 0$ em $D = 2$ e $\beta(g \rightarrow \infty) = -1$ em $D = 1$, como mostrado na fig.(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 decai exponencialmente com L , de forma que $g(L) \propto e^{-\gamma L}$. Usando a Eq.(13), temos

$$\lim_{g \rightarrow 0} \beta(g) = \ln g, \quad (15)$$

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 fig.(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:

$$\begin{aligned}\sigma_{DC} &\propto (E - E_c)^s, \\ \lambda &\propto (E - E_c)^{-\nu}.\end{aligned}\tag{16}$$

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 Wlfle* [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 vem 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 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 ($Si : Ba$) [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].

2 Modelo de *Anderson* com correlações na desordem

2.1 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 unidimensionais foi demonstrada analiticamente por *K. Ishii* [40] e é uma consequência natural do teorema de *Furstenberg* [36] sobre produtos de variáveis aleatórias não correlacionadas. Entretanto, uma série de trabalhos têm sido propostos nos quais a presença de desordem correlacionada e/ou sequências pseudo-aleatórias são responsáveis por um comportamento não usual no modelo de *Anderson* unidimensional. Em 1976, *Theodorou e Cohen* [41] mostraram que um modelo *tight-binding* unidimensional com as amplitudes de *hopping* aleatórias apresenta uma energia crítica no centro da banda, onde a função de onda é estendida. Entretanto, *Fleishman e 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 divergente, 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* unidimensional 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 em pares. Foi mostrado que se $|\epsilon_A - \epsilon_B| \leq 2J$, onde J é a amplitude de *hopping*, o sistema apresenta uma energia ressonante onde a função de onda é deslocalizada. Em 1992, *Bovier* [13] estudou o modelo *tight-binding* unidimensional 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 com os mesmos resultados: Divergência do comprimento de localização em algumas energias críticas [14, 15, 16, 17, 18, 19]. A diferença fundamental entre o modelo de *Anderson* original e os modelos de dímeros é a existência de correlações nas energias dos sítios. *Wu e Phillips* [14] mostraram que a distribuição de desordem na polianilina é descrita exatamente por este modelo de dímeros aleatórios. A existência destes estados estendidos ressonantes foi verificada por *Bellani et al.* [47] em experimentos com super-redes de dímeros aleatórios (GaAs-AlGaAs).

Uma outra realização experimental do modelo de dímeros aleatórios foi feita em 2013 [48]. Nesta, os autores usaram espécie de rede ótica formada por guias de onda fracamente acoplados. Os guias foram escolhidos com constantes de propagação ϵ_1 e ϵ_2 . A distribuição dos guias foi aleatória, entretanto os autores mantiveram o mesmo tipo de correlação local existente no modelo de dímeros aleatórios. Dependendo da diferença entre os valores ϵ_1 e ϵ_2 os autores encontraram diversos regimes de propagação ótica incluindo a propagação superdifusiva, uma clara assinatura do modelo de dímeros aleatórios. Se faz importante mencionar que boa parte dos experimentos são feitos em sistemas análogos ao modelo de *Anderson* 1D.

Em linhas gerais, os resultados encontrados via modelo de *Anderson* são válidos não apenas para sistemas eletrônicos, mas também tem uma validade geral em diversos sistemas contendo fenômenos ondulatórios. Recentemente, *Cressoni e Lyra* [49] estudaram cadeias recozidas, onde a correlação entre as energias dos sítios é dada por $\langle \epsilon_i \epsilon_j \rangle \propto e^{-|i-j|/\zeta}$. Foi mostrado que o comprimento de localização cresce com comprimento de correlação ζ , mas todos os estados permanecem localizados dado a ausência de ressonâncias típicas.

2.1.1 Correlações de Longo Alcance no Modelo de *Anderson*

Como foi mostrado na seção 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 [50] 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* [51] 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 demonstrada a existência de transição de *Anderson* em altas dimensões ($d > 4$). No início de 1998, *Russ et al.* [52] estudaram um modelo de *Anderson* unidimensional 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* [20] estudaram o modelo de *Anderson* unidimensional 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 unidimensionais desordenados foi encontrada. Como mencionado, a sequência de energias dos sítios foi considerada 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* [53, 54] 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

$$V(t - t_0) = \langle [B_H(t) - B_H(t_0)]^2 \rangle = 2D_f\tau(|t - t_0|/\tau)^{2H}, \quad (17)$$

onde τ é o intervalo entre duas observações sucessivas da posição da partícula e D_f é a constante de difusão. Em uma função aleatória $X(t)$ o expoente de *Hurst* H é igual a $1/2$, enquanto 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 $2D_f\tau = 1$. 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

$$C(t) = \left[\frac{\langle -B_H(-t)B_H(t) \rangle}{B_H(t)^2} \right] = (2^{2H-1} - 1). \quad (18)$$

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. Consequentemente, 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* [20] utilizaram um formalismo de transformada de *Fourier* discreta descrito nas Refs. [55, 56, 57, 58, 59, 60, 61]. 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 [58]:

$$x_i = x(t_i) = \sum_{k=1}^{N/2} (S(\omega_k)\Delta\omega)^{1/2} \cos(\omega_k t_i + \phi_k). \quad (19)$$

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 ,

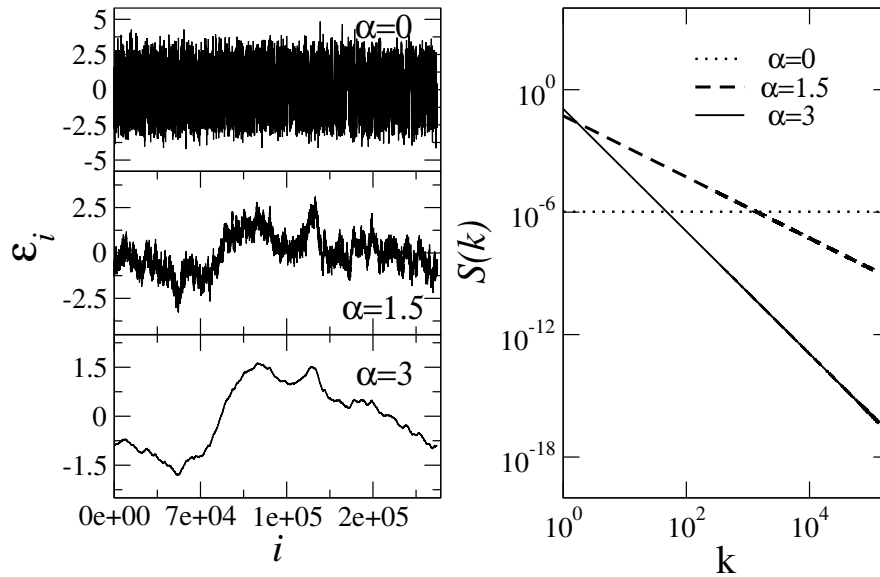


Figura 2 – (a) Sequências geradas pela Eq. 1.30 com $N = 2 \times 10^5$ e parâmetro de correlação $\alpha = 0, 0.5, 1.5$. (b) Densidade espectral $S(k)$ obtida numericamente. Observe o comportamento $S(k) \propto 1/k^\alpha$ para $\alpha = 0, 0.5, 1.5$.

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

$$x_i = \sum_{k=1}^{N/2} \left[k^{-\alpha} \left| \frac{2\pi}{N} \right|^{1-\alpha} \right]^{1/2} \cos \left(\frac{2\pi i k}{N} + \phi_k \right). \quad (20)$$

O parâmetro α controla as correlações desta sequência. Para $\alpha = 0$, temos uma sequência aleatória, sem correlações entre os eventos (ruído branco). No caso de $\alpha = 2$, 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.(20). Entretanto, segundo a Eq.(20) 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.(20) 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

$$\epsilon_i = \sum_{k=1}^{N/2} \frac{\mathcal{C}(\alpha)}{k^{\alpha/2}} \cos \left(\frac{2\pi i k}{N} + \phi_k \right), \quad (21)$$

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 fig.(2.1.1 (a)) para $\alpha = 0, 0.5, 1.5$ e $N = 2^{19}$.

A densidade espectral ($S(k) \propto 1/k^\alpha$) para $\alpha = 0, 0.5, 1.5$ é mostrada na fig. (2.1.1 (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*). Como já mencionamos anteriormente, *Moura* e *Lyra* usaram um formalismo de renormalização para se calcular o expoente de *Lyapunov* para o modelo de *Anderson* com as energias dos sítios descritas pela Eq.(21). Esta quantidade física já foi introduzida no cap.1 e será reanalisada no cap.4. As metodologias utilizadas para o cálculo do expoente de *Lyapunov* também serão devidamente detalhadas no cap.4. Em linhas gerais, os resultados encontrados em 1998 [20] mostraram que o comprimento de localização calculado em torno do centro da banda pode ser divergente a depender do grau de correlação impetrado na distribuição de desordem diagonal do Hamiltoniano. Se as energias ϵ_n do Hamiltoniano tiverem espectro de potência $1/k^\alpha$ com $\alpha > 2$ é possível encontrar uma verdadeira fase de estados metálicos mesmo em sistemas unidimensionais. Ainda em 1999, resultados semelhantes a estes foram obtidos pelo grupo de *Izrailev* e *Krokhin* [22]. 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 física. Podemos citar a observação experimental de transmissão de micro-ondas em guias retangulares com espalhadores correlacionados [26]. Neste experimento, os espalhadores colocados no guia de ondas são parafusos micrométricos cujo as dimensões são correlacionadas. 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* [20] para sistemas bidimensionais 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 exibe uma transição tipo *Kosterlitz-Thouless*, cujo comprimento de localização diverge com $\lambda \propto \exp\{(c/\sqrt{E - E_c})\}$.

Recentemente foi estudado 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 [62]. 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 propostos na Ref. [20], foi calculada através de um formalismo de matriz de transferência modificado [63]. Eles encontraram que para $\alpha > 2$, existe uma faixa de energias $[E_c^1, E_c^2]$ no centro da banda onde a resistividade apresenta um decaimento $\rho \propto N^{-\nu}$, onde N é o tamanho do sistema e ν é um expoente muito próximo de 1 ($\nu \approx 0.95$). Eles concluíram que os estados estendidos encontrados por *Moura* e *Lyra* [20] representam estados com resistência nula no limite termodinâmico. Diversos estudos teóricos e experimentais foram apresentados na literatura dentro do contexto de modelos de *Anderson* com desordem correlacionada.

Em um passado recente a natureza dos estados eletrônicos em sistemas bidimensionais com desordem correlacionada foi exaustivamente investigada [64, 65, 66]. Nestes trabalhos uma generalização dos estudos de *Moura* e *Lyra* [20] para o caso $2D$ foram apresentados. Uma grande quantidade de técnicas numéricas foi utilizada para calcular diversas quantidades físicas de interesse. De maneira geral, os autores mostraram que a transição metal-isolante induzida por correlações de longo alcance também é encontrada. Nos caps. 4 e 5 vamos apresentar diversas técnicas numéricas para o estudo de sistemas com desordem. Boa parte das técnicas usadas nas refs. [64, 65, 66] serão detalhadamente explicadas e aplicadas em exemplos concretos.

Outro ponto que se faz importante saliente foram os estudos sobre a competição entre termos de interação e desordem correlacionada [67, 68, 69, 70, 71]. Em diversos estudos, foram considerados modelos contendo desordem e campos elétricos ou interação Coulombiana. Em linhas gerais, os efeitos de campos elétricos são bem relevantes no caso de sistemas cristalinos. Sistemas eletrônicos cristalinos na presença de campos elétricos estáticos apresentam uma dinâmica coerente chamada de Oscilação de *Bloch* [72]. Diversos trabalhos apresentaram a possibilidade de encontrar tais oscilações em sistemas com desordem correlacionada. No cap. 6 vamos detalhar esta fenomenologia bem como o formalismo necessário para se investigar a competição entre campo elétrico estático e desordem correlacionada.

Dentro do contexto de interação Coulombiana, diversos trabalhos com diversas metodologias foram até então apresentados. De forma geral, a competição entre interação Coulombiana e desordem correlacionada tem revelado uma grande coleção de novos resultados [68, 70, 71]. Particularmente, dentro da aproximação de dois elétrons foi mostrado que, no limite de correlações de longo alcance fortes ($\alpha > 2$), uma interação Coulombiana da ordem da largura da banda cristalina pode promover um movimento balístico, entretanto mantendo uma correlação entre

as posições dos elétrons. Devido à presença de interação elétron-elétron aparece uma banda de estados ligados e esta banda acaba dominando a dinâmica [68]. Em linhas gerais, propriedades de transporte envolvendo correlações de longo alcance, interação elétron-elétron e/ou campos elétricos é um tema com diversas questões em aberto e constante esforço de investigação da comunidade científica [23].

3 Teoria da localização em sistemas harmônicos e magnéticos

3.1 MÁGNONS E MODOS VIBRACIONAIS EM SISTEMAS DESORDENADOS

3.1.1 Mágnon em sistemas desordenados

Os resultados da teoria de escala para o modelo de *Anderson* unidimensional com desordem na diagonal não correlacionada preveem que todos os estados são exponencialmente localizados. Como apresentamos no cap. 2, a generalização proposta por *Moura e Lyra* [20] mostra uma transição metal-isolante, mesmo em sistemas 1D, induzida pela presença de correlações na distribuição de desordem. Este resultado vem motivando o estudo da propagação de excitações gerais tipo mágnons, fônons, luz ou ondas acústicas em meios com desordem correlacionada. Em uma dimensão existem várias analogias entre a propagação de ondas e problemas de transporte eletrônico em sistemas desordenados. Por exemplo, a equação de movimento para um mágnon no modelo de *Heisenberg* ferromagnético pode ser exatamente mapeada no problema de um elétron em um Hamiltoniano *tight-binding*, onde os termos de *hopping* são aleatórios e distribuídos sempre em pares [73]. Este modelo eletrônico com *hopping* aleatório dimerizado é uma generalização do conhecido modelo de dímeros aleatórios proposto por *Dunlap* [12] no final da década de 80.

3.1.2 Mágns em Cadeias Ferromagnéticas Desordenadas

Em 1929, *Bloch* introduziu o conceito de onda de *spin* (mágnon) estudando uma cadeia de N *spins* acoplados com seus primeiros vizinhos por uma energia J . A energia de interação entre dois *spins* \vec{S}_i e \vec{S}_j é dada por $h = -J_{i,j}\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$. O hamiltoniano deste sistema pode ser escrito como [73, 74]:

$$H = - \sum_{n=-N/2}^{N/2} J_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j. \quad (22)$$

Este é o modelo de *Heisenberg* que mostrou que a energia do campo molecular de *Weiss* resulta da interação (*exchange*) entre os *spins*. Para uma distribuição de acoplamentos $J_{i,j} > 0$ o estado fundamental é ferromagnético. *Bloch* verificou que em baixas temperaturas, o estado com um desvio em um único *spin* são as excitações de mais baixa energia do sistema. Estas excitações são chamadas de ondas de *spin* e são quantizadas em energia: mágnons. Se os acoplamentos são constantes ($J_{i,j} = constante$) as ondas de *spin* propagam-se por toda a cadeia, semelhante as

funções de *Bloch* para problemas eletrônicos. Entretanto, em sólidos reais a presença de defeitos induz uma aleatoriedade nos acoplamentos entre os *spins*.

A propagação de ondas de *spin* no modelo de *Heisenberg* ferromagnético com desordem nos acoplamentos entre os *spins* têm sido objeto de estudo a muitos anos [73, 74, 75, 15]. No caso de desordem não correlacionada, os acoplamentos J são aleatoriamente escolhidos num intervalo (J_{min}, J_{max}) segundo uma distribuição de probabilidade $P(J)$. É bem estabelecido que todos os modos com energia não nula ($E > 0$) são localizados devido a desordem, enquanto que a largura λ do modo com $E = 0$ apresenta uma divergência [73, 15]. A largura λ das ondas de *spin* é equivalente ao comprimento de localização da função de onda eletrônica. O comportamento funcional de λ , bem como da densidade de estados (DOS) perto de $E = 0$ depende do tipo de distribuição de probabilidade $P(J)$ [73]. Por exemplo, se $P(J)$ é escolhida de tal forma que os dois primeiros momentos $\langle 1/J \rangle$ e $\langle 1/J^2 \rangle$ são finitos, a largura das ondas de *spin* λ diverge proporcional a $1/E$ e a densidade de estados é proporcional a $1/\sqrt{E}$ [73]. A dinâmica das ondas de *spin* nesta mesma cadeia foi estudada por *Evangelou* [15] a partir do cálculo numérico do deslocamento médio quadrático no tempo $\sigma^2(t)$. Se a distribuição de probabilidade $P(J)$ é escolhida de tal forma que ao menos o primeiro momento $\langle 1/J \rangle$ é finito, o sistema apresenta uma dinâmica superdifusiva ($\sigma^2(t) \propto t^{3/2}$) no limite de tempos longos ($t \propto \infty$).

A equação de *Schrödinger* ($H|\phi\rangle = E|\phi\rangle$) para as excitações de ondas de *spin* nesta cadeia pode ser exatamente mapeada na equação de *Schrödinger* para um problema eletrônico com desordem nas integrais de *hopping*. Este mapeamento foi apresentado por *Ziman* [73] e permite o estudo das propriedades de localização das ondas de *spin* utilizando técnicas que foram desenvolvidas para sistemas eletrônicos, como matriz de transferência e técnicas de funções de *Green* e também o cálculo da função participação.

Efeitos de correlações nos acoplamentos entre os *spins* foram recentemente analisados por *Lyra et al.* [76]. Utilizando um procedimento de diagonalização direta do Hamiltoniano eles calcularam a função participação para este sistema. As correlações foram introduzidas utilizando o mesmo formalismo apresentado no cap. 2 (Eq.(19)). Eles encontraram uma fase de ondas de *spin* não espalhadas para sequências de acoplamentos com parâmetro de correlação $\alpha > 1$. Entretanto, não foi possível descrever completamente a transição e encontrar as energias críticas, pois este estudo foi restrito a sistemas pequenos, $N < 2000$, devido à dificuldade em diagonalizar matrizes grandes. A presença de correlações de longo alcance em sistemas magnéticos é um tópico de pesquisa com grande interesse atual [77].

Vamos considerar uma cadeia linear contendo N íons de *spin* $\vec{S}_n = S_n^x \vec{x} + S_n^y \vec{y} + S_n^z \vec{z}$.
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 relações de comutação dos operadores de *spin* ($[S_k^x, S_l] = iS_k^z \delta_{k,l}$), podemos demonstrar as seguintes relações:

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

Para estudar as excitações do sistema, vamos considerar agora que um desvio de *spin* é introduzido no sítio 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 é obter a equação de *Schrödinger* para um mágnon numa cadeia ferromagnética. Vamos aplicar o Hamiltoniano definido na Eq.(22) ao estado $|\phi_n\rangle$, definido por $|\phi_n\rangle = \vec{S}_n |\phi_0\rangle$:

$$\begin{aligned} H |\phi_n\rangle &= - \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} \vec{S}_l \cdot \vec{S}_{l+1} |\phi_n\rangle = \\ &= - \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} [S_l^z S_{l+1}^z + \frac{1}{2}(S_l^+ S_{l+1}^- + S_l^- S_{l+1}^+)] |\phi_n\rangle = \\ &= - \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^z S_{l+1}^z |\phi_n\rangle - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^+ S_{l+1}^- |\phi_n\rangle \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^- S_{l+1}^+ |\phi_n\rangle. \end{aligned} \tag{23}$$

Vamos calcular os três somatórios 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

$$\begin{aligned} H_1 &= - \sum_{l=1}^{n-2} J_{l,l+1} S_l^z S_{l+1}^z |\phi_n\rangle - (J_{n-1,n} S_{n-1}^z S_n^z |\phi_n\rangle) \\ &\quad - (J_{n,n+1} S_n^z S_{n+1}^z |\phi_n\rangle) - \sum_{l=n+1}^N J_{l,l+1} S_l^z S_{l+1}^z |\phi_n\rangle. \end{aligned} \tag{24}$$

Lembrando que S_i^z aplicado ao estado $|\phi_n\rangle$ com $i \neq n$ tem valor máximo S na direção z , temos então

$$\begin{aligned} H_1 &= - \sum_{l=1}^{n-2} J_{l,l+1} S^2 |\phi_n\rangle - \sum_{l=n+1}^N J_{l,l+1} S^2 |\phi_n\rangle - (J_{n-1,n} S_{n-1}^z S_n^z |\phi_n\rangle) \\ &\quad - (J_{n,n+1} S_n^z S_{n+1}^z |\phi_n\rangle). \end{aligned} \tag{25}$$

Utilizando as relações de comutação entre S^z e S^- , obtemos

$$H_1 = - \sum_{l=1}^{n-2} J_{l,l+1} S^2 |\phi_n\rangle - \sum_{l=n+1}^N J_{l,l+1} S^2 |\phi_n\rangle - J_{n-1,n} S_{n-1}^z (S_n^- S_n^z |\phi_0\rangle - S_n^- |\phi_0\rangle) - J_{n,n+1} S_{n+1}^z (S_n^- S_n^z |\phi_0\rangle - S_n^- |\phi_0\rangle). \quad (26)$$

Lembrando a relação $S_n^z |\phi_0\rangle = S |\phi_0\rangle$ na equação anterior, teremos

$$H_1 = - \sum_{l=1}^{n-2} J_{l,l+1} S^2 |\phi_n\rangle - \sum_{l=n+1}^N J_{l,l+1} S^2 |\phi_n\rangle - J_{n-1,n} S_{n-1}^z (S - 1) |\phi_n\rangle - J_{n,n+1} S_{n+1}^z (S - 1) |\phi_n\rangle. \quad (27)$$

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

$$H_1 = - \sum_{l=1}^{n-2} J_{l,l+1} S^2 |\phi_n\rangle - \sum_{l=n+1}^N J_{l,l+1} S^2 |\phi_0\rangle - J_{n-1,n} S^2 |\phi_n\rangle - J_{n,n+1} S^2 |\phi_n\rangle + J_{n-1,n} S |\phi_n\rangle + J_{n,n+1} S |\phi_n\rangle. \quad (28)$$

Podemos agrupar os quatro primeiros termos desta última equação em um só somatório e a equação para H_1 resulta em

$$H_1 = - \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S^2 |\phi_n\rangle + S (J_{n-1,n} + J_{n,n+1}) |\phi_n\rangle. \quad (29)$$

O somatório $-\sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S^2$ é igual a energia (E_0) do estado fundamental $|\phi_0\rangle$. Portanto, a expressão final para H_1 é

$$H_1 = E_0 |\phi_n\rangle + S (J_{n-1,n} + J_{n,n+1}) |\phi_n\rangle. \quad (30)$$

(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 relações de comutação entre os operadores S^+ e S^- , temos

$$\begin{aligned} H_2 &= -\frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_{l+1}^- (2S_l^z \delta_{ln} |\phi_0\rangle) + S_n^- S_l^+ |\phi_0\rangle \\ &= -\sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_{l+1}^- (2S_l^z \delta_{ln} |\phi_0\rangle). \end{aligned} \quad (31)$$

Na equação acima $S_l^+ |\phi_0\rangle = 0$, pois o estado $|\phi_0\rangle$ contém todos os *spins* na direção (+). A função delta seleciona os termos do somatório com $l = n$, portanto

$$\begin{aligned} H_2 &= -J_{n,n+1} S_{n+1}^- S_n^z |\phi_0\rangle = -J_{n,n+1} S S_{n+1}^- |\phi_0\rangle \\ &= -J_{n,n+1} S |\phi_{n+1}\rangle. \end{aligned} \quad (32)$$

(iii) $H_3 = -\frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^- S_{l+1}^+ |\phi_n\rangle$. De forma análoga, obtemos

$$H_3 = -\frac{1}{2} \sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^- [2S_{l+1}^z \delta_{l+1,n} + S_n^- S_{l+1}^+] |\phi_0\rangle. \quad (33)$$

Na expressão acima, o termo que contém $S_{l+1}^+ |\phi_0\rangle$ é nulo, pois todos os *spins* estão apontando na direção (+). Portanto,

$$H_3 = -\sum_{l=1}^N J_{l,l+1} S_l^- S_{l+1}^z \delta_{l+1,n} |\phi_0\rangle. \quad (34)$$

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

$$\begin{aligned} H_3 &= -J_{n-1,n} S_{n-1}^- S_n^z |\phi_0\rangle = -J_{n-1,n} S S_{n-1}^- |\phi_0\rangle \\ &= -J_{n-1,n} S |\phi_{n-1}\rangle. \end{aligned} \quad (35)$$

Coletando os resultados acima, obtemos

$$\begin{aligned} H |\phi_n\rangle &= E_0 |\phi_n\rangle + S[(J_{n-1,n} + J_{n,n+1}) |\phi_n\rangle - J_{n,n+1} |\phi_{n+1}\rangle \\ &\quad - J_{n-1,n} |\phi_{n-1}\rangle]. \end{aligned} \quad (36)$$

Da equação acima, verificamos que $|\phi_n\rangle$ não é autoestado de H , pois um desvio no sítio n não fica localizado em n , propagando-se ao longo da cadeia através de seus vizinhos $n+1$ e $n-1$. Esta propagação estabelece a excitação coletiva do sistema, ou seja, a onda de *spin*. Portanto precisamos determinar que estado represente esta configuração. Vamos representar por $|\Phi\rangle$ uma onda de *spin*. Podemos expandir esta onda de *spin* usando os estados $|\phi_n\rangle$:

$$|\Phi\rangle = C(S, N) \sum_{n=1}^N f_n |\phi_n\rangle, \quad (37)$$

onde os números f_n representam as amplitudes de probabilidade de ocorrer um desvio no sítio n . Vamos demonstrar que $|\Phi\rangle$ é autoestado de H usando a equação de *Schrödinger*:

$$H |\Phi\rangle = E |\Phi\rangle. \quad (38)$$

Usando as eqs. (37) e (38), temos

$$\begin{aligned} H |\Phi\rangle &= C(S, N) \sum_{n=1}^N f_n H |\phi_n\rangle \\ &= C(S, N) \sum_{n=1}^N \{E_0 + S[(J_{n-1,n} + J_{n,n+1}) f_n |\phi_n\rangle \\ &\quad - J_{n,n+1} f_n |\phi_{n+1}\rangle - J_{n-1,n} f_n |\phi_{n-1}\rangle]\} = E |\Phi\rangle. \end{aligned} \quad (39)$$

Desta equação anterior, obtemos

$$\begin{aligned} & \sum_{n=1}^N (J_{n-1,n} + J_{n,n+1}) f_n |\phi_n\rangle - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} f_n |\Phi_{n+1}\rangle \\ & - \sum_{n=1}^N J_{n-1,n} f_n |\Phi_{n-1}\rangle = \frac{E - E_0}{S} \sum_{n=1}^N f_n |\phi_n\rangle. \end{aligned} \quad (40)$$

Fazendo $n = n + 1$ no segundo somatório e $n = n - 1$ no terceiro somatório, obtemos

$$\sum_{n=1}^N \{[(J_{n-1,n} + J_{n,n+1}) f_n - J_{n,n+1} f_{n+1} - J_{n-1,n} f_{n-1}]\} |\phi_n\rangle = \frac{(E - E_0)}{S} \sum_{n=1}^N f_n |\phi_n\rangle. \quad (41)$$

Portanto, fazendo $\mathcal{E} = E - E_0$ e $S = 1/2$, temos a equação de *Schrödinger* para o modelo escrita em função dos números c_n :

$$(J_{n-1,n} + J_{n,n+1}) f_n - J_{n,n+1} f_{n+1} - J_{n-1,n} f_{n-1} = 2\mathcal{E} f_n. \quad (42)$$

Esta relação de recorrência entre os números f_n pode ser usada, entre outros aspectos importantes, para se obter uma representação matricial do Hamiltoniano H na base $(|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, \dots, |\phi_n\rangle)$. Esta representação consiste em uma matriz tridiagonal, ou seja, todos os termos da matriz são nulos exceto os termos da diagonal principal ($H_{n,n} = J_{n-1,n} + J_{n,n+1}$) e das duas primeiras diagonais secundárias ($H_{n,n+1} = H_{n+1,n} = -J_{n,n+1}$). Esta representação matricial de H é bem semelhante a representação matricial do modelo de *Anderson* 1D. A representação matricial do Hamiltoniano do problema de um magnon considerando uma cadeia com N spins $1/2$ pode ser escrita da forma :

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} J_{1,2} + J_{0,1} & -J_{1,2} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -J_{1,2} & J_{1,2} + J_{2,3} & -J_{2,3} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -J_{2,3} & J_{2,3} + J_{3,4} & -J_{3,4} & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -J_{3,4} & J_{3,4} + J_{4,5} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & J_{N-2,N-1} + J_{N-1,N} & -J_{N-1,N} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -J_{N-1,N} & J_{N-1,N} + J_{N,N+1} \end{pmatrix}_{N \times N} \quad (43)$$

Como mencionamos anteriormente, esta matriz é bem semelhante ao tipo de matriz do problema de um elétron em uma cadeia desordenada. Vamos mostrar agora que existe um mapeamento entre os dois modelos e assim muitos resultados e/ou metodologias obtidos usando o modelo de *Anderson* podem ser aplicados ao modelo de Mágns. A equação de *Schrödinger* para o problema de mágnon Eq.(42) é equivalente ao seguinte problema eletrônico:

$$E^e b_n = J_{n-1,n} b_{n-1} + J_{n,n+1} b_{n+1}, \quad (44)$$

onde os termos de *hopping* são aleatórios, mas distribuídos em pares, ou seja, $J_{0,1} = J_{1,2}$, $J_{2,3} = J_{3,4}$ e assim por diante. Este mapeamento pode ser verificado dizimando os sítios ímpares

do conjunto de equações (42). Vamos fazer, como exemplo, uma dizimação dos sítios $n = 1$ e $n = 3$. Primeiro vamos fazer as seguintes mudanças de variáveis nos sítios pares e na energia. $b_0 = -f_0$, $b_2 = -f_1$, $b_4 = -f_2$ e $(E^e) = \sqrt{2E^m}$. Agora basta eliminar do conjunto de equações os sítios ímpares $n = 1$ e $n = 3$. Para tal, vamos escrever as três primeiras equações

$$\sqrt{2E^m} b_1 = J_{0,1} (-f_0) + J_{1,2} (-f_1), \quad (45)$$

$$\sqrt{2E^m} (-f_1) = J_{1,2} b_1 + J_{2,3} b_3, \quad (46)$$

$$\sqrt{2E^m} (b_3) = J_{2,3} (-f_1) + J_{3,4} (-f_2). \quad (47)$$

Em seguida, vamos multiplicar a equação (46) 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

$$2E^m (-f_1) = J_{1,2} [J_{0,1} (-f_0) + J_{1,2} (-f_1)] + J_{2,3} [J_{2,3} (-f_1) + J_{3,4} (-f_2)]. \quad (48)$$

Agrupando os termos que contém f_0 , f_1 e f_2 , temos

$$(-2E^m + J_{1,2}^2 + J_{2,3}^2) f_1 = -J_{1,2} J_{0,1} f_0 - J_{2,3} J_{3,4} f_2. \quad (49)$$

Como as amplitudes de *hopping* aparecem em pares, vamos utilizar a seguinte mudança de variáveis, $J_{1,2}J_{0,1} = J_{1,2}^2 = J_{0,1}$ e $J_{2,3}J_{3,4} = J_{2,3}^2 = J_{2,3}$, para deixar a Eq.(49) idêntica a equação para o mágnon (42) para $n = 1$ e $\mathcal{E} = E^m$:

$$2E^m f_1 = (J_{0,1} + J_{2,3}) f_1 - J_{0,1} f_0 - J_{2,3} f_2. \quad (50)$$

3.1.3 Modos vibracionais em sistemas desordenados

A equação para os modos vibracionais em uma cadeia harmônica desordenada também tem um mapeamento exato em problemas eletrônicos [78]. A relevância da pesquisa, tanto analítica quanto computacional de modos vibracionais em cadeias com desordem e/ou anarmonicidade tem origem na possibilidade de se entender os modos inelásticos que aparecem em vidros ou outras substâncias com arranjos atômicos aleatórios [79]. A natureza dos modos vibracionais em cadeias harmônicas desordenadas tem sido objeto de estudo durante várias décadas [80, 81, 82, 83, 84, 85, 86, 87, 88, 89, 90, 91, 92, 93]. Por outro lado, os efeitos da presença de anarmonicidade sobre os modos normais foram extensivamente estudados na literatura desde *Fermi, Pasta e Ulam* em 1955 [79] até os famosos trabalhos de *Toda* [94]. *Toda* introduziu um

termo exponencial na força de interação entre os átomos. Esta rede não linear de *Toda* obedece a equações de movimento que são exatamente solúveis em termos de funções elásticas.

Em nosso trabalho, vamos concentrar nossa atenção numa cadeia com N átomos que interagem através de uma força harmônica, ou seja, uma força proporcional à distância entre os átomos $f = \beta_{i,j}(u_j - u_i)$, onde u_j e u_i representam as posições de dois átomos consecutivos. A desordem neste modelo pode ser colocada de duas formas: através de uma distribuição de massas aleatórias e constantes de força iguais ($\beta_{i,j} = 1$) ou massas iguais $m_i = m$ e constantes de força aleatórias [79]. A equação de movimento para as amplitudes u_n pode ser escrita como

$$m_n \frac{d^2 u_n}{dt^2} = \beta_{n-1}(u_n - u_{n-1}) + \beta_n(u_{n+1} - u_n). \quad (51)$$

Assumindo uma dependência temporal com uma única frequência [$u_n = u_n \exp\{-i\omega t\}$], podemos obter uma equação estacionária para os modos:

$$(\beta_{n-1} + \beta_n - \omega^2 m_n)u_n = \beta_{n-1}u_{n-1} + \beta_n u_{n+1} \quad . \quad (52)$$

Esta equação pode ser mapeada na equação de *Schrödinger* para um problema eletrônico semelhante a Eq.(55). Este mapeamento foi apresentado por *Dean* [78] e pode ser facilmente reproduzido definindo-se uma nova variável $f_n = m_n^{1/2} u_n$. Substituindo-a na equação acima, teremos

$$(\beta_{n-1} + \beta_n - \omega^2 m_n)(f_n/m_n^{1/2}) = \beta_{n-1}(f_{n-1}/m_{n-1}^{1/2}) + \beta_n(f_{n+1}/m_{n+1}^{1/2}) \quad . \quad (53)$$

Multiplicando a Eq.(53) por $1/m_n^{1/2}$ e definindo :

$$\begin{aligned} J_{n-1,n} &= -\beta_{n-1}/\sqrt{m_{n-1}m_n} \\ J_{n,n+1} &= -\beta_n/\sqrt{m_n m_{n+1}} \\ \epsilon_n &= (\beta_{n-1} + \beta_n)/m_n \\ E &= \omega^2, \end{aligned} \quad (54)$$

encontramos uma equação que tem certas semelhanças com a equação encontrada no modelo de Anderson em *1d*:

$$J_{n,n+1}f_{n+1} + J_{n-1,n}f_{n-1} = (E - \epsilon_n)f_n. \quad (55)$$

Em resumo, a equação de movimento para os modos vibracionais em uma cadeia harmônica pode ser mapeada em uma equação semelhante a equação de Schrödinger para modelo de Anderson *1d*. Este mapeamento sugere que a teoria de localização, originalmente desenvolvida para sistemas eletrônicos, também pode ser usada em sistemas vibracionais clássicos.

Utilizando o formalismo de matriz de transferência, *Matsuda e Ishii* mostraram que os modos vibracionais da cadeia harmônica com frequência não nula ($\omega > 0$) são localizados [82] e próximo de $\omega = 0$ existem \sqrt{N} estados estendidos, pois o comprimento de localização λ dos modos diverge como $\lambda \propto 1/\omega^2$. Eles também mostraram que a condutividade térmica nesta cadeia é fortemente dependente destes modos vibracionais não espalhados. O efeito de correlações em cadeias harmônicas têm sido objeto de grande interesse no meio acadêmico. Em 1994, *Kundu e Datta* mostraram que correlações na distribuição de massas produz um novo conjunto de modos vibracionais estendidos [83]. No modelo de *Kundu e Datta*, as massas podem assumir valores m_0 e m_1 com probabilidade p e $1 - p$. A correlação é introduzida através do tipo de distribuição das massas m_1 , que podem aparecer em duplas (dímeros) ou segmentos de três massas (trímeros). Eles mostraram que, no caso de dímeros, aparecem \sqrt{N} modos não espalhados em torno da frequência $\omega_c = m_1$ e no caso de trímeros aparecem $N^{3/4}$ novos estados. Se $m_1 = 0$, eles mostraram que a cadeia harmônica apresenta $N^{5/6}$ modos estendidos em torno de $\omega_c = 0$.

Modos não espalhados foram também encontrados em cadeias harmônicas com correlações tipo dímeros na distribuição de constantes de força. [84]. Outras formas de correlações em cadeias harmônicas foram também analisadas. Por exemplo, *Lyra e Cressoni* [85] analisaram o efeito de correlações induzidas por recozimento térmico (*thermal annealing*). Eles mostraram que o comprimento de localização dos modos vibracionais apresenta um decaimento exponencial para distâncias maiores que o comprimento de correlação térmica. Utilizando argumentos analíticos, *Datta e Kundu* [86] demonstraram que o transporte de energia em cadeias harmônicas com desordem correlacionada e não correlacionada está diretamente relacionado com os modos vibracionais não espalhados e com as condições iniciais do sistema. O transporte de energia foi estudado através do segundo momento da distribuição espacial de energia $M_2(t)$. 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 massa da cadeia ($Q_{n_0} = Q^0 \delta_{n,n_0}$). A evolução da energia na cadeia é governada pelas equações de Hamilton. Integrando-se estas equações, podemos obter a energia $h_n(t)$ em cada massa e calcular o segundo momento da distribuição, na forma:

$$M_2(t) = \sum_{n=1}^N (n - n_0)^2 h_n(t). \quad (56)$$

Kundu e Datta mostraram que para uma cadeia com desordem não correlacionada, $M_2(t) \propto t^{3/2}$ se a condição inicial é de impulso e $M_2(t) \propto t^{1/2}$ se a condição inicial é de deslocamento. A dependência de $M_2(t)$ com a condição inicial foi também obtida na Ref. [88]. Se a distribuição de

massas apresentar correlações o transporte de energia muda, podendo atingir o expoente mínimo $M_2(t) \propto t^{11/6}$ para o caso de correlações tipo trímeros: $m_1 m_1 m_1$ com $m_1 = 0$ e excitação inicial tipo momento. Este mínimo expoente está relacionado com os $N^{5/6}$ modos estendidos em torno de $\omega_c = 0$, como demonstrado na Ref. [83]. Na Ref. [86] todos os resultados para $M_2(t)$ obtidos analiticamente foram confirmados por simulação numérica da evolução da energia na cadeia. O segundo momento está relacionado com a constante de difusão na cadeia através da relação $D(t) \propto dM_2(t)/dt$ [83, 95]. Por outro lado, a condutividade térmica está relacionada com a constante de difusão e, portanto, com o segundo momento da distribuição de energia $M_2(t)$ [95].

Recentemente a condutividade térmica de cadeias harmônicas e anarmônicas com massas aleatórias não correlacionadas [90] e também de cadeias com massas alternadas [91, 93] foram numericamente investigadas. A dependência da condutividade com o tamanho da cadeia e o valor da condutividade térmica no limite termodinâmico são questões que permanecem controversas [92].

4 Medidas do grau de localização: Quantidades independentes do tempo

4.1 MÉTODOS ENVOLVENDO DIAGONALIZAÇÃO DIRETA DO HAMILTONIANO

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 da função de onda, entretanto, esta caracterização nem sempre é simples. Em muitos casos o estudo deve ser feito através de diversas técnicas e concomitantemente o cálculo de diversas quantidades físicas. Uma das formas de efetuar esta descrição é resolver a equação de *Schrödinger* $H |\Psi_i\rangle = E_i |\Psi_i\rangle$ e investigar os autoestados $|\Psi_i\rangle$ diretamente. Porém, a presença de desordem no hamiltoniano dificulta um tratamento analítico da equação de *Schrödinger*, desta forma, o tratamento numérico aparece como um caminho factível, entretanto, com diversas limitações devido à capacidade computacional.

Vamos apresentar a metodologia inicial baseada em diagonalização exata do Hamiltoniano. Este procedimento consiste inicialmente em escrever uma representação matricial do Hamiltoniano H usando a base de orbitais atômicos $|n\rangle$. A diagonalização da matriz H fornece os autoestados $|\Psi_i\rangle$ e suas respectivas autoenergias E_i , além disso, os autoestados são também escritos na base de orbitais atômicos na forma ($|\Psi_i\rangle = \sum_{n=1}^N f_n^{(i)} |n\rangle$). Podemos calcular um número que meça o grau de localização dos estados $|\Psi_i\rangle$, este número é chamado de razão participação ξ [5]:

$$\xi = \frac{\sum_j |f_n|^2}{\sum_j |f_n|^4}. \quad (57)$$

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 f_n constante. Lembrando que o numerador da Eq.(57) é igual a 1 para manter a normalização dos autoestados do Hamiltoniano e $\sum_n |f_n|^2 = 1$, temos que $|f_n| = \frac{1}{\sqrt{N}}$. Substituindo na expressão da participação, obtemos

$$\xi = \frac{1}{\sum_n |f_n|^4} = \frac{1}{\sum_n \frac{1}{N^2}} = N. \quad (58)$$

Portanto, ξ é o número de sítios onde as amplitudes f_n 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]. A função participação tem um longo histórico de aplicações, tanto em dimensão $D = 1$ quanto $D = 2$, para um caso geral, em um sistema de dimensão d , temos que a participação para estados estendidos diverge com $\xi \propto N^d$. Outro ponto importante da

participação é que suas flutuações também tem informações físicas relevantes. Em diversos trabalhos [65] foi mostrado que a flutuação relativa da participação pode ser usada para detectar estados estendidos/localizados, em linhas gerais, a quantidade $\eta = \sqrt{\langle \xi^2 \rangle - \langle \xi \rangle^2} / \langle \xi \rangle$ pode revelar a natureza de um estado eletrônico. Para estados estendidos, a quantidade η tende a zero à medida que N cresce, entretanto, para estados localizados η cresce à medida que N cresce [65].

Outra quantidade que pode ser calculada usando os autoestados do Hamiltoniano é a entropia de *Shannon* [5], definida como

$$S = - \sum_n |f_n|^2 \log(|f_n|^2). \quad (59)$$

A entropia de *Shannon* tem um comportamento semelhante ao descrito para a participação, entretanto, em escala logarítmica. Se um estado do sistema é localizado temos então que $S = 0$, por outro lado, se o estado é estendido temos que, em um sistema de dimensão d , a entropia tem comportamento $S \approx \log(N^d)$.

Outra medida interessante sobre a topologia do pacote de onda é a raiz quadrada do desvio médio quadrático do pacote σ , no qual é calculado seguindo a definição padrão de desvio médio quadrático de uma distribuição de probabilidade, ou seja [23],

$$\sigma = \sqrt{\sum_n (n - \langle n \rangle)^2 |f_n|^2}, \quad (60)$$

onde $\langle n \rangle(t) = \sum_n n |f_n|^2$ é a posição média do pacote de onda. Tanto ξ quanto S e σ são medidas do tamanho do pacote, uma análise de escala destas quantidades pode revelar se o estado é localizado ou estendido. Por exemplo, em sistemas unidimensionais, para um dado estado metálico, a participação ξ , bem como σ , devem divergir linearmente com N , portanto, as quantidades ξ/N e σ/N devem ser independentes de N . Se faz importante salientar que σ e S também podem ser calculadas em um sistema de dimensão d , a generalização das definições de σ e S pode ser feita facilmente dentro de qualquer topologia com dimensão d .

Ainda dentro do contexto de quantidades físicas calculadas usando os autovalores e autovetores podemos citar a condutividade de *Kubo-Greenwood* G [96] e a densidade de estados locais LDOS [97], onde a fórmula de *Kubo-Greenwood* para a condutividade elétrica em unidades de e^2/\hbar é dada por [96]

$$G(E) = \frac{2\pi}{\Omega} \sum_{a,b} |\langle a | XH - HX | b \rangle|^2 \delta(E - E_a) \delta(E - E_b). \quad (61)$$

Nesta equação, os índices a e b representam dois autoestados do Hamiltoniano H , X representa

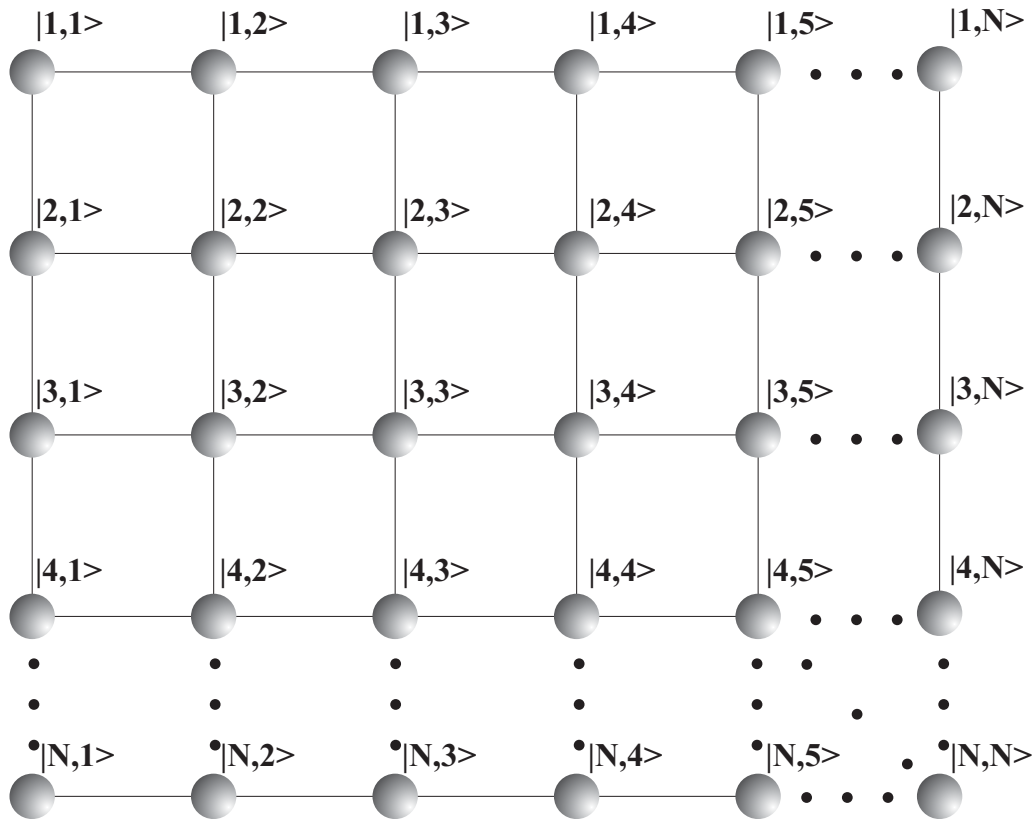


Figura 3 – Diagrama esquemático da geometria bidimensional ($D = 2$) para o modelo de Anderson bem como a ordenação dos orbitais $|n, m\rangle$ utilizados. O Hamiltoniano é escrito em uma rede $N \times N$, onde cada sítio da rede é representado pelos índices n, m . Em cada sítio da rede temos um orbital atômico $|n, m\rangle$. Fonte: Autores

o operador posição e a quantidade Ω é a área do sistema. $(XH - HX)$ é o comutador do operador X com H , ou seja, uma quantidade proporcional ao momento P , logo, a fórmula de Kubo-Greenwood calcula elementos de P entre autoestados $|a\rangle$ e $|b\rangle$. E_a e E_b são as autoenergias dos autoestados $|a\rangle$ e $|b\rangle$, respectivamente. A densidade de estados locais (LDOS) é definida por [97]

$$\rho_n(E) = \sum_a |f_n(E_a)|^2 \delta(E - E_a), \quad (62)$$

onde $f_n(E_a)$ é a amplitude da função de onda de energia E_a no sítio n . A quantidade usada para caracterizar um dado estado como localizado ou estendido é uma medida das flutuações da LDOS. Vamos calcular uma média aritmética de $\rho_n(E)$ ao longo do sistema, bem como uma

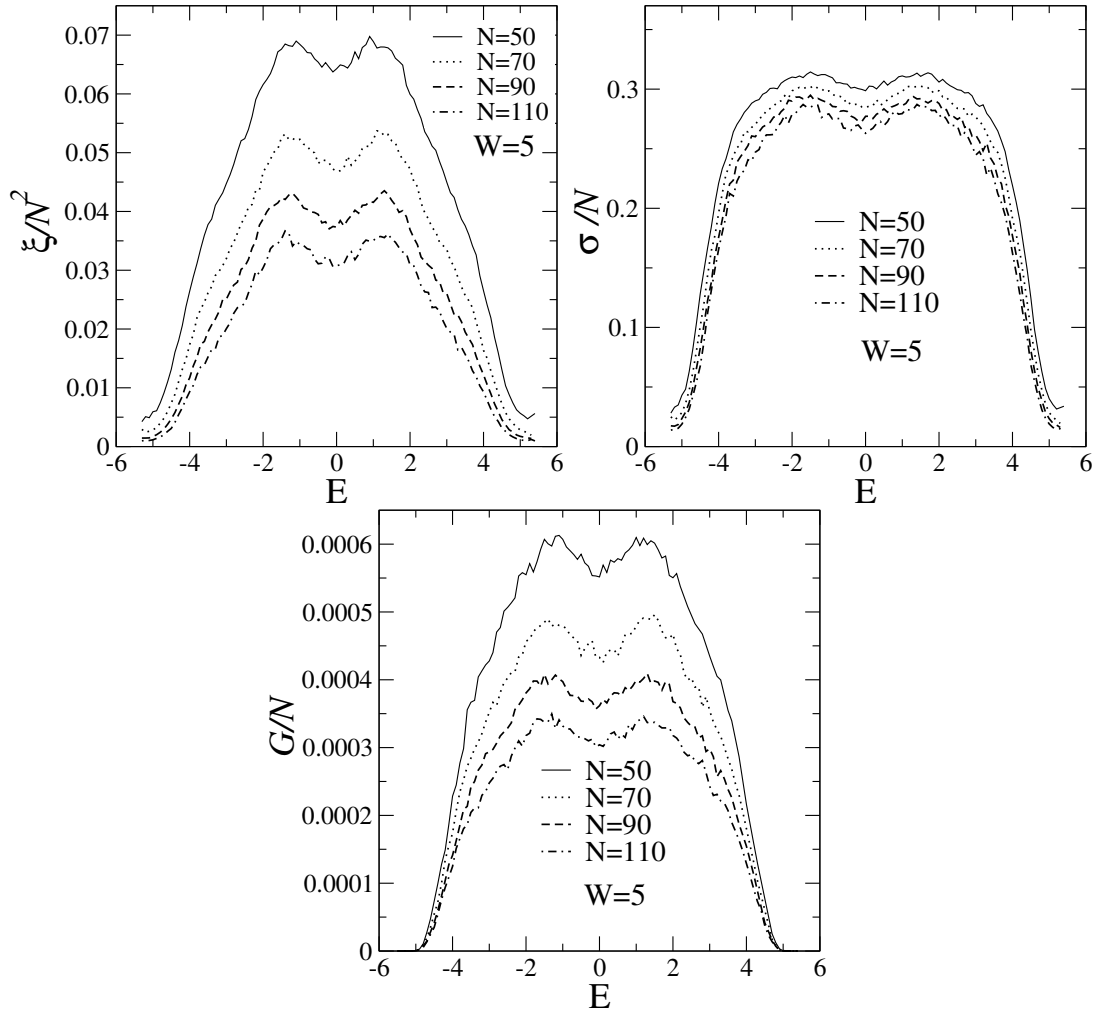


Figura 4 – Participação reescalada ξ/N^2 , raiz quadrada do desvio médio quadrático reescalado σ/N e condutância reescalado G/N . Experimento numérico feito considerando o Hamiltoniano de *Anderson* em dimensão $D = 2$ com desordem diagonal $W = 5$ (medido em unidades do *hopping* $J = 1$). Como podemos observar todas as quantidades reescaladas diminuem a medida que o tamanho do sistema cresce. Este resultado sinaliza que no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$) todos os estados são localizados. Fonte: Autores

média geométrica. A média aritmética é dada por

$$\rho_a(E) = \sum_{n=1}^N \frac{\rho_n(E)}{N}. \quad (63)$$

Por outro lado, a média geométrica é dada por

$$\rho_g(E) = \exp \left[\frac{1}{N} \sum_n \ln(\rho_n(E)) \right]. \quad (64)$$

A razão $R(E) = \rho_g(E)/\rho_a(E)$ pode ser usada como uma medida do grau de localização dos autoestados. Para estados estendidos ρ_g e ρ_a são praticamente equivalentes, deste modo, temos

que $R(E) > 0$. Por outro lado, para estados localizados ρ_g tende a zero e ρ_a é finito, logo, a razão $R(E) \cong 0$. Para exemplificar o cálculo de algumas destas quantidades bem como a análise de escala envolvida, vamos considerar o caso bidimensional do Modelo de *Anderson*. A fig.(3) mostra não só a geometria do modelo de *Anderson* 2D como também a distribuição dos orbitais atômicos, onde cada sítio (n, m) da rede $N \times N$ contém um orbital atômico $|n, m\rangle$. Usando a base dos orbitais atômicos o Hamiltoniano 2D pode ser escrito como

$$\begin{aligned} H_{2D} = & \sum_{n,m} \epsilon_{n,m} |n, m\rangle \langle n, m| \\ & + \sum_{n,m} J[|n, m\rangle \langle n+1, m| + |n, m\rangle \langle n-1, m| \\ & + |n, m\rangle \langle n, m+1| + |n, m\rangle \langle n, m-1| + c.c.]. \end{aligned} \quad (65)$$

Seguindo a ordenação da base de orbitais apresentada na fig.(3) a representação matricial do Hamiltoniano pode ser escrita como

$$H_{2D} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 & \mathbf{J} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots \\ \mathbf{J} & \mathbf{A}_2 & \mathbf{J} & \mathbf{0} & \cdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{J} & \mathbf{A}_3 & \mathbf{J} & \cdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{J} & \mathbf{A}_4 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}_{N^2 \times N^2}, \quad (66)$$

onde,

$$\mathbf{A}_n = \begin{pmatrix} \epsilon_{n1} & J & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ J & \epsilon_{n2} & J & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & J & \epsilon_{n3} & J & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & J & \epsilon_{n4} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \epsilon_{n(N-1)} & J \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & J & \epsilon_{nN} \end{pmatrix}_{N \times N}, \quad (67)$$

com $n = 1, 2, 3, \dots, N$. Por outro lado, a matriz de *hopping* \mathbf{J} é dada por

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} J & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & J & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & J & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & J & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & J & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & J \end{pmatrix}_{N \times N}, \quad (68)$$

ou seja, H_{2D} é uma matriz de dimensão $N^2 \times N^2$ que tem uma forma tipo “diagonal em blocos”. Os blocos diagonais \mathbf{A}_n representam os Hamiltonianos das linhas separadamente e a matriz \mathbf{J}

representa o *hopping* acoplando estas linhas. A diagonalização desta matriz pode ser feita usando métodos tradicionais como aqueles encontrados no livro *Numerical Recipes* [98] ou usando a plataforma *LAPACK* [99].

Vamos diagonalizar esta matriz considerando $N = 50, 70, 90, 110$, $J = 1$ e a diagonal do Hamiltoniano $(\epsilon_{n,m})$ sendo valores aleatoriamente escolhidos dentro do intervalo $[-2.5, 2.5]$, ou seja, uma largura de desordem $W = 5$ em unidades de $J = 1$. Geralmente, em estudos numéricos envolvendo desordem é importante considerar distintas realizações de desordem para fazer uma média, onde, em nosso estudo numérico, foi utilizado um número de amostras que foi função do tamanho N do sistema. Vamos explicar detalhadamente qual a necessidade de tal procedimento. A questão fundamental é garantir que o número de autovetores usados no cálculo das quantidades físicas seja aproximadamente constante, para garantir isso, em nosso estudo escolhemos o número de amostras para cada tamanho $N(N_A(N))$ de maneira que o número de autovalores utilizados $(N_A(N)N^2)$ fosse aproximadamente 5×10^5 . Assim, o número de amostras para cada tamanho foi $N_A(N = 50) = 200$, $N_A(N = 70) = 102$, $N_A(N = 90) = 61$ e $N_A(N = 110) = 41$.

Na fig.(4) apresentamos resultados para participação (ξ) , a raiz quadrada do desvio médio quadrático (σ) e a condutância de *Kubo-Greenwood* (G) . Como já mencionamos anteriormente, a caracterização da natureza de um determinado estado (seja estendido ou localizado) é feita, em geral, através da análise de escala das quantidades. Na fig.(4) fizemos o gráfico de todas as funções devidamente normalizadas dentro de suas escalas características. Observe que ξ/N^2 , σ/N e G/N diminuem à medida que crescemos o tamanho do sistema. Este comportamento é uma clara assinatura de estados localizados, o que está em total concordância com a teoria de escala apresentada no cap.1, que diz que todos os estados são localizados independente da largura de desordem em sistemas de dimensão $d \leq 2$.

Obviamente, este tipo de estudo tem uma limitação grave, pois geralmente se a diagonalização total do Hamiltoniano for necessária, os valores de N são pequenos. Em sistemas unidimensionais ($D = 1$), considerando a diagonalização total do Hamiltoniano, temos que o número de sítios máximo é algo em torno de 6×10^4 . No caso de sistemas bidimensionais ($D = 2$) temos que o $N_{\text{máx}}$ é algo perto de 200 ou 220. Em alguns problemas podemos usar diagonalização parcial do Hamiltoniano, nestes casos é possível crescer N um pouco acima destes valores, entretanto, ainda existe uma forte limitação.

4.2 O COMPRIMENTO DE LOCALIZAÇÃO

Uma estratégia um pouco mais eficiente e que permite o estudo de sistemas com $N \gg 10^4$ é o cálculo do comprimento de localização. O comprimento de localização λ é definido a partir do comportamento assintótico da função de onda [4, 5]. Em grandes distâncias, a função de onda apresenta um decaimento exponencial do tipo

$$\Psi_i(r) = \psi(r) \exp\{-r/\lambda\}, \quad (69)$$

onde r é a distância ao centro de localização, para estados estendidos, temos que $\lambda \rightarrow \infty$. Em muitos textos é comum encontrar o nome “expoente de *Lyapunov*” (γ), este expoente é definido como o inverso do comprimento de localização ($\gamma = 1/\lambda$). Existem vários métodos para calcular λ , entre os quais destacamos o grupo de renormalização e matriz de transferência. Estes métodos podem ser usados em quaisquer dimensões e possibilitam o estudo de sistemas grandes ($N \gg 10^5$). Vamos apresentar agora uma revisão detalhada destes procedimentos.

4.2.1 Método do Grupo Renormalização 1D Usando o Operador de *Green*.

Este método é deduzido a partir das equações de movimento para o operador de *Green* associado ao Hamiltoniano. Para compreender o papel deste operador em modelos Hamiltonianos, vamos analisar o seguinte exemplo: suponha que os autoestados de um Hamiltoniano H_0 (Hamiltoniano de referência) são conhecidos como

$$H_0 |\Phi_n\rangle = E_0 |\Phi_n\rangle. \quad (70)$$

Considere agora um segundo Hamiltoniano H definido por

$$H = H_0 + V, \quad (71)$$

ou seja, o operador H é o Hamiltoniano do sistema de referência na presença de uma interação V . A equação de autovalores para o Hamiltoniano H é definido por

$$H |\Phi_n\rangle = E |\Phi_n\rangle. \quad (72)$$

Os autoestados de H estão relacionados com os autoestados do modelo de referência pela relação

$$|\Phi_n\rangle = |\Phi_n\rangle + VG |\Phi_n\rangle, \quad (73)$$

onde G é o operador de *Green* associado ao Hamiltoniano, $G = \frac{1}{E-H}$. Então, os autoestados de um Hamiltoniano H , onde $H = H_0 + V$ e os autoestados de H_0 são conhecidos e podem sempre

ser obtidos usando os operadores de *Green*. Para deduzir o método de renormalização, vamos escrever as equações de movimento para os elementos de matriz do operador de *Green*. Uma discussão mais detalhada pode ser encontrada na referência [100]. A partir da Eq.(33) podemos obter a seguinte relação entre operadores

$$EG(E) = I + HG(E). \quad (74)$$

Vamos agora obter o conjunto de equações de movimento para os elementos de matriz do operador de *Green* $G(E)$, onde o elemento de matriz $G_{l,m} = \langle l|G(E)|m\rangle$ é dado por,

$$EG_{l,m} = \delta_{l,m} + \langle l|HG(E)|m\rangle. \quad (75)$$

Para condensar as equações vamos usar a notação $A_{l,m} = \langle l|A|m\rangle$, onde A é um operador qualquer. Usando a relação de completudeza, $\sum_k |k\rangle\langle k| = I$ no produto $HG(E)$, temos

$$EG_{l,m} = \delta_{l,m} + \sum_k H_{l,k} G_{k,m}, \quad (76)$$

onde usamos mais uma vez a notação $\langle l|A|m\rangle = A_{lm}$. Sem perda de generalidade, vamos escrever as equações de movimento para os elementos $l,0$ do operador de *Green*

$$EG_{l,0} = \delta_{l,0} + \sum_k H_{l,k} G_{k,0}. \quad (77)$$

O Hamiltoniano H só tem termos diferente de zero na diagonal principal ($H_{l,l} = \epsilon_l$) e nas diagonais secundárias ($H_{n,n+1} = H_{n+1,n} = J_{n,n+1}$). Logo, podemos escrever a equação de movimento para os elementos de matriz do operador de *Green*:

$$(E - \epsilon_l)G_{l,0} = \delta_{l,0} + J_{l-1,l} G_{l-1,0} + J_{l,l+1} G_{l+1,0}. \quad (78)$$

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

$$\begin{aligned} (E - \epsilon_0)G_{0,0} &= 1 + J_{0,-1} G_{-1,0} + J_{0,-1} G_{1,0} \\ (E - \epsilon_1)G_{1,0} &= +J_{1,0} G_{0,0} + J_{1,2} G_{2,0} \\ &\vdots \\ (E - \epsilon_{2l-1})G_{2l-1,0} &= \delta_{2l-1,0} + J_{2l-1,2l-2} G_{2l-2,0} + J_{2l-1,2l} G_{2l,0} \\ (E - \epsilon_{2l})G_{2l,0} &= \delta_{2l,0} + J_{2l,2l-1} G_{2l-1,0} + J_{2l,2l+1} G_{2l+1,0} \\ (E - \epsilon_{2l+1})G_{2l+1,0} &= \delta_{2l+1,0} + J_{2l+1,2l} G_{2l,0} + J_{2l+1,2l+2} G_{2l+2,0} \\ &\vdots \end{aligned} \quad (79)$$

Observe que, para um dado i , a equação de $G_{i,0}$ é acoplada às equações de $G_{i+1,0}$ e $G_{i-1,0}$. Portanto, podemos remover do conjunto de equações o elemento de matriz $G_{i,0}$ associado ao *spin* localizado no sítio i . Após este processo, teremos efetuado um processo de dizimação do *spin* do sítio i e precisamos renormalizar os parâmetros ϵ_{i-1} e ϵ_{i+1} associados aos sítios localizados em $i - 1$ e $i + 1$, bem como o acoplamento entre eles. Para compreender como as equações que renormalizam estas quantidades são deduzidas a partir das equações de movimento apresentadas anteriormente, vamos dizimar formalmente o sítio $2l + 1$, substituindo a equação de G_{2l+1} na equação 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, após as substituições só restaram os elementos de matriz $G_{2l,0}$, $G_{2l-1,0}$ e $G_{2l+2,0}$. Agrupando melhor estes termos, teremos

$$\left[E - \epsilon_{2l} + \frac{J_{2l,2l+1} J_{2l+1,2l}}{E - \epsilon_{2l+1}} \right] G_{2l,0} = \delta_{2l,0} + J_{2l,2l-1} G_{2l-1,0} + \left(\frac{J_{2l,2l+1} J_{2l+1,2l+2} \epsilon_{2l+1}}{E - \epsilon_{2l+1}} \right) G_{2l+2,0}. \quad (80)$$

Lembrando que $\epsilon_{2l,2l}$ é real e que $J_{2l,2l-1} = J_{2l-1,2l}$ e $J_{2l+1,2l} = J_{2l,2l+1}$, podemos escrever a equação anterior como

$$\left[E - \epsilon_{2l,2l} + \frac{|J_{2l,2l+1}|^2}{E - \epsilon_{2l+1}} \right] G_{2l,0} = \delta_{2l,0} + J_{2l,2l-1} G_{2l-1,0} + \left(\frac{J_{2l,2l+1} J_{2l+1,2l+2}}{E - \epsilon_{2l+1}} \right) G_{2l+2,0}. \quad (81)$$

Note que após a dizimação a equação de movimento, Eq.(78), mantém sua estrutura original. O coeficiente que aparece no termo $G_{2l,0}$ é o parâmetro ϵ_{2l} renormalizado e o coeficiente do termo $G_{2l+2,0}$ é o acoplamento efetivo entre os *spins* $2l$ e $2l + 2$, após a dizimação do *spin* $2l + 1$. Podemos escrever a equação que renormaliza o termo da diagonal do Hamiltoniano ϵ_{2l} como sendo

$$\epsilon_{2l}^{(1)}(E) = \epsilon_{2l} + J_{2l,2l+1} \frac{1}{E - \epsilon_{2l+1}} J_{2l,2l+1}. \quad (82)$$

O índice superescrito (1) indica que apenas um *spin* foi dizimado. Substituindo a equação para $G_{2l+1,0}$ na equação de $G_{2l+2,0}$ e repetindo este mesmo procedimento podemos encontrar a equação que renormaliza o parâmetro ϵ_{2l+2} na forma

$$\epsilon_{2l+2}^{(1)}(E) = \epsilon_{2l+2} + J_{2l+1,2l+2} \frac{1}{E - \epsilon_{2l+1}} J_{2l+1,2l+2}. \quad (83)$$

O acoplamento efetivo entre os sítios $2l$ e $2l + 2$ é dado por

$$J_{2l,2l+2}^{(eff)}(E) = J_{2l,2l+1} \frac{1}{E - \epsilon_{2l+1}} J_{2l+1,2l+2}. \quad (84)$$

Os demais sítios não sofreram nenhuma mudança. Podemos continuar a remover os sítios iterativamente até que tenhamos no final apenas os dois sítios extremos de uma cadeia com $N + 1$ sítios. Removendo sequencialmente os sítios $1, 2, \dots, N - 1$, as equações que renormalizam as energias e acoplamento efetivo dos dois sítios restantes são

$$\epsilon_0^{(N-1)}(E) = \epsilon_0^{N-2}(E) + J_{0,N-1}^{(eff)} \frac{1}{E - \epsilon_{N-1}^{(N-2)}(E)} J_{0,N-1}^{(eff)}, \quad (85)$$

$$\epsilon_N^{(N-1)}(E) = \epsilon_N + J_{N-1,N} \frac{1}{E - \epsilon_{N-1}^{(N-2)}(E)} J_{N-1,N}, \quad (86)$$

$$J_{0,N}^{(eff)}(E) = J_{0,N-1}^{(eff)} \frac{1}{E - \epsilon_{N-1}^{(N-2)}(E)} J_{N-1,N}, \quad (87)$$

onde $\epsilon_0^{(N-1)}(E)$ e $\epsilon_N^{(N-1)}(E)$ representam os parâmetros ϵ_0 e ϵ_N após $N - 1$ dizimações, e $J_{0,N}^{(eff)}(E)$ é o acoplamento efetivo entre os sítios 0 e N .

A natureza localizada ou deslocalizada da função de onda eletrônica pode ser investigada através do cálculo expoente de *Lyapunov* $\gamma(E)$, que é uma medida do inverso do comprimento de localização λ da função de onda eletrônica. Se no limite termodinâmico o expoente de *Lyapunov* é finito, a largura da função de onda eletrônica também é finita e o estado é localizado. Se a função de onda é estendida o expoente de *Lyapunov* deve ir a zero no limite termodinâmico. O expoente de *Lyapunov* pode ser escrito em função dos elementos de matriz do operador de *Green* como [100]

$$\gamma(E) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{N} \ln \left| \frac{G_{N,N}(E)}{G_{0,N}} \right| \right]. \quad (88)$$

Os elementos de matriz $G_{N,N}$ e $G_{N,0}$ podem ser obtidos em função de $J_{0,N}^{(eff)}(E)$. Após os sítios terem sido dizimados, o Hamiltoniano efetivo para os dois sítios restantes pode ser escrito como

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

Vamos utilizar este operador $H^{(eff)}$ para calcular o operador de *Green* efetivo $G^{(eff)}$. Este procedimento requer apenas a inversão do operador $E - H^{(eff)}$. Após esta inversão, temos os elementos $G_{N,N}(E)$ e $G_{0,N}(E)$, necessários ao cálculo de γ :

$$G_{N,N}(E) = \frac{E - \epsilon_0^{(N-1)}(E)}{(E - \epsilon_0^{(N-1)}(E))(E - \epsilon_N^{(N-1)}(E)) - J_{0,N}^{(eff)} J_{0,N}^{(eff)}}, \quad (89)$$

$$G_{0,N}(E) = \frac{J_{0,N}^{(eff)}}{(E - \epsilon_0^{(N-1)}(E))(E - \epsilon_N^{(N-1)}(E)) - J_{0,N}^{(eff)} J_{0,N}^{(eff)}}. \quad (90)$$

Logo, substituindo as duas equações anteriores na Eq.(88), teremos

$$\gamma(E) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{N} \ln \left| \frac{E - \epsilon_0^{(N-1)}(E)}{J_{0,N}^{(eff)}(E)} \right| \right]. \quad (91)$$

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

$$\gamma(E) = - \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{N} \ln |J_{0,N}^{(eff)}(E)| \right]. \quad (92)$$

Portanto, o procedimento de renormalização permite o cálculo direto do expoente de *Lyapunov*. O algoritmo numérico é bastante simples e estável, basta iterar as equações que renormalizam os termos da diagonal do Hamiltoniano ϵ e os acoplamentos J entre os sítios. Após um grande número de iterações, em geral acima de $N = 10^4$, o expoente $\gamma(E)$ pode ser obtido através de uma regressão linear da quantidade $\ln |J_{0,N}^{(eff)}(E)|$ versus o tamanho da cadeia N .

4.2.2 Matriz de transferência unidimensional

O método de matriz de transferência é um formalismo interessante dentro do contexto de teoria da localização pois permite o cálculo de diversas quantidades físicas importantes. O formalismo pode ser construído da seguinte forma: vamos considerar um modelo *tight-binding* unidimensional descrito pelo Hamiltoniano de *Anderson* dado por

$$H = \sum_n \epsilon_n |n\rangle \langle n| + \sum_n [J_{n,n+1} |n\rangle \langle n+1| + J_{n-1,n} |n\rangle \langle n-1| + c.c], \quad (93)$$

onde $|n\rangle$ é o orbital atômico centrado no sítio n e ϵ_n é o potencial aleatório. Usando a expansão $|\psi\rangle = \sum_n f_n |n\rangle$, a equação de *Schrödinger* pode ser escrita como

$$J_{n,n+1} f_{n+1} + J_{n-1,n} f_{n-1} = (E - \epsilon_n) f_n. \quad (94)$$

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

$$\begin{pmatrix} f_{n+1} \\ f_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{(E-\epsilon_n)}{J_{n,n+1}} & -\frac{J_{n-1,n}}{J_{n,n+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_n \\ f_{n-1} \end{pmatrix}$$

ou usando uma redefinição de variáveis, temos

$$F_{n+1} = T_n F_n, \quad (95)$$

onde

$$F_{n+1} = \begin{pmatrix} f_{n+1} \\ f_n \end{pmatrix}$$

e T_n é a matriz de transferência definida por

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

Logo, dado uma condição inicial $F_0 = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_0 \end{pmatrix}$ podemos obter as amplitudes da função de onda nos sítios $N - 1$ e N através do produto de todas as matrizes de transferência:

$$F_N = \left[\prod_{n=1}^N T_n \right] \times F_0. \quad (96)$$

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

$$\gamma = \frac{1}{\lambda} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \frac{|F_N|}{|F_0|}. \quad (97)$$

Formalmente o cálculo de γ é feito por esta última equação, entretanto, do ponto de vista numérico, o cálculo não é tão direto. Em linhas gerais, o produtório de matrizes de transferência apresenta instabilidades numéricas sérias, a matriz resultante do produtório $\prod_n T_n$ acaba tendo elementos pequenos demais ou grandes demais. Para resolver isso, no caso $1D$, é possível ir multiplicando o produtório por constantes para então controlar a instabilidade. Se, ao longo da execução do produtório, os termos da matriz resultante ficarem menores que 10^{-10} , então vamos multiplicar a matriz toda por $A = 10^{10}$. Se ocorrer o contrário, os termos ficarem maiores que 10^{10} , então multiplicamos a matriz por $B = 10^{-10}$. Assim, ao fim do cálculo do produtório teremos uma matriz efetiva $A^{n_a} B^{n_b} \prod_n T_n$, onde n_a e n_b representam o número de vezes que multiplicamos a matriz por A e B , respectivamente. Usando a fórmula da Eq.(97) nesta matriz efetiva, vamos encontrar um γ^* que obviamente é diferente do expoente de *Lyapunov* γ . Uma relação entre γ^* e γ pode ser encontrada seguindo os próximos passos:

$$\begin{aligned} \gamma^* &= \frac{1}{N} \log \frac{|A^{n_a} B^{n_b} \prod_n T_n F_0|}{|F_0|} \\ \gamma^* &= \frac{1}{N} [n_a \log A + n_b \log B] + \frac{1}{N} \log \frac{|\prod_n T_n F_0|}{|F_0|}. \end{aligned} \quad (98)$$

Com base nesta última equação, temos que o valor de γ pode então ser obtido por

$$\gamma = \frac{1}{N} \log \frac{|\prod_n T_n F_0|}{|F_0|} = \gamma^* - \frac{1}{N} [n_a \log A + n_b \log B] \quad (99)$$

Utilizando esta técnica, vamos remover a instabilidade numérica e poder calcular γ para N grande. Tradicionalmente, este procedimento funciona bem no limite de N grande (usamos $N = 10^5$ ou maior em geral), os resultados obtidos usando o método de matriz de transferência são equivalentes aos resultados obtidos usando o método de funções de *Green* $1D$ e os valores de N no formalismo de renormalização são também semelhantes aos valores usados na matriz de transferência. Vamos aplicar agora ambos os métodos de matriz de transferência

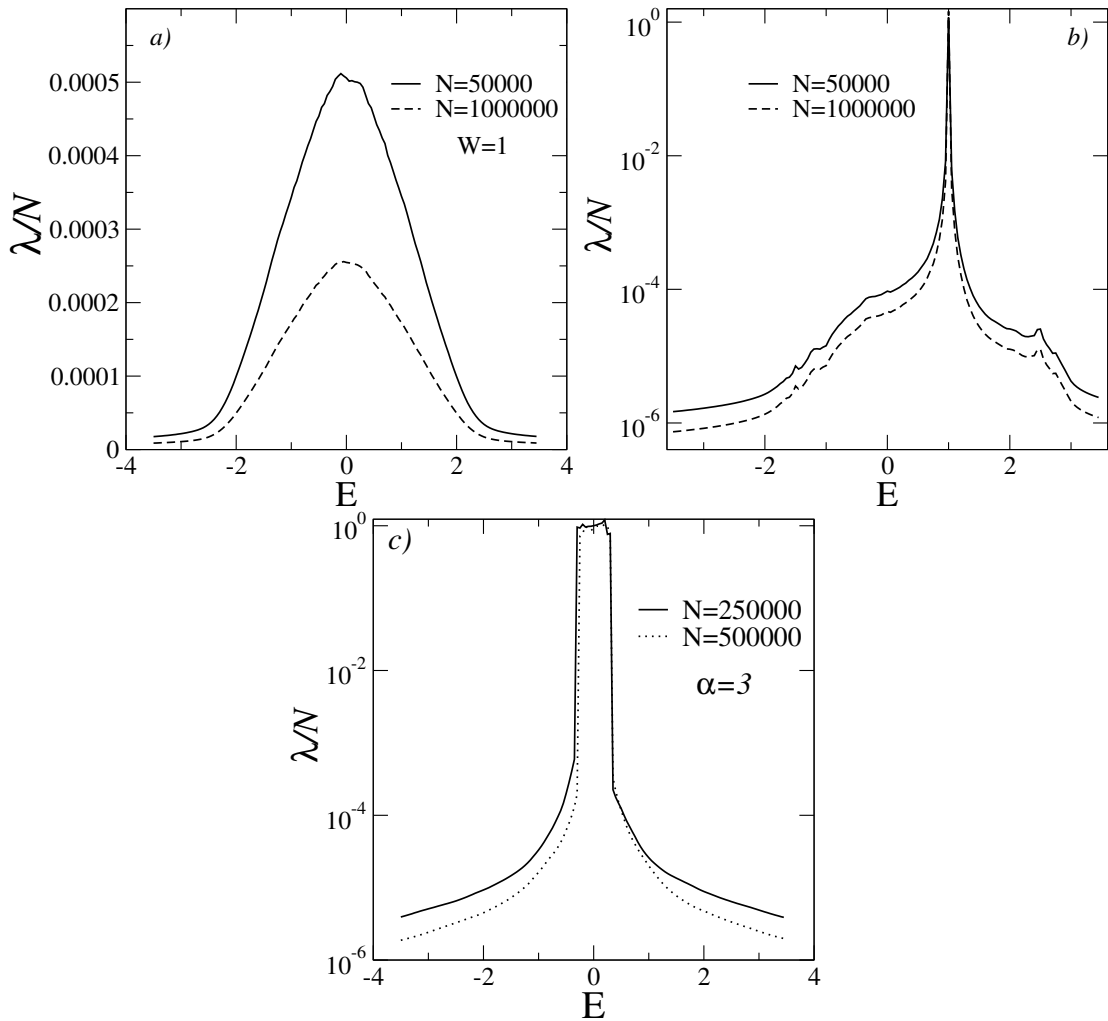


Figura 5 – Comprimento de localização: a) modelo de *Anderson* unidimensional com desordem diagonal não correlacionada, b) modelo de dímeros aleatórios e c) modelo de *Anderson* com correlação de longo alcance na distribuição de desordem. No caso (a) a desordem não correlacionada resulta em comprimento de localização pequeno no limite termodinâmico. No caso (b) encontramos uma energia ressonante. No caso (c) encontramos uma região em torno do centro da banda, onde o comprimento de localização é proporcional ao tamanho do sistema (estados metálicos). Cálculos realizados usando o método de *Green* e a matriz de transferência.

quanto funções de *Green* em três sistemas unidimensionais desordenados. Vamos considerar (i) o modelo de *Anderson* 1D com desordem diagonal não correlacionada; (ii) o modelo com desordem diagonal com correlações tipo dímeros [12]; (iii) O modelo com correlações de longo alcance na distribuição de desordem.

O modelo (i) é basicamente considerar o Hamiltoniano 1D (Eq.(93)) com termo diagonal sendo números aleatórios não correlacionados uniformemente distribuídos dentro do intervalo $[-W/2, W/2]$, vamos considerar $W = 1$ (em unidades de $J = 1$). O comprimento de localização calculado através do método de *Green* pode ser encontrado na fig.(5(a)), fizemos o gráfico de

λ/N versus a energia E considerando $N = 5 \times 10^5$ e $N = 10^6$. Observe que o comprimento de localização reescalado tende a zero à medida que N cresce, este comportamento de escala sugere estados localizados no limite termodinâmico.

Na figura fig.(5(b)) fizemos o gráfico dos nossos resultados para o caso (ii), neste sistema, a desordem diagonal é composta de dois valores: $\epsilon_n = 0$ com probabilidade p e $\epsilon_n = 1$ com probabilidade $1 - p$, onde a probabilidade aqui será $p = 0.5$. A correlação tipo dímero é introduzida considerando que os valores $\epsilon_n = 1$ sempre aparecem em pares ao longo da cadeia. Podemos observar que para $E = 1$ o comprimento de localização reescalado é uma constante logo, nesta energia, o comprimento de localização é proporcional ao tamanho do sistema. Portanto, este tipo de correlação tipo dímero promove o aparecimento de uma ressonância de valor $E = 1$. Nesta ressonância o elétron propaga sem “perceber” a desordem.

Por fim, vamos mostrar outra aplicação destas técnicas resolvendo o modelo (iii), que é basicamente o modelo de *Anderson* 1D considerando a desordem diagonal como sendo uma sequência desordenada com espectro de potência $S(k) \propto k^{-\alpha}$, onde já debatemos sobre este problema no Cap.2 e mostramos que para $\alpha > 2$ o sistema apresenta uma fase metálica em torno do centro da banda. Na fig.(5(c)) podemos apreciar os resultados para o caso com $\alpha = 3$ e podemos observar a existência de uma região finita em torno de $E = 0$, onde o comprimento de localização reescalado é constante, ou seja, existe uma transição metal-isolante neste modelo. Existe uma fase de estados metálicos no centro da banda. Os resultados obtidos com a matriz de transferência e o método de funções de *Green* foram equivalentes. Nestes cálculos também usamos algumas amostras para fazer uma média estatística, em geral, usamos 20 amostras diferentes para cada experimento numérico.

4.2.3 Método de Matriz de Transferência 2D

O formalismo de Matriz de Transferência também pode ser utilizado no cálculo do comprimento de localização λ para o modelo de *Anderson* em dimensão $D = 2$. Existem diversas 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. Entretanto, um dos pontos fracos dentro do contexto de usar matriz de transferência em sistemas de dimensão alta é que a geometria considerada não é exatamente 2D.

O estudo começa considerando uma geometria tipo “fita” com comprimento N e largura M , ver fig.(6). Em geral, se considera $N \gg M$ ($N = 10^7$ ou maior e $M < 1000$), portanto,

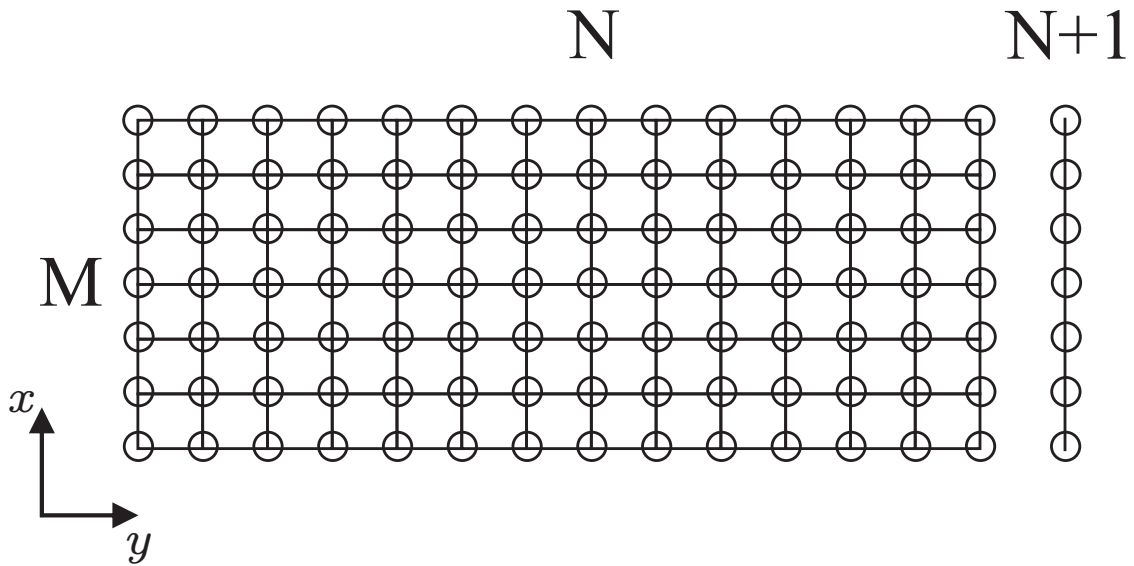


Figura 6 – Geometria tipo “fita” com comprimento N e largura M usada nos formalismos de matriz de transferência 2D e funções de *Green*.

formalmente, o sistema não é exatamente 2D e sim “quasi-unidimensional”. Entretanto, é possível fazer uma extrapolação através de uma análise de escala para diversos valores de M . O início do procedimento consiste em escrever a equação de *Schrödinger* estacionária ($H|\Phi\rangle = E|\Phi\rangle$):

$$J_{n,n+1}f_{n+1} = (E - H_n)f_n - J_{n-1,n}f_{n-1}. \quad (100)$$

No caso unidimensional f_{n+1} , f_n e f_{n-1} representam respectivamente as amplitudes da função de onda $|\Phi\rangle$ nos sítios $n + 1$, n e $n - 1$. Os termos $J_{n-1,n}$ e $J_{n,n+1}$ representam o *hopping* entre os sítios $n - 1$ e n ; $n + 1$ e n , respectivamente. O H_n representa a energia do sítio. Como já mencionamos anteriormente, vamos considerar que o sistema tem a geometria igual a uma tira $N \times M$, onde $N \gg M$ (ver fig.6). Então, vamos generalizar a Eq.(100) definindo a classe de vetores \vec{f}_n , onde $n = 1, \dots, N$. Um dado vetor \vec{f}_m contém as M amplitudes da função de onda sobre a linha m do sistema. A equação Eq.(100) pode ser escrita como

$$\mathbf{J}_{n,n+1}\vec{f}_{n+1} = (E\mathbf{I} - \mathbf{H}_n)\vec{f}_n - \mathbf{J}_{n-1,n}\vec{f}_{n-1}, \quad (101)$$

onde $\mathbf{J}_{n,n+1}$ agora é uma matriz $M \times M$ cuja diagonal representa os M termos de *hopping* entre as linhas n e $n + 1$, \mathbf{H}_n 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:

$$\begin{pmatrix} \vec{f}_{n+1} \\ \vec{f}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\mathbf{J}_{n,n+1}}(E\mathbf{I} - \mathbf{H}_n) & -\mathbf{J}_{n-1,n} \\ \mathbf{I} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{f}_n \\ \vec{f}_{n-1} \end{pmatrix}. \quad (102)$$

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

$$\mathbf{T}_n = \begin{pmatrix} \frac{1}{\mathbf{J}_{n,n+1}}(\mathbf{E}\mathbf{I} - \mathbf{H}_n) & -\frac{\mathbf{J}_{n-1,n}}{\mathbf{J}_{n,n+1}} \\ \mathbf{I} & 0 \end{pmatrix}, \quad (103)$$

$$\begin{pmatrix} \vec{f}_N \\ \vec{f}_{N-1} \end{pmatrix} = \mathbf{T}_N \mathbf{T}_{N-1} \mathbf{T}_{N-2} \dots \mathbf{T}_1 \begin{pmatrix} \vec{f}_1 \\ \vec{f}_0 \end{pmatrix} = \prod_{n=1}^N \mathbf{T}_n \begin{pmatrix} \vec{f}_1 \\ \vec{f}_0 \end{pmatrix}. \quad (104)$$

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

$$\Gamma = \lim_{N \rightarrow \infty} (\mathbf{Q}_N^\dagger \mathbf{Q}_N)^{\frac{1}{2N}}, \quad (105)$$

cujo logaritmo natural dos autovalores de Γ são os expoentes de *Lyapunov* da matriz de transferência \mathbf{Q}_N e 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 $\mathbf{Q}_N^\dagger \mathbf{Q}_N$ 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 \mathbf{Q}_N . O procedimento deve ser aplicado a cada n_M multiplicações:

$$\bar{B}_i = [B_i - \sum_{j < i} (\bar{B}_j \cdot B_i) \bar{B}_j] / b^{(i)}, \quad (106)$$

onde

$$b^{(i)} = |B_i - \sum_{j < i} (\bar{B}_j \cdot B_i) \bar{B}_j|. \quad (107)$$

Logo, cada coluna de \mathbf{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 \mathbf{Q}_N apresenta um conjunto de M pares de autovalores [5, 101], por isso, a M -ésima coluna da matriz \mathbf{Q}_N representará o autovetor relacionado com o menor autovalor de \mathbf{Q}_N .

O comprimento de localização λ_M para a faixa com largura M pode ser encontrado a partir deste menor autovalor [5, 101], que pode ser calculado recursivamente:

$$f_n^M = \ln b_n^M + f_{n-1}^M, \quad (108)$$

$$\lambda_M = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N}{c_n^M}. \quad (109)$$

Se N é finito, as expressões acima fornecem um valor aproximado de λ_M com erro estimado a partir da seguinte equação [101]:

$$\frac{\Delta\lambda_M}{\lambda_M} = \sqrt{\frac{C_n^M}{(c_n^M)^2} - \frac{1}{N_0}}, \quad (110)$$

onde $\{c_n^M$ é calculado durante o processo recursivo usando a expressão

$$\{c_n^M = (\ln b_n^M)^2 + \{c_{n-1}^M, \quad (111)$$

e o termo N_0 que aparece na Eq.(110) 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, 101] 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].

4.2.4 Método de Funções de Green

O sistema sob estudo é a mesma tira longa $N \times M$ mostrada na fig.(6), 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, 101, 39]

$$\mathbf{H}^{N+1} = \mathbf{H}^N + \mathbf{J}_{N,N+1} + \mathbf{H}_{N+1}^0, \quad (112)$$

onde $\mathbf{J}_{N,N+1}$ é a matriz dos *hopping* que acopla a $(N + 1)$ -ésima fatia ao sistema com N fatias e o termo \mathbf{H}_{N+1}^0 é o hamiltoniano da $(N + 1)$ -ésima fatia isolada. A função de Green para o sistema de tamanho $N + 1$, \mathbf{G}^{N+1} é determinada a partir da função de Green para o sistema do tamanho N (\mathbf{G}^N) e da função de Green para a fatia isolada, \mathbf{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, 101, 39]:

$$\mathbf{G}_{1,N+1}^{(N+1)} = \mathbf{G}_{1,N}^N \mathbf{J}_{N,N+1} \mathbf{G}_{N+1,N+1}^N, \quad (113)$$

$$\mathbf{G}_{N+1,N+1}^{(N+1)} = (\mathbf{E}\mathbf{I} - \mathbf{H}_{N+1,N+1}^0 - \mathbf{J}_{N,N+1} \mathbf{G}_{N,N}^N \mathbf{V}_{N,N+1}^T)^{-1}, \quad (114)$$

$$\mathbf{G}_{1,1}^1 = 1, \quad (115)$$

$$\mathbf{G}_{0,0}^0 = 0. \quad (116)$$

O resolvente $\mathbf{G}_{1,N}^N$ pode ser usado para definir o coeficiente de *Lyapunov* $\gamma_M(E)$ (inverso do comprimento de localização) para uma tira $N \times M$ [5, 101, 39]:

$$\gamma_M(E) = \frac{1}{\lambda_M} = -\frac{1}{2} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \text{Tr} |\mathbf{G}_{1,N}^N|^2. \quad (117)$$

Este método não necessita de um procedimento de ortonormalização como no caso da matriz de transferência, no entanto, 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.

4.2.5 Coeficiente de Transmissão

Outra medida importante do grau de localização é o coeficiente de transmissão $t(E)$, esta quantidade pode ser calculada usando formalismo de matriz de transferência e tem um papel importante dentro do estudo das propriedades de transporte. É importante salientar que $t(E)$ aparece no cálculo da corrente elétrica dentro da formulação de *Landauer-Büttiker*. O formalismo neste caso exige que o modelo de interesse seja colocado entre duas cadeias puras semi-infinitas. O Hamiltoniano do sistema completo pode ser escrito como [102]:

$$\begin{aligned} H_1 &= \sum_{n=-\infty}^{n=1} J(|n\rangle \langle n+1| + |n-1\rangle \langle n|), \quad -\infty < n \leq 0, \\ H_2 &= \sum_{n=2}^N \epsilon_n |n\rangle \langle n| + [J_{n,n+1} |n\rangle \langle n+1| + J_{n-1,n} |n\rangle \langle n-1|], \quad 0 < n < N+1, \\ H_3 &= \sum_{n=N+1}^{n=\infty} J(|n\rangle \langle n+1| + |n-1\rangle \langle n|), \quad N < n < \infty. \end{aligned} \quad (118)$$

Ou seja, entre os sítios 2 e N temos o modelo de *Anderson* e o restante do sistema é composto de dois condutores perfeitos sem desordem. Os autoestados de H_1 e H_3 são ondas de *Bloch* que podem ser escritas como

$$\begin{aligned} f_n &= Ae^{ikn} + Be^{-ikn}, \quad -\infty < n \leq 1, \\ f_n &= Ce^{ikn} + De^{-ikn}, \quad N+1 \leq n < \infty \end{aligned} \quad (119)$$

De acordo com o formalismo de matriz de transferência apresentado anteriormente, temos que 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:

$$\begin{pmatrix} f_{N+2} \\ f_{N+1} \end{pmatrix} = \prod_{l=1}^{N+1} T_l \begin{pmatrix} f_1 \\ f_0 \end{pmatrix}, \quad (120)$$

onde $Q_{N+1} = \prod_{l=1}^{N+1} T_l$ é o produto das matrizes de transferência. Substituindo as Eqs.(119) na última equação, temos

$$\begin{pmatrix} Ce^{ik(N+2)} + De^{-ik(N+2)} \\ Ce^{ik(N+1)} + De^{-ik(N+1)} \end{pmatrix} = Q_{N+1} \begin{pmatrix} Ae^{ik} + Be^{-ik} \\ A + B \end{pmatrix}. \quad (121)$$

Para escrever a Eq.(121) de outra forma, vamos definir as seguintes matrizes $S(k)$ e $M(k, N)$:

$$S(k) = \begin{pmatrix} e^{-ik} & e^{ik} \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (122)$$

$$M(k, N) = \begin{pmatrix} e^{-ik(N+1)} & 0 \\ 0 & e^{ik(N+1)} \end{pmatrix}. \quad (123)$$

Utilizando estas matrizes podemos escrever facilmente as identidades a seguir:

$$\begin{pmatrix} Ae^{ik} + Be^{-ik} \\ A + B \end{pmatrix} = S(k) \begin{pmatrix} B \\ A \end{pmatrix} \quad (124)$$

e

$$\begin{pmatrix} Ce^{ik(N+2)} + De^{-ik(N+2)} \\ Ce^{ik(N+1)} + De^{-ik(N+1)} \end{pmatrix} = M(k, N)S(k) \begin{pmatrix} D \\ C \end{pmatrix}. \quad (125)$$

Vamos substituir estas duas últimas identidades na Eq.(121),

$$M(k, N)S(k) \begin{pmatrix} D \\ C \end{pmatrix} = Q_{N+1}S(k) \begin{pmatrix} B \\ A \end{pmatrix} \quad (126)$$

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

$$\begin{pmatrix} D \\ C \end{pmatrix} = P(k, N) \begin{pmatrix} B \\ A \end{pmatrix}. \quad (127)$$

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

$$P(k, N) = \begin{pmatrix} e^{ik(N+1)} & 0 \\ 0 & e^{-ik(N+1)} \end{pmatrix} S(k)^{-1}Q_{N+1}S(k). \quad (128)$$

Para calcularmos a transmitância nós consideramos o elétron movendo-se de $-\infty$ até ∞ com energia $E = 2J \cos(k)$, 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 e utilizando a Eq.(127) podemos escrever $t(E)$ como sendo

$$|t(E)| = \left| \frac{-P_{21}(k, N)}{P_{12}(k, N)P_{11}(k, N)} + P_{22}(k, N) \right|^2. \quad (129)$$

Como mencionamos anteriormente, $t(E)$ tem um papel importante na teoria de transporte de *Landauer-Büttiker* [103, 28, 104]. A teoria de *Landauer-Büttiker* considera um sistema com

N sítios colocados entre dois eletrodos, os eletrodos vão funcionar como os sistemas semi-infinitos introduzidos na Eq.(118). A diferença de potencial entre os eletrodos é V e a fórmula de *Landauer-Büttiker* para a corrente é dada por [103, 28, 104] :

$$I(V) = \frac{2e}{\hbar} \int |t(E)|(F_e(E) - F_d(E))dE, \quad (130)$$

onde $F_e(E)$ e $F_d(E)$ são distribuições de *Fermi-Dirac* para os eletrodos a esquerda e a direita do sistema de interesse, ou seja, $F_e(E)$ está relacionado com o sistema semi-infinito localizado na região $-\infty < n \leq 0$ e $F_d(E)$ está relacionado com o sistema semi-infinito localizado na região $N < n < \infty$. $F_e(E)$ e $F_d(E)$ podem ser escritos como:

$$F_{e(d)}(E) = \{\exp\{[(E - E_F \mp eV/2)/k_B T] + 1\}\}^{-1}, \quad (131)$$

onde E_F é a energia de Fermi e T é a temperatura.

4.2.6 Densidade de Estados

Nesta seção vamos apresentar o método de *Dean* [78], um potente formalismo baseado no teorema dos autovalores negativos, que permite calcular a densidade de estados (DOS) em qualquer sistema físico cujo Hamiltoniano \mathbf{H} seja tridiagonal. Este formalismo foi bastante utilizando para se obter as propriedades espectrais no modelo de *Anderson 1D*, em cadeias Harmônicas e também pode ser utilizado no modelo de *Heisenberg*. A densidade de estados não é uma medida direta do grau de localização, entretanto, dentro de uma faixa de energias para as quais os autoestados sejam isolantes, a densidade de estado apresenta um perfil rugoso. Por outro lado, estados metálicos apresentam uma DOS suave praticamente sem rugosidade. Em um passado não tão distante, a flutuação no perfil da densidade de estados foi utilizada para aferir a existência de uma transição de *Anderson* em sistemas magnéticos unidimensionais [105].

Para obter a densidade de estados precisamos resolver a equação característica para o Hamiltoniano:

$$\det(\mathbf{H} - \lambda\mathbf{I}) = 0. \quad (132)$$

termos consecutivos da sequência $g_i(\lambda)$ equivale a valores negativos de $h_i(\lambda)$. A densidade de estados pode ser obtida através de uma simples derivação numérica. A densidade de estados também pode ser obtida através da diagonalização do Hamiltoniano. Formalmente, a densidade de estados é calculada usando a equação $DOS(E) = \sum_{E_j} \delta(E - E_j)$, onde E_j são os autovalores do Hamiltoniano. Do ponto de vista computacional, este procedimento é equivalente a fazer um simples histograma das autoenergias.

5 Medidas do grau de localização: Quantidades dependentes do tempo

5.1 EVOLUÇÃO TEMPORAL

Se faz importante enfatizar que o comportamento dinâmico de um sistema quântico desordenado pode indicar a existência (ou ausência) de estados estendidos no sistema. Vamos exemplificar isso considerando o modelo de *Anderson* unidimensional com N sítios. Suponha que, em $t = 0$, um elétron é colocado no sítio m de modo que $|c_m(t = 0)|^2 = 1$ e $c_n(t = 0) = 0$ para $n \neq m$. A evolução temporal deste estado inicialmente localizado é obtida através da solução da equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$i\hbar \frac{df_n(t)}{dt} = \epsilon_n f_n(t) + J_{n-1,n} f_{n-1}(t) + J_{n,n+1} f_{n+1}(t), \quad n = 1, 2, \dots, N. \quad (136)$$

Assumindo que é possível resolver este conjunto de equações, vamos examinar $f_m(t)$ 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, $f_m(t \rightarrow \infty) = 0$, este resultado é um forte indício que, no limite termodinâmico, o elétron é itinerante através da cadeia (estado estendido). Se $f_m(t \rightarrow \infty) \neq 0$, então o elétron não está difundido por toda a rede e pode ser encontrado apenas nas vizinhanças de m (estado localizado). A quantidade $|f_m(t)|^2$ é chamada de probabilidade de retorno ao ponto de partida. Uma maneira direta de obter $|f_m(t)|^2$ é efetuar a integração numérica do conjunto de equações de movimento (Eqs.(136)). Existem diversos métodos numéricos que podem ser aplicados na resolução da equação de Schrödinger dependente do tempo, vamos descrever detalhadamente os principais métodos bem como as quantidades físicas de interesse.

5.1.1 Método do operador de evolução temporal

Uma das estratégias mais precisas para se encontrar numericamente a dinâmica de um estado quântico é calcular o operador de evolução temporal [106]. Uma de suas vantagens é a precisão numérica, uma vez que o processo é formalmente exato, entretanto, uma das dificuldades é a limitação computacional, pois o cálculo exige a diagonalização total do Hamiltoniano do problema. Portanto, como já discutimos anteriormente, este procedimento é bastante limitado. Vamos construir a teoria de maneira geral, considerando um problema geral em Mecânica Quântica com Hamiltoniano H . Formalmente, a evolução temporal do estado quântico deste sistema é dada por

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iH\frac{t}{\hbar}} |\Psi(0)\rangle, \quad (137)$$

onde $|\Psi(0)\rangle$ é o estado no tempo $t = 0$ e $e^{-iH\frac{t}{\hbar}}$ é o operador de evolução temporal do problema. Considere que os estados $|\Psi(t)\rangle$ e $|\Psi(0)\rangle$ podem ser expandidos na base de orbitais $|n\rangle$ como

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n f_n(t) |n\rangle \quad (138)$$

e

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_n f_n(0) |n\rangle \quad (139)$$

podemos então encontrar uma relação simples entre $f_n(t)$ e $f_n(0)$, para isso, façamos a substituição da Eq.(138) e (139) na Eq.(137), ficando com

$$\sum_n f_n(t) |n\rangle = e^{-iH\frac{t}{\hbar}} \sum_n f_n(0) |n\rangle. \quad (140)$$

Salientamos que $\{|n\rangle\}$ é uma base do espaço de Hilbert do sistema de interesse, assim, podemos usar $\{|n\rangle\}$ para escrever uma representação matricial de H e/ou expandir os seus autovetores. Seja então $|E\rangle$ um autovetor de H (e portanto, $H|E\rangle = E|E\rangle$), podemos escrever

$$|E\rangle = \sum_n z_n^E |n\rangle. \quad (141)$$

Usando $\{|E\rangle\}$ para expandir o estado inicial, ou seja,

$$\begin{aligned} |\psi(0)\rangle &= \sum_E [\langle E|\psi_0\rangle] |E\rangle \\ |\psi(0)\rangle &= \sum_{\substack{n,m \\ E}} [z_m^{E*} f_n(0)] (\langle m|n\rangle) |E\rangle. \end{aligned} \quad (142)$$

Admitindo que H é real e Hermitiano e que $\langle m|n\rangle = \delta_{m,n}$, temos

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{n,E} z_n^E f_n(0) |E\rangle \quad (143)$$

$$|\psi_0(0)\rangle = \sum_E \left[\sum_n z_n^E f_n(0) \right] |E\rangle. \quad (144)$$

Assim, podemos usar $|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{iHt}{\hbar}} |\psi(0)\rangle$ para fazer a evolução temporal:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{iHt}{\hbar}} \sum_E \left[\sum_n z_n^E f_n(0) \right] |E\rangle \quad (145)$$

e lembrando que $e^{-\frac{iHt}{\hbar}} |E\rangle = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} |E\rangle$, a evolução temporal fica

$$|\psi(t)\rangle = \sum_E \left[\sum_n z_n^E f_n(0) \right] e^{-\frac{iEt}{\hbar}} |E\rangle. \quad (146)$$

Sabendo que $|\psi(t)\rangle = \sum_n f_n(t) |n\rangle$ e que $|E\rangle = \sum_m z_m^E |m\rangle$, temos

$$\sum_n f_n(t) |n\rangle = \sum_E \left[\sum_n z_n^E f_n(0) \right] e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \sum_m z_m^E |m\rangle. \quad (147)$$

Fazendo $Z(E) = \sum_n z_n^E f_n(0)$, temos

$$\sum_n f_n(t) |n\rangle = \sum_{E,m} Z(E) z_m^E e^{-\frac{iEt}{\hbar}} |m\rangle. \quad (148)$$

No lado direito, podemos eliminar um somatório fazendo a mudança de variáveis $m \rightarrow n$. Logo,

$$f_n(t) = \sum_E Z(E) z_n^E e^{-\frac{iEt}{\hbar}}. \quad (149)$$

Como já foi mencionado anteriormente, este procedimento tem uma grande precisão numérica dentro do contexto da conservação da norma da função de onda. Por outro lado, o procedimento exige a diagonalização total do Hamiltoniano e este procedimento tem um custo computacional em geral bem caro. Dentro do contexto do modelo de *Anderson 1D* este formalismo é interessante considerando cadeias pequenas com $N < 10000$ por exemplo. Para sistemas grandes, técnicas tradicionais como o *Runge-Kutta* ou o método de Taylor são mais recomendáveis.

5.1.2 Runge-Kutta de 4ª ordem

Vamos descrever o método de *Runge-Kutta* de 4ª ordem (RK4) dentro do contexto do modelo de *Anderson 1D* com *hopping* constante $J = 1$. Considerando que o estado do sistema no instante t seja $|\psi(t)\rangle = \sum_n f_n(t) |n\rangle$, temos que a equação de Schrödinger dependente do tempo pode ser escrita como:

$$i\hbar \frac{df_n}{dt} = \epsilon_n f_n + f_{n+1} + f_{n-1}, \quad \text{com } n = 1, 2, 3, \dots \quad (150)$$

Como já mencionamos, a evolução temporal de um dado estado inicial $|\psi(t=0)\rangle$ é obtida através da solução deste conjunto de equações, vamos apresentar formalmente o procedimento de solução numérica usando RK4. Considere que o estado inicial é dado por $|\psi(t=0)\rangle = \sum_n f_n(0) |n\rangle$, as componentes da função de onda ($\{f_n\}$) no tempo $t = \Delta t$ podem ser encontradas através da seguinte fórmula de quarta ordem:

$$f_n(\Delta t) \cong f_n(t=0) + \frac{1}{6} [K_n^1 + 2(K_n^2 + K_n^3) + K_n^4], \quad (151)$$

onde K_n^1 , K_n^2 , K_n^3 e K_n^4 são definidos como

$$K_n^1 = \frac{\Delta t}{\hbar i} [\epsilon_n f_n(0) + f_{n+1}(0) + f_{n-1}(0)], \quad (152)$$

$$K_n^2 = \frac{\Delta t}{\hbar i} \left[\epsilon_n \left(f_n(0) + \frac{K_n^1}{2} \right) + \left(f_{n+1}(0) + \frac{K_{n+1}^1}{2} \right) + \left(f_{n-1}(0) + \frac{K_{n-1}^1}{2} \right) \right], \quad (153)$$

$$K_n^3 = \frac{\Delta t}{\hbar i} \left[\epsilon_n \left(f_n(0) + \frac{K_n^2}{2} \right) + \left(f_{n+1}(0) + \frac{K_{n+1}^2}{2} \right) + \left(f_{n-1}(0) + \frac{K_{n-1}^2}{2} \right) \right], \quad (154)$$

$$K_n^4 = \frac{\Delta t}{\hbar i} \left[\epsilon_n \left(f_n(0) + K_n^3 \right) + \left(f_{n+1}(0) + K_{n+1}^3 \right) + \left(f_{n-1}(0) + K_{n-1}^3 \right) \right]. \quad (155)$$

O formalismo de RK4 tem erro da ordem de $(\Delta t)^5$, para calcular as componentes da função de onda no tempo $t = 2\Delta t$ basta repetir o procedimento considerando o tempo “ $t = \Delta t$ ” como sendo o ponto de partida, para calcular a função de onda no tempo “ $t = 3\Delta t$ ” usamos o tempo “ $t = 2\Delta t$ ” como sendo o ponto de partida e assim sucessivamente, ou seja, para encontrar a função de onda no tempo final T_M precisamos aplicar o método RK4 $\frac{T_M}{\Delta t}$ vezes. Esta é uma das dificuldades deste formalismo, pois o erro numérico em cada aplicação é acumulado ao longo do tempo, devido a isso, é recomendável manter algum mecanismo de "teste" para verificar se a solução numérica está sendo feita com sucesso. Tradicionalmente, a norma da função de onda $N(t)$ deve ser acompanhada ao longo do tempo, onde ela é dada por

$$N(t) = \sum_n |f_n(t)|^2. \quad (156)$$

Se $|N(t) - 1| < 10^{-7}$ temos, em geral, uma solução numérica aceitável. O RK4 consegue manter tal condição para tempo longo ($T_M \gg N$) se $\Delta t \ll 0.01$ (em geral). Entretanto, para N muito grande, o formalismo de RK4 requer um tempo computacional grande demais e assim muitas vezes, métodos de mais alta ordem são mais interessantes.

5.2 MÉTODO DE TAYLOR

O método de Taylor é obtido através da expansão de Taylor para o operador de evolução temporal. Vamos construir o formalismo considerando novamente o problema da Eq. de Schrödinger 1D com *hopping* $J = 1$:

$$i\hbar \frac{df_n}{dt} = \epsilon_n f_n + f_{n+1} + f_{n-1}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (157)$$

A expansão de Taylor para o operador de Evolução Temporal $U(t) = e^{-\frac{iHt}{\hbar}}$ é dada por

$$U(t) = e^{-\frac{iHt}{\hbar}} \approx 1 + \sum_{k=1}^{N_0} \left(-\frac{iHt}{\hbar} \right)^k \frac{1}{k!}, \quad (158)$$

onde H representa o Hamiltoniano do modelo de *Anderson 1D*. n_0 representa a ordem de truncamento da soma (em geral, $n_0 > 10$). Considerando que o estado inicial é $|\psi(0)\rangle = \sum_n f_n(0) |n\rangle$, temos que o estado $|\psi(t)\rangle$ pode ser encontrado como

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{iHt}{\hbar}} |\psi(0)\rangle = \left\{ 1 + \sum_{k=1}^{n_0} \left(-\frac{iHt}{\hbar} \right)^k \frac{1}{k!} \right\} |\psi(0)\rangle, \quad (159)$$

lembrando que $|\psi(t)\rangle = \sum_k f_n(t) |n\rangle$ é o estado quântico do sistema no tempo t . Logo,

$$|\psi(t)\rangle = |\psi(0)\rangle + \sum_{k=1}^{n_0} \left(-\frac{iHt}{\hbar} \right)^k \frac{1}{k!} |\psi(0)\rangle. \quad (160)$$

Vamos considerar $t = \Delta t < 1$ e fazer algumas considerações: O estado $|\psi(\Delta t)\rangle$ é obtido através de uma soma de potências do Hamiltoniano aplicadas ao estado $|\psi(0)\rangle$. O termo do somatório pode ser escrito de maneira clara como

$$\sum_k \left(-\frac{iHt}{\hbar} \right)^k \frac{1}{k!} |\psi(0)\rangle = -\frac{iH\Delta t}{\hbar} |\psi(0)\rangle \quad (161)$$

$$+ \left[\left(\frac{-i\Delta t}{\hbar} \right)^2 \frac{H^2}{2!} + \left(\frac{-i\Delta t}{\hbar} \right)^3 \frac{H^3}{3!} + \left(\frac{-i\Delta t}{\hbar} \right)^4 \frac{H^4}{4!} + \dots \right] |\psi(0)\rangle, \quad (162)$$

ou seja, cada termo tem uma constante de valor $\left(\frac{-i\Delta t}{\hbar} \right)^k \frac{1}{k!}$ multiplicada por H^k . Então, para se calcular o estado $|\psi(\Delta t)\rangle$ temos que calcular $H^k |\psi(0)\rangle$, entretanto, calcular H^k não é tão simples, principalmente se o número de átomos N for grande. Assim, podemos desenvolver um procedimento recursivo para calcular $H^k |\psi(0)\rangle$. Em linhas gerais, $H^1 |\psi(0)\rangle$ é simples de calcular, para isso, podemos usar a forma da equação de Schrödinger inicial do problema, ou seja,

$$H^1 |\psi(0)\rangle = H^1 \sum_n f_n(0) |n\rangle = \sum_n \{ \epsilon_n f_n(0) + [f_{n+1}(0) + f_{n-1}(0)] \} |n\rangle. \quad (163)$$

Definindo $H^1 |\psi(0)\rangle = \sum_n C_n^1 |n\rangle$, temos que $C_n^1 = \epsilon_n f_n(0) + f_{n+1}(0) + f_{n-1}(0)$. Para calcular $H^2 |\psi(0)\rangle$ o procedimento é semelhante, $H^2 |\psi(0)\rangle = H (H |\psi_0\rangle)$, mas $H |\psi_0\rangle$ já foi calculado como $H |\psi_0\rangle = \sum_n C_n^1 |n\rangle$, onde $\{C_n^1\}$ é uma relação simples dependente da forma da equação de Schrödinger. Assim, definindo $H^2 |\psi(0)\rangle = \sum_n C_n^2 |n\rangle$, tal que

$$C_n^2 = \epsilon_n C_n^1 + C_{n+1}^1 + C_{n-1}^1. \quad (164)$$

Agora basta generalizar para $H^k |\psi(0)\rangle$. Definindo $H^k |\psi(0)\rangle = \sum_n C_n^k |n\rangle$, temos que

$$C_n^k = \epsilon_n C_n^{k-1} + C_{n+1}^{k-1} + C_{n-1}^{k-1}. \quad (165)$$

Assim, podemos calcular todos os produtos $H^k |\psi(0)\rangle$ e então obter a solução numérica para o estado quântico do sistema no tempo $t = \Delta t$. Para encontrar a solução numérica em um tempo t_m , basta aplicar o método de forma sucessiva. Neste tipo de procedimento, em geral, devemos manter $n_0 \approx 12$ e $\Delta t = 0.05$. Estes valores de n_0 e Δt são suficientes para resolver a dinâmica com uma boa conservação da norma da função de onda. Quanto maior for o valor de n_0 melhor será a solução numérica encontrada, entretanto, o tempo computacional também cresce à medida que n_0 cresce, devido aos novos termos que devem ser somados. Sem falar que, se n_0 for muito grande, por exemplo $n_0 = 50$ ou maior, teremos $1/k!$ praticamente zero dentro da precisão da máquina. Desta feita, recomendamos que n_0 seja escolhido dentro dos limites $10 < n_0 < 20$. Nesta região, é possível resolver boa parte dos problemas envolvendo dinâmica eletrônica dentro do contexto da teoria da localização de *Anderson*.

Outro aspecto importante é que este formalismo pode ser aplicado em qualquer dimensão. Fizemos a dedução usando o caso $1D$, mas o formalismo pode facilmente ser aplicado no caso $2D$ ou $3D$. Os valores descritos para n_0 e Δt no caso $1D$ são suficientes para soluções numéricas eficientes em dimensão elevada, em comparação ao método de RK4 o método de Taylor chega a ser quase três vezes mais rápido (especialmente em sistemas $2D$ ou $3D$).

Uma vez implementado um formalismo apropriado para se resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo, as medidas do grau de localização podem ser feitas seguindo um procedimento semelhante ao caso independente do tempo. Podemos calcular a participação dependente do tempo, dada por

$$\xi(t) = \left(\sum_n |f_n(t)|^4 \right)^{-1}, \quad (166)$$

a raiz quadrada do desvio médio quadrático dependente do tempo,

$$\sigma(t) = \sqrt{\sum_n (n - \langle n(t) \rangle)^2 |f_n(t)|^2} \quad (167)$$

bem como a entropia de Shannon definida por

$$S(t) = - \sum_n |f_n(t)|^2 \log(|f_n(t)|^2). \quad (168)$$

O estudo da natureza localizada/estendida dos autoestados é feito novamente com base na análise de escala bem como na evolução temporal destas funções. Para estados estendidos em um sistema de dimensão D a participação $\xi(t)$ é proporcional a t^D e a raiz quadrada do desvio médio quadrático $\sigma(t)$ é proporcional a t^1 . Para estados localizados tanto ξ quanto σ

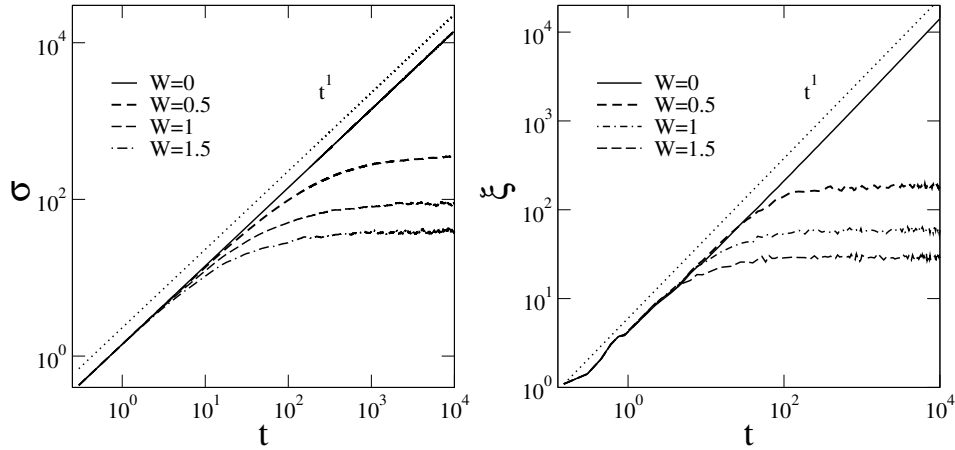


Figura 7 – Raiz quadrada do desvio médio quadrático e participação versus tempo considerando o modelo de Anderson unidimensional com desordem diagonal não correlacionada de largura W . Para $W = 0$ ou seja, o caso cristalino onde os estados são estendidos, temos que σ e ξ divergem linearmente. Para $W > 0$ temos que σ e ξ são constantes para tempo longo indicando assim a presença de estados localizados (isolantes).

evoluem para uma constante i.e. $\xi(t) \propto t^0$ e $\sigma(t) \propto t^0$. Também é possível encontrar regimes intermediários entre o caso localizado e o caso metálico. Em linhas gerais é possível encontrar sistemas físicos onde $\sigma \propto t^X$. Se $0 < X < 0.5$ temos que o sistema apresenta uma dinâmica subdifusiva. Se $X = 0.5$ temos o regime difusivo. Se $0.5 < X < 1$ temos o regime chamado subdifusivo. Os regimes com $0 < X < 1$ foram tradicionalmente obtidos em sistemas com desordem tipo dímero [12] ou em sistemas contendo não-linearidade. Os casos onde ocorre localização completa ($X = 0$) ou estados metálicos ($X = 1$) podem ser rapidamente verificados considerando uma cadeia unidimensional contendo desordem diagonal não correlacionada de largura W . Na fig. 7 mostramos nossos resultados para este sistema considerando $W = 0$ (caso cristalino) e $W > 0$ (caso desordenado). A condição inicial do sistema foi o elétron inicialmente localizado no centro da cadeia. Nossos resultados estão em total concordância com a teoria de localização: No caso sem desordem $W = 0$, os estados metálicos promovem uma dinâmica balística; no caso desordenado ($W > 0$) a localização dos autoestados é obtida através da ausência de crescimento de σ e ξ à medida que o tempo cresce.

Analisar a evolução temporal destas funções (σ, ξ etc) visando aferir a dependência temporal assintótica tem certas dificuldades computacionais. O ponto central destas dificuldades consiste na integração numérica da equação de Schrödinger sem que a borda da cadeia esteja presente. Ou seja, precisamos integrar o modelo para tempo razoavelmente longo sem que a função de onda chegue nas bordas. Para obter tal resultado temos que resolver as equações em sistemas com N grande (em geral $N > 10^4$). Este tipo de procedimento pode gerar severas

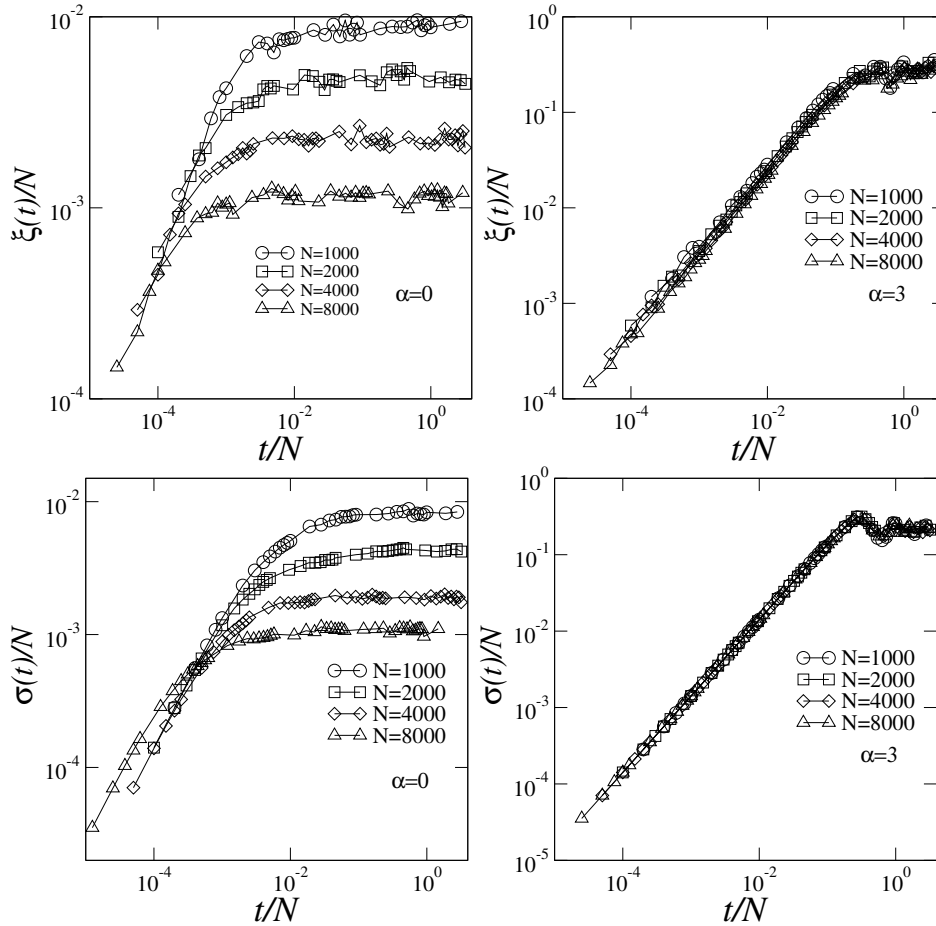


Figura 8 – Participação e raiz quadrada do desvio médio quadrático reescalados versus tempo reescalado considerando o modelo unidimensional com desordem diagonal apresentando espectro de potência $S(k) \propto k^{-\alpha}$ (ou seja, correlação de longo alcance). Para $\alpha = 0$, o sistema apresenta apenas estados localizados logo ξ/N e σ/N diminuem a medida que N cresce. Para $\alpha = 3$, o sistema tem estado metálico e assim tanto ξ quanto σ propagam de forma balística.

dificuldades computacionais principalmente em casos com $d > 1$. Por exemplo, na fig. 7 para conseguir resultados até um tempo $t_{max} \approx 10^4$ tivemos que usar $N = 50000$. Se o sistema for 2D ou 3D tal formalismo pode se tornar inviável pois o número de equações cresce com N^D . Uma forma de transpor tal dificuldade consiste em analisar ξ e σ usando sistemas menores ($N < 10^4$) e considerando o limite de tempo longo (ou seja, tempo $t_{max} \gg N$). Para tempo longo ($t \rightarrow \infty$) temos que $\xi(t \rightarrow \infty) \propto N^D$ e $\sigma(t \rightarrow \infty) \propto N$. Portanto uma outra estratégia para se investigar a natureza dos autoestados de um sistema desordenado usando métodos dependentes do tempo pode ser descrita da seguinte forma: considere uma condição inicial onde o elétron esteja totalmente localizado no centro do sistema. Calcule $\xi(t)$ e $\sigma(t)$ para tempo longo considerando diversos valores para N . Se faz importante mencionar que a condição inicial onde o elétron está inicialmente localizado em um único sítio (tipo função delta) é uma condição

espectralmente larga ou seja, contém todos os autoestados do Hamiltoniano. Assim, se existirem autoestados estendidos dentro do pacote inicial, as curvas de ξ/N^D versus t/N para diversos valores de N devem colapsar em uma única curva. O mesmo deve acontecer com as curvas de $\sigma(t)/N$ versus t/N para diversos valores de N . Este comportamento colapsado nas curvas de ξ/N^D e $\sigma(t)/N$ é um indicativo que o modelo contém estados metálicos. Vamos aplicar este procedimento no problema unidimensional com desordem diagonal correlacionada.

Vamos revisitar o problema investigado na ref. [20] usando esta metodologia dinâmica. Vamos considerar $N = 1000, 2000, 4000$ e 8000 . Vamos resolver a equação de Schrödinger unidimensional dependente do tempo (Eq.(150)) usando todos os métodos apresentados (operador de evolução, RK4 e método de Taylor). A desordem diagonal ϵ_n são números aleatórios com densidade espectral $S(k) \propto k^{-\alpha}$ ou seja, exatamente o modelo considerado na ref. [20]. Uma síntese de nossos resultados pode ser encontrada na fig.(8). A condição inicial foi $f_n(t=0) = \delta_{n,N/2}$ ou seja, o elétron inicialmente localizado no centro da cadeia. Em linhas gerais os três métodos obtiveram exatamente os mesmos resultados. Para $\alpha = 0$ os resultados de ξ/N^1 e $\sigma(t)/N$ não apresentaram o colapso. Este resultado está em total concordância com os resultados encontrados na ref.[20] usando grupo de renormalização. O caso $\alpha = 0$ é, basicamente, o modelo de *Anderson* com desordem diagonal não correlacionada, todos os autoestados são localizados. Os autoestados sendo localizados tanto ξ quanto σ são constantes no limite de tempo longo. Assim temos que na presença de estados localizados ξ/N e σ/N devem diminuir à medida que N cresce. Para $\alpha = 0$ podemos observar este comportamento claramente em nossos dados. Para $\alpha = 3$ encontramos um colapso bem definido tanto para ξ/N^1 quanto $\sigma(t)/N$. Este resultado indica a existência de estados metálicos no modelo. Novamente, o formalismo dinâmico tem boa concordância com os resultados obtidos na ref. [20]. Para $\alpha = 3$ o sistema apresenta uma fase de estados metálicos no centro da banda. Estes modos estendidos promovem um alargamento balístico do pacote inicialmente localizado. Esta dinâmica balística pode ser observada no colapso de ξ e σ versus tempo.

6 Efeito do Campo Elétrico

6.1 MODELO DE ANDERSON COM EFEITO DO CAMPO ELÉTRICO 1D

Vamos considerar o problema de um elétron descrito na abordagem de *Anderson* e incluir o termo de campo elétrico estático (campo DC). A interação com o campo elétrico dinâmico também pode ser considerada posteriormente. A fig.(9) mostra um esboço do problema em questão. Consideramos inicialmente o caso de uma cadeia com N sítios igualmente espaçados (a é o espaçamento de rede). O campo elétrico \vec{E} atua de forma paralela a cadeia conforme mostra a figura (ou seja, $\vec{E} = E\vec{e}_x$, onde $\vec{e}_x = \vec{x}/|\vec{x}|$). A energia potencial oriunda da interação do elétron com o campo é dada por

$$P_n^E = \int_0^r eE \cdot d\vec{x} = aeEn. \quad (169)$$

Considerando $e = a = \hbar = 1$, temos que o termo diagonal do Hamiltoniano de *Anderson* na presença do campo elétrico é dado por $\epsilon_n = P_n^E + \epsilon_n^* = En + \epsilon_n^*$, onde E é o valor do campo e ϵ_n^* representa a desordem diagonal do modelo de *Anderson*. Logo, ϵ_n^* são números aleatórios uniformemente distribuídos na região $[-W/2, W/2]$. Assim, a equação de *Schrödinger* 1D pode ser descrita como

$$i\hbar \frac{df_n}{dt} = (En + \epsilon_n^*)f_n + f_{n+1} + f_{n-1}, \quad (170)$$

onde f_n é a amplitude da função de onda no sítio n . Vamos debater inicialmente o caso sem desordem, ou seja, a desordem diagonal ϵ_n^* tem largura $W = 0$. Neste caso o problema se resume a um elétron se movendo em um cristal unidimensional submetido a um campo elétrico estático paralelo ao sistema. Este problema pode ser investigado através de uma simples abordagem semiclássica, para isso, vamos considerar que o Hamiltoniano geral do problema cristalino com

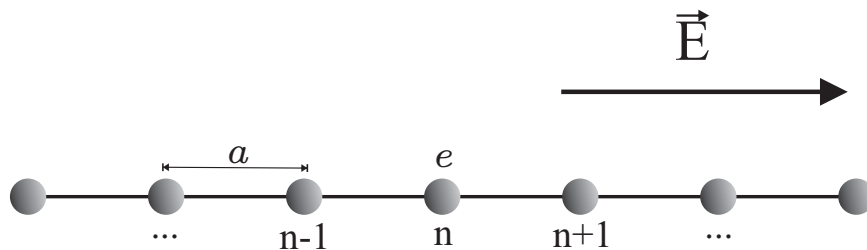


Figura 9 – Ilustração do modelo de *Anderson* unidimensional sob a ação de um campo elétrico paralelo ao sistema.

campo elétrico é dado por

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) + nE \quad (171)$$

e considerando o sistema cristalino, temos que $V(x)$ é constante para cada posição $x = an$, assim, podemos calcular

$$\dot{p} = -\frac{dH}{dx} = E. \quad (172)$$

Integrando esta última equação no tempo, temos

$$p = Et + p_0. \quad (173)$$

Considerando que $p = \hbar k$ e $\hbar = 1$, temos que o número de onda k pode ser escrito como

$$k = Et + k_0, \quad (174)$$

ou seja, considerando que no tempo $t = 0$ o elétron tenha número de onda k_0 observamos que, para um tempo $T = \frac{2\pi}{E}$, o número de onda percorre toda a 1ª zona de *Brillouin*. Podemos analisar um diagrama simples que explica detalhadamente a dinâmica eletrônica dentro da zona de *Brillouin* (ver fig. 10), para isso, vamos considerar que o número de onda inicial ($t = 0$) é dado por k_0 , após um dado tempo t_1 , o momento k cresce linearmente até o valor máximo $\pi(a = 1)$ (limite superior da zona de *Brillouin*). Neste instante, o elétron não pode mais crescer o momento k , uma vez que chegou no valor máximo permitido, assim, em um instante posterior ($t = t_1 + \Delta t$) o elétron é “reinjetado” no extremo esquerdo da zona de *Brillouin*, portanto, o momento agora passa a ser $-\pi$. No tempo t_2 o elétron tem seu momento k igual k_0 novamente e o tempo total ($t_1 + t_2$) é igual a $\frac{2\pi}{E}$, assim o elétron fica oscilando dentro da zona de *Brillouin* e a frequência de oscilação é dada por $\omega = \frac{2\pi}{T} = E$.

Observe que, no espaço real, o elétron também fica oscilando, uma vez que no instante no qual o elétron chega no limite $(+\pi)$ da zona de *Brillouin* ele acaba sendo reinjetado no lado esquerdo e, portanto, muda seu momento para $(-\pi)$. Esta inversão no sinal do momento representa uma mudança no sentido do movimento dentro do espaço real, assim, um elétron inicialmente com momento k_0 em uma dada posição x_0 da cadeia vai apresentar um movimento oscilatório em torno de x_0 . Como mencionamos anteriormente, a frequência deste movimento é proporcional ao campo elétrico, em um sistema de unidades onde $e = a = \hbar = 1$, temos então que $\omega = E$. Este comportamento oscilatório com uma única frequência $\omega = E$ é chamado de “Oscilação de *Bloch*” [72] e podemos verificar numericamente se este comportamento oscilatório obtido através desta abordagem semiclássica pode ser encontrado usando a equação de *Schrödinger* discreta (eq. 170).

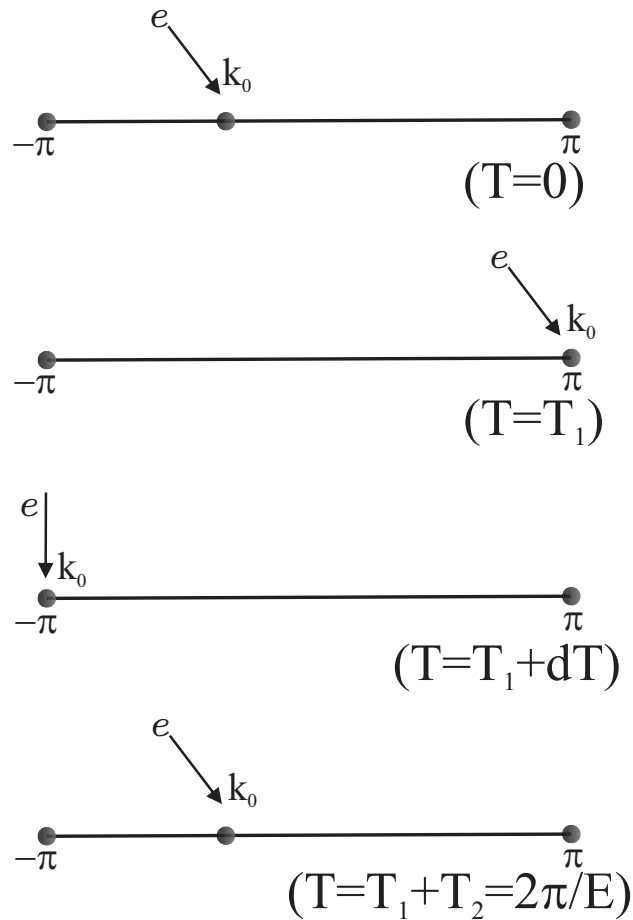


Figura 10 – Diagrama ilustrando a dinâmica eletrônica na presença de campo elétrico dentro da zona de *Brillouin*, onde o elétron inicia seu movimento com momento k_0 . O momento cresce linearmente com o tempo até chegar no valor $+\pi$ e então é reinjetado no outro extremo da zona de *Brillouin* (com momento $-\pi$). O momento volta a evoluir linearmente até chegar novamente ao valor inicial k_0 . Este movimento oscilatório é chamado de *Oscilação de Bloch*.

Para fazer um comparativo direto com a formulação semiclássica vamos focar inicialmente no caso sem desordem (ou seja, $W = 0$). A equação de *Schrödinger* 1D sem desordem ($W = 0$) na presença de campo elétrico fica

$$i\hbar \frac{df_n}{dt} = (nE)f_n + (f_{n+1} + f_{n-1})t. \quad (175)$$

Em alguns textos é comum encontrar o campo elétrico como sendo $(n - \frac{N}{2}) E$. Formalmente, somar ou subtrair uma constante no termo potencial não impetra quaisquer mudanças

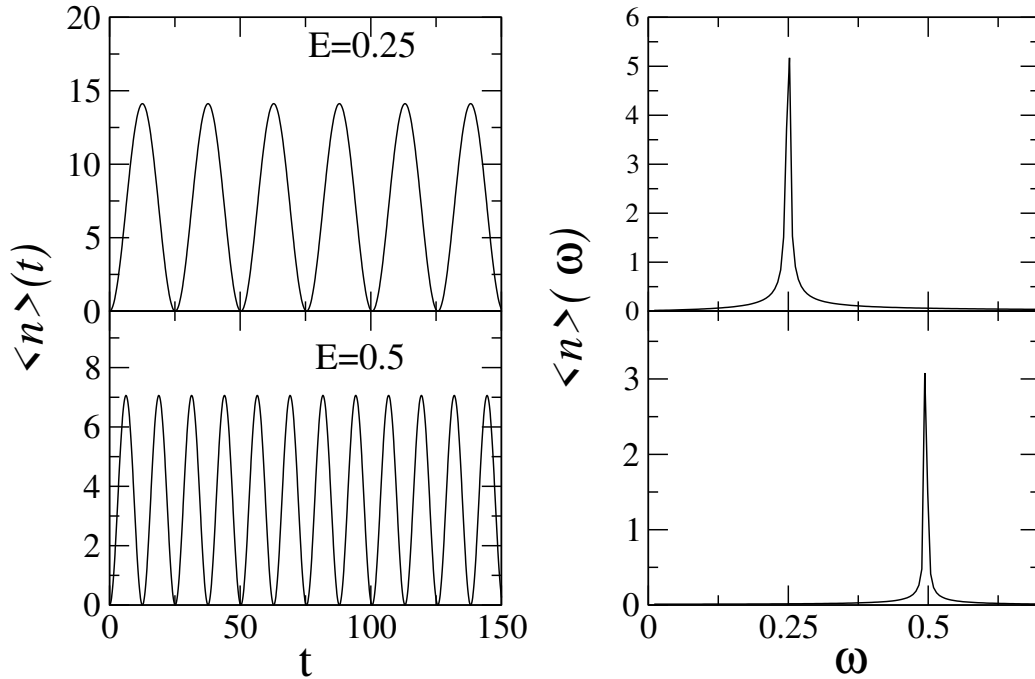


Figura 11 – Posição eletrônica média calculada considerando o sistema unidimensional sem desordem ($W = 0$) na presença de campo elétrico $E = 0.25$ e 0.5 . Observamos claramente o movimento oscilatório (Oscilação de Bloch) com frequência $\omega = E$, ou seja, em total concordância com a abordagem semiclássica.

qualitativas aos resultados. Vamos escolher uma condição inicial tipo Gaussiana, ou seja,

$$|\psi(t=0)\rangle = \sum_n f_n(0) |n\rangle, \quad (176)$$

onde,

$$f_n(0) = \frac{1}{A} e^{-\frac{(n-\frac{N}{2})^2}{4\Sigma^2}} \quad (177)$$

Σ é a largura inicial do pacote e A é uma constante de normalização definida como $A = \sum_n e^{-\frac{(n-\frac{N}{2})^2}{2\Sigma^2}}$.

Vamos calcular a posição média $\langle n \rangle$ do elétron ao longo do tempo ($\langle n \rangle(t) = \sum_n n |f_n|^2$). Na fig. 11 temos $\langle n \rangle \times tempo$ para $\Sigma = 1$, $E = 0.25$ e 0.5 . A equação de Schrödinger foi resolvida usando método de Runge-Kutta de 4ª ordem (RK4) com $dt = 0.002$. A figura mostra claramente o padrão oscilatório do elétron, onde a frequência de oscilação em ambos os casos foi obtida como sendo $\omega \approx E$, ou seja, está em plena concordância com a abordagem semiclássica que utilizamos.

No caso desordenado o comportamento oscilatório não é obtido, pois a desordem espalha a função de onda promovendo interferência destrutiva e, portanto, localização. Na fig. 12 calculamos a posição média do pacote de onda em uma cadeia desordenada ($W = 2$) sob

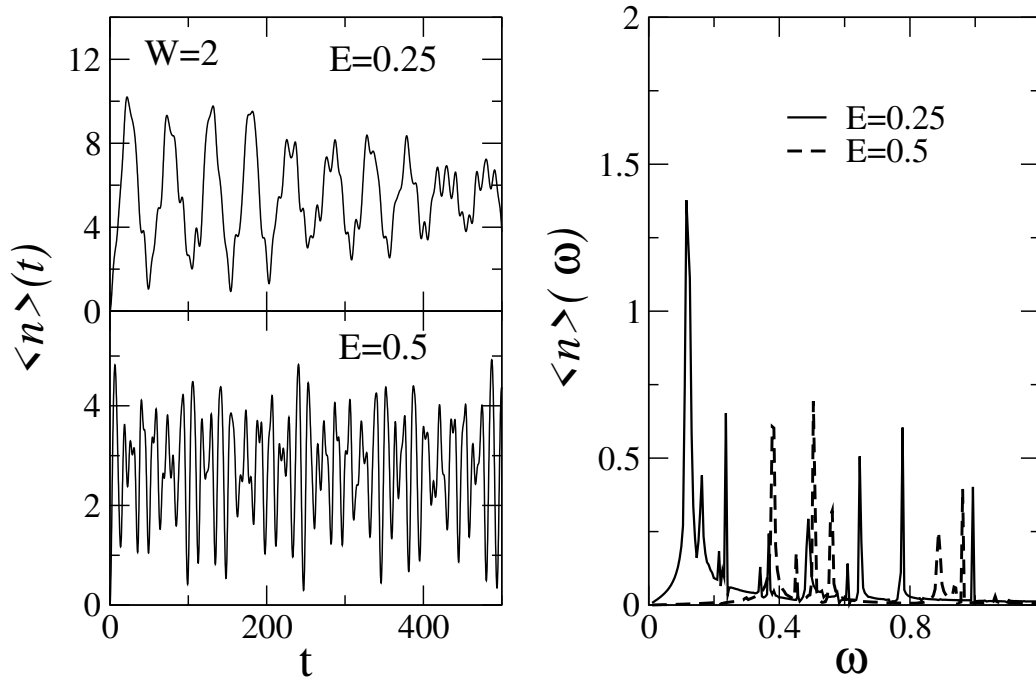


Figura 12 – Mesmo caso considerado na figura 11 sendo que agora incluindo desordem diagonal com $W = 2$ (em unidades de $J = 1$). Observamos claramente a ausência de uma oscilação coerente.

a ação de um campo elétrico $E = 0.25$ e 0.5 . O conjunto de equações diferenciais eq.(170) foi resolvido usando RK4 com $\Delta t = 0.002$. O padrão oscilatório típico de uma Oscilação de *Bloch* é totalmente ausente, observamos claramente que existem diversas frequências no movimento eletrônico quando calculamos a transformada de *Fourier* da posição eletrônica, esta localização do pacote de onda na presença de desordem e campo elétrico é chamada de “localização dinâmica”.

6.2 MODELO DE ANDERSON 2D E 3D COM EFEITO DE CAMPO ELÉTRICO

O efeito do campo elétrico estático pode facilmente ser generalizado para geometrias em dimensão $D = 2$ ou 3 . Do ponto de vista de formalismo, as equações são bem semelhantes e a fenomenologia também tem suas semelhanças. Computacionalmente, a resolução da equação de *Schrödinger* para sistemas de dimensão $D = 2$ ou 3 tem um custo bem maior, o número de equações diferenciais é N^2 ($D = 2$) e N^3 ($D = 3$). Comparando com o caso $D = 1$, que tem apenas N equações, podemos claramente perceber que numericamente sistemas com $d > 1$ são bem mais complexas de tratar. Neste tipo de sistema, o formalismo de Taylor é bem mais eficiente que o RK4.

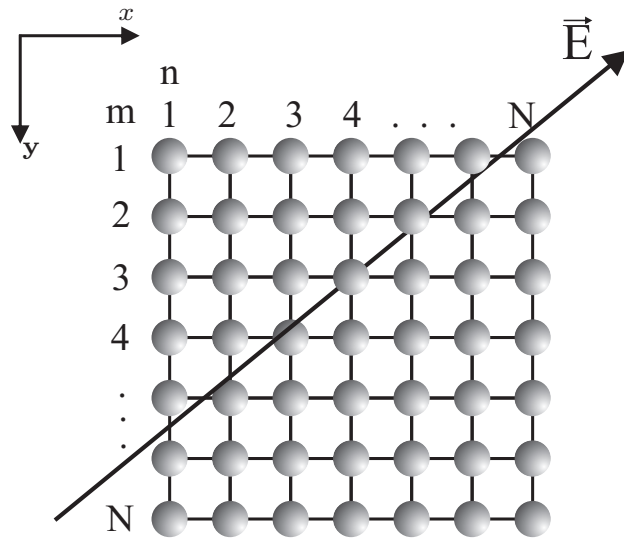


Figura 13 – Geometria bidimensional consistindo de uma rede $N \times N$ submetida a um campo elétrico \vec{E} paralelo ao plano.

Vamos construir passo a passo o formalismo e voltar a debater alguns aspectos da precisão numérica posteriormente. Vamos iniciar considerando o modelo de *Anderson* bidimensional, ou seja, o elétron se movendo em uma rede $N \times N$ contendo desordem diagonal. Como já debatemos no cap.4, neste caso cada sítio da rede vai ser indexado pelos inteiros n e m (ver fig. 3 e eq. 65 no cap.4). O estado do sistema no tempo t pode ser expandido usando a base de orbitais como $|\psi(t)\rangle = \sum_{n,m} f_{n,m} |n, m\rangle$. Desta forma, a equação de *Schrödinger* dependente do tempo pode ser escrita como

$$i\hbar \frac{df_{n,m}}{dt} = \epsilon_{n,m} f_{n,m} + f_{n+1,m} + f_{n-1,m} + f_{n,m+1} + f_{n,m-1}, \quad (178)$$

onde $\epsilon_{n,m}$ contém a desordem diagonal do modelo, ou seja, números aleatórios uniformemente distribuídos no intervalo $[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}]$. A banda do caso cristalino é nossa referência para se escolher os limites da intensidade da desordem W . No caso $D = 2$ sem desordem, a largura B da banda cristalina é dada por $8J$, onde J é a energia de “*hopping*”. Em geral, o limite $W > B$ é considerado o limite de desordem forte no caso $D = 2$, $W \ll B$ é o limite de desordem fraca e $W \approx B$ é o limite de desordem intermediária. Lembrando que, independentemente do valor de W , sabemos pela teoria de escala que se $W > 0$, todos os estados são localizados.

Para incluir o efeito do campo elétrico neste caso vamos iniciar definindo um campo elétrico geral paralelo ao plano $N \times N$:

$$\vec{E} = E_x \hat{e}_x + E_y \hat{e}_y. \quad (179)$$

A figura 13 mostra um campo \vec{E} atuando no plano $N \times N$ e a energia de interação do elétron com tal campo é dada por $P_{n,m}^E = nE_x + mE_y$. Assim, podemos escrever o conjunto de equações para $f_{n,m}$ na presença do campo elétrico e desordem como sendo

$$i\hbar \frac{df_{n,m}}{dt} = (\epsilon_{n,m} + nE_x + mE_y) f_{n,m} + (f_{n+1,m} + f_{n-1,m} + f_{n,m+1} + f_{n,m-1}). \quad (180)$$

A solução numérica pode ser feita tanto usando RK4 quanto o método de *Taylor*. Uma vez resolvido o conjunto de equações (180), podemos calcular diversas quantidades físicas. A posição média agora é um vetor $\vec{R} = \langle n \rangle \hat{e}_x + \langle m \rangle \hat{e}_y$, onde $\langle n \rangle = \sum_{n,m} n |f_{n,m}|^2$ e $\langle m \rangle = \sum_{n,m} m |f_{n,m}|^2$. Outras medidas do grau de localização podem ser feitas dentro do contexto da dinâmica do estado quântico, como por exemplo a participação dependente do tempo que pode ser facilmente calculada como

$$\xi(t) = \left(\sum_{n,m} |f_{n,m}|^4 \right)^{-1}. \quad (181)$$

Outra função importante é a raiz quadrada do desvio médio quadrático $\sigma(t)$ do pacote de onda, o cálculo pode ser feito através da fórmula:

$$\sigma(t) = \sqrt{\sum_{n,m} [(n - \langle n \rangle)^2 + (m - \langle m \rangle)^2] |f_{n,m}|^2}. \quad (182)$$

A entropia de *Shannon* também pode ser calculada seguindo um procedimento semelhante ao formalismo aplicado em $D = 1$:

$$S(t) = - \sum |f_{n,m}|^2 \log(|f_{n,m}|^2). \quad (183)$$

Adicionalmente, a probabilidade de retorno é definida como

$$r(t) = |f_{n_0, m_0}|^2, \quad (184)$$

onde (n_0, m_0) é a posição inicial do elétron. Um estudo interessante envolvendo a probabilidade de retorno é o cálculo da função de auto-correlação temporal $C(t)$ definida como:

$$C(t) = \frac{1}{t} \int_0^t r(t) dt \quad (185)$$

Tradicionalmente a função de auto-correlação tem comportamento $C(t \rightarrow \infty) \propto 1/t$ para estados estendidos. Para estados localizados temos que $C(t \rightarrow \infty) \rightarrow \text{constante}$. Formalmente, todas as funções do caso $D = 1$ podem ser adaptadas para o caso $D = 2$ e também $D = 3$. No caso $D = 3$, o Hamiltoniano é escrito em uma geometria cúbica ($N \times N \times N$), onde cada

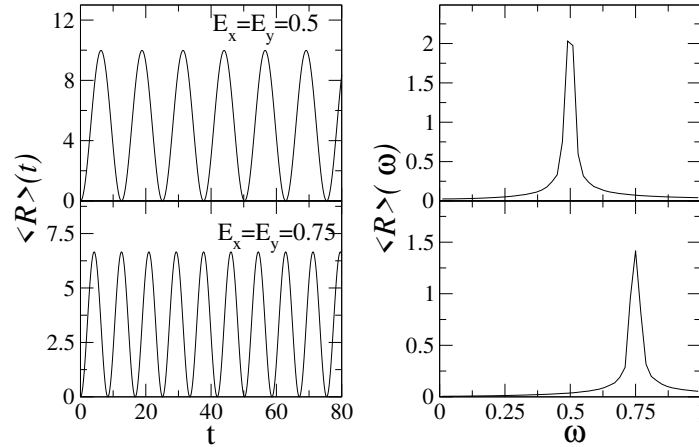


Figura 14 – Posição média eletrônica calculada em sistemas $N \times N$ com $N = 200$ sítios. O sistema está submetido a um campo $\vec{E} = E_x n + E_y m$ com $E_x = E_y = 0.5$ e 0.75 . Consideramos o caso sem desordem diagonal, ou seja, $W = 0$. Observamos novamente uma oscilação de *Bloch* com frequência idêntica ao campo aplicado.

sítio é descrito por três parâmetros (n, m, l) . Assim, o estado $|\psi(t)\rangle$ do sistema é descrito como $|\psi(t)\rangle = \sum f_{n,m,l} |n, m, l\rangle$. $|n, m, l\rangle$ é o orbital localizado no sítio (n, m, l) . Seguindo o mesmo procedimento usado no caso $D = 2$, a equação de *Schrödinger* fica:

$$i\hbar \frac{df_{n,m,l}}{dt} = \epsilon_{n,m,l} f_{n,m,l} + (f_{n+1,m,l} + f_{n-1,m,l} + f_{n,m+1,l} + f_{n,m-1,l} + f_{n,m,l+1} + f_{n,m,l-1}). \quad (186)$$

O termo diagonal neste caso é dado por $\epsilon_{n,m,l} = \epsilon_{n,m,l}^* + E_x n + E_y m + E_z l$, onde $\epsilon_{n,m,l}^*$ é a desordem diagonal do sistema e E_x, E_y, E_z são as componentes do campo elétrico. Tanto no caso $D = 2$ quanto no caso $D = 3$, a resolução numérica da equação de *Schrödinger* dependente do tempo é uma estratégia interessante para medir o grau de localização dos autoestados. Como já mencionamos anteriormente, em problemas $D = 2$ e 3 , o número de equações cresce consideravelmente em comparação ao caso unidimensional. Neste tipo de problema é recomendável o uso do método de *Taylor*. Na fig.(14) mostramos o resultado de nosso estudo para o caso bidimensional. A eq.(180) foi resolvida no limite sem desordem ($W = 0$), considerando campos elétricos do tipo $\vec{E} = E_x \hat{e}_x + E_y \hat{e}_y$ com $E_x = 0.5$ e $E_y = 0.75$. Usamos neste cálculo o método de *Taylor* com $N_0 = 12$ e $\Delta t = 0.02$. O vetor posição média do pacote foi calculado seguindo a definição $\vec{R} = \langle n \rangle \hat{e}_x + \langle m \rangle \hat{e}_y$. Para calcular a frequência de oscilação e fazer um comparativo com a abordagem semiclassica consideramos a posição média escalar definida como $\langle R \rangle(t) = \vec{R} \cdot \left[\frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{e}_x + \hat{e}_y) \right]$.

Observando a fig.(14), podemos perceber que a posição média (*centroid*) do pacote oscila com a frequência prevista pela abordagem semiclassica $\omega = E$. Novamente encontramos uma

boa concordância com a teoria semiclássica, portanto, em sistemas bidimensionais sem desordem ($W = 0$) um campo elétrico paralelo ao plano promove oscilações de *Bloch* com a mesma frequência fundamental prevista pela teoria semiclássica, o mesmo resultado é encontrado no caso 3D. Incluindo o termo de desordem ($W > 0$), vamos novamente encontrar a fenomenologia da localização dinâmica, similar ao que foi encontrado no caso 1D. No caso tridimensional, para desordem fraca, o sistema pode apresentar uma espécie de oscilação de *Bloch* para tempo curto. Em linhas gerais, para desordem W pequena, em comparação com a largura da banda cristalina 3D, o sistema apresenta estados metálicos em torno do centro da banda. Se a condição inicial usada na evolução temporal conter uma fração macroscópica destes estados metálicos, o pacote de onda na presença de um campo $\vec{E} = E_x \hat{e}_x + E_y \hat{e}_y + E_z \hat{e}_z$, vai apresentar uma oscilação para tempo curto. Para tempo longo, como não existem estados de *Bloch* reais, o padrão oscilatório perde a coerência e desaparece.

REFERÊNCIAS

- [1] P. W. Anderson, “Absence of diffusion in certain random lattices,” *Physical review*, vol. 109, no. 5, p. 1492, 1958.
- [2] E. Abrahams, P. Anderson, D. Licciardello, and T. Ramakrishnan, “Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions,” *Physical Review Letters*, vol. 42, no. 10, p. 673, 1979.
- [3] R. Zallen, *The physics of amorphous solids*. John Wiley & Sons, 2008.
- [4] I. Lifshitz, S. Gredeskul, and L. Pastur, “Introduction to the theory of disordered systems, wiley,” *New York*, 1988.
- [5] B. Kramer and A. MacKinnon, “Localization: theory and experiment,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 56, no. 12, p. 1469, 1993.
- [6] N. F. Mott and E. A. Davis, *Electronic processes in non-crystalline materials*. Oxford university press, 2012.
- [7] B. Altshuler, A. Aronov, D. Khmel'nitskii, and A. Larkin, “Quantum theory of solids,” *Moscow*, p. 131, 1982.
- [8] P. A. Lee and T. Ramakrishnan, “Disordered electronic systems,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 57, no. 2, p. 287, 1985.
- [9] D. Belitz and T. Kirkpatrick, “The anderson-mott transition,” *Reviews of modern physics*, vol. 66, no. 2, p. 261, 1994.
- [10] Y. Asada, K. Slevin, and T. Ohtsuki, “Anderson transition in two-dimensional systems with spin-orbit coupling,” *Physical review letters*, vol. 89, no. 25, p. 256601, 2002.
- [11] J. Flores, “Transport in models with correlated diagonal and off-diagonal disorder,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 1, no. 44, p. 8471, 1989.
- [12] D. H. Dunlap, H. Wu, and P. W. Phillips, “Absence of localization in a random-dimer model,” *Physical Review Letters*, vol. 65, no. 1, p. 88, 1990.
- [13] A. Bovier, “Perturbation theory for the random dimer model,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. 25, no. 5, p. 1021, 1992.

- [14] H.-L. Wu and P. Phillips, "Polyaniline is a random-dimer model: A new transport mechanism for conducting polymers," *Physical review letters*, vol. 66, no. 10, p. 1366, 1991.
- [15] S. Evangelou and D. Katsanos, "Super-diffusion in random chains with correlated disorder," *Physics Letters A*, vol. 164, no. 5-6, pp. 456–464, 1992.
- [16] J. Flores and M. Hilke, "Absence of localization in disordered systems with local correlation," *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. 26, no. 24, p. L1255, 1993.
- [17] M. Hilke, "Local correlations in one-and two-dimensional disordered systems," *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. 27, no. 14, p. 4773, 1994.
- [18] F. C. Lavarda, M. Dos Santos, D. Galvao, and B. Laks, "Near resonant scattering from nonsymmetric dimers: Applications to substituted polyanilines," *Physical review letters*, vol. 73, no. 9, p. 1267, 1994.
- [19] J. Heinrichs, "Localization, antilocalization, and delocalization in one-dimensional disordered lattices," *Physical Review B*, vol. 51, no. 9, p. 5699, 1995.
- [20] F. A. B. F. de Moura and M. L. Lyra, "Delocalization in the 1d anderson model with long-range correlated disorder," *Physical Review Letters*, vol. 81, no. 17, p. 3735, 1998.
- [21] F. A. B. F. de Moura and M. L. Lyra, "Correlation-induced metal-insulator transition in the one-dimensional anderson model," *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 266, no. 1-4, pp. 465–470, 1999.
- [22] F. Izrailev and A. Krokhin, "Localization and the mobility edge in one-dimensional potentials with correlated disorder," *Physical review letters*, vol. 82, no. 20, p. 4062, 1999.
- [23] F. M. Izrailev, A. A. Krokhin, and N. Makarov, "Anomalous localization in low-dimensional systems with correlated disorder," *Physics Reports*, vol. 512, no. 3, pp. 125–254, 2012.
- [24] D. Taras-Semchuk and K. Efetov, "Influence of long-range disorder on electron motion in two dimensions," *Physical Review B*, vol. 64, no. 11, p. 115301, 2001.

- [25] W.-S. Liu, T. Chen, and S.-J. Xiong, “Kosterlitz-thouless-type metal-insulator transition in two-dimensional layered media with long-range correlated disorder,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 11, no. 36, p. 6883, 1999.
- [26] U. Kuhl, F. Izrailev, A. Krokhin, and H.-J. Stöckmann, “Experimental observation of the mobility edge in a waveguide with correlated disorder,” *Applied Physics Letters*, vol. 77, no. 5, pp. 633–635, 2000.
- [27] P. Carpena, P. Bernaola-Galván, P. C. Ivanov, and H. E. Stanley, “Metal–insulator transition in chains with correlated disorder,” *Nature*, vol. 418, no. 6901, p. 955, 2002.
- [28] E. Albuquerque, U. Fulco, V. Freire, E. Caetano, M. Lyra, and F. A. B. F. de Moura, “Dna-based nanobiostructured devices: The role of quasiperiodicity and correlation effects,” *Physics Reports*, vol. 535, no. 4, pp. 139–209, 2014.
- [29] N. W. Ashcroft and N. Mermin, “Solid state,” *Physics (New York: Holt, Rinehart and Winston)*, pp. 131–151, 1976.
- [30] D. J. Thouless, “Electrons in disordered systems and the theory of localization,” *Physics Reports*, vol. 13, no. 3, pp. 93–142, 1974.
- [31] F. J. Wegner, “Electrons in disordered systems. scaling near the mobility edge,” *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, vol. 25, no. 4, pp. 327–337, 1976.
- [32] K. Slevin and T. Ohtsuki, “Corrections to scaling at the anderson transition,” *Physical review letters*, vol. 82, no. 2, p. 382, 1999.
- [33] K. Slevin, P. Markoš, and T. Ohtsuki, “Reconciling conductance fluctuations and the scaling theory of localization,” *Physical review letters*, vol. 86, no. 16, p. 3594, 2001.
- [34] S. De Queiroz, “Reentrant behavior and universality in the anderson transition,” *Physical Review B*, vol. 63, no. 21, p. 214202, 2001.
- [35] K. Slevin, T. Ohtsuki, and T. Kawarabayashi, “Topology dependent quantities at the anderson transition,” *Physical review letters*, vol. 84, no. 17, p. 3915, 2000.
- [36] G. Thomas and M. Paalanen, “Recent developments in the metal-insulator transition,” in *Localization, Interaction, and Transport Phenomena*, pp. 77–89, Springer, 1985.

- [37] S. Waffenschmidt, C. Pfeleiderer, and H. v. Löhneysen, “Critical behavior of the conductivity of Si:P at the metal-insulator transition under uniaxial stress,” *Physical review letters*, vol. 83, no. 15, p. 3005, 1999.
- [38] S. Bogdanovich, M. Sarachik, and R. N. Bhatt, “Scaling of the conductivity with temperature and uniaxial stress in Si:B at the metal-insulator transition,” *Physical review letters*, vol. 82, no. 1, p. 137, 1999.
- [39] D. Ferry and S. M. Goodnick, *Transport in nanostructures*. No. 6, Cambridge university press, 1999.
- [40] K. Ishii, “Localization of eigenstates and transport phenomena in the one-dimensional disordered system,” *Progress of Theoretical Physics Supplement*, vol. 53, pp. 77–138, 1973.
- [41] G. Theodorou and M. H. Cohen, “Extended states in a one-dimensional system with off-diagonal disorder,” *Physical Review B*, vol. 13, no. 10, p. 4597, 1976.
- [42] L. Fleishman and D. Licciardello, “Fluctuations and localization in one dimension,” *Journal of Physics C: Solid State Physics*, vol. 10, no. 6, p. L125, 1977.
- [43] C. Soukoulis and E. Economou, “Off-diagonal disorder in one-dimensional systems,” *Physical Review B*, vol. 24, no. 10, p. 5698, 1981.
- [44] M. Griniasty and S. Fishman, “Localization by pseudorandom potentials in one dimension,” *Physical review letters*, vol. 60, no. 13, p. 1334, 1988.
- [45] S. D. Sarma, S. He, and X. Xie, “Mobility edge in a model one-dimensional potential,” *Physical review letters*, vol. 61, no. 18, p. 2144, 1988.
- [46] D. Thouless, “Localization by a potential with slowly varying period,” *Physical review letters*, vol. 61, no. 18, p. 2141, 1988.
- [47] V. Bellani, E. Diez, R. Hey, L. Toni, L. Tarricone, G. Parravicini, F. Domínguez-Adame, and R. Gómez-Alcalá, “Experimental evidence of delocalized states in random dimer superlattices,” *Physical review letters*, vol. 82, no. 10, p. 2159, 1999.
- [48] U. Naether, S. Stützer, R. Vicencio, M. Molina, A. Tünnermann, S. Nolte, T. Kottos, D. Christodoulides, and A. Szameit, “Experimental observation of superdiffusive transport in random dimer lattices,” *New Journal of Physics*, vol. 15, no. 1, p. 013045, 2013.

- [49] J. C. Cressoni and M. L. Lyra, “Scaling behavior of the localization length in random dimer harmonic chains with thermal correlations,” *Physical Review B*, vol. 53, no. 9, p. 5067, 1996.
- [50] M. Paczuski, S. Maslov, and P. Bak, “Avalanche dynamics in evolution, growth, and depinning models,” *Physical Review E*, vol. 53, no. 1, p. 414, 1996.
- [51] M. C. Varriale and A. Theumann, “Conductivity of a metal with inverse-power-law correlated impurities,” *Physical Review B*, vol. 52, no. 7, p. 4631, 1995.
- [52] S. Russ, J. W. Kantelhardt, A. Bunde, S. Havlin, and I. Webman, “Anderson localization in a random correlated energy landscape,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 266, no. 1-4, pp. 492–496, 1999.
- [53] B. B. Mandelbrot and J. W. Van Ness, “Fractional brownian motions, fractional noises and applications,” *SIAM review*, vol. 10, no. 4, pp. 422–437, 1968.
- [54] B. B. Mandelbrot, *The fractal geometry of nature*, vol. 173. WH freeman New York, 1983.
- [55] A. A. Tsonis, “Chaos—from theory to applications plenum press,” *New York*, 1992.
- [56] N. Greis and H. Greenside, “Implication of a power-law power-spectrum for self-affinity,” *Physical Review A*, vol. 44, no. 4, p. 2324, 1991.
- [57] T. Higuchi, “Approach to an irregular time series on the basis of the fractal theory,” *Physica D: Nonlinear Phenomena*, vol. 31, no. 2, pp. 277–283, 1988.
- [58] C. G. Fox, “Empirically derived relationships between fractal dimension and power law form frequency spectra,” in *Fractals in geophysics*, pp. 211–239, Springer, 1989.
- [59] A. R. Osborne and A. Provenzale, “Finite correlation dimension for stochastic systems with power-law spectra,” *Physica D: Nonlinear Phenomena*, vol. 35, no. 3, pp. 357–381, 1989.
- [60] M. F. Barnsley, R. L. Devaney, B. B. Mandelbrot, H.-O. Peitgen, D. Saupe, R. F. Voss, Y. Fisher, and M. McGuire, *The science of fractal images*. Springer, 1988.
- [61] T. Higuchi, “Relationship between the fractal dimension and the power law index for a time series: a numerical investigation,” *Physica D: Nonlinear Phenomena*, vol. 46, no. 2, pp. 254–264, 1990.

- [62] H. A. Makse, S. Havlin, M. Schwartz, and H. E. Stanley, “Method for generating long-range correlations for large systems,” *Physical Review E*, vol. 53, no. 5, p. 5445, 1996.
- [63] G.-P. Zhang and S.-J. Xiong, “Localization-delocalization transition in one-dimensional system with long-range correlated diagonal disorder,” *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*, vol. 29, no. 3, pp. 491–495, 2002.
- [64] F. A. B. F. de Moura, M. Coutinho-Filho, M. Lyra, and E. Raposo, “Delocalization and ballistic dynamics in the two-dimensional anderson model with long-range correlated disorder,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 66, no. 4, p. 585, 2004.
- [65] I. dos Santos, F. de Moura, M. Lyra, and M. Coutinho-Filho, “Critical behavior of the two-dimensional anderson model with long-range correlated disorder,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 19, no. 47, p. 476213, 2007.
- [66] W. Dias, F. A. B. F. de Moura, M. Coutinho-Filho, and M. Lyra, “Kosterlitz–thouless-like transition in two-dimensional lattices with long-range correlated hopping terms,” *Physics Letters A*, vol. 374, no. 34, pp. 3572–3575, 2010.
- [67] F. Domínguez-Adame, V. Malyshev, F. De Moura, and M. Lyra, “Bloch-like oscillations in a one-dimensional lattice with long-range correlated disorder,” *Physical review letters*, vol. 91, no. 19, p. 197402, 2003.
- [68] W. Dias, E. Nascimento, M. Lyra, and F. A. B. F. de Moura, “Dynamics of two interacting electrons in anderson-hubbard chains with long-range correlated disorder: Effect of a static electric field,” *Physical Review B*, vol. 81, no. 4, p. 045116, 2010.
- [69] F. A. B. F. de Moura, M. Lyra, F. Domínguez-Adame, and V. Malyshev, “Coherent electron dynamics in a two-dimensional random system with mobility edges,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 19, no. 5, p. 056204, 2007.
- [70] X. Chen and T. Kobayashi, “The effect of the electron–electron interactions on localization in one-dimensional disordered model with long-range correlation,” *Solid State Communications*, vol. 122, no. 9, pp. 479 – 483, 2002.
- [71] Y. Wang and R. M. Nandkishore, “Interplay between short-range correlated disorder and coulomb interaction in nodal-line semimetals,” *Phys. Rev. B*, vol. 96, p. 115130, Sep 2017.

- [72] D. Dunlap and V. Kenkre, "Effect of scattering on the dynamic localization of a particle in a time-dependent electric field," *Physical Review B*, vol. 37, no. 12, p. 6622, 1988.
- [73] T. A. Ziman, "Localization and spectral singularities in random chains," *Physical Review Letters*, vol. 49, no. 5, p. 337, 1982.
- [74] G. Theodorou, "Spin waves in random one-dimensional ferromagnets," *Journal of Physics C: Solid State Physics*, vol. 15, no. 36, p. L1315, 1982.
- [75] M. Cieplak and G. Ismail, "Localised spin waves in disordered ferromagnetic chains," *Journal of Physics C: Solid State Physics*, vol. 20, no. 9, p. 1309, 1987.
- [76] R. P. Lima, M. L. Lyra, E. M. Nascimento, and A. D. de Jesus, "Magnon delocalization in ferromagnetic chains with long-range correlated disorder," *Physical Review B*, vol. 65, no. 10, p. 104416, 2002.
- [77] H. Rieger and F. Iglói, "Random quantum magnets with long-range correlated disorder: Enhancement of critical and griffiths-mccoy singularities," *Physical review letters*, vol. 83, no. 18, p. 3741, 1999.
- [78] P. Dean, "The vibrational properties of disordered systems: numerical studies," *Reviews of modern physics*, vol. 44, no. 2, p. 127, 1972.
- [79] D. C. Mattis, *The many-body problem: an encyclopedia of exactly solved models in one dimension*. World Scientific, 1993.
- [80] F. J. Dyson, "The dynamics of a disordered linear chain," *Physical Review*, vol. 92, no. 6, p. 1331, 1953.
- [81] P. Dean, "Vibrations of glass-like disordered chains," *Proceedings of the Physical Society*, vol. 84, no. 5, p. 727, 1964.
- [82] H. Matsuda and K. Ishii, "Localization of normal modes and energy transport in the disordered harmonic chain," *Progress of Theoretical Physics Supplement*, vol. 45, pp. 56–86, 1970.
- [83] P. Datta and K. Kundu, "The absence of localization in one-dimensional disordered harmonic chains," *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 6, no. 24, p. 4465, 1994.

- [84] F. Dominguez-Adame, E. Macia, and A. Sánchez, “Delocalized vibrations in classical random chains,” 1993.
- [85] J. C. Cressoni and M. L. Lyra, “Scaling behavior of the localization length in random dimer harmonic chains with thermal correlations,” *Physical Review B*, vol. 53, no. 9, p. 5067, 1996.
- [86] P. Datta and K. Kundu, “Energy transport in one-dimensional harmonic chains,” *Physical Review B*, vol. 51, no. 10, p. 6287, 1995.
- [87] S. Evangelou and E. Economou, “Reflectionless modes in chains with large-size homogeneous impurities,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. 26, no. 12, p. 2803, 1993.
- [88] M. Wagner, G. Zavt, J. Vazquez-Marquez, A. Lütze, T. Mougios, G. Vilianni, W. Frizzera, O. Pilla, and M. Montagna, “Energy transport in disordered oscillatory systems,” *Philosophical Magazine B*, vol. 65, no. 2, pp. 273–287, 1992.
- [89] M. J. De Oliveira and A. Petri, “Density of states and localization lengths in one-dimensional linear chains,” *International Journal of Modern Physics B*, vol. 11, no. 18, pp. 2195–2205, 1997.
- [90] B. Li, H. Zhao, and B. Hu, “Can disorder induce a finite thermal conductivity in 1d lattices?,” *Physical review letters*, vol. 86, no. 1, p. 63, 2001.
- [91] P. L. Garrido, P. I. Hurtado, and B. Nadrowski, “Simple one-dimensional model of heat conduction which obeys fourier’s law,” *Physical review letters*, vol. 86, no. 24, p. 5486, 2001.
- [92] A. Dhar, “Comment on “simple one-dimensional model of heat conduction which obeys fourier’s law”,” *Physical review letters*, vol. 88, no. 24, p. 249401, 2002.
- [93] O. Narayan and S. Ramaswamy, “Anomalous heat conduction in one-dimensional momentum-conserving systems,” *Physical review letters*, vol. 89, no. 20, p. 200601, 2002.
- [94] M. Toda, “One-dimensional dual transformation,” *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 20, no. 11, pp. 2095A–2095A, 1965.

- [95] P. B. Allen and J. L. Feldman, “Thermal conductivity of disordered harmonic solids,” *Physical Review B*, vol. 48, no. 17, p. 12581, 1993.
- [96] F. A. B. F. de Moura, L. P. Viana, M. L. Lyra, V. A. Malyshev, and F. Domínguez-Adame, “Bias driven coherent carrier dynamics in a two-dimensional aperiodic potential,” *Physics Letters A*, vol. 372, no. 44, pp. 6694–6700, 2008.
- [97] F. A. B. F. de Moura and F. Domínguez-Adame, “Extended modes and energy dynamics in two-dimensional lattices with correlated disorder,” *The European Physical Journal B*, vol. 66, no. 2, pp. 165–169, 2008.
- [98] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *FORTTRAN numerical recipes*, vol. 1. Cambridge England, 1996.
- [99] “Lapack - linear algebra package (<http://www.netlib.org/lapack/>),”
- [100] K. Chao, R. Riklund, and Y.-Y. Liu, “Renormalization-group results of electronic states in a one-dimensional system with incommensurate potentials,” *Physical Review B*, vol. 32, no. 9, p. 5979, 1985.
- [101] A. MacKinnon, “The calculation of transport properties and density of states of disordered solids,” *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, vol. 59, no. 4, pp. 385–390, 1985.
- [102] Y. Liu and K. Chao, “dc conductivity in one-dimensional incommensurate systems,” *Physical Review B*, vol. 34, no. 8, p. 5247, 1986.
- [103] M. de Almeida, G. Ourique, U. Fulco, E. Albuquerque, F. A. B. F. de Moura, and M. Lyra, “Charge transport properties of a twisted dna molecule: A renormalization approach,” *Chemical Physics*, vol. 478, pp. 48–54, 2016.
- [104] M. de Almeida, J. Oliveira, J. Lima Neto, C. Gomes, U. Fulco, E. Albuquerque, V. Freire, E. Caetano, F. A. B. F. de Moura, and M. L. Lyra, “Electronic transport in methylated fragments of dna,” *Applied Physics Letters*, vol. 107, no. 20, p. 203701, 2015.
- [105] M. H. Vainstein, R. Morgado, F. A. Oliveira, F. A. B. F. de Moura, and M. D. Coutinho-Filho, “Stochastic description of the dynamics of a random-exchange heisenberg chain,” *Physics Letters A*, vol. 339, no. 1-2, pp. 33–38, 2005.

- [106] D. Nunes, A. R. Neto, and F. A. B. F. de Moura, “Coherent magnon dynamics in ferromagnetic models with nonuniform magnetic field and correlated disorder,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 410, pp. 165–170, 2016.